05.13.18

КРИТИЧЕСКИЙ ИНДЕКС ТЕПЛОЁМКОСТИ В ЗАДАЧЕ СВЯЗЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИ ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ С УЧЁТОМ ВНЕШНЕГО ПОЛЯ

Т.В. Якунина, В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан

Построена одномерная перколяционная модель для задачи связей при протекании по неближайшим соседям. Предложены новые алгоритмы нахождения перколяционного порога для решеток произвольного размера с произвольным радиусом протекания без построения покрывающей решетки и матрицы смежности. Эти алгоритмы работают на ЭВМ существенно быстрее известных.

Рассчитан порог при радиусе протекания до восьми. Кроме того, рассчитана свободная энергия и критический индекс теплоёмкости для цепочек различной длины до перколяционного радиуса, равного шести. В работе учтено влияние слабого поля. Результаты могут найти применение при моделировании прыжковой проводимости полупроводников при низких температурах.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, теория перколяции, одномерная задача связей, перколяционный порог, свободная энергия, критический индекс теплоёмкости, слабое внешнее поле.

ВВЕДЕНИЕ

Теория перколяции возникла более 60 лет назад, однако область её применения давно вышла за рамки физики [1].

Название возникло в связи с тем, что ряд первых работ в этом направлении был посвящён процессам просачивания жидкостей или газов через пористую среду [2].

Классическими решеточными задачами в теории перколяции являются задача узлов и задача связей с одинаковой вероятностью для каждой связи быть целой или блокированной [3].

Обычно рассматривают протекание по ближайшим соседям на двумерных или трехмерных решетках, так как на одномерных решетках случай перколяции по ближайшим соседям тривиален. Однако он перестает быть таковым, если рассматривать перколяцию по неближайшим соседям [3].

Цель данной работы заключается в том, чтобы разработать методы решения одномерных задач связей без построения покрывающих решеток и матриц смежности, получить новые результаты для критического индекса теплоёмкости при учете внешнего поля.

МОДЕЛЬ

Рассмотрим одномерную перколяционную модель в задаче связей. Множество узлов N, которые расположены друг от друга на одном расстоянии, представляет собой горизонтальную цепочку. Из каждого узла выходит одно и то же число связей. Количество связей не зависит от расположения самого узла в решетке, число связей зависит только от радиуса протекания. Вероятность блокировки любой связи одинакова, все связи в модели равноценны. Нумерация связей цепочки осуществляется с левого края.

Связи между узлами могу быть только двух видов: целыми и блокированными (разорванными, по которым ток не течёт). В задаче связей блокируется только одна связь за один шаг, все узлы считаются целыми. Два узла решетки считаются связанными друг с другом, если их соединяет цепочка целых связей. Совокупность связанных друг с другом узлов называется кластером [2, 4]. Если доля целых связей мала, они образуют небольшие отдельные кластеры. С увеличением числа целых связей кластеры растут, объединяются, и возникает пронизывающий всю решетку, так называемый, соединяющий («бесконечный») кластер, по которому осуществляется протекание с одного конца решетки на другой. Средняя максимальная доля целых связей, при которой нет соединяющего кластера – это порог перколяции (протекания) p_{cb}. Он зависит от радиуса перколяции, размерности решетки, ее типа и числа узлов N [2-6].

Таким образом, решетка представляет собой горизонтальную одномерную цепочку, состоящую из N узлов, при радиусе протекания R.

Количество блокированных связей до достижения порога зависит от параметров N и R. Выбор блокируемой связи осуществляется случайно. Порог протекания находится по следующему алгоритму.

АЛГОРИТМЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Рассмотрим метод нахождения перколяционного порога одномерных задач связей для произвольного радиуса протекания.

Рассмотрим алгоритм нахождения порога одномерного протекания (произвольный радиус одномерного протекания). Сначала все связи считаются целыми, затем случайным образом связи блокируются.

1. Пронумеруем все узлы натуральными числами и выберем достижимые (узлы, до которых можно добраться с левого края по целым связям). Рассмотрим первые R узлов. Проверим, являются ли целыми связи (идущие от левого края решетки), входящие в эти узлы, если хотя бы одна связь целая, то данный узел достижим. Так находятся первые из достижимых узлов. Номера достижимых узлов запоминаются в соответствии с первоначальной нумерацией узлов.

2. На следующем шаге проверим связи, выходящие направо из найденных достижимых узлов, и находим следующие достижимые узлы. Их номера так же запоминаются.

3. При рассмотрении ситуации, когда на очередном шаге не добавляются новые достижимые узлы, заканчиваем процесс поиска достижимых узлов. Таким образом, находятся все достижимые узлы в цепочке.

4. Смотрим достижимость последних R узлов, и если такие есть, то проверяются связи, выходящие из этих узлов направо. Если такие целые связи существуют, которые доходят до правого края, то порог не достигнут и процесс продолжается – блокируется еще одна связь. В противном случае протекание отсутствует и вычисляется значение порога как доли целых связей. На этом заканчивается первый опыт по поиску порога протекания. На основании данных алгоритмов была составлена компьютерная программа, с помощью которой получены следующие результаты (рис. 1).

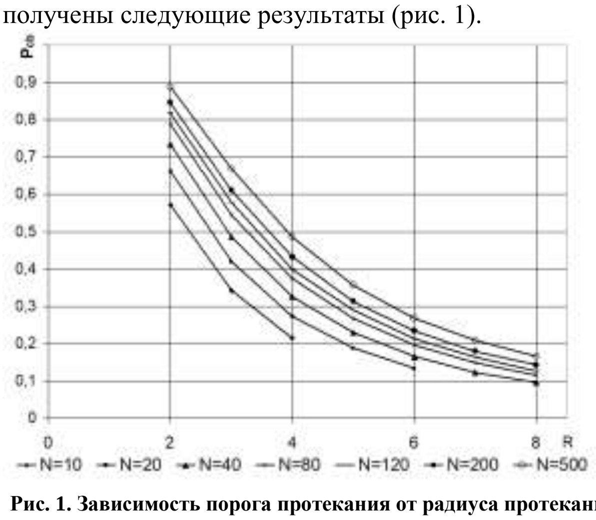

Рис. 1. Зависимость порога протекания от радиуса протекания в одномерной задаче связей.

Из рис. 1 видно, что при увеличении радиуса протекания порог перколяции уменьшается. С увеличением числа узлов (N), увеличивается среднее значение порога протекания при неизменном радиусе (R=2, 3, 4, 5, 6, 7, 8) протекания и количестве опытов (Q=10000).

Перколяционный порог, разделяет две фазы: в одной фазе существуют только конечные кластеры и бесконечного (соединяющего) кластера нет, в другой фазе соединяющий кластер существует [6]. Поэтому некоторые величины теории протекания аналогичны величинам из теории фазовых переходов второго рода. В теории протекания доля целых связей (в задаче связей) играет ту же роль, что и температура в температурных фазовых переходах. Вероятность того, что узел (связь) принадлежит бесконечному кластеру, аналогична параметру порядка в теории температурных фазовых переходов [6]. Многие важные характеристики кластера (корреляционная длина, среднее число узлов) вблизи перехода описываются степенными функциями с различными критическими показателями [6], например

$$F \propto \left| p - p_{cb} \right|^{2-\alpha}, \qquad (1)$$

где F – свободная энергия для данной цепочки (точнее, это аналог свободной энергии), p – доля целых связей в цепочке, p_{cb} – порог протекания в задаче связей, α – критический индекс аналога теплоемкости. Строго говоря, (1) верно для системы бесконечного размера (в термодинамическом пределе) и при приближении к порогу перколяции, однако при моделировании наносистем эту формулу можно использовать в некотором интервале изменения p (не слишком близко к порогу). Формула (1) справедлива также только в нулевом или слабом поле.

В теории протекания роль свободной энергии F играет среднее число кластеров в расчете на один узел [7]

1. $$F(p) = \sum_s n_s e^{-sh}, \qquad (2)$$

где n_s – среднее число кластеров размера S в расчете на один узел решетки; h – параметр, играющий роль напряженности безразмерного внешнего поля [4].

Из формулы (1) легко получить формулу для вычисления индекса α

2. $$\alpha = 2 - \frac{\ln \dfrac{F(p_1)}{F(p_2)}}{\ln \left| \dfrac{p_1 - p_{cb}}{p_2 - p_{cb}} \right|}, \qquad (3)$$

где p_1 и p_2 – доли целых связей в цепочке длины N.

Изложим метод расчета критического индекса α. Обозначим значение доли p_n вблизи порога за Z_c, где $n = 1, 2$. Z_c это близкое, но не превосходящее порога протекания значение p_n для рассматриваемой решетки (для определенности рассматриваем область ниже порога). Для каждой связи возьмем случайное число в промежутке от нуля до единицы. Если это число не меньше Z_c, то присвоим этой связи единицу. Это означает, что связь целая. В противном случае присвоим нуль и связь считаем блокированной. Присвоим каждому кластеру порядковый номер. И всем узлам в каждом кластере присвоим значение, равное номеру своего кластера. Считаем количество двухчастичных кластеров (в задаче связей одночастичных кластеров нет), трехчастичных и так далее до m-частичных, где m – это максимальный размер кластера. Затем находим свободную энергию с соответствующей погрешностью. Свободная энергия вычисляется при использовании двух различных значений Z_c. На основании полученных значений свободной энергии вычисляется значение критического индекса α с соответствующей погрешностью.

На основании данного алгоритма составлена компьютерная программа, позволяющая найти свободную энергию и критический индекс теплоемкости α в задаче связей для модели одномерного протекания с произвольным радиусом протекания.

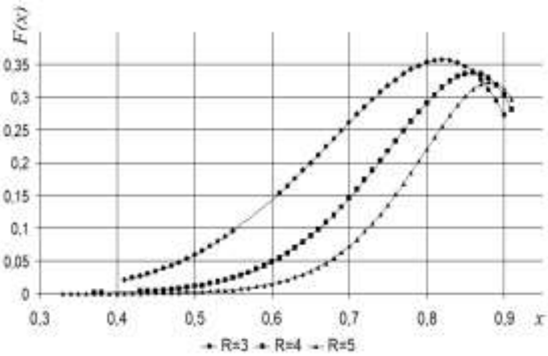

Рис. 2. Аналог свободной энергии при радиусах протекания *R*=3, *R*=4 и *R*=5 цепочек из 150 узлов в задаче связей при *h*=0; погрешность вычислений 1 - 17%.

Видно, что с увеличением радиуса протекания максимум $F(p)$ смещается вправо (рис. 2), а его значение уменьшается, что связано с увеличением порога протекания.

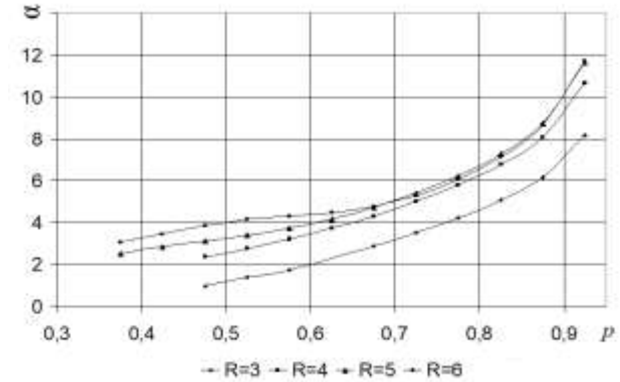

Рис. 3. Зависимость критического индекса теплоёмкости выше перколяционного порога (*R*=3, *R*=4, *R*=5 и *R*=6) для цепочек из 150 узлов в задаче связей при *h*=0; погрешность вычислений 0,5 - 17%.

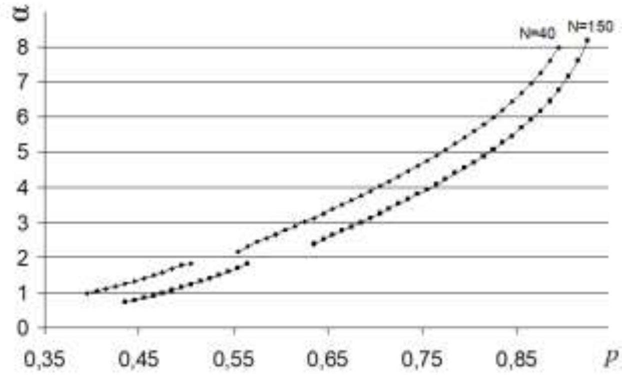

Рис. 4. Зависимость критического индекса теплоёмкости ниже и выше перколяционного порога от доли целых связей в решётке при радиусе протекания *R*=3 одномерных цепочек из 40 и 150 узлов в задаче связей при нулевом поле; погрешность вычислений 1,3 - 20%.

Из рисунка 3 видно, что при любом радиусе протекания R в задаче связей индекс α растет с увеличением R. Значения критического индекса теплоёмкости вблизи перколяционного порога не рассчитывались, т.к. в критической области этот индекс теряет смысл из-за больших флуктуаций (см. разрывы кривых на рис. 4). В этом проявляется специфика системы конечного размера.

Из рисунка 4 видно, что при различной длине цепочки N=40 и N=150 графики повторяют друг друга (монотонно возрастающая зависимость). Нет пересечения графиков. Кроме того, можно предположить для случая больших цепочек, графики зависимостей будут проходить ниже, а значения индекса α численно меньше.

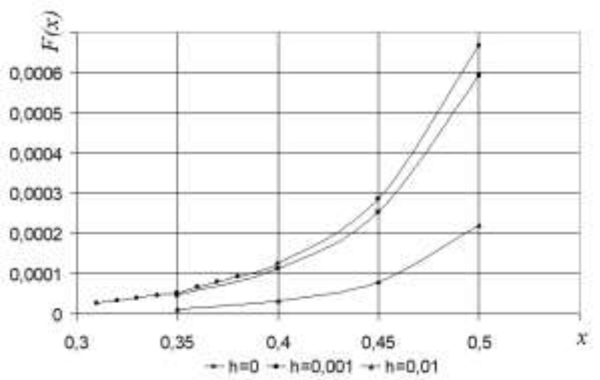

Рис. 5. Аналог свободной энергии для цепочек из 150 узлов, R=6 в задаче связей при различных слабых полях; погрешность вычислений 0,5 - 22%.

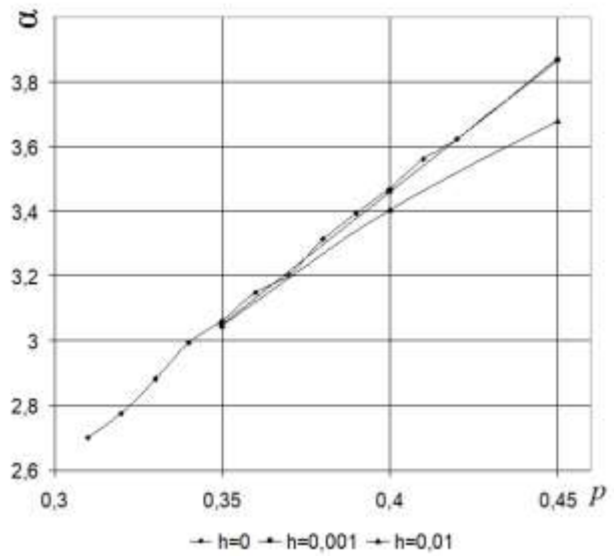

Рис. 6. Зависимость критического индекса теплоёмкости выше перколяционного порога (для *R*=6) цепочек из 150 узлов в задаче связей при различных слабых полях; погрешность вычислений 0,5 - 17%.

Из рисунков 5 и 6 видим, что слабое поле незначительно влияет, как на аналог свободной энергии, так и на критический индекс теплоёмкости α: вблизи порога (у левого края) кривые сливаются на рис. 6 (в пределах погрешности вычислений). Отсюда следует, что поле напряженностью 0,01 является слабым.

Итак, предложены новые алгоритмы для задачи связей и рассчитаны средние значения перколяционного порога в одномерном случае для цепочек конечного размера, предложен метод нахождения аналогов свободной энергии и критического индекса теплоёмкости для одномерной решетки при различных значениях радиуса перколяции, числа узлов решетки и напряженности внешнего поля. В отличие от других авторов [2, 8] рассчитана зависимость критического индекса теплоемкости от доли целых узлов при различном радиусе протекания без построения покрывающей решётки и матрицы смежности. Проведён сравнительный анализ результатов [2, 8] и результатов данной работы для одномерной решётки при радиусе протекания R=3, числе узлов N=40 и N=150. Значения критического индекса теплоёмкости [2, 8] согласуются с нашими результатами как выше, так и ниже порога при учете погрешности вычислений. Представленные результаты могут найти применение при моделировании прыжковой проводимости полупроводников при низких температурах, политипных превращений с особенностями в нанометровом диапазоне в плотноупакованных кристаллах [9].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Предложены новые алгоритм нумерации связей одномерной решетки в задаче связей (без построения покрывающей решетки и матрицы смежности) и второй алгоритм, позволяющий находить перколяционный порог для одномерных решеток произвольного размера с произвольным радиусом протекания.
2. Разработан новый метод нахождения свободной энергии и критического индекса теплоёмкости для одномерной задачи связей при различных параметрах (радиус протекания R, число узлов N, напряженность внешнего поля h).
3. Для одномерных перколяционных цепочек размером от 10 до 500 узлов рассчитан порог протекания (p_{cb}) при радиусе перколяции от R=2 до R=8.
4. Вычислены аналог свободной энергии и критический индекс теплоёмкости для одномерных решеток размером 150 узлов с нулевым и слабым внешним полем в задаче связей. Рассчитана зависимость критического индекса теплоемкости от доли целых связей при различном радиусе протекания в одномерной перколяционной задаче связей.
5. Представленные результаты могут найти применение при моделировании прыжковой проводимости полупроводников при низких температурах [6], политипных превращений с особенностями в нанометровом диапазоне в плотноупакованных кристаллах [9].

Таким образом, предложенная модель позволяет рассматривать произвольное число узлов в одномерной решетке для задачи связей при произвольных радиусе протекания и поле. Кроме того, предложенный подход позволяет находить критические индексы теплоёмкости при больших (в принципе произвольных) радиусах протекания для конечных систем, что было ранее для одномерной задачи связей невозможно. В рамках предложенного подхода возможно также вычисление и других критических индексов.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Займан, Дж. Модели беспорядка [Текст] / Дж. Займан – М.: Мир, 1982. – 592 с.

2. Тарасевич, Ю.Ю.Математическое и компьютерное моделирование [Текст] / Ю.Ю. Тарасевич Вводный курс: учеб. Пособие для вузов. – Изд. 3-е, испр. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 144 с.

3. Буреева, М.А. Моделирование задачи связей одномерной теории перколяции на неориентированном графе [Текст] / М.А. Буреева, В.Н. Удодов// Математическое моделирование. – М., 2012. – Т. 24, № 11. – С. 72-82.

4. Эфрос, А.Л. Физика и геометрия беспорядка [Текст] / А.Л. Эфрос. – М.: Наука, 1982. – 176 с.

5. Волкова, Т.В. Зависимость порога протекания от длины цепочки и от радиуса протекания для модели одномерной перколяции [Текст] / Т.В. Волкова, М.А. Буреева // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов IV Всероссийской конференции молодых учёных (22-25 апреля 2008 г., г. Томск). . – Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. – С. 182-184.

6. Тарасевич, Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения [Текст] / Ю.Ю. Тарасевич Учебное пособие – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2012. – 112 с.

7 Шкловский, Б.И. Теория протекания и проводимость сильно неоднородных сред [Текст] / Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос // УФН. – М., 1975. – Т. 117, № 3. – С. 401-435.

8. Волкова, Т.В. Задача связей в одномерной теории перколяции для конечных систем [Текст] / Т.В. Волкова, М.А. Буреева, В.Н. Удодов, А.И. Потекаев // Известия вузов. Физика. 2010. – №2. – С. 33-39.

9. Удодов, В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектах наноструктурах [Текст] / В.Н. Удодов, А.И.Потекаев, А.А.Попов и др. Ред. В.Н.Удодов – Абакан: Изд-во ХГУ им. Н.Ф. Катанова 2008. – 135 с.

Якунина Татьяна Валерьевна, г. Абакан; 8(913)447-29-42. e-mail: TataV19@mail.ru

Удодов Владимир Николаевич, профессор, доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры производственных технологий и техносферной безопасности Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан; 8(923)395-62-52. e-mail: udodov@khsu.ru

HEAT CAPACITY CRITICAL EXPONENT IN THE BOND PROBLEM FOR ONE-DIMENSIONAL PERCOLATION MODEL TAKING INTO ACCOUNT THE EXTERNAL FIELD

T.V. Yakunina, V.N. Udodov
Katanov Khakas State University, Abakan

A one-dimensional percolation model is constructed for the bond problem for percolation along not nearest neighbors. New algorithms are proposed for finding the percolation threshold for gratings of arbitrary size with an arbitrary percolation radius without constructing a covering lattice and an adjacency matrix. These algorithms work on computers much faster than the known ones.

The threshold is calculated for a percolation radius of up to eight. In addition, the free energy and critical heat capacity exponent were calculated for chains of various lengths up to a percolation radius of six. The influence of a weak field is taken into account in the work. The results may find application in simulating the hopping conductivity of semiconductors at low temperatures.

Index terms: computer modeling, percolation theory, one-dimensional bond problem, percolation threshold, free energy, the critical exponent of the specific heat.

REFERENCES

1. Ziman, J.M. Models of disorder (The theoretical physics of homogeneously disordered systems). Cambridge University Press; 1979. – 540 p.
2. Tarasevich, Yu.Yu. Mathematical and computer modeling. Introductory course: textbook. Manual for universities. Moskow: URSS Editorial, 2003. – 144 p.
3. Bureeva, M.A., V.N. Udodov, Simulation of the bond problem of the one-dimensional percolation theory on the nondirectional count, Matem. Mod., 2012, V. 24, № 11, pp. 72-82.
4. Efros, A.L. Physics and geometry of disorder. Moscow: Science, 1982. – 176 p.
5. Volkova, T.V., M.A. Bureeva. The dependence of the percolation threshold on the length of the chain and on the percolation radius for the model of one-dimensional percolation. Physics and Chemistry of High-Energy Systems: Proceedings of the IV All-Russian Conference of Young Scientists (April 22-25, 2008). Tomsk: TML-Press, 2008. – P. 182-184.
6. Tarasevich, Yu.Yu. Percolation: theory, applications. Textbook. Moscow: Book House "LIB-ROCK", 2012. – 112 p.
7. Shklovsky, B.I., A.L. Efros. “The theory of percolation and conductivity of strongly inhomogeneous media” *Phys. Usp.* **117,** pp. 401–435, 1975. 8. Volkova, T.V., M.A. Bureeva, V.N. Udodov, A.I. Potekaev. The bond problem in the one-dimensional theory of percolation for finite systems. Russian Physics Journal**.** №2. P. 33–39, 2010.
9. Udodov, V.N., A.I. Potekaev, A.A. Popov et al. Modeling of phase transformations in low-dimensional defective nanostructures. Ed. V.N. Udodov. Abakan: Publishing House of KHSU named after N.F. Katanov, 2008. – 135 p.

Udodov Vladimir Nikolaevich, Professor, doctor of physical and mathematical sciences, Professor of the Department of Industrial Technologies and Techno-Sphere Security of the Katanov Khakas State University, Abakan. 8(923)395-62-52. udodov@khsu.ru

Yakunina Tatyana Valerevna, Abakan.