

01;05

Размерные эффекты в перколяции малых областей на плоских и цилиндрических поверхностях

© В.А. Стучинский

Институт физики полупроводников имени А.В. Ржанова, Новосибирск
E-mail: stuchin@isp.nsc.ru

Поступило в Редакцию 29 ноября 2012 г.

Рассмотрен размерный эффект (поведение вероятности перколяции как функции размера рассматриваемой области) в некоторых двумерных задачах теории протекания на плоских и цилиндрических поверхностях.

Возникнув первоначально в связи с изучением свойств решеточных моделей, теория протекания впоследствии значительно диверсифицировалась и нашла обширные применения в различных областях науки и техники [1–13]. В области задач на регулярных дискретных решетках усилия исследователей быстро сместились в сферу изучения характеристик перехода и свойств рассматриваемых систем вблизи порога протекания (определение значений порогов и величин критических индексов, изучение структурных и транспортных свойств перколяционного кластера и т.п.). Вместе с тем тенденция к уменьшению размеров рабочих областей приборных и исследовательских структур в микро- и нанoeлектронике стимулирует более пристальное рассмотрение тех задач в теории протекания, которым ранее было уделено относительно небольшое внимание. Одной из таких задач является задача о вероятности перколяции в малой квадратной области, разбитой на $n \times n$ кв. ячеек, каждая из которых статистически случайно заполняется проводящей (с вероятностью ξ) либо непроводящей (с вероятностью $1 - \xi$) фазой. Рассматривается вероятность w возникновения проводящего кластера, замыкающего собой верхнюю и нижнюю стороны области. Разумеется, при $n = 1$ мы имеем ситуацию, в которой вся квадратная область покрывается единственной „элементарной“ ячейкой, и вероятность перколяции поэтому совпадает с вероятностью реализации проводящего состояния ячейки, $w = \xi$, а при $n \rightarrow \infty$ вероятность

перколяции w стремится к нулю либо к единице в зависимости от того, находится ли значение ξ ниже или выше порога протекания ξ_c . Ставится задача о поведении функции $w(n)$ при промежуточных значениях n .

Автор работы [14] рассматривал сходную задачу, в которой, однако, при реализации случайных конфигураций системы с заданным размером n фиксированным параметром являлась не величина ξ , а доля проводящих ячеек в системе ξ^* . Было обнаружено, что для задачи узлов на квадратной сетке для некоторых значений ξ^* функция $w(n)$ проявляет примечательное поведение с максимумом, которое следует учитывать при оценке вероятности перколяции в малых рабочих областях. Ясно, однако, что формулировка задачи в [14] является весьма специальной: вместе с нею фактически принимается, что при рассмотрении вероятности w для одного и того значения n физически мы имеем дело не с ансамблем схожим образом приготовленных систем, а скорее с разными конфигурациями одной и той же системы, которые реализуются путем „перетряски“ (реконfigurирования) фиксированного числа проводящих элементов в ней. Физическим же ситуациям, в которых фиксированным параметром является не доля проводящей фазы ξ^* в системе, а именно величина ξ (при этом количество проводящих ячеек в системе заданного размера n может флуктуировать вокруг среднего значения $\xi \cdot n^2$), соответствует формулировка задачи о перколяции, приведенная в начале этой статьи. Примером может являться формирование системы посредством осаждения проводящих „частиц“ из большого резервуара в условиях баланса адсорбционных и десорбционных потоков либо посредством осуществления фазовых переходов в невзаимодействующих областях.

В данной статье мы рассматриваем поведение функции $w(n)$ для этого физически более значимого варианта задачи о перколяции. Хотя соотношение между двумя задачами достаточно подробно обсуждалось в литературе (см., например, [15]), представляется полезным в непосредственных расчетах методом Монте-Карло изучить поведение вероятности перколяции конечной квадратной решетки как функцию ее размера с тем, чтобы выяснить, проявляет ли функция $w(n)$ и в случае $\xi = \text{const}$ выявленное в [14] немонотонное поведение. Для этого мы провели статистически весьма подробные (10^5 – 10^6 реализаций для фиксированного размера n системы) расчеты методом Монте-Карло вероятности перколяции w , которые были выполнены в разных

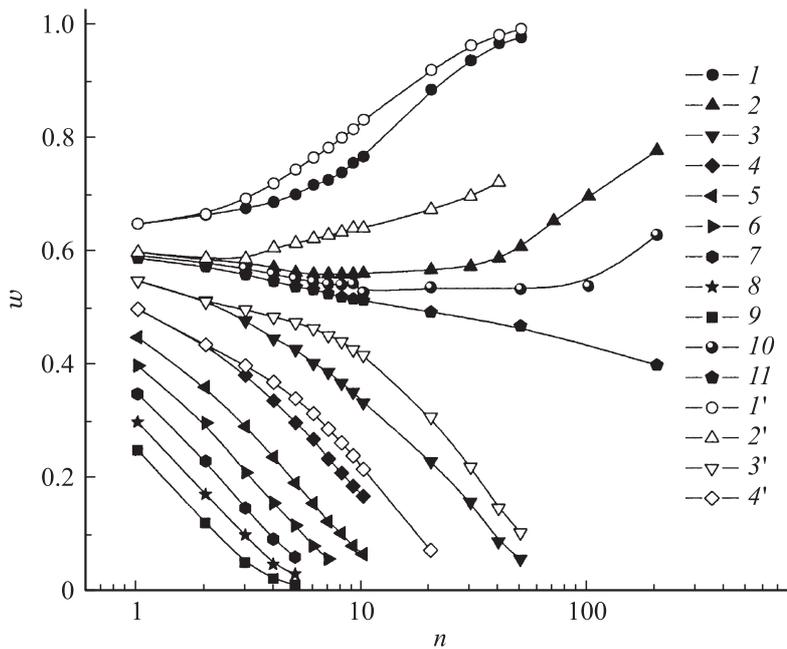


Рис. 1. Поведение вероятности перколяции w как функции n в задаче 1 (протекание в 1-ю КГ) для плоской (кривые 1–11) и цилиндрической (кривые 1'–4') области. ξ : 0.65 (1, 1'), 0.60 (2, 2'), 0.55 (3, 3'), 0.50 (4, 4'), 0.45 (5), 0.40 (6), 0.35 (7), 0.30 (8), 0.25 (9); 0.595 (10), 0.590 (11).

предположения о характере контакта между соседними ячейками (через общую сторону или дополнительно еще и „по диагонали через общую вершину“). Эти случаи соответствуют задаче узлов на квадратной решетке с протеканием в 1-ю и 2-ю координационную группу (КГ) [2]. Помимо случая плоских областей, мы также рассмотрели случай областей на цилиндрических поверхностях (свободностоящие нанопроволоки), когда цилиндрическая область формируется путем „склейки“ боковых сторон исходно плоской квадратной области.

В наших расчетах случайные конфигурации рассматриваемых решеточных систем приготавливались и анализировались следующим образом. Ячейки квадратной сетки размером $n \times n$ построчно заполнялись

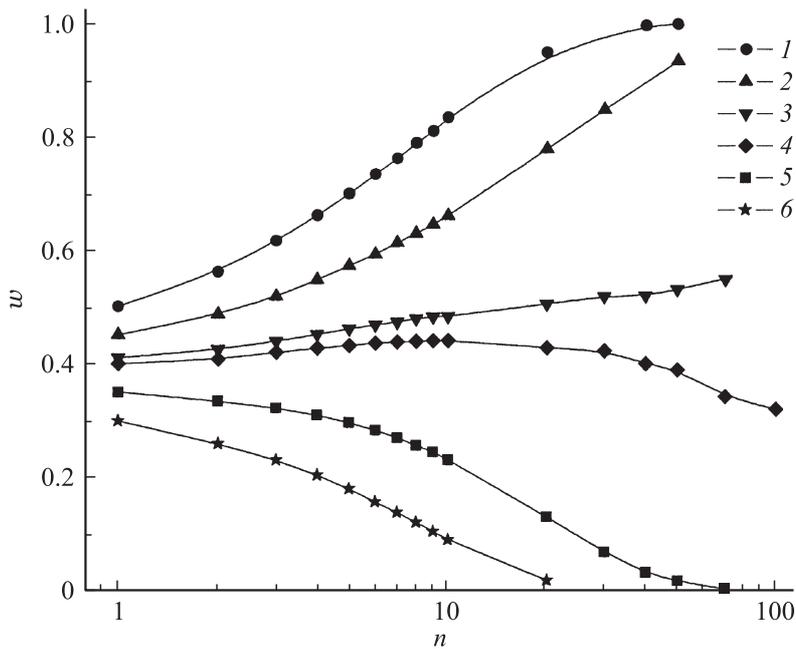


Рис. 2. Поведение функции $w(n)$ в задаче 2 (протекание во 2-ю КГ) для плоской области. ξ : 0.50 (1), 0.45 (2), 0.41 (3), 0.40 (4), 0.35 (5), 0.30 (6).

проводящей либо непроводящей фазой в зависимости от того, слева или справа от выбранного числа ξ находилось число, сгенерированное генератором случайных чисел (ГСЧ) на отрезке $[0,1]$. Затем с учетом выбранного характера связей в системе, для полученной конфигурации производился анализ того, реализуется ли в ней кластер, связывающий нижнюю и верхнюю стороны квадрата. Анализ производился не слишком экономичным, но прозрачным и простым в реализации методом, описанным в [2], который позволял учитывать возможность „попятных движений“ перколяционных путей, а также решать смешанные задачи узлов и связей. А именно осуществлялись повторные многократные прохождения строк системы „снизу вверх“ с переобозначением на каждом проходе метки проводящих ячеек, „касающихся“ ячеек, идентифицированных на предыдущих проходах как имеющих

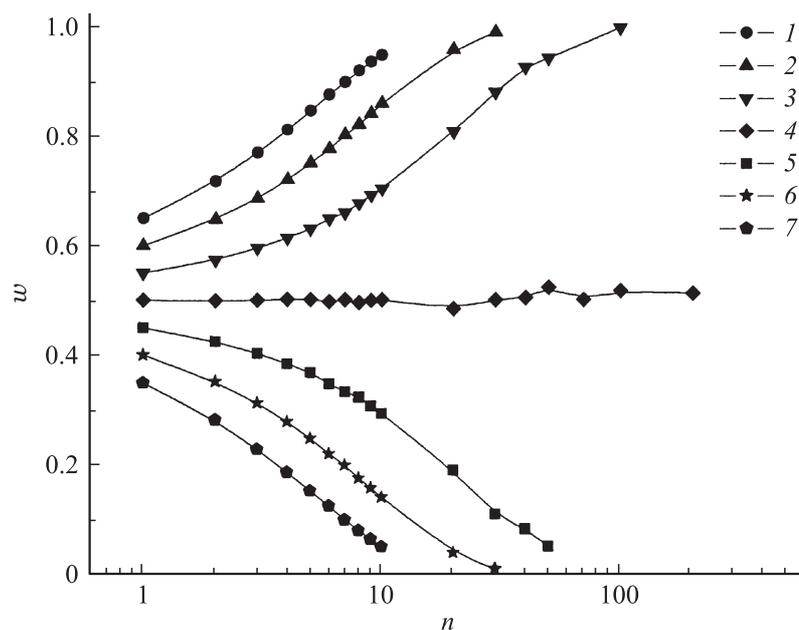


Рис. 3. Поведение функции $w(n)$ в задаче 3 (протекание во 2-ю КГ с вероятностью $1/2$) для плоской области. ξ : 0.65 (1), 0.60 (2), 0.55 (3), 0.50 (4), 0.45 (5), 0.40 (6), 0.35 (7).

связь с нижней стороной квадрата. Работа алгоритма заканчивалась по появлению переобозначенных ячеек на верхней грани квадрата либо после достижения ситуации, когда в системе не совершалось никаких переобозначений меток. Вероятность перколяции подсчитывалась как доля опытов, в которых был идентифицирован стягивающий кластер, к общему числу опытов. Все вычисления производились в системе MathCad с использованием ее средств программирования и встроенного ГСЧ. В ряде случаев для дополнительной рандомизации полученных конфигураций предпринимались меры, заключающиеся в изменении направления заполнения ячеек в строках, опускании некоторого количества чисел в генерированной ГСЧ псевдослучайной числовой последовательности либо в перестановке/инверсии строк, столбцов или перестановке отдельных элементов в сгенерированных

конфигурациях решетки. При этом направление заполнения ячеек, номера строк/столбцов/ячеек, с которыми производились манипуляции, и количество пропускаемых в псевдослучайных числовых последовательностях чисел выбирались случайным образом с применением аналогичного ГСЧ. Качество приготовления случайных конфигураций системы тестировалось по контролю отсутствия выраженного (с контрастом, существенно превышающим стандартное отклонение) узора на картинках средних чисел заполнения ячеек после проведения большого количества циклов заполнения. В расчетах, результаты которых приведены ниже, это качество было признано удовлетворительным даже без применения дополнительной рандомизации. Укажем, что найденные в наших расчетах величины перколяционных порогов оказались весьма близки к величинам порогов, найденных ранее с применением более эффективных и точных алгоритмов (см. [2,15–22] и цитированную в этих источниках литературу).

Полученные нами данные свидетельствуют о том, что, как и величины порогов ξ_c в классических задачах узлов теории протекания [1–13], поведение функции $w(n)$ при промежуточных значениях n сильно зависит от предположений, которые делаются относительно характера контакта между ячейками (от того, осуществляется ли контакт лишь „через ребро“ ячеек или еще и „через вершину по диагонали“ (задачи узлов с протеканием в 1-ю и 2-ю КГ [2], далее — задачи 1 и 2)). Например, в задаче 1 функция $w(n)$ при небольшом превышении над порогом ($\xi > \xi_c \approx 0.59$) проявляет неглубокий минимум, опускаясь до значений ≈ 0.53 и ≈ 0.575 при $\xi = 0.595$ и 0.60 (в то же время при $\xi = 0.65$ и более высокой доле проводящей фазы эта функция монотонно возрастает с n), а при $\xi < \xi_c$ вероятность перколяции w монотонно убывает с n (рис. 1). Для задачи 2 чуть ниже порога $\xi_c \approx 0.41$ функция $w(n)$ проходит через невысокий максимум (≈ 0.441 при $\xi = 0.40$), но монотонно убывает уже при $\xi = 0.35$, как и монотонно возрастает выше порога (рис. 2). Отметим, что поведение функции $w(n)$ для некоторой вероятности ξ в задаче 1 является „зеркальным“ (относительно линии $w = 0.5$) по отношению к поведению функции $w(n)$ для вероятности $1 - \xi$ в задаче 2 (см. рис. 1 и 2), в согласии со свойством взаимной дополнителности задач 1 и 2 для бесконечных решеток, согласно которому сумма критических вероятностей для перколяции в указанных задачах равна единице [1,3,10,20,23]. Любопытно, что функция $w(n)$ с хорошей точностью остается постоянной (а пределах

$\pm 0.01-0.02$) на пороге ($\xi = \xi_c \approx 0.50$) в задаче 3, в которой протекание „по диагонали“ во 2-ю КГ определяется, помимо вида фазы соответствующей ячейки, еще и случайной (с вероятностью $1/2$) реализацией связи „по диагонали“ (касанием вершин ячеек) (рис. 3). Выше и ниже порога функция $w(n)$ в задаче 3 строго возрастает и убывает соответственно с достаточно хорошо выраженной симметрией кривых семейств относительно линии $w = 0.50$. Влияние „сворачивания“ квадратной области в цилиндр на поведение зависимости $w(n)$ иллюстрируется на примере задачи 1 (рис. 1), где штриховыми линиями показано поведение функции $w(n)$ для некоторых из ранее рассмотренных значений ξ . Видно, что указанное поведение заметно модифицируется при промежуточных значениях n (разумеется, в результате „склейки“ количество путей, замыкающих собой нижнюю и верхнюю границу области, увеличивается, так что кривая $w(n)$ для цилиндрической области всегда лежит выше аналогичной кривой для несвернутой плоской области). В то же время существенного изменения порога $\xi_c(n \rightarrow \infty)$ при изменении граничных условий в пределах точности, реализованной в наших расчетах, зафиксировано не было: как и в случае плоской области, значение ξ_c в задаче на цилиндре находится в интервале $\xi = 0.594-0.595$.

Таким образом, при изучении перколяционных свойств квадратных решеток конечных размеров при фиксированной вероятности заполнения отдельных ячеек решетки проводящей фазой ξ выявлены характер поведения вероятности перколяции w как функции размера решетки n для задач узлов с протеканием в 1-ю и 2-ю КГ, а также влияние сворачивания решетки в цилиндр на поведение этой функции. Показано, что, хотя описанный в [14] эффект немонотонного поведения w с n и в рассматриваемом варианте задачи о перколяции при некоторых значениях ξ также имеет место, его величина является весьма незначительной. Результаты расчетов выявляют симметрию в поведении кривых $w(n)$ для рассмотренной пары задач, которая разрушается при сворачивании плоской решетки в цилиндр, а также позволяют идентифицировать самосимметричную (в указанном смысле) смешанную задачу узлов и связей, в которой при определенной доле разорванных диагональных связей ($1/2$) вероятность перколяции (равная $1/2$) остается независимой от n .

Автор благодарен В.А. Скачкову и С.С. Шаймееву за полезные дискуссии.

Список литературы

- [1] *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to Percolation Theory. London: Taylor & Francis, 2003.
- [2] *Эфрос А.Л.* Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982.
- [3] *Кестен Х.* Теория просачивания для математиков. М.: Мир, 1986.
- [4] *Шкловский В.И., Эфрос А.Л.* Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
- [5] *Sahini M.* Applications of Percolation Theory. London: Taylor & Francis, 1994.
- [6] *Meester M., Ray R.* Continuum Percolation. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1996.
- [7] *Grimmett G.* Percolation. Berlin: Springer Verlag, 1999.
- [8] *Тарасевич Ю.Ю.* Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Едиториал УРСС, 2002.
- [9] *Hunt A.J.* Percolation Theory for Flow in Porous Media. Lect. Notes Phys. 674. Berlin: Springer, 2005.
- [10] *Bollobas B., Riordan O.* Percolation. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2006.
- [11] *Шкловский В.И., Эфрос А.Л.* // УФН. 1975. Т. 117. В. 3. С. 401–435.
- [12] *Соколов И.М.* // УФН. 1986. Т. 150. В. 2. С. 221–255.
- [13] *Зеленый Л.М., Милованов А.В.* // УФН. 2004. Т. 174. В. 8. С. 810–852.
- [14] *Воронцов П.И.* // Сборник трудов VI Междунар. конф. „Аморфные и микрокристаллические полупроводники“. 7–9 июля 2008 г. Санкт-Петербург: Политехнический университет, 2008. С. 170–171.
- [15] *Newman M.E.J., Ziff R.M.* // Phys. Rev. E. 2001. V. 64. P. 016 706 (1–16).
- [16] *Newman M.E.J., Ziff R.M.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 4104–4107.
- [17] *Djordjevič Z.V., Stanley H.E., Margolina A.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1982. V. 15. P. L405–412.
- [18] *Malarz K., Salam S.* // Phys. Rev. E. 2005. V. 71. P. 016 125 (1–4).
- [19] *Feng X., Deng Y., Blöte H.W.* // Phys. Rev. E. 2008. V. 78. P. 031 136.
- [20] *Галямов С.Р., Мельчуков С.А.* // Вестник Удмуртского ун-та. Механика. 2011. В. 4. С. 60–79.
- [21] *Галямов С.Р., Мельчуков С.А.* // Вестник Удмуртского ун-та. Механика. 2009. В. 4. С. 33–44.
- [22] http://en.wikipedia.org/wiki/Percolation_threshold
- [23] *Russo L.* // Z. Wahrscheinlichkeitstheorie verw. Gebiete. 1978. V. 43. P. 39–48.