

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ ПРОВІДНИХ ОСАДІВ

Змодульовано процеси формування провідного шару колоїдних частинок для одновимірної ґраткової моделі балістичного осаду. Також обчислено поріг перколяції провідного шару та досліджено його скейлінгові та фрактальні властивості. Показано, що товщина перколяційного осаду зростає за умови збільшення розміру системи приблизно за логарифмічним законом $h_p \sim \ln(L)$. Висловлено припущення, що ця модель належить до нового класу універсальності перколяції спрямованого осаду з скейлінговим показником $n = 1,74 \pm 0,02$, що суттєво відрізняється від відомих значень випадкової та направленої перколяції. Перколяційний кластер не є ізотропним фракталом, але в повздовжньому напрямку між масою кластеру та його ефективним розміром спостерігається скейлінгове співвідношення, що характеризується ефективною фрактальною вимірністю рівною $D = 1,44 \pm 0,02$.

Вивченню структури і властивостей нерівноважних осадів колоїдних частинок присвячено велику кількість як теоретичних та експериментальних робіт, так і робіт, пов'язаних з комп'ютерним моделюванням [1]. Серед комп'ютерних моделей можна виділити модель балістичного осадження, в якій частинки рухаються по прямолінійних траєкторіях і приєднуються до осаду, що попередньо агрегував за наявності прямого контакту. Попередні дослідження моделі головним чином пов'язані з вивченням пористої структури осаду і динамічної поведінки середньоквадратичної флуктуації висоти осаду (шорсткості поверхні) [1,2].

Дана робота присвячена вивченню моделі осаду провідних частинок на поверхні та вивченню умов формування провідного перколяційного шару. Досліджується задача перколяції за наявності

спрямованого росту провідного шару, що є цікавою при розгляді умов виникнення провідності в тонких плівках провідних речовин, осаджених на підложках [3].

Моделювання росту було виконано за допомогою ґраткового варіанту моделі балістичного осадження на квадратній ґратці з застосуванням періодичних граничних умов. Провідні частинки однакового розміру рухаються по вертикальних траєкторіях з випадково обраного положення над поверхнею осаду і осаджуються за наявності безпосереднього контакту з найближчою частинкою осаду, що знаходиться на поверхні. При цьому під "поверхнею" розуміють набір часток, що знаходяться в найвищому положенні в кожній колонці. Наявність бічних взаємодій у даній моделі осадження призводить до формування осадів із до-

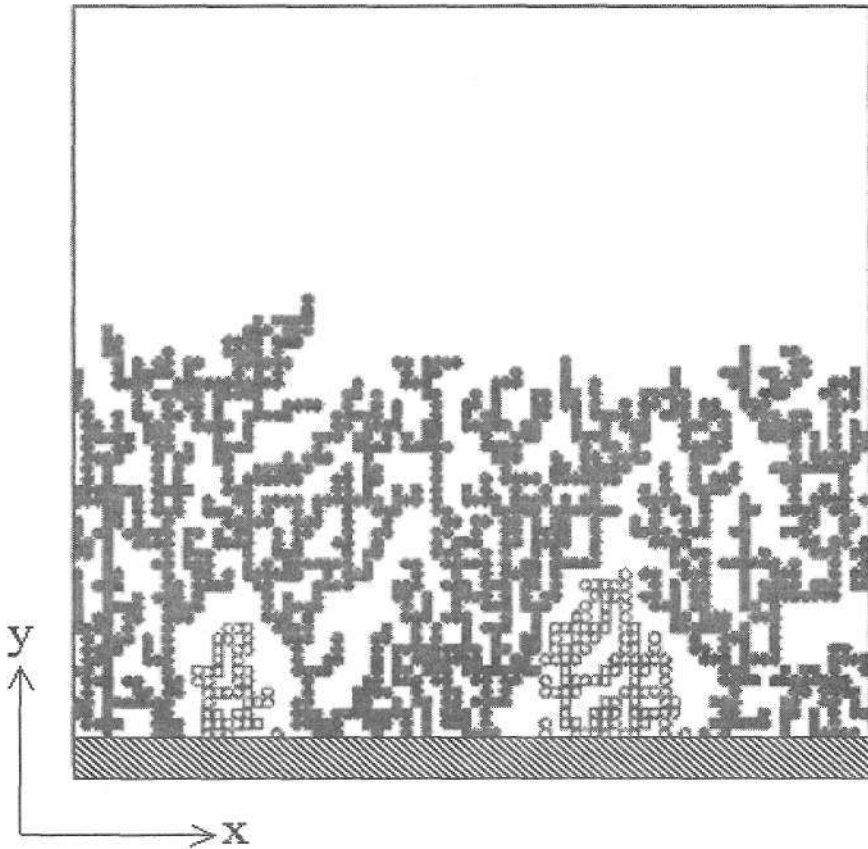


Рис. 1. Перколяційний осад провідних частинок, отриманий у моделі балістичного осадження на ґратці з $L = 80$. Провідні частинки подані на малюнку білим кольором. Сірим кольором показані провідні частинки, що належать до перколяційного кластера

статньо складною пористою структурою і цікавими властивостями поверхні. На рис. 1 подано характерний приклад структури пористого осадку, що складається з провідних частинок і переходить у провідний стан (перколяційний осад), коли доля вузлів квадратної сітки, заповнених провідними частинками p , досягає деякого критичного значення $p = p_c$. За аналогією з задачею перколяції на квадратній ґратці приймаємо правило, що дві провідні частинки належать до одного кластера, якщо вони осаджені в сусідніх вузлах квадратної ґратки і розміщені одна щодо іншої у вертикальному чи горизонтальному напрямку. Час утворення в системі перколяційного осадку обчислювався як $t_p = NIL$, де N — повне число осаджених провідних частинок, при якому система вперше переходить в провідний стан. Для аналізу провідності осадку використовувався алгоритм маркування кластерів Хошена—Копельмана [4]. При цьому вважалося, що система перейшла в провідний стан, коли всі частинки, що утворили поверхню осадку, мали ту саму кластерну мітку.

Залежність товщини перколяційного осадку h_p від розміру системи L показано на рис. 2. Товщина

перколяційного осадку зростає зі збільшенням L приблизно за законом:

$$h_p \sim \ln(L), \quad (1)$$

що дозволяє зробити висновок про відсутність перколяції в випадку нескінченно великої системи при $L \rightarrow \infty$. Це досить несподіваний результат і він може бути пов'язаний з одновимірністю цієї системи.

Аналіз даних комп'ютерного моделювання дозволив підтвердити універсальність, що описується рівнянням [5]

$$|p_c - p_c^\infty| \sim L^{-1/\nu}, \quad (2)$$

де отримані за допомогою методу найменших квадратів параметри в цьому рівнянні становлять $p_c^\infty = 0,491 \pm 0,001$ і $\nu = 1,74 \pm 0,02$ (див. рис. 3).

Значення p_c^∞ значно нижче в порівнянні з порогом випадкової перколяції для квадратної ґратки $p_c = 0,59275 \pm 0,0003$ [5], а значення ν відрізняється від значень $\nu = 4/3$ для випадкової [5] і $\nu = 1,096854(4)$ для направленої перколяції [6]. Це дозволяє висловити припущення, що тут ми маємо справу з новим класом універсальності перколяції спрямованого осадку.

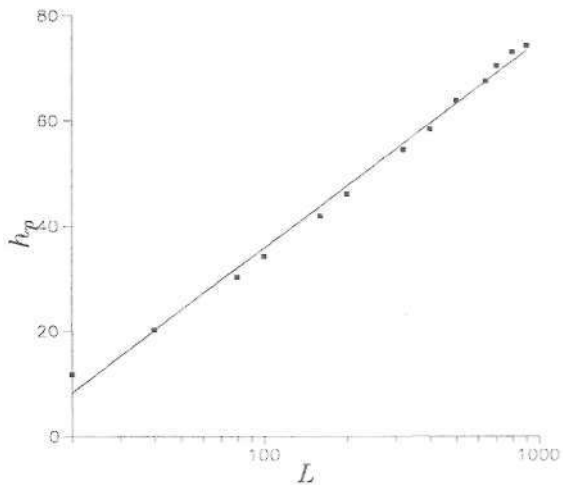


Рис. 2. Залежність товщини перколяційного осаду h_p від розміру квадратної ґратки L (дані усереднені по 1000 комп'ютерних експериментів для кожного значення L)

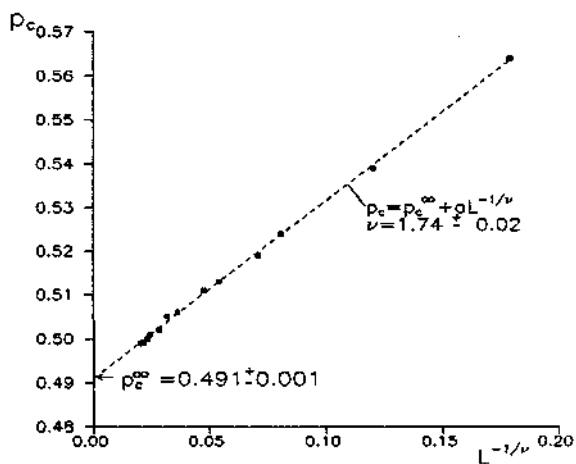


Рис. 3. Залежність p_c від $L^{-1/2}$ (усереднені дані 1000 комп'ютерних експериментів для кожного значення L)

Враховуючи (1) і (2), отримаємо залежність

$$h_p \sim \ln|p_c - p_c^x|, \quad (3)$$

яка добре підтверджується наявними даними комп'ютерного моделювання.

Для аналізу фрактальних властивостей перколяційного кластера розглянемо залежність числа вузлів, що належать перколяційному кластеру N_p , від середньоквадратичних розмірів у паралельному

та перпендикулярному напрямках до підложки, R_x та R_y (рис. 4). В паралельному напрямку дані можна описати за допомогою скейлінгового співвідношення

$$N_p \sim R_x^D, \quad (4)$$

де $D = 1,44 \pm 0,02$, проте в перпендикулярному напрямку дані комп'ютерного моделювання найкраще описуються залежністю типу $\ln(N_p) \sim R_y$

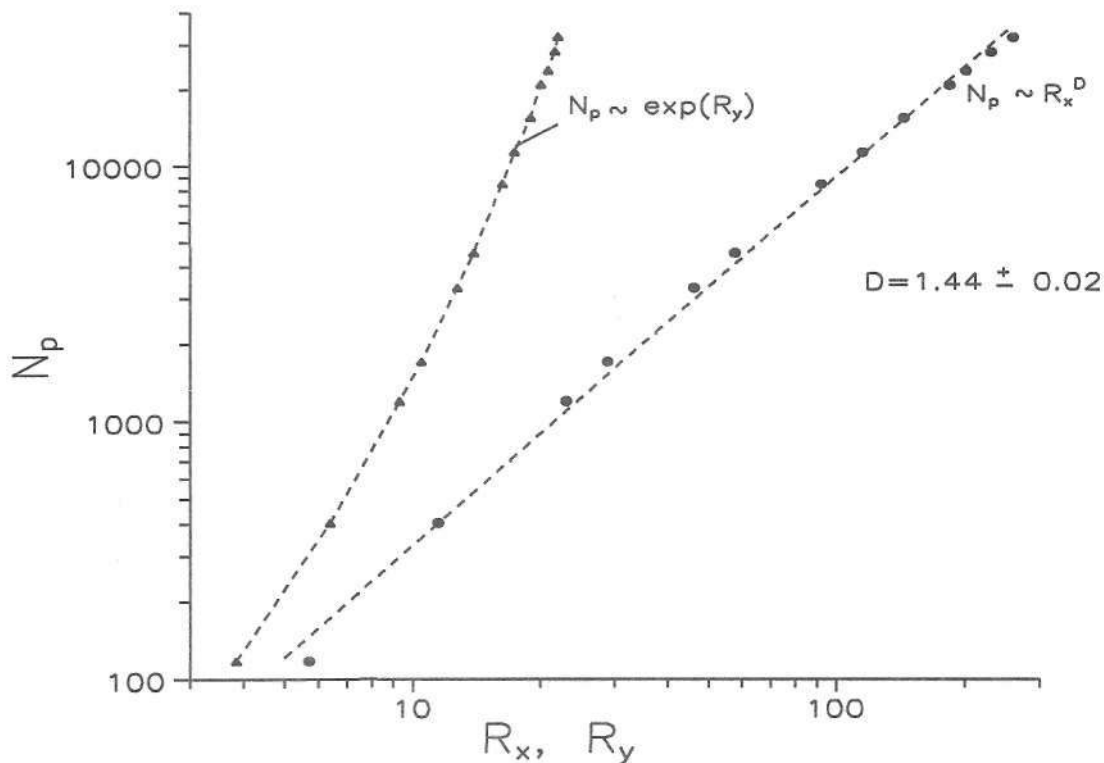


Рис. 4. Залежність N_p від R_x та R_y (усереднені дані 1000 комп'ютерних експериментів)

Таким чином перколяційний кластер у цій моделі не є ізотропним фракталом і отримана величина D значно менша, ніж значення фрактальної вимірності для ізотропного кластера в моделі випадкової перколяції $D = 1,89 \pm 0,01$ [5]. Цей факт відображає відмінність механізмів росту перколяційних кластерів у моделях перколяції спрямованого осаду та випадкової перколяції.

У подальшому передбачається проведення аналогічних досліджень для більш цікавої з практичного погляду двохвимірної моделі балістичного осадження.

Ця робота підтримана Індо-Українським грантом 2М/186-2001.

1. *Barabasi A. L. and Stanley H. E.* Fractal Concepts in Surface Growth.— Cambridge: Cambridge University Press, 1995.— 366 p.
2. *Family and T. Vicsek.* Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model // *J. Phys. A.*— 1985.— V. 18.— P. L75—L81.
3. *Silverman B. D. and Piatt D. E.* Percolation of a simulated metallic film on a porous substrate: The copper-polyimide interface // *Phys. Rev.*— 1994.— V. E49.— P. 1028—1039.
4. *Hoshen J., Kopelman R.* // *Phys. Rev. B*—1976.— V. 14.— P. 3438.
5. *Stauffer D. and Aharony A.* // Introduction to Percolation Theory,— London: Taylor & Francis, 1992.—179 p.
6. *Jensen I.* Low-density series expansions for directed percolation 1: A new efficient algorithm with applications to the square lattice // *cond-mat/9906036*.

Lebovka M. I., Vygornitskii M. V.

SIMULATION OF CONDUCTIVE DEPOSITE FORMATION PROCESSES

Simulation of the processes of colloid particles conductive layer formation was carried out for a one-dimension lattice model of ballistic deposition. The percolation threshold of conductive layer was calculated and its scaling and fractal properties was studied. It was shown that the width of a percolation deposit grows with the system size increase, approximately, following the logarithmic law $h_p - \ln(L)$. It was supposed that this model belongs to a new class of universality of the directed deposition percolation with scaling exponent $\eta = 1,74 \pm 0,02$, which differs substantially from known values for random and directed percolation. The percolation cluster is not an isotropic fractal, but a scaling relation between cluster mass and its size was observed in the longitudinal direction of the cluster with the effective fractal dimension $D = 1,44 \pm 0,02$.