

СМЕШАННАЯ ПЕРКОЛЯЦИЯ ДИМЕРОВ НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Черкасова В.А., Тарасевич Ю.Ю.

Астраханский государственный университет,
Россия, 414056, Астрахань, ул. Татищева 20а, (8512)610819, E-mail: tarasevich@aspu.ru

Для описания фазового перехода золь–гель широко применяется теория перколяции. Обычно занятые узлы рассматривают в качестве молекул растворенного вещества, а пустые – в качестве молекул растворителя. Однако в ряде случаев такая модель оказывается чрезмерно упрощенной. Примером может служить процесс гелеобразования водного раствора альбумина при его высыхании. Молекула альбумина имеет сложную форму. Обычная модель перколяции узлов слишком проста в этом случае. В качестве следующего приближения может быть рассмотрена перколяция димеров (линейных объектов длины 2) на простой кубической решетке [2]. Альбумин является транспортным белком, на его поверхности адсорбируются продукты метаболизма. Способность молекул альбумина к агрегации существенно зависит от состояния поверхности молекул. Для моделирования влияния состояния поверхности альбумина на фазовый переход золь-гель нами рассмотрена смешанная перколяция (перколяция узлов и связей) димеров на простой кубической решетке.

Моделирование проводилось на решетке с линейным размером 32 узла, свободными граничными условиями вдоль одного направления и периодическими вдоль двух других. Использовался классический алгоритм Хошена-Копельмана [3] для идентификации кластеров и определения порога перколяции.

Получено, что критическая кривая хорошо аппроксимируется функцией $p_s = 0.806 \exp\left(\frac{p_b}{0.363}\right) + 0.204$, где p_s – доля заполненных узлов, p_b – доля целых связей.

Для получения критической кривой в термодинамическом пределе планируется провести моделирование на решетках большего размера и воспользоваться скейлинговыми соотношениями.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 06-02-16027-а «Исследование механизмов дегидратационной самоорганизации биологических жидкостей».

Литература

1. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, 1992.
2. *Tarasevich Y.Y., Cherkasova V.A.* Dimer percolation and jamming on simple cubic lattice // European Physical Journal B, 2007.
3. *Hoshen J., Kopelman R.* Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // Phys. Rev. B. Vol. 14, № 8, 1976, P. 3438-3445.