

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Percolação em Nanotubos

Andrey Brito Nascimento¹

Programa de Pós graduação em Matemática e Estatística, UFPA, Belém, PA

Heliton Ribeiro Tavares²

Universidade Federal do Pará, Belém, Pará

Neste trabalho propomos uma aproximação para a função de condutibilidade para nanotubos de carbono em formato de zig-zag, com parede simples. Adota-se os nanotubos como uma rede hexagonal com respectivas condições de contorno, e aplicamos o processo de simulação Monte Carlo fazendo um paralelo entre o software R e Dev C++. Tem-se como base o algoritmo de Newman e Ziff (2000) para desenvolver o processo de percolação. Nosso problema de pesquisa é estimar a probabilidade ($\theta(p)$), na rede tubular $N = L_1 \times L_2$, de se aplicar uma carga elétrica em uma das extremidades do nanotubos e esta atravessar todo o comprimento L_2 , dessa forma a expressão de básica teria como modelo:

$$\theta(p) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(E \leftrightarrow D | Y = n) \mathbb{P}(Y = n), \quad (1)$$

sendo $\{E \leftrightarrow D\}$ o evento conectar os átomos do lado direito (D) com os átomos do lado esquerdo (E), $\mathbb{P}(Y = n)$ a probabilidade de n sítios da rede estarem ocupados.

O Algoritmo de Newman e Ziff tem como principal finalidade simular o fenômeno percolação, dessa forma dada uma rede vazia $L_1 \times L_2$ com pontos enumerados de $\{1, \dots, N\}$, com $N = L_1 \times L_2$ como mostrada na Figura 1, foram estabelecidas as seguintes etapas:

1. Gere uma permutação aleatória dos números $\{1, \dots, N\}$ (R_1)
2. Considerando R_1 , ocupe os sítios sucessivamente até preencher toda a rede (N etapas).
3. Durante a ocupação, os sítios ocupados formarão aglomerados. Para cada aglomerado atribua um sítio *raiz* que represente todo o conjunto de sítios do aglomerado.
4. Todos os sítios do aglomerado apontarão para o sítio raiz.

O algoritmo de descrito no artigo [1] foi desenvolvido para preencher toda rede de tamanho N . Para nosso trabalho o interesse é que o algoritmo pare quando for formado um caminho entre os extremos à direita e à esquerda da rede. Inicialmente o artigo faz uma proposta

¹prof.andreynascimento@gmail.com

²heliton@ufpa.br

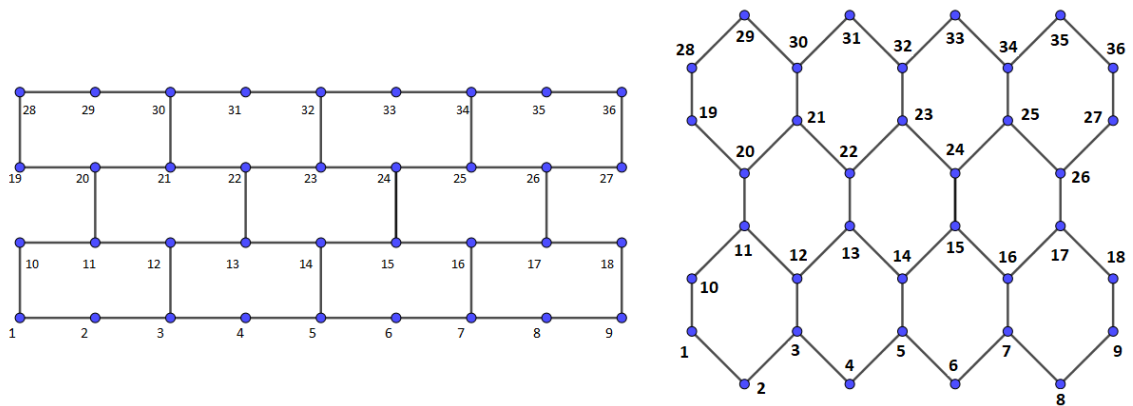


Figura 1: Rede hexagonal enumerada

que contempla o interesse de nosso trabalho, todavia esta não será empregada em nosso trabalho. Para este trabalho é o utilizado o seguinte processo:

- (i) Gere uma permutação aleatória dos números $\{1, \dots, N\}$ (R_1);
- (ii) Considerando R_1 , ocupe os sítios sucessivamente, com a formação dos aglomerados, eleja um sítio raiz;
- (iii) Para cada sítio raiz, eleja duas outras raízes, uma localizada mais à direita, do cluster, e outra mais à esquerda. Seja $r_d = (x_d, y_d)$ as coordenadas da raiz mais à direita e $r_e = (x_e, y_e)$ as coordenadas mais à esquerda;
- (iv) O processo deve parar quando $x_d = L_2$ e $x_e = 1$.

Baseado na Lei dos grandes números, no processo foram feitas 10^4 réplicas da rede, com tamanhos diferentes, com o intuito de construir a função de probabilidade. Nosso algoritmo é validado quando chega-se aos resultados já conhecidos na literatura dos pontos críticos das redes quadradas e hexagonal. É apresentado também duas formas para construção computacional da rede hexagonal.

Referências

- [1] M. Newman and R. Ziff, Efficient monte carlo algorithm and high-precision results for percolation, *Physical Review Letters*, 2001. DOI: 10.1103/PhysRevE.64.016706