

Περίληψη διπλωματικής εργασίας

Στο πρώτο κεφάλαιο μελετάται το πρόβλημα της διήθησης τύπου σημείου (site percolation). Συνήθως τα δεδομένα που αφορούν το πλέγμα στο συγκεκριμένο πρόβλημα συλλέγονται από τα γειτονικά σημεία – ή τα αμέσως επόμενα γειτονικά . Ωστόσο, αλληλεπιδράσεις μεγάλου βεληνεκούς (long range interactions) μπορούν να παίξουν σημαντικό ρόλο, ειδικά όταν μελετώνται κβαντικά φαινόμενα ή φαινόμενα σήραγγας. Τα εν λόγω φαινόμενα παίζουν σημαντικό ρόλο σε triplet εξιόνια σε άτακτους μοριακούς κρυστάλλους (disordered molecular crystals) όπου φαινόμενα σήραγγας συνδέονται με το παρατηρούμενο χαμηλό κατώφλι συγκέντρωσης στο πρόβλημα της διήθησης. Παρόμοια η ηλεκτρική αγωγιμότητα σε υψηλού βαθμού νόθευσης ημιαγωγούς έχει προσεγγιστεί ως μια διεργασία διήθησης μεγάλου βεληνεκούς (long-range percolation process). Εισάγουμε κάποιους βασικούς ορισμούς για 2- και 3 – διάστατα συστήματα κυρίως επικεντρωνόμαστε σε 2-διάστατη τοπολογία: κρίσιμη συγκέντρωση ,πιθανότητες διήθησης κρίσιμοι εκθέτες. Αν και η συμπεριφορά που παρουσιάζει η κρίσιμη συγκέντρωση φαίνεται να εναρμονίζεται με την κλασική συμπεριφορά όσο η εμβέλεια της αλληλεπίδρασης αυξάνει, το ίδιο δεν μπορούμε να πούμε ότι ισχύει και για τους κρίσιμους εκθέτες (β, γ). Οι τελευταίοι δείχνουν αμετάβλητοι από αυτούς που βρέθηκαν για την τοπολογία με την μικρότερη ακτίνα αλληλεπίδρασης. Κρίσιμα φαινόμενα διήθησης είναι χαρακτηριστικά για 2 –και 3 – διάστατα πλέγματα. Ένα ενδιαφέρον ερώτημα σε αυτό το κεφάλαιο αφορά την μελέτη της διήθησης σε λεπτά υμένα. Στην πραγματικότητα τα λεπτά υμένα αποτελούν μια ενδιάμεση περίπτωση ανάμεσα σε 2 –και 3 – διάστατα πλέγματα. Η γνώση της συμπεριφοράς του συστήματος κατά τη μεταπήδηση του από 2 σε 3 διαστάσεις είναι εξαιρετικά σημαντική στο χώρο της Νανοτεχνολογίας (χαρακτηριστικό παράδειγμα της αναφέρονται οι επικαλύψεις που σχηματίζονται με τις τεχνικές εναπόθεσης ατμών στα λεπτά υμένα).

Στο δεύτερο κεφάλαιο κάνουμε μια εισαγωγή στις έννοιες τυχαίος περίπατος (RW-Random Walk) ,αριθμός των πλεγματικών σημείων που επισκέφθηκε ο δρομέας S_n , πιθανότητα επιστροφής του δρομέα στο σημείο εκκίνησης $P(0,t)$ μετά από χρόνο t . Τέλος εξετάζονται εναλλακτικές μορφές ανώμαλης διάχυσης όπως είναι τα Levy walks και Levy flights, και τα RWs σε scale- free και random networks.

Στο τρίτο κεφάλαιο εξάγουμε μια ασφαλή φόρμουλα για την διάσταση πληροφορίας D_I σε RWs σε σχέση με την συνάρτηση $V(r,n)$, την συνάρτηση που

δίνει τον αριθμό των σημείων του πλέγματος τα οποία έχουν ακριβώς r επισκέψεις κατά την διάρκεια ενός RW n βημάτων. Η φόρμουλα αυτή είναι γενική και ισχύει τόσο για απλά πλέγματα όσο και για μορφοκλασματικές (fractal) δομές. Η κύρια παράμετρος είναι ο S_n , ο αριθμός των σημείων του πλέγματος τα οποία έχουν επισκεφτεί τουλάχιστον μια φορά κατά την διάρκεια ενός RW n βημάτων. Πραγματοποιούμε προσομοιώσεις σε απλά πλέγματα και σε μορφοκλασματικές (fractal) δομές: στο Sierpinski gasket στο Sierpinski carpet σε 2 –και 3 – διάστατα συσσωματώματα διήθησης ακριβώς στο κατώφλι συγκέντρωσης. Βρέθηκε ότι η D_1 έχει την ίδια τιμή όσο η φασματική διάσταση όσο το n τείνει στο άπειρο.

Στο τέταρτο κεφάλαιο μελετούμε τον εκθέτη dw που συνδέεται με το μέσο τετράγωνο της απόστασης και τον εκθέτη dn που συνδέεται με το μέσο όρο των σημείων που επισκέπτεται ο RW n για την οικογένεια των προτύπων τύπου Sierpinski carpet. Εισάγουμε ένα νέο αλγόριθμο για τον τυχαίο περίπατο σε πρακτικά άπειρα ντετερμινιστικά μορφοκλασματικά πλέγματα. Ο αλγόριθμος εφαρμόστηκε σε διάφορα Sierpinski carpet patterns με την ίδια Hausdorff διάσταση. Αποδεικνύεται ότι τα συστήματα δίνουν διαφορετικές τιμές για τα dw .

Στο πέμπτο κεφάλαιο εξετάζεται η συμπεριφορά του μη γραμμικού προτύπου επιφανειακών αντιδράσεων Lotka – Volterra μέσω προσομοίωσης Monte Carlo σε διδιάστατα υποστρώματα. Κατά την εξέλιξη του συστήματος σε πλέγμα εμφανίζονται φαινόμενα αυθόρμητης συσσωμάτωσης ομοειδών σωματιδίων (clustering) και μορφώματα τα οποία διαθέτουν μορφοκλασματική (fractal) δομή και εμφανίζουν ταλαντώσεις με τον χρόνο. Η δομή αυτή διερευνάται με χρήση της χωρικής fractal διάστασης (box counting fractal dimension). Μελετάται επίσης η τροποποίηση που επιφέρει στην συμπεριφορά του δυναμικού συστήματος η εισαγωγή μορφοκλασματικών υποστρωμάτων. Φαίνεται ότι με την ρύθμιση της fractal διάστασης του ενεργού υποστρώματος είναι δυνατόν να προκαθορίσουμε την πορεία που θα ακολουθήσει το δυναμικό σύστημα, οδηγώντας ακόμη και σε δηλητηρίαση του υποστρώματος με το ένα από τα ενεργά συστατικά. Τέλος εξετάζεται το αντίστροφο μοντέλο καθώς και η επίδραση της ανάμιξης στη δομή του συστήματος.

Στο έκτο κεφάλαιο μελετάμε το «κέλυφος» των περιοχών που τα επισκέπτηκαν N τυχαίοι δρομείς μετά από t χρονικά βήματα. Για το λόγο αυτό μελετάμε (α) τετραγωνικά πλέγματα και (β) percolation clusters στο κρίσιμο σημείο.

Ανακαλύπτουμε ότι αυτό το κέλυφος εμφανίζει ιδιότητες αυτό-ομοιότητας και περιγράφεται από την διάσταση d_H η οποία προσεγγίζει την τιμή $d_H = 4/3$.