

Энтропия Реньи для примесного графена

Конобеева Н.Н., доц.; Полунина А.А., студ.

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград

В настоящей работе проводилось моделирование движения электрона по поверхности квадратной и гексагональной решеток. Точки пересечения линий называются узлами, на них мы и помещали электроны случайным образом. В рамках одной из предыдущих работ уже исследовалась задача о перколяционном пути в решетке графена [1]. Целью же данной работы было отыскание замкнутых областей, составленных из связей – кластеров, которые иначе называются кораллами и определение зависимости для последующего расчета различных характеристик графена с примесями на основе свойства конформности.

Предложен алгоритм маркировки замкнутых областей, образованных ячейками, занятыми электронами, разработанный на основе алгоритма Ли [2]. Разработана программа для моделирования движения электрона по поверхности примесного графена с использованием теории графов. Приведены результаты экспериментальных исследований программы для квадратной и гексагональной решеток, показавшие его работоспособность. Построена зависимость количества замкнутых путей от их длины вблизи порога перколяции. В соответствии с теорией скейлинга [3] определен вид степенной функции, который позволил рассчитать физические характеристики графена с примесями, в том числе энтропию Реньи и минимальную проводимость графена.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 12-02-31654).

1. А.А. Полунина, Н.Н. Конобеева, *Материалы II Международной конференции молодых ученых «Математическое моделирование фрактальных процессов, родственные проблемы анализа и информатики»*, 129 (Нальчик: 2012).
2. C.Y. Lee, *IRE Trans. Electronic Computation* **EC-10** No2, 364 (1961).
3. Х. Мюллер, *Основания физики и геометрии* (М.: РУДН: 2008).