

Capítulo 5

Modelo de aglomerados vacantes (2)

O modelo (2) é definido de forma análoga ao modelo (1) (capítulo 4), exceto por quais transições elementares são permitidas. No modelo (2), há dois tipos de transição possíveis:

1. uma partícula que tem por vizinhos uma outra partícula e dois sítios vacantes salta para o sítio vacante mais distante da partícula vizinha;
2. uma partícula separada de outra por um sítio vazio salta para este sítio vazio.

As transições correspondentes são mostradas a seguir:

$$1100 \rightarrow 1001 \qquad 0011 \rightarrow 1001 \qquad (5.1)$$

$$101 \rightarrow 011 \qquad 101 \rightarrow 110 \qquad (5.2)$$

O primeiro par de transições corresponde a uma regra do modelo PCCI para segundos vizinhos ($n = 2$).

O estado estacionário ativo é qualquer estado cuja única classe de sítios vacantes são os pares de sítios vazios consecutivos (de onde vem o nome do modelo). Exemplo:

$$100110010011110011$$

Para que o sistema chegue ao estado ativo, é necessário tomar a densidade ρ no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 1$. Fora deste intervalo, o sistema deve cair em um dentre muitos estados absorventes.

Um estado absorvente para este modelo deve obedecer a duas condições: a primeira é que não existam vacâncias isoladas, de modo que não ocorram as transições (5.2). Cumprida esta primeira condição, todos os sítios vacantes estão em aglomerados de no mínimo duas unidades. Assim, para que as transições (5.1) também não ocorram, entre dois aglomerados vacantes deve existir apenas uma partícula. Logo, num estado absorvente, toda partícula deve estar separada das partículas mais próximas por dois ou mais sítios vacantes. Para qualquer $\rho < 1/3$, é possível construir um estado que satisfaça tal condição, o que é condizente com a afirmativa do parágrafo anterior.

Na seção a seguir, vamos argumentar porque, aplicando as regras (5.1) e (5.2), chegamos ao estado estacionário ativo descrito acima.

5.1 Caracterização do estado ativo

Já que queremos mostrar que ocorrem apenas pares de sítios vacantes no estado ativo, precisamos estudar a evolução das densidades de trincas de sítios, além das de pares, pois precisamos mostrar que $P(101) = P(000) = 0$ no equilíbrio para provar que todos os sítios vacantes do modelo ocorrem como pares.

As transições (5.1) podem ser desdobradas nas transições a seguir (onde x representa um sítio que pode estar ocupado ou vazio, não influenciando a análise que queremos fazer):

$$x110000 \rightarrow x100100 \qquad 000011x \rightarrow 001001x \qquad (5.3)$$

$$x110001 \rightarrow x100101 \qquad 100011x \rightarrow 101001x \qquad (5.4)$$

$$x11001x \rightarrow x10011x \qquad x10011x \rightarrow x11001x \qquad (5.5)$$

Nas transições (5.3), um par de sítios é separado de uma cadeia de tamanho qualquer, o que contribui para aumentar $P(1001)$, às custas de $P(000)$. Nas transições (5.4), uma tripla é separada em um par e um sítio isolado, o que aumenta $P(1001)$ e $P(101)$, enquanto $P(000)$ decai. As transições (5.5) consistem em difusão de pares, o que não altera as densidades de nenhuma das classes.

Já as transições (5.2) podem ser desdobradas nas transições:

$$00101x \rightarrow 00011x \qquad x10100 \rightarrow x11000 \qquad (5.6)$$

$$10101x \rightarrow 10011x \qquad x10101 \rightarrow x11001 \qquad (5.7)$$

$$x1101x \rightarrow x1011x \qquad x1011x \rightarrow x1101x \qquad (5.8)$$

Nas transições (5.6), um sítio vacante é agregado a uma seqüência de sítios vacantes, de tamanho desconhecido. Nas transições (5.7), dois sítios vacantes se fundem, formando um par. As transições (5.8) podem por sua vez ser interpretadas como um processo de difusão de sítios vacantes isolados, que não altera a densidade de nenhuma classe de sítios vacantes. Assim, a densidade de sítios vacantes isolados diminui, enquanto crescem as densidades de pares, triplas, n -uplas de sítios vacantes.

A partir desta discussão, notamos que $P(101)$ e $P(000)$ possuem comportamento indefinido, pois tendem a aumentar ou diminuir conforme a regra de transição utilizada. Entretanto, não há nenhuma regra que favoreça a diminuição de $P(00)$, e os dois processos postulados podem favorecer o seu aumento. Assim, podemos supor que, conforme o sistema evolui, $P(00)$ aumenta até encontrar algum limite (que existe, uma vez que $P(00) \leq P(0) = 1 - \rho$). Conforme $P(00)$ aumenta, as densidades das demais classes devem diminuir, até eventualmente se anularem.

Um vez que isso aconteça, as transições elementares possíveis são apenas (5.5), as quais preservam as densidades de pares. Notamos que essas transições são reversa uma da outra e ocorrem com a mesma taxa, correspondendo à condição (2.4). Esta condição pode ser simplificada, obtendo-se o resultado (2.5) $P(\eta) = const.$, desde que o processo seja ergódico, como mostraremos na próxima seção.

5.2 Ergodicidade

Para mostrar que o sistema é ergódico, vamos fixar a densidade ρ no intervalo $1/3 < \rho < 1$ e o comprimento L do sistema. Vamos supor que exista um número par de sítios vacantes e que este sistema se encontre numa configuração η onde todos os sítios estejam agrupados em pares. Definimos $\eta^0(\rho)$ como uma configuração formada por duas cadeias: η_a^0 , de comprimento $3(1 - \rho)L/2$, formada por repetições da seqüência 100, e η_b^0 , formada unicamente por sítios ocupados:

$$\eta^0 = \underbrace{100\ 100\ \dots\ 100}_{\eta_a^0} \underbrace{11\ \dots\ 1}_{\eta_b^0} \qquad (5.9)$$

Vamos estabelecer a convenção a seguir: seja i_n , $1 \leq n \leq (1 - \rho)L/2$, a posição de um par vacante igual à posição do sítio vacante à esquerda. Assim, uma configuração

η possível possui $(1 - \rho)L/2$ pares de sítios vacantes. Para levar η até η^0 , utilizamos o procedimento a seguir:

1. Primeiramente, tomamos o primeiro par vacante da cadeia ($n = 1$) e renomeamos as posições de todos os sítios de modo que a posição deste par seja $i_1 = 2$. Assim, localizamos uma seqüência 100 no começo da cadeia, que é renomeada como η_a^0 . Vamos ao passo seguinte.
2. Tomamos o par vacante correspondente ao próximo valor de n . Se $i_n > 3n - 2$, então este par pertence a uma cadeia 100 separada de η_a^0 por uma cadeia de um ou mais sítios ocupados. Prosseguimos ao próximo passo. Se i_n for igual a $3n - 2$, então vamos ao passo 5. Se não houver o próximo par vacante, vamos para o passo 6.
3. Devido à disposição de sítios, podemos aplicar a primeira transição (5.1), que desloca o par uma unidade à esquerda:

$$\begin{array}{ccc}
 \dots 100 \dots 1 \ 100 \ 1 \dots & & \\
 \downarrow & & (5.10) \\
 \dots 100 \dots 100 \ 1 \ 1 \dots & &
 \end{array}$$

4. Repetimos o item 3 enquanto existirem sítios ocupados entre a cadeia 100 considerada e η_a^0 .
5. Quando a cadeia 100 for vizinha de η_a^0 , incorporamos 100 à cadeia maior. A seguir, repetimos o passo 2.
6. Quando não houver mais sítios vacante fora de η_a^0 , o restante da configuração é igual a η_b^0 . Assim, transformamos η em η^0 .

Assim, concluímos que o estado estacionário ativo do modelo (2) é ergódico, o que nos autoriza a utilizar a formulação de matrizes de transferência.

5.3 Cálculo da matriz de transferência

Como visto acima, no estado estacionário ativo, a densidade de sítios vacantes isolados e a densidade de ternas de sítios vacantes devem se anular. Para o cálculo da

matriz de transferência, essa restrição pode ser traduzida pelo seguinte fator γ :

$$\gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \eta_{i+2}) = \begin{cases} 0, & \eta_i = \eta_{i+2} = 1, \eta_{i+1} = 0 \\ 0, & \eta_i = \eta_{i+1} = \eta_{i+2} = 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (5.11)$$

que especifica que as sequências 101 e 000 são proibidas.

Como γ é função de três sítios, a dimensão mínima da matriz de transferência é igual a 4. De acordo com a seção 3.1, obtemos a seguinte matriz de transferência:

$$T(z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

A partir desta matriz, a atividade z é dada por:

$$z = \frac{\lambda^3}{\lambda^2 + 1} \quad (5.13)$$

Utilizando a equação (3.15), obtemos:

$$\rho = \frac{\lambda^2 + 1}{\lambda^2 + 3} \rightarrow \lambda = \left(\frac{3\rho - 1}{1 - \rho} \right)^{1/2} \quad (5.14)$$

De (5.14), notamos que, variando o autovalor λ no intervalo $0 \leq \lambda \leq \infty$, obtemos uma variação correspondente na densidade no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 1$. Assim, nesse intervalo de valores, todas as configurações acessíveis no estado estacionário são equiprováveis, como suposto no começo do capítulo.

Vamos agora calcular algumas grandezas macroscópicas, começando pela densidade de sítios vacantes $P(00)$. É possível calcular $P(00)$ sem utilizar a técnica de matrizes de transferência pois, como todos os sítios vacantes estão dispostos em pares, obtemos:

$$P(0) = 2P(00) \rightarrow P(00) = \frac{1 - \rho}{2} \quad (5.15)$$

Obtemos o mesmo resultado a partir da matriz de transferência modificada:

$$T' = \begin{pmatrix} 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

e procedendo como na seção 3.1. Obtemos:

$$P(00) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln w \right)^{-1} = \frac{1}{\lambda^2 + 3} = \frac{1 - \rho}{2} \quad (5.17)$$

Uma outra grandeza interessante para se calcular é a densidade de partículas ativas $\rho_a = P(1100) + P(0011) = 2P(1100)$ (uma vez que, no estado estacionário ativo, $P(101)$ é nula). Em princípio precisaríamos utilizar uma matriz de dimensão 8 para deduzir essa grandeza, mas $P(1100) = P(110)$, uma vez que não há vacâncias isoladas. Assim, podemos calcular $P(110)$ utilizando uma matriz de menor dimensão. Seja a seguinte matriz de transferência:

$$T'' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & vz & z \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

A variável v é dada por:

$$v = \frac{\lambda^4 - z\lambda^3 - z\lambda + z^2}{z^2} \quad (5.19)$$

Usando a equação (4.24), obtemos:

$$\frac{1}{P(110)} = \frac{\lambda(3\lambda^2 - 2z\lambda - z)}{\lambda^3 - z\lambda^2 - z\lambda + z^2} \quad (5.20)$$

Usando (5.13) e (5.14) para eliminar z e λ , obtemos:

$$P(110) = \frac{\lambda^2}{(\lambda^2 + 1)(\lambda^2 + 3)} = \frac{(3\rho - 1)(1 - \rho)}{4\rho} \quad (5.21)$$

5.4 Resultados numéricos

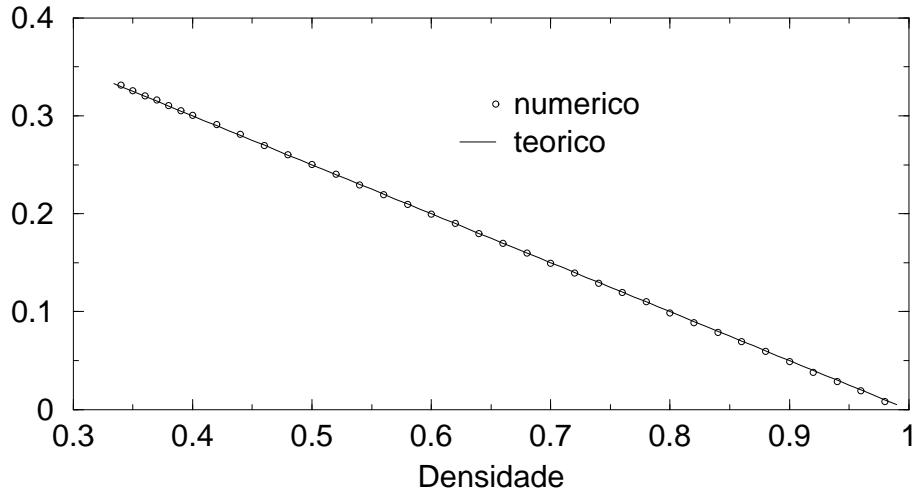


Figura 5.1: Densidade de pares vacantes em função de ρ , para o modelo (2).

Realizamos uma simulação do modelo (2), a partir de condições iniciais aleatórias, numa rede de 4000 sítios com densidade variando entre 0.34 e 1, e evoluímos o sistema durante 25000 passos de Monte Carlo (ou seja, 25000 vezes o tamanho da rede). Os primeiros pontos, entretanto, são produzidos após o sistema evoluir um tempo bem maior ($4 \cdot 10^5$ passos de Monte Carlo), necessário para realmente

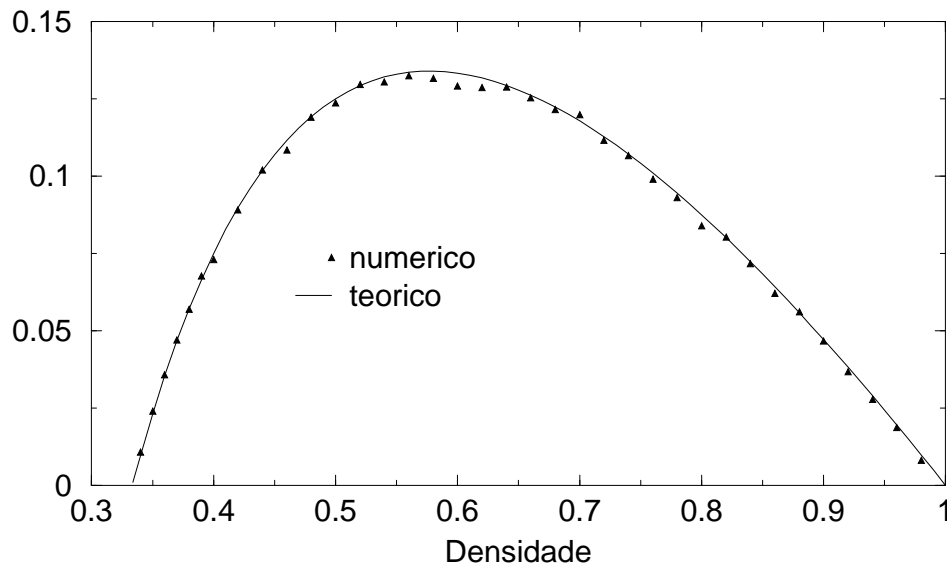


Figura 5.2: Densidade de partículas ativas em função de ρ , para o modelo (2).

alcançarmos o estado estacionário, devido a motivos já expostos na seção 4.5.

O gráfico 5.1 compara a densidade de pares de sítios vacantes $P(00)$ medida numericamente com a dada pela equação (5.15). Relembrando o raciocínio da seção anterior, a concordância destes resultados indica que não há sítios isolados. Além disso, nas simulações mediu-se também a densidade de trincas 000, a qual era nula para todos os pontos ao final da simulação. Estes dois resultados indicam que o sistema realmente se encontra no estado estacionário.

O gráfico 5.2 compara a densidade de partículas ativas numérica com a dada por (5.21). Notamos uma ótima convergência entre o resultado numérico e o analítico, como esperado.