

Capítulo 6

Modelo de aglomerados vacantes (1, 2)c

Neste capítulo, vamos estudar o modelo definido pelas transições a seguir:

$$1100 \rightarrow 1001 \qquad 0011 \rightarrow 1001 \qquad (6.1)$$

$$1101 \rightarrow 1011 \qquad 1011 \rightarrow 1101 \qquad (6.2)$$

$$10100 \rightarrow 10010 \qquad 00101 \rightarrow 01001 \qquad (6.3)$$

$$11000 \rightarrow 10100 \qquad 00011 \rightarrow 00101 \qquad (6.4)$$

Este modelo é tal que, para densidades suficientemente altas, cai num estado estacionário ativo, enquanto para densidades suficientemente baixas, cai num estado absorvente (dentre muitos), como os modelos estudados nos capítulos 4 e 5.

O estado absorvente para este modelo deve ser tal que as densidades de partículas ativas para as transições (6.1) a (6.4) se anulem. Para que isso ocorre é fácil mostrar que esse estado deve obedecer às condições:

$$P(110) = P(011) = 0 \qquad (6.5)$$

$$P(10100) = P(00101) = 0 \qquad (6.6)$$

As duas condições acima são satisfeitas para os valores extremos do parâmetro ρ : $\rho = 0$ e $\rho = 1$. No entanto, excluimos estes casos, uma vez que para estes valores de ρ , existe apenas um estado possível.

Tomando $\rho \neq 0, 1$, temos que $P(10) \neq 0$, já que existem numa cadeia periódica

com sítios ocupados e vacantes ao menos duas interfaces entre os dois tipos de sítios. Para que a condição (6.5) seja satisfeita, todas as partículas devem estar isoladas, uma vez que, se existem duas partículas em sítios consecutivos e existem sítios vacantes (uma vez que $\rho \neq 1$), então existe uma trinca de sítios 110, localizada no encontro entre a cadeia de partículas e o primeiro sítio isolado. Se todas as partículas estão isoladas, então $\rho \leq 0.5$.

Vamos supor que $\rho < 0.5$, deixando o caso $\rho = 0.5$ para ser analisado mais adiante. Para que um estado seja absorvente, ele também deve obedecer à condição (6.6), que implica que existe apenas uma partícula separando aglomerados vacantes. Vemos que, se existe ao menos um sítio vacante isolado, (6.6) é obedecida se os aglomerados mais próximos também são vacâncias isoladas. Considerando que a mesma condição deve ser obedecida pelas demais vacâncias isoladas, concluímos que não deve haver aglomerados de vacâncias de tamanho superior a 1, ou seja, todas as vacâncias são isoladas ($\rho = 0.5$). Como estamos ignorando provisoriamente este caso, vemos que não deve haver vacâncias isoladas no estado absorvente. Este deve ser tal que todas as partículas estão separadas entre si por dois ou mais sítios vacantes, correspondendo ao intervalo $0 \leq \rho \leq 1/3$.

Fora dessa faixa de valores de ρ , não existem estados absorventes (a não ser para $\rho = 0.5$, o que será justificado mais adiante), de modo que o sistema deve evoluir até cair num estado estacionário ativo.

6.1 Caracterização do estado ativo

Vamos considerar um estado inicial aleatório, com densidade $\rho > 1/3$, para que caia no estado estacionário ativo, e não num estado absorvente. Nesta situação, as regras (6.1) e (6.2) permitem a ocorrência de difusão de vacâncias, enquanto (6.3) e (6.4) separam uma ou duas vacâncias de cadeias maiores de sítios vacantes. Para caracterizar este estado ativo, vamos analisar como variam as grandezas $P(101)$ e $P(1001)$, além da densidade de trincas 000.

Expandindo as transições (6.1) de modo a abranger sete sítios consecutivos, obtemos:

$$x11001x \rightarrow x10011x \qquad x10011x \rightarrow x11001x \qquad (6.7)$$

$$x110001 \rightarrow x100101 \qquad 100011x \rightarrow 101001x \qquad (6.8)$$

$$x110000 \rightarrow x100100 \qquad 000011x \rightarrow 001001x \qquad (6.9)$$

Vemos que as transições (6.7) não alteram $P(101)$, $P(1001)$ ou $P(000)$. Nas transições (6.8) e (6.9), $P(000)$ diminui, enquanto $P(101)$ (apenas em (6.8)) e $P(1001)$ aumentam.

As transições (6.2) não alteram nenhuma das grandezas citadas. As transições (6.3), quando expandidas de modo a abranger seis sítios consecutivos, tornam-se:

$$101001 \rightarrow 100101 \qquad 100101 \rightarrow 101001 \qquad (6.10)$$

$$101000 \rightarrow 100100 \qquad 000101 \rightarrow 001001 \qquad (6.11)$$

Destas, as transições (6.10) não envolvem variação de $P(101)$, $P(1001)$ ou $P(000)$. Nas transições (6.11), no entanto, $P(1001)$ aumenta, enquanto $P(101)$ e $P(000)$ diminuem.

Por último, expandindo as transições (6.4) de modo a abranger seis sítios consecutivos, obtemos:

$$110001 \rightarrow 101001 \qquad 100011 \rightarrow 100101 \qquad (6.12)$$

$$110000 \rightarrow 101000 \qquad 000011 \rightarrow 000101 \qquad (6.13)$$

Vemos que $P(101)$ aumenta e $P(000)$ diminui nas transições (6.12) e (6.13), enquanto $P(1001)$ aumenta em (6.12) e mantém-se constante em (6.13).

A partir da análise anterior, vemos que, em todas as transições nas quais ao menos uma das grandezas estudadas varia, $P(000)$ diminui, enquanto $P(101)$ pode aumentar, diminuir ou manter-se constante, e $P(1001)$ pode aumentar ou permanecer constante. Assim, enquanto o sistema não alcança o estado estacionário, $P(000)$ tende a diminuir, até alcançar um limite mínimo, que pode ser nulo, ou não.

Vamos supor que, no estado estacionário ativo, $P(000) = 0$. Assim, existem duas classes de sítios vacantes: vacâncias isoladas e pares de vacâncias. Vemos que, neste estado, a regra (6.4) não ocorre, e as regras (6.1), (6.2) e (6.3) podem ser reescritas:

$$11001 \rightarrow 10011 \qquad 10011 \rightarrow 11001 \qquad (6.14)$$

$$1101 \rightarrow 1011 \qquad 1011 \rightarrow 1101 \qquad (6.15)$$

$$101001 \rightarrow 100101 \qquad 100101 \rightarrow 101001 \qquad (6.16)$$

Notamos que as transições (6.14), (6.15) e (6.16) são pares de inversas. Atingimos assim a condição (2.4). A partir desta condição, obtemos o resultado $P(\eta) = \text{const.}$ (2.5), se o processo for ergódico, o que será mostrado na próxima seção.

Analisando as transições (6.14), (6.15) e (6.16), vemos também que nenhuma delas altera os valores de $P(101)$ e $P(1001)$. Logo, não é possível transitar entre configurações com valores distintos de $P(101)$ e $P(1001)$, e cada conjunto de configurações com os mesmos valores de ρ , $P(101)$ e $P(1001)$ deve corresponder a um subespaço ativo distinto. Cada subespaço é determinado pelos parâmetros $\sigma_1 = P(101)$ e $\sigma_2 = P(1001)$, além de ρ . No entanto, os três parâmetros não são independentes, uma vez que:

$$\rho + \sigma_1 + 2\sigma_2 = 1 \quad (6.17)$$

Assim, apenas dois parâmetros são exigidos para definir o estado ativo, os quais podem ser escolhidos como um dos pares: (ρ, σ_1) , (ρ, σ_2) ou (σ_1, σ_2) . Neste trabalho, estamos indexando o estado ativo por (ρ, σ_2) , de modo que:

$$\sigma_1 = 1 - \rho - 2\sigma_2 \quad (6.18)$$

A condição $1/3 < \rho < 1$ é necessária, mas não é suficiente para que exista o estado ativo definido pelo par (ρ, σ_2) , uma vez que, para valores arbitrários de σ_2 pode não ser possível construir uma cadeia com a densidade de partículas desejada e cuja densidade de trincas 000 seja nula. Uma configuração pertencente ao subespaço ativo (ρ, σ_2) pode ser decomposta genericamente em três subconjuntos, que contêm n_a seqüências 100, n_b seqüências 10 e n_c seqüências 1, como no exemplo:

$$1 \ 100 \ 100 \ 1 \ 10 \ 1 \ 1 \ 10 \ 10 \ 100 \ 1$$

onde $n_a = 3$, $n_b = 3$ e $n_c = 5$.

Os parâmetros ρ , σ_1 e σ_2 são dados em termos dos n_α , onde $\alpha = a, b, c$, através das equações:

$$L\rho = n_a + n_b + n_c \quad (6.19)$$

$$L\sigma_1 = n_b \quad (6.20)$$

$$L\sigma_2 = n_a \quad (6.21)$$

Invertendo este sistema e utilizando (6.18), obtemos os n_α :

$$n_a = L\sigma_2 \quad (6.22)$$

$$n_b = L(1 - \rho - 2\sigma_2) \quad (6.23)$$

$$n_c = L(2\rho + \sigma_2 - 1) \quad (6.24)$$

Impondo como condição suficiente para que haja o estado ativo que $n_\alpha \geq 0$, obtemos:

$$1 - 2\rho \leq \sigma_2 \leq \frac{1 - \rho}{2}, \quad 1/3 \leq \rho \leq 0.5 \quad (6.25)$$

$$0 \leq \sigma_2 \leq \frac{1 - \rho}{2}, \quad 0.5 \leq \rho \leq 1 \quad (6.26)$$

Esta condição para a existência do estado ativo corresponde à existência de uma região acessível no espaço de fase (ρ, σ_2) , mostrada na figura 6.1.

Voltando ao fato de que existe um estado absorvente em $\rho = 0.5$, tal que partículas e vacâncias alternam-se, vemos que este estado se encontra num dos vértices da região acessível no espaço de fase, de coordenadas $(0.5, 0)$. Os outros dois vértices, de coordenadas $(1, 0)$ e $(1/3, 1/3)$, também correspondem a estados absorventes, mas estes estados podem ser considerados como limites de estados estacionários ativos, alcançados quando $\rho \rightarrow 1$ e $\sigma_2 \rightarrow 1/3$ e o número de configurações existentes cai a 1. Assim, a configuração com partículas e vacâncias alternadas também pode ser considerada como o limite de um estado estacionário ativo quando $\sigma_1 \rightarrow 0.5$ e o número de configurações correspondentes também cai a 1.

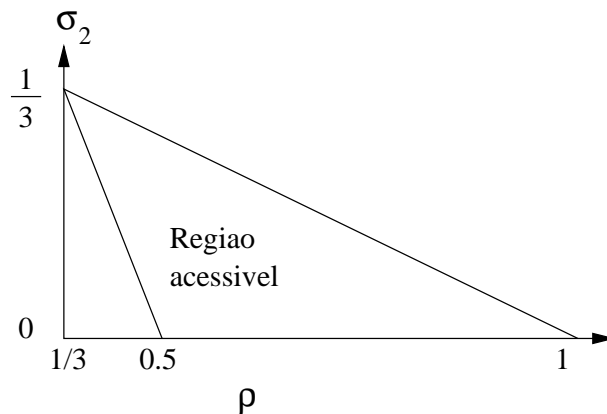


Figura 6.1: Porção do espaço de fase acessível ao sistema.

6.2 Ergodicidade

Nesta seção, vamos mostrar que toda configuração no estado ativo com os parâmetros ρ, σ_2 fixados é acessível a partir de uma dada configuração com os mesmos valores dos parâmetros.

Para isso, vamos fixar η^0 como a configuração formada por três seqüências: η_a^0 , formada por n_a cadeias 100; η_b^0 , formada por n_b cadeias 10; e η_c^0 , formada por n_c cadeias 1 (os n_α são dados pelas equações (6.22) a (6.24)):

$$\eta^0 = \underbrace{\overleftarrow{100100\dots100}}_{\eta_a^0} \underbrace{\overleftarrow{1010\dots10}}_{\eta_b^0} \underbrace{\overleftarrow{11\dots1}}_{\eta_c^0} \quad (6.27)$$

Até duas das cadeias η_i^0 podem estar vazias. Consideremos agora uma configuração η qualquer, com densidade igual a ρ , densidade de pares vacantes igual a σ_2 e densidade de trinca 000 nula.

Para levar η a η^0 , tomamos os seguintes passos:

1. Se $\sigma_2 = 1/3$, $\eta = \eta_a^0$; se $1 - \rho - 2\sigma_2 = 1/2$, $\eta = \eta_b^0$; se $\rho = 1$, $\eta = \eta_c^0$; nestes três casos, já alcançamos a configuração η^0 .
2. Se $\sigma_2 \neq 0$, localizamos uma trinca 100 e renomeamos a posição de todos os sítios de modo que esta trinca esteja em $i = 1$; a seguir vamos ao passo seguinte. Senão, escolhemos um par 10 e renomeamos a posição de todos os sítios de modo que este par esteja em $i = 1$; a seguir, vamos ao passo 8.
3. Procuramos a próxima trinca 100; se ela não existir, vamos ao passo 7; se ela existir e for vizinha da trinca anterior, repetimos este passo procurando a trinca 100 seguinte.
4. Tendo encontrado uma trinca 100 que não é vizinha da trinca anterior, então existem pares 10 e/ou sítios ocupados entre as duas trinca. Olhando para o sítio imediatamente anterior à próxima trinca 100, ele pode estar ocupado ou vazio: se estiver ocupado vamos para o passo seguinte; senão, vamos para o passo 6.
5. Havendo um sítio ocupado antes da próxima trinca 100, então é possível aplicar

a primeira regra (6.14) para deslocar o par vacante uma unidade à esquerda:

$$\begin{array}{c} \dots 1001 \dots 11001 \dots \\ \downarrow \\ \dots 1001 \dots 10011 \dots \end{array} \quad (6.28)$$

Se a trinca 100 tornar-se vizinha da trinca anterior, vamos ao passo 3; em caso contrário, voltamos ao passo 4.

6. Havendo um sítio vazio entre uma trinca e a próxima, este sítio faz parte de um par 10. Nessa situação é possível aplicar a primeira regra 6.16 para permutar as cadeias 10 e 100:

$$\begin{array}{c} \dots 1001 \dots 101001 \dots \\ \downarrow \\ \dots 1001 \dots 100101 \dots \end{array} \quad (6.29)$$

Se a trinca 100 tornar-se vizinha da trinca anterior, vamos ao passo 3; em caso contrário, voltamos ao passo 4.

7. Quando todas as trincas tiverem sido deslocadas até o começo da cadeia, formamos a cadeia η_a^0 . O restante da cadeia é composto de pares 10 e/ou de sítios ocupados. Tratando este pedaço como uma nova cadeia, vamos ao passo 8.
8. Procuramos o par 10 mais próximo do começo da cadeia: se ele for vizinho do par (ou trinca) anterior, procuramos o próximo; senão, existem sítios ocupados entre os dois pares (como não existem cadeias 100, após todo par 10 há um sítio ocupado). Podemos utilizar a primeira transição (6.15) para deslocar o sítio vazio uma unidade à esquerda, obtendo:

$$\begin{array}{c} \dots 10(0)1 \dots 1101 \dots \\ \downarrow \\ \dots 10(0)1 \dots 1011 \dots \end{array} \quad (6.30)$$

9. O passo 8 pode ser repetido, enquanto houver dois ou mais sítios ocupados entre os dois sítios vazios. Quando isso não for mais possível, então o par 10

será vizinho do par 10 anterior.

10. Repetem-se os passos 8 e 9 até que não haja mais pares 10 no restante da cadeia. Neste momento, dividimos η em η_b^0 e η_c^0 , obtendo η^0 .

Assim, provamos que o estado ativo deste modelo é ergódico dentro do espaço das configurações η tais que $\rho = \text{const.}$ e $\sigma_2 = \text{const.}$. Ou seja, utilizando as regras de transição propostas, podemos acessar qualquer configuração a partir de uma configuração inicial dada. Como todas as transições possuem a mesma taxa, pode-se provar que este estado ativo constitui um ensemble microcanônico com $\rho = \text{const.}$ e $\sigma_2 = \text{const.}$. Na próxima seção, nos aproveitaremos deste fato para calcular as grandezas físicas pelo método de matrizes de transferência.

6.3 Cálculo da matriz de transferência.

Para este modelo, vamos definir uma matriz de transferência em função das atividades z e w , do seguinte modo:

$$T = z^{\eta_i} w^{\bar{\eta}_i \bar{\eta}_{i+1}} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \eta_{i+2}) , \quad (6.31)$$

onde

$$\gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \eta_{i+2}) = \begin{cases} 0, & \eta_i = \eta_{i+1} = \eta_{i+2} = 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (6.32)$$

de modo que a sequência 000 é proibida.

Passando à forma matricial, obtemos:

$$T = \begin{pmatrix} 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (6.33)$$

A partir do polinômio característico desta matriz, escrevemos $w(z, \lambda)$ e $z(w, \lambda)$:

$$w = \frac{\lambda(\lambda^2 - z\lambda - z)}{z} \quad (6.34)$$

$$z = \frac{\lambda^3}{\lambda^2 + \lambda + w} \quad (6.35)$$

$$T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z & vz & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 \end{pmatrix} \quad (6.43)$$

$$T_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & w & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & xz & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (6.44)$$

Igualando o polinômio característico de T_1 a zero, obtemos:

$$u = \frac{\lambda^4 - z\lambda^3 - z\lambda^2 - wz\lambda + wz^2}{wz^2} \quad (6.45)$$

Em termos de λ , z e w , obtemos:

$$P(1100) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln u \right)^{-1} = \frac{\lambda^4 - z\lambda^3 - z\lambda^2 - wz\lambda + wz^2}{\lambda(4\lambda^3 - 3z\lambda^2 - 2z\lambda - wz)} \quad (6.46)$$

Usando (6.39), (6.40) e (6.41), obtemos:

$$P(1100) = \frac{\sigma_2(2\rho + \sigma_2 - 1)}{\rho} \quad (6.47)$$

Igualando o polinômio característico de T_2 a zero, obtemos:

$$v = \frac{\lambda^3 - z\lambda^2 - z\lambda - wz + z^2}{z^2} \quad (6.48)$$

Em termos de λ , z e w , obtemos:

$$P(1101) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln v \right)^{-1} = \frac{\lambda^3 - z\lambda^2 - z\lambda - wz + z^2}{\lambda(3\lambda^2 - 2z\lambda - z)} \quad (6.49)$$

Usando (6.39), (6.40) e (6.41), obtemos:

$$P(1101) = \frac{(1 - \rho - 2\sigma_2)(2\rho + \sigma_2 - 1)}{\rho} \quad (6.50)$$

Igualando o polinômio característico de T_3 a zero, obtemos:

$$x = \frac{\lambda^5 - z\lambda^4 - z\lambda^3 - wz\lambda^2 + wz^2}{wz^2} \quad (6.51)$$

Em termos de λ , z e w , obtemos:

$$P(10100) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln x \right)^{-1} = \frac{\lambda^5 - z\lambda^4 - z\lambda^3 - wz\lambda^2 + wz^2}{\lambda(5\lambda^4 - 4z\lambda^3 - 3z\lambda^2 - 2wz\lambda)} \quad (6.52)$$

Usando (6.39), (6.40) e (6.41), obtemos:

$$P(10100) = \frac{\sigma_2(1 - \rho - 2\sigma_2)}{\rho} \quad (6.53)$$

As expressões (6.47), (6.50) e (6.53) podem ser comparadas a dados de simulações computacionais do modelo, o que será feito na próxima seção.

6.4 Resultados numéricos

Simulamos o modelo (1, 2)c numa rede unidimensional de 4000 sítios, partindo de uma configuração do estado estacionário (onde sítios vacantes estão dispostos

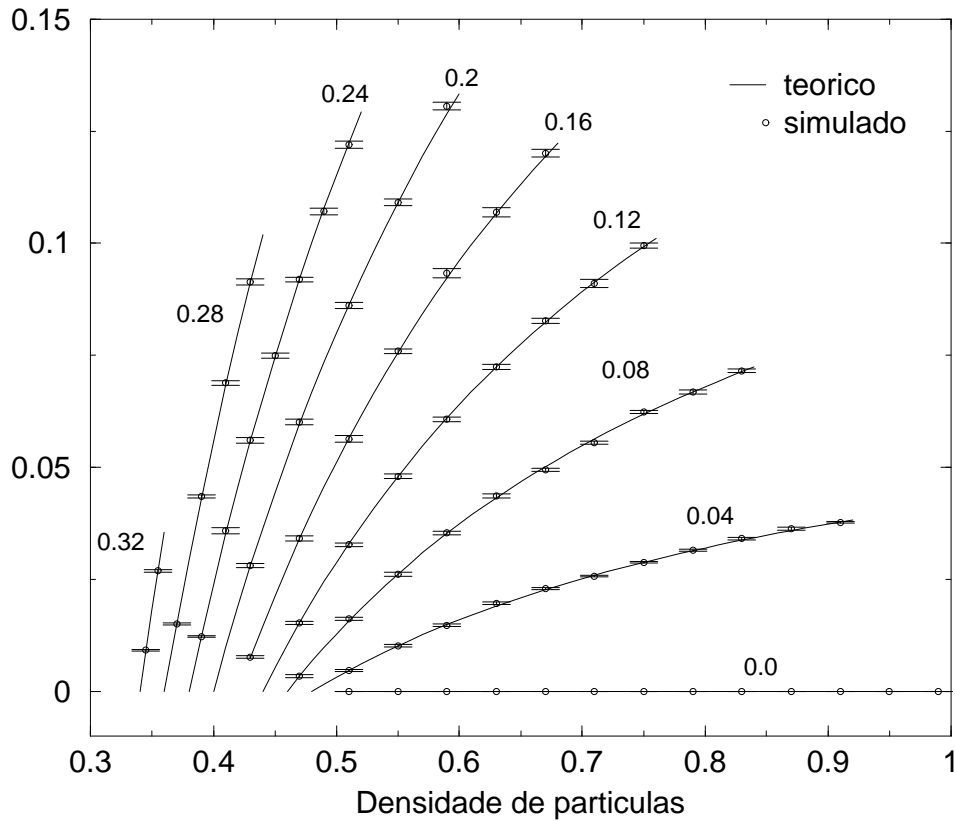


Figura 6.2: Densidade de partículas ativas para o processo de difusão de pares de vacâncias em função de ρ e para vários valores de σ_2 , especificados no gráfico.

isoladamente ou aos pares) escolhida aleatoriamente, tomando como parâmetros a densidade de partículas ρ e a densidade de pares vacantes σ_2 . Ao final de um intervalo de tempo inicial de $2 \cdot 10^4$ passos, para retirar qualquer influência da escolha da configuração inicial, mediram-se as grandezas desejadas a intervalos de 10^4 passos. Para $\rho < 0.4$, foi necessário rodar a simulação por um número maior de passos ($0.5 \cdot 10^5$, ou $1 \cdot 10^5$ passos para $\sigma_2 = 0.32$, antes de iniciar a tomada de dados, e $2 \cdot 10^4$ passos entre cada medida), para garantir que cada medição fosse independente das demais. Após tomar 10 dados para cada grandeza, calculamos e imprimimos a média e o desvio-padrão da média, para cada ponto no gráfico.

As curvas de nível, em cada gráfico, correspondem aos resultados (6.47), (6.50) e (6.53), para valores fixos de σ_2 (mostrados ao lado de cada curva), variando-se ρ . Para um determinado valor de σ_2 , ρ pode variar dentro do intervalo:

$$\frac{1 - \sigma_2}{2} \leq \rho \leq 1 - 2\sigma_2 \quad (6.54)$$

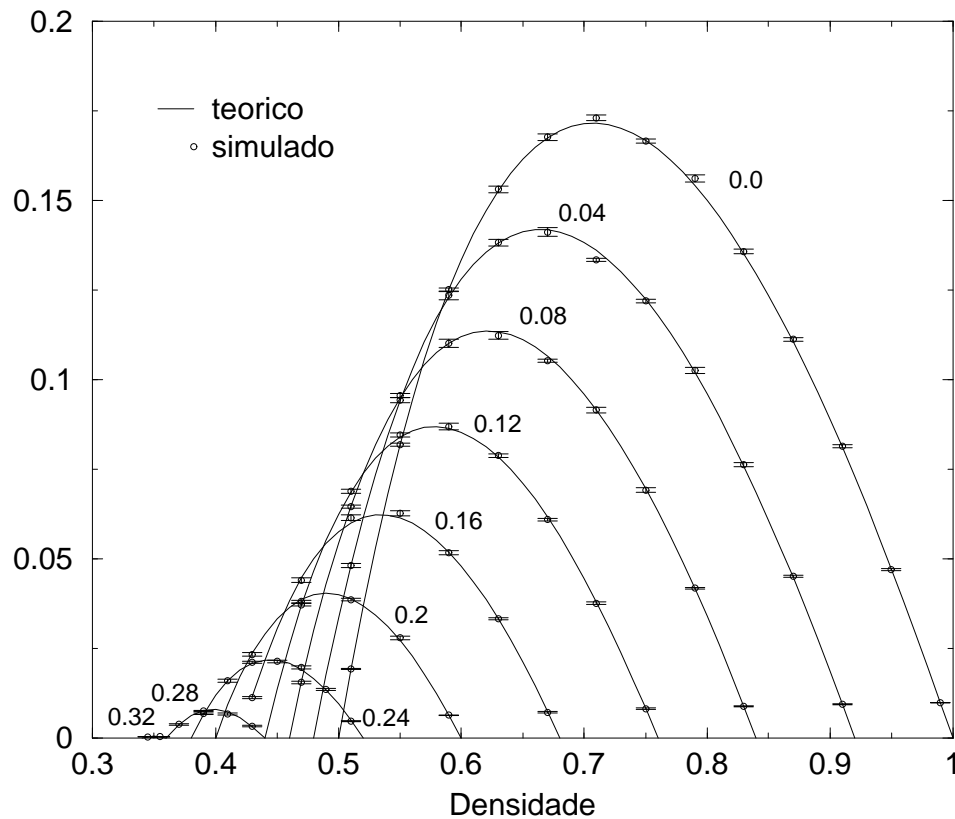


Figura 6.3: Densidade de partículas ativas para o processo de difusão de vacâncias isoladas em função de ρ e para vários valores de σ_2 , especificados no gráfico.

Por sua vez, $0 \leq \sigma_2 \leq 1/3$. Estas duas condições equivalem às condições (6.25).

O gráfico 6.2 mostra $P(1100)$ em função da densidade de partículas, para valores escolhidos da densidade de pares de vacâncias, contidos no intervalo (6.54). O gráfico 6.3 mostra $P(1101)$, e o gráfico 6.4 mostra $P(10100)$, para os mesmos intervalos de ρ e σ_2 .

Podemos notar a concordância excelente entre os pontos obtidos via simulação e as curvas analíticas dadas por (6.47), (6.50) e (6.53). Este resultado confirma que todas as configurações possíveis ao modelo são igualmente acessíveis com as regras propostas.

É bom lembrar que, diferentemente dos outros modelos, quando partíamos de uma configuração exterior ao estado estacionário e observávamos a queda no sistema no estado estacionário ativo, neste modelo, partimos de uma condição inicial já pertencente ao estado estacionário. Isto se fez necessário para que pudéssemos apresentar os resultados da forma que fizemos, ou seja, como uma série de curvas

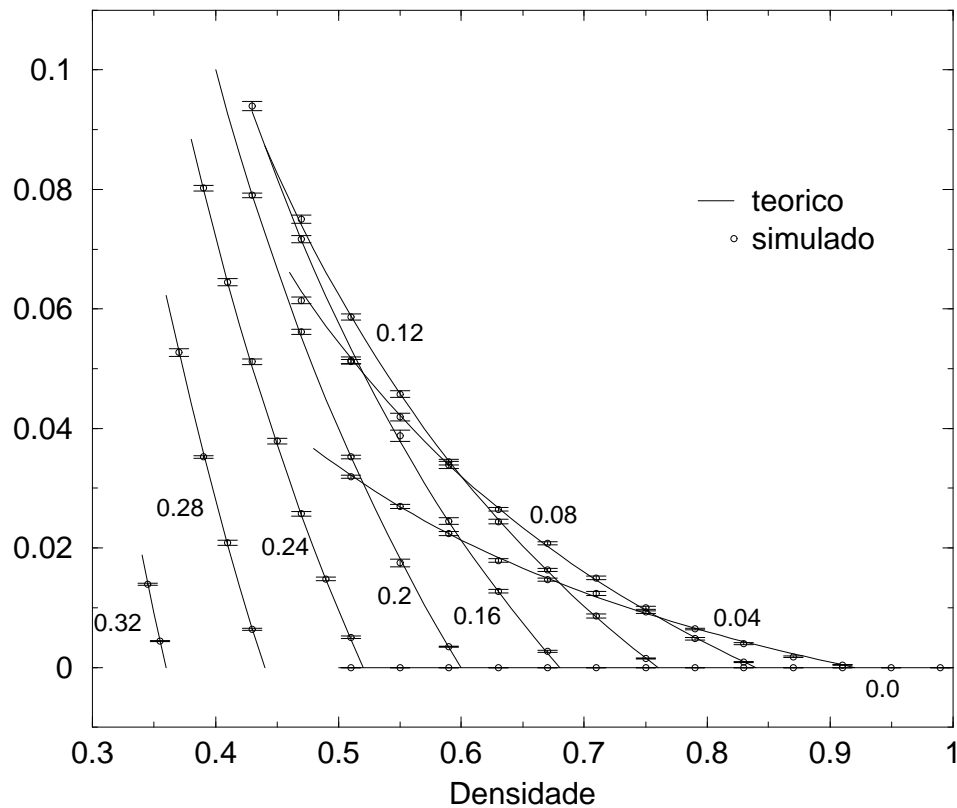


Figura 6.4: Densidade de partículas ativas para o processo de troca de posições entre vacâncias duplas e isoladas em função de ρ e para vários valores de σ_2 , especificados no gráfico.

de nível, cada qual com um valor específico de σ_2 .

Caso partíssemos de uma condição inicial aleatória, não conheceríamos de antemão o valor de σ_2 quando o sistema atingisse o estado estacionário (uma vez que, enquanto o sistema não estivesse no estado estacionário, σ_2 variaria devido às transições (6.3) e (6.4)) e deveríamos apresentar os resultados como superfícies no espaço tridimensional formado por ρ , σ_2 e pela grandeza medida. Neste caso, a verificação da concordância entre os cálculos e os resultados numéricos só poderia ser feita utilizando-se ferramentas estatísticas, como o cálculo de χ^2 , enquanto nos modelos anteriores era possível fazer a verificação simplesmente analisando os gráficos obtidos.