

Capítulo 7

Modelo de aglomerados vacantes (1, 2)

O modelo a ser estudado nesta seção é definido pelo conjunto de transições:

$$1100 \rightarrow 1001 \qquad 0011 \rightarrow 1001 \qquad (7.1)$$

$$110 \rightarrow 101 \qquad 101 \rightarrow 110 \qquad (7.2)$$

$$10101 \rightarrow 10011 \qquad 10101 \rightarrow 11001 \qquad (7.3)$$

Este modelo, tal qual os anteriores, cai num estado estacionário ativo para densidades suficientemente altas e cai num estado absorvente (dentre muitos) para densidades suficientemente baixas. Diferentemente dos anteriores, coexistem, para uma faixa de valores de ρ a ser determinada adiante, estados absorventes e o estado ativo.

Um estado absorvente para este processo deve obedecer às condições:

$$P(110) = P(011) = 0 \qquad (7.4)$$

$$P(10101) = 0 \qquad (7.5)$$

Ignorando os valores extremos do parâmetro ρ , a condição (7.4), que é idêntica à condição (6.5) para o modelo (1, 2)c, exige que todas as partículas estejam isoladas para que o estado possa ser absorvente, forçando a densidade a situar-se no intervalo $0 < \rho \leq 0.5$. De acordo com essa condição, podemos escrever:

$$\rho = P(1) = P(010) = P(10101) + P(10100) + P(00101) + P(00100) \qquad (7.6)$$

Impondo a condição (7.5), a equação acima torna-se:

$$P(1) = P(10100) + P(00101) + P(00100) \quad (7.7)$$

Interpretando a equação (7.7), vemos que, para que um estado seja absorvente, cada partícula deve estar cercada, ao menos de um lado, por dois ou mais sítios vacantes. A configuração de maior densidade que obedece a esta regra é aquela formada por repetições da seqüência 10100, que correspondem a $\rho = 0.4$. Nesta seqüência, toda partícula está cercada, de um lado, por uma vacância isolada, e, pelo outro, por um par de vacâncias.

Assim, existem estados absorventes no intervalo $0 \leq \rho \leq 0.4$.

7.1 Caracterização do estado ativo

Nesta seção, vamos estudar o estado estacionário ativo para o modelo (1, 2). Primeiramente, vamos trabalhar no intervalo $0.4 \leq \rho \leq 1$, no qual não existem estados absorventes. Vamos acompanhar a evolução da densidade de trincas 000, além das densidades de sítios vacantes isolados e de pares vacantes.

As transições (7.1) são iguais às transições (6.1), estudadas no capítulo 6. De acordo com a análise feita nesse capítulo, $P(000)$ tende a diminuir como resultado dessa transição, enquanto $P(101)$ e $P(1001)$ tendem a aumentar.

Expandindo as transições (7.2) de modo a abranger sete sítios consecutivos, obtemos:

$$x1101xx \rightarrow x1011xx \quad \quad \quad xx1011x \rightarrow xx1101x \quad (7.8)$$

$$x11001x \rightarrow x10101x \quad \quad \quad x10011x \rightarrow x10101x \quad (7.9)$$

$$x110001 \rightarrow x101001 \quad \quad \quad 100011x \rightarrow 100101x \quad (7.10)$$

$$x110000 \rightarrow x101000 \quad \quad \quad 000011x \rightarrow 000101x \quad (7.11)$$

Vemos que as transições (7.9) a (7.11) contribuem para aumentar $P(101)$ e diminuir $P(000)$, enquanto $P(1001)$ pode aumentar, diminuir ou permanecer constante. As transições (7.8), por sua vez, envolvem apenas $P(101)$, que permanece constante.

A regra (7.3), por sua vez, contribui para aumentar $P(1001)$ diminuindo $P(101)$, sem alterar o valor de $P(000)$.

Vemos que existem transições que contribuem para diminuir $P(000)$, enquanto

$P(101)$ e $P(1001)$ aumentam ou diminuem, mas não existem transições que contribuam para aumentar $P(000)$. Assim, um sistema que se encontra inicialmente em um estado qualquer tende a evoluir por meio destas transições de forma que $P(000)$ diminua até um limite, que pode ou não ser nulo. No intervalo de valores de ρ considerado, existem configurações que satisfazem a condição $P(000) = 0$. Assim, é possível supor que $P(000)$ se anula no estado estacionário ativo.

Vamos fazer a suposição de que, no estado ativo, $P(000)$ se anule: as únicas classes de sítios vacantes existentes são sítios isolados e pares de sítios, como no modelo (1, 2)c, estudado no capítulo anterior. Entretanto, no modelo (1, 2)c, as densidades de cada classe de vacância mantinham-se constantes, o que não acontece neste modelo. De fato, impondo $P(000) = 0$, as regras (7.1), (7.2) e (7.3) convertem-se nas transições a seguir:

$$11001 \rightarrow 10011 \qquad 10011 \rightarrow 11001 \qquad (7.12)$$

$$1101 \rightarrow 1011 \qquad 1011 \rightarrow 1101 \qquad (7.13)$$

$$11001 \rightarrow 10101 \qquad 10011 \rightarrow 10101 \qquad (7.14)$$

$$10101 \rightarrow 10011 \qquad 10101 \rightarrow 11001 \qquad (7.15)$$

Enquanto as transições (7.12) e (7.13), que são iguais às transições (6.14) e (6.15), são responsáveis pelo processo de difusão de vacâncias duplas e simples pela rede, as transições (7.14) e (7.15) convertem uma vacância dupla em duas simples, ou duas vacâncias simples em uma dupla, alterando os valores de $P(101)$ e $P(1001)$. Logo, o estado ativo deste modelo fica determinado por um único parâmetro, a densidade ρ , enquanto as densidades de vacâncias simples e duplas flutuam em torno de valores médios, os quais podem ser calculados em termos de ρ .

Notamos que cada uma das transições acima possui uma inversa: de fato, as transições dos pares (7.12) e (7.13) são inversas entre si, enquanto a primeira transição de (7.14) é inversa da segunda de (7.15), e a segunda de (7.14) é inversa da primeira de (7.15). Como cada transição possível no estado ativo possui uma reversa e cada par de reversas ocorre com a mesma taxa, atingimos a condição (2.4), a qual pode ser simplificada, obtendo-se o resultado $P(\eta) = \text{const.}$ (2.5) desde que o processo seja ergódico, como mostraremos na próxima seção.

7.2 Ergodicidade

Vamos agora mostrar que o conjunto de configurações η tais que todas as vacâncias são simples ou duplas é ergódico para este processo. Para isso, vamos provar que podemos alcançar uma certa configuração η^0 a partir de qualquer configuração com apenas as duas classes de sítios acima mencionadas. Definimos η^0 como uma cadeia, de comprimento L e densidade ρ , tal que $0.4 < \rho < 1$, formada por três sub-cadeias se o número total de sítios vacantes for ímpar, ou apenas duas se o número total for par: a primeira, chamada η_a^0 , é formada pelo maior número possível de repetições da seqüência 100 (que é igual a $(1 - \rho)L/2$, se o número de sítios vacantes for par, ou a $[(1 - \rho)L - 1]/2$, em caso contrário); uma seqüência intermediária η_m^0 , que existe apenas na primeira situação, igual a 10; e a seqüência final, chamada η_b^0 , que é formada unicamente por sítios ocupados:

$$\eta^0 = \begin{cases} \left\langle \begin{array}{c} \overleftarrow{100100 \dots 100} \overleftarrow{10} \overleftarrow{11 \dots 1} \\ \eta_a^0 \quad \eta_m^0 \quad \eta_b^0 \end{array} \right\rangle, & (1 - \rho)L \text{ ímpar} \\ \left\langle \begin{array}{c} \overleftarrow{100100 \dots 100} \overleftarrow{11 \dots 1} \\ \eta_a^0 \quad \eta_b^0 \end{array} \right\rangle, & (1 - \rho)L \text{ par} \end{cases} \quad (7.16)$$

Agora, consideramos uma configuração η com densidade $\rho \geq 0.4$. Para levar a configuração η a η^0 , efetuamos o procedimento a seguir:

1. Procuramos o primeiro sítio vacante na cadeia, o qual pode corresponder a uma vacância isolada ou dupla, de posição i_1 , e renomeamos todos os sítios da cadeia de modo que $i_1 = 2$. Assim, obtemos um par 10 ou uma tripla 100 no começo da cadeia.
2. Procuramos a próxima seqüência 101 ou 1001. Se não existir outra seqüência, vamos ao passo 5. Encontrando-a, verificamos se ela está ligada ao começo da cadeia. Se não estiver, então existem ao menos dois sítios ocupados antes da(s) vacância(s), permitindo que apliquemos a primeira transição (7.12) (v. dupla) ou (7.13) (v. isolada) para deslocá-la um sítio à esquerda:

$$\begin{array}{ccc} \dots 10(0) \dots 1 \ 10(0) \ 1 \dots & & \\ \downarrow & & (7.17) \\ \dots 10(0) \dots 10(0) \ 1 \ 1 \dots & & \end{array}$$

Repete-se esta transição até que a seqüência 10(0) deslocada seja vizinha do início da cadeia, e vamos ao passo seguinte.

3. Se, ao final do passo 2, obtivermos a seqüência 10101, aplicamos a primeira transição (7.15) para obter uma vacância dupla e um par de sítios ocupados:

$$\dots 10101 \dots \rightarrow \dots 10011 \dots \tag{7.18}$$

Vamos ao passo seguinte.

4. Incorporamos a seqüência 10 ou 100 ao início da cadeia. A seguir, voltamos ao passo 2.
5. Quando não houver mais seqüências 101 ou 1001 no restante da cadeia, obtemos duas sub-cadeias: η_e^0 e η_d^0 . η_e^0 é formada por repetições das seqüências 100 e 10, sendo igual a η_a^0 justaposta a η_m^0 se existir apenas uma seqüência 10, localizada no fim de η_e^0 . Vale lembrar que, devido ao passo 3, após uma seqüência 10 vem sempre uma seqüência 100. η_d^0 é formada por ao menos um sítio ocupado, uma vez que $P(10101) = 0$ e, como o estado não é absorvente, já que $\rho \geq 0.4$, devemos ter $P(110) > 0$. Neste estágio, se não houver nenhuma seqüência 10 na cadeia, ou se houver apenas uma, localizada entre uma seqüência 100 e a sub-cadeia de sítios ocupados, vamos ao passo 12. Se houver uma seqüência 10 localizada entre duas seqüências 100, vamos ao passo 11. Senão, há mais de uma seqüência 10, e, para chegar a η^0 , precisamos eliminar todas as seqüências 10 (se o número de vacâncias for par), ou eliminar todas exceto uma, que deve formar η_m^0 . Para isso, vamos parear todas as seqüências 10, a partir da extremidade direita, como no exemplo a seguir, onde há um número ímpar de vacâncias:

$$100 \ \underline{10} \ 100100 \ \underline{10} \ 100 \ \underline{10} \ 100 \ \underline{10} \ 100 \ \underline{10} \ 100 \ 11 \ \dots \tag{7.19}$$

$$\qquad \qquad \qquad 1 \qquad \qquad 1 \qquad \qquad 2 \qquad \qquad 2$$

6. Deslocamos uma partícula para a esquerda utilizando a segunda transição (7.12) até que ela esteja localizada após a segunda vacância isolada do último

par (par 2 no exemplo anterior):

$$\begin{array}{c} \dots \underline{10} \ 100 \ \underline{10} \ 100 \ 11 \ \dots \\ \downarrow \\ \dots \underline{10}(100 \ \underline{10} \ 11)00 \ 1 \ \dots \end{array} \quad (7.20)$$

7. Deslocamos a segunda vacância isolada do último par (entre parênteses na última equação (7.20) do exemplo anterior) para mais perto da primeira vacância, aplicando na seqüência as segundas transições (7.13), (7.14) e (7.15), cujo efeito é o seguinte:

$$\dots 1001011 \ \dots \rightarrow \dots 1001101 \ \dots \rightarrow \dots 1010101 \ \dots \rightarrow \dots 1011001 \ \dots \quad (7.21)$$

Repetimos este item até que as duas vacâncias isoladas do último par formem a seqüência 10101. Então, vamos ao próximo item.

8. Quando encontramos a seqüência 10101, aplicamos a segunda transição (7.15) para transformá-la numa vacância dupla:

$$\dots 10101 \ \dots \rightarrow \dots 11001 \ \dots \quad (7.22)$$

9. Como resultado do item anterior, existem dois pares de partículas vizinhas dentro da cadeia η_e^0 . Deslocamos o segundo par para a direita utilizando as primeiras transições (7.12) e (7.13) até que volte a η_d^0 , e deslocamos o primeiro par para a esquerda até que esteja localizado após a vacância anterior, como no passo 6. A seguir, repetimos o procedimento do passo 7.
10. Aplicamos o passo 9 até que todas as vacâncias pareadas tenham sido eliminadas da cadeia η_d^0 . Quando isso acontecer, verificamos se ainda há alguma vacância isolada na cadeia. Se houver, deslocamos o primeiro par ocupado (resultante da última aplicação do passo 9) para a esquerda (2ª transição (7.12)), até que esteja imediatamente após a vacância isolada. Aplicamos a seqüência de transições: 1ª (7.14), 1ª (7.15) e 1ª (7.13), deslocando a vacância isolada à direita:

$$\dots 1011001 \ \dots \rightarrow \dots 1010101 \ \dots \rightarrow \dots 1001101 \ \dots \rightarrow \dots 1001011 \ \dots \quad (7.23)$$

Repetimos esta seqüência de transições até que a vacância isolada esteja entre uma vacância dupla e a sub-cadeia de sítios ocupados. Vamos ao passo 11.

11. Havendo uma única vacância isolada entre uma sub-cadeia de vacâncias duplas e uma sub-cadeia de sítios ocupados, nomeamos a primeira sub-cadeia (até o penúltimo sítio vacante) como η_a^0 , a seqüência seguinte (10), como η_m^0 e o restante como η_b^0 . Assim, transformamos η em η^0 .
12. Havendo uma sub-cadeia formada por seqüências 100 e outra formada só por sítios ocupados, nomeamos a primeira como η_a^0 e a segunda como η_b^0 . Assim, transformamos η em η^0 .

Provamos assim que o estado ativo deste modelo é ergódico. Como todas as transições utilizadas na demonstração acima são reversíveis, é possível alcançar qualquer estado, partindo de qualquer outro estado com o mesmo comprimento de rede e mesma densidade. Como todas as transições possuem a mesma taxa, este estado ativo constitui um ensemble microcanônico com $\rho = const..$

7.3 O intervalo $1/3 \leq \rho \leq 0.4$

Vimos na seção 7.1 que, no intervalo $0.4 \leq \rho \leq 1$, existe um estado estacionário ativo, formado pelo conjunto de configurações tais que $P(000) = 0$, enquanto no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 0.4$ existem estados absorventes. Sabemos que, para $\rho \geq 1/3$, é possível construir estados cujas vacâncias são simples ou duplas e, entre estes estados, estão aqueles tais que $P(10101)$, ou seja, a probabilidade de haver duas vacâncias isoladas separadas entre si por uma única partícula, é não-nula. Analisando o conjunto de transições (7.12) a (7.15), vemos que o número de partículas ativas não pode chegar a zero, uma vez que, para este conjunto de estados, se uma transição é possível, sua reversa também é. Assim, há estados não-transientes com partículas ativas para os mesmos valores de densidade para os quais há estados absorventes, existindo uma diferença qualitativa entre este modelo e os modelos anteriores, nos quais estados absorventes e estados ativos não coexistiam para os mesmos valores dos parâmetros.

De fato, é possível mostrar que, no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 0.4$, os estados absorventes são instáveis relativamente a pequenas perturbações. Seja a seqüência a seguir:

$$10\underline{1}0010100 , \tag{7.24}$$

a qual corresponde a um estado absorvente com $\rho = 0.4$ se repetida ao longo de toda a cadeia. Movendo a partícula sublinhada um sítio à direita, o estado deixa de ser absorvente. Como $P(000) = 0$, o sistema ingressou no estado ativo e, conforme ele evolui, ele permanece nesse estado, não voltando à configuração de partida. O mesmo ocorre para valores menores da densidade, bastando começar com um estado onde a seqüência (7.24) é cercada de repetições da seqüência 100, de modo que a densidade pode chegar tão perto de $1/3$ quanto maior for o tamanho da rede.

Uma vez que existe um estado estacionário ativo, é lícito perguntar qual o valor assumido pelas grandezas físicas do sistema neste estado, como fizemos para os modelos anteriores. Entretanto, este estado não é descrito por uma condição simples de ser tratada analiticamente, uma vez que, além da condição $P(000) = 0$, precisamos impor a condição $\rho_a \neq 0$ (onde ρ_a é o número de partículas ativas para ao menos uma transição do processo), de modo que seu tratamento exato é muito difícil. Na seção a seguir, em vez de tratar este estado exatamente, vamos ignorar a segunda restrição e efetuar os cálculos das grandezas físicas a partir de uma matriz de transferência na qual impomos apenas a primeira restrição, que é válida nos dois intervalos. Isso implica que, no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 0.4$, o conjunto de configurações utilizado para definir a matriz inclui configurações que não estão presentes no estado ativo, e os valores calculados para as grandezas físicas são apenas aproximações para os valores verdadeiros.

7.4 Cálculo da matriz de transferência

O estado ativo descrito na seção 7.1 possui sítios vacantes isolados e pares de sítios vacantes, mas não são permitidas trincas vacantes (ou conjuntos maiores). Assim, definimos o seguinte fator γ :

$$\gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \eta_{i+2}) = \begin{cases} 0, & \eta_i = \eta_{i+1} = \eta_{i+2} = 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (7.25)$$

com o qual proibimos a seqüência 000.

Dada esta definição de γ , podemos construir uma matriz de transferência com dimensão mínima igual a 4. Entretanto, temos interesse em calcular grandezas dependentes de 4 ou 5 sítios consecutivos, como as densidades de partículas ativas para as diferentes transições. O cálculo de tais grandezas exige o uso de matrizes de di-

Primeiramente, vamos obter a atividade z :

$$z = \frac{\lambda^3}{\lambda^2 + \lambda + 1} \quad (7.29)$$

Usamos (3.15) para obter ρ em função de λ :

$$\rho = \frac{\lambda^2 + \lambda + 1}{\lambda^2 + 2\lambda + 3} \quad (7.30)$$

E invertemos (7.30) para obter λ em função de ρ :

$$\lambda = \frac{2\rho - 1 + \sqrt{-8\rho^2 + 12\rho - 3}}{2(1 - \rho)} \quad (7.31)$$

Podemos notar que a expressão analítica para $\lambda(\rho)$ para esse modelo não é tão simples como as expressões (4.23) e (5.14), obtidas a partir dos modelos anteriores. De fato, as demais grandezas macroscópicas calculadas a seguir são expressões analíticas muito complicadas em termos da variável ρ . Assim, nos limitaremos a apresentar os resultados a seguir em função de λ .

Analisando a expressão (7.30), notamos que, quando λ varia no intervalo $0 \leq \lambda < \infty$, a densidade varia correspondentemente no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 1$. Entretanto, como visto na seção 7.3, a descrição do estado ativo é correta apenas para $\rho \geq 0.4$, enquanto para $1/3 \leq \rho \leq 0.4$ algumas configurações contabilizadas pelo método de matriz de transferência não fazem parte do estado ativo, e as expressões obtidas a seguir são apenas aproximações, cuja qualidade discutiremos mais adiante.

Dentre as grandezas que são interessantes de se calcular, encontramos as densidades de sítios vacantes isolados e de pares, respectivamente $P(101)$ e $P(1001)$. Para calcular $P(101)$, introduzimos a variável x e modificamos $T_1(z)$ para obter $T'_1(x, z)$:

$$T'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & xz & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (7.32)$$

Nesta matriz, x é dada por:

$$x = \frac{\lambda^3 - z\lambda^2 - z}{z\lambda} \quad (7.33)$$

Em termos de λ , a densidade de sítios vacantes isolados é dada por:

$$P(101) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln x \right)^{-1} = \frac{\lambda}{\lambda^2 + 2\lambda + 3} \quad (7.34)$$

Para calcular $P(1001)$, nos lembramos de que não há sítios vacantes de classes superiores neste modelo. Assim, $P(1001) = P(00)$. Para calcular $P(00)$, introduzimos uma variável w e modificamos $T_1(z)$ para obter $T_1''(w, z)$:

$$T_1'' = \begin{pmatrix} 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

Com o mesmo procedimento acima:

$$w = \frac{\lambda^3 - z\lambda^2 - z\lambda}{z} \quad (7.36)$$

$$P(1001) = \frac{1}{\lambda^2 + 2\lambda + 3} \quad (7.37)$$

Analisando os resultados (7.34) e (7.37), vemos que o número de pares é igual ao número de sítios isolados quando $\lambda = 1$. Usando (7.30), vemos que isso ocorre para $\rho = 1/2$. Para densidades menores, a classe predominante é a de pares, enquanto para densidades maiores, dominam os sítios isolados.

Outras grandezas medidas numericamente neste trabalho são as densidades de partículas ativas para cada tipo de transição. As transições elementares (7.12) a (7.15) podem ser classificadas de acordo com o comportamento observado nos sítios vacantes como: difusão de pares (transições (7.12)), difusão de sítios isolados ((7.13)), fusão de sítios isolados ((7.15)) e isolamento de pares ((7.14)). Assim, em princípio, há quatro densidades de partículas ativas a se calcular, dadas por $P(11001)$, $P(1101)$, $P(10101)$ e $P(11001)$. Como vemos, as densidades de partículas ativas para difusão e para isolamento de pares são idênticas. Além disso, como veremos adiante, elas são iguais à densidade de partículas ativas para a fusão de sítios isolados.

Para calcular $P(11001)$, não é necessário, em princípio, calcular o determinante de uma matriz de dimensão 16. Como não há trincas de sítios vacantes, $P(11001) = P(1100)$, o que nos permite usar uma matriz de dimensão 8 para fazer os cálculos.

Modificamos a matriz T_2 , introduzindo uma variável auxiliar y que multiplica a entrada dessa matriz referente ao elemento $T(110, 100)$, obtendo $T'_2(y, z)$:

$$T'_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & yz & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (7.38)$$

Na matriz acima, y é dado por:

$$y = \frac{\lambda^4 - z\lambda(\lambda^2 + \lambda + 1) + z^2}{z^2} \quad (7.39)$$

E $P(1100)$ é dada por:

$$P(1100) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln y \right)^{-1} = \frac{\lambda^2}{(\lambda^2 + \lambda + 1)(\lambda^2 + 2\lambda + 3)} \quad (7.40)$$

Para calcular a densidade de partículas ativas $P(1101)$, utilizamos a seguinte matriz de transferência:

$$T''_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z & uz & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (7.41)$$

A variável u é dada por:

$$u = \frac{\lambda^3 - z(\lambda^2 + \lambda + 1) + z^2}{z^2} \quad (7.42)$$

E $P(1101)$ é dada por:

$$P(1101) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln u \right)^{-1} = \frac{\lambda^3}{(\lambda^2 + \lambda + 1)(\lambda^2 + 2\lambda + 3)} \quad (7.43)$$

Para calcular $P(10101)$, a densidade de partículas ativas para o processo de fusão de sítios isolados, precisamos operar com uma matriz de transferência de dimensão 16, dada por:

$$T'_3(t, z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z & tz & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (7.44)$$

Em termos de z e λ , t é dada por:

$$t = \frac{\lambda^5 - z(1 + \lambda^2)(z + \lambda^2)}{z(\lambda^3 - z(1 + \lambda^2))} \quad (7.45)$$

E $P(10101)$ é igual a:

$$P(10101) = \left(\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln t \right)^{-1} = \frac{\lambda^2}{(\lambda^2 + \lambda + 1)(\lambda^2 + 2\lambda + 3)} \quad (7.46)$$

Podemos notar que, no estado ativo, $P(10101) = P(1100)$.

7.5 Resultados numéricos

Realizamos uma simulação do modelo (1,2), a partir de condições iniciais aleatórias, numa rede de 4000 sítios com densidade variando entre 0.34 e 1.0, e evoluímos o sistema durante 25000 passos de Monte Carlo para pontos com densidades entre 0.4 e 1.0. Para os pontos de menor densidade, entretanto, foi necessário simular o sistema por um número maior de passos, específico para cada ponto. Para o primeiro ponto ($\rho = 0.34$), foi necessário obter $2 \cdot 10^7$ pontos para alcançar o estado estacionário. Relembrando, de acordo com nossos argumentos, o estado estacionário ativo deve ser tal que não ocorram trincas 000. Assim, medindo $P(000)$ podemos ver facilmente quando o sistema alcança o estado ativo.

Os gráficos 7.1 e 7.2 mostram os resultados numéricos para as densidades de vacâncias isoladas $P(101)$ e de pares de vacâncias $P(00)$, comparados às curvas analíticas. Os gráficos 7.3 e 7.4 mostram os resultados numéricos para as densidades de partículas ativas para os processo de difusão de sítios isolados ($P(1101)$), fusão de sítios isolados ($P(10101)$), difusão de pares e isolamento de pares ($P(1100)$).

No intervalo $1/3 \leq \rho \leq 0.4$, em vez de o sistema caminhar em direção ao estado ativo, ele poderia cair num estado absorvente, tal que as densidades de partículas ativas para todas as transições seriam nulas. Entretanto, vemos que isso não ocorreu em nenhuma das simulações, o que parece corroborar a idéia de que nesse intervalo, estados absorventes são instáveis frente a pequenas perturbações, de modo que é ne-

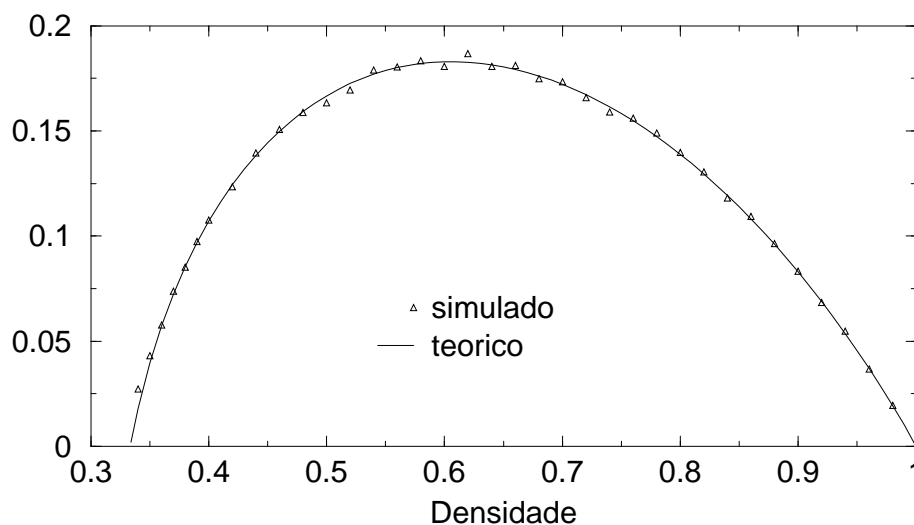


Figura 7.1: Densidade de vacâncias isoladas em função de ρ , para o modelo (1, 2).

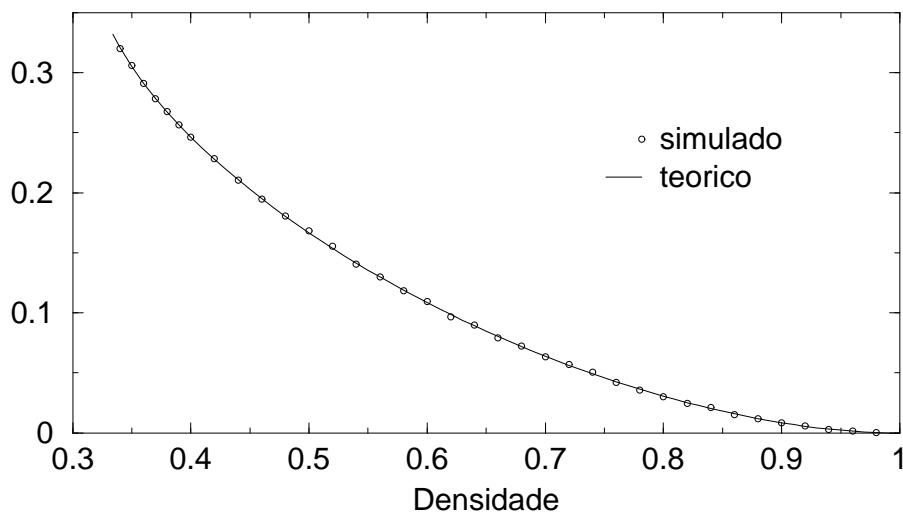


Figura 7.2: Densidade de pares vacantes em função de ρ , para o modelo (1, 2).

cessário um ajuste fino das condições iniciais ou da seqüência de números randômicos utilizada na simulação para que o sistema caia em um estado absorvente.

Analisando os gráficos, vemos que as curvas analíticas reproduzem os resultados numéricos, tanto no intervalo $0.4 \leq \rho \leq 1$, onde esse resultado era esperado, quanto no intervalo $1/3 \leq \rho \leq 0.4$, onde prevíamos a existência de uma discrepância entre os resultados analíticos e numéricos. Ao que parece, os estados absorventes existentes neste intervalo são muito menos numerosos que os estados ativos, de modo que eles

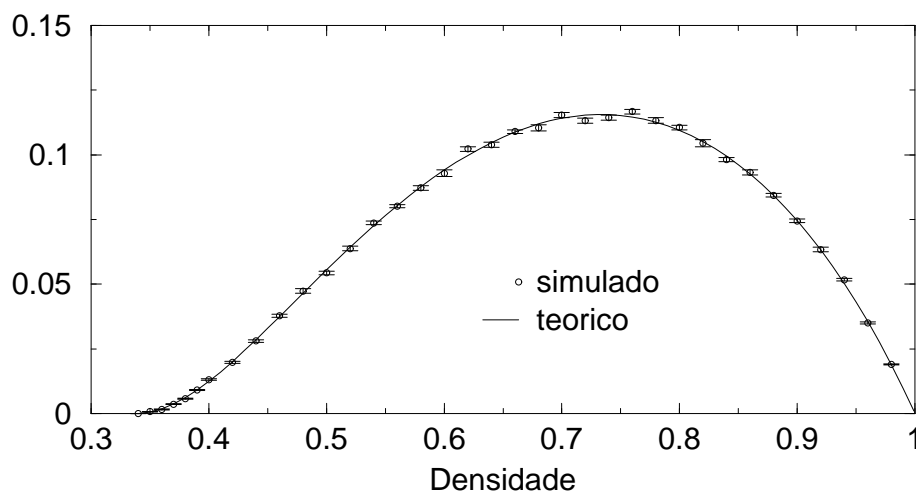


Figura 7.3: Densidade de partículas ativas para o processo de difusão de vacâncias isoladas ($P(1101)$) em função de ρ , para o modelo (1, 2).

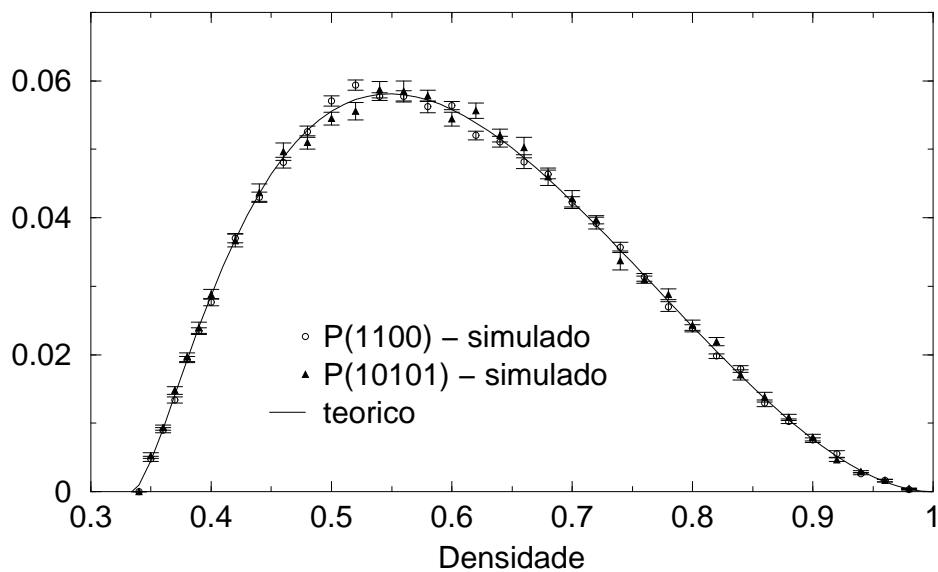


Figura 7.4: Densidades de partículas ativas para os processos de difusão/isolamento de pares vacantes ($P(1100)$) e de fusão de vacâncias isoladas ($P(10101)$) em função de ρ , para o modelo (1, 2).

têm um peso estatístico irrelevante na hora de efetuar médias estatísticas.

Também podemos notar que as densidades $P(10101)$ e $P(1100)$ medidas numericamente realmente se alinham conforme uma linha analítica comum.