

Capítulo 8

Contra-exemplos

Nos capítulos 4, 5, 6 e 7, calculamos grandezas físicas referentes ao estado estacionário ativo de diferentes modelos utilizando o método da matriz de transferência, exposto no capítulo 3. Neste capítulo, veremos que esse método possui limitações e não pode ser aplicado a qualquer modelo, uma vez que não sabemos a priori qual é o subespaço tal que o sistema seja ergódico. Mais especificamente, vamos estudar dois modelos cuja falta de ergodicidade num determinado subespaço é possível provar, e veremos como a ausência desta condição se reflete na dificuldade de se usar ensembles de equilíbrio como fizemos nos capítulos anteriores.

Nos capítulos 5, 6 e 7, definimos três modelos derivados do PCCI de segundos vizinhos, uma vez que exibiam a regra (5.1), que é uma das regras que compõem esse modelo, e regras acessórias. Agora, vamos analisar um modelo que exhibe apenas (5.1) e verificar se também vale a formulação de matrizes de transferência. Por fim, obtemos resultados numéricos para o PCCI de segundos vizinhos para verificar se ele pode ser descrito por esta formulação.

8.1 Modelo A

Seja um modelo definido do mesmo modo que nos capítulos anteriores, para o qual permitem-se apenas as regras de transição (5.1). Como analisado previamente, esta regra atua difundindo pares vacantes pelo sistema e, fora do estado estacionário, separando pares vacantes de cadeias maiores. Assim, esta regra contribui para aumentar $P(1001)$, diminuir $P(000)$, e aumentar $P(101)$, sempre que fora do estado estacionário houver exatamente três sítios vacantes consecutivos. Assim, poderíamos

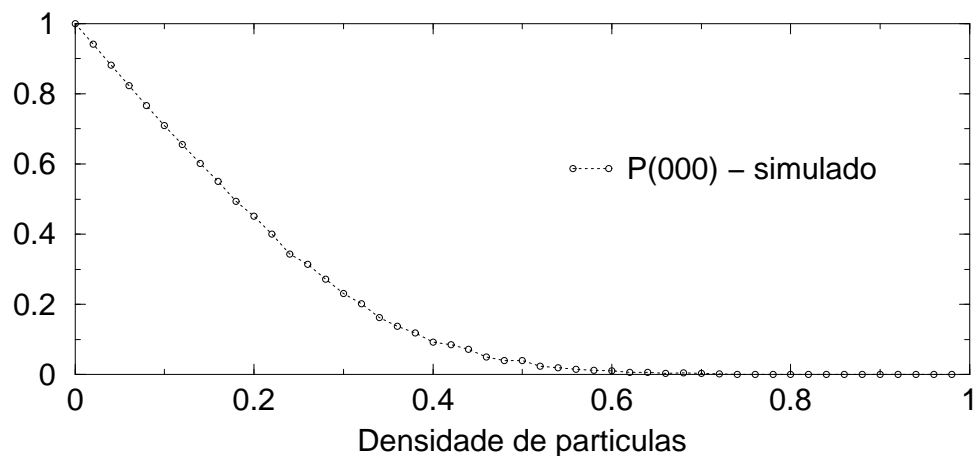


Figura 8.1: Densidade de trincas 000, partindo de condições aleatórias, para o modelo A.

supor que $P(000)$ se anularia no estado estacionário ativo, o qual seria composto de vacâncias isoladas e duplas, como os modelos estudados nos capítulos 6 e 7.

Realizamos duas simulações deste modelo, ambas usando uma cadeia de 4000 sítios, com condições periódicas de contorno. Na primeira, partimos de uma condição inicial aleatória. Na segunda, partimos de uma condição na qual $P(000) = 0$, ou seja, existem apenas vacâncias isoladas e duplas. Medimos as densidades de vacâncias isoladas ($P(101)$) e duplas ($P(1001)$), a densidade de partículas ativas ($P(1100)$) e, na primeira simulação, a densidade de trincas 000. Os resultados são mostrados nos gráficos 8.1 a 8.4. Nas legendas, (a) indica que o sistema é simulado a partir de uma condição inicial aleatória (1ª simulação), enquanto (e) indica que ele é simulado a

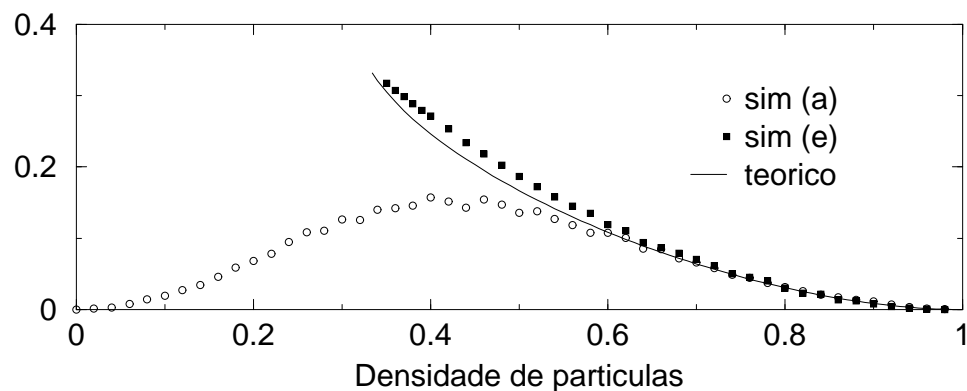


Figura 8.2: Densidade de vacâncias duplas no modelo A.

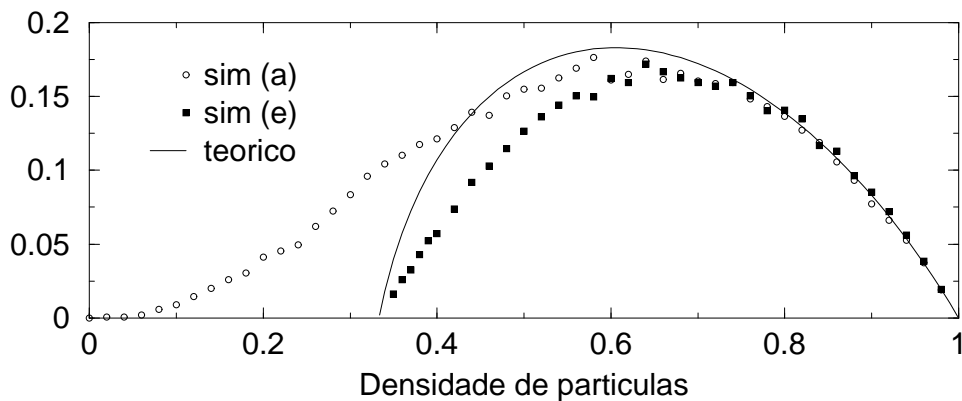


Figura 8.3: Densidade de vacâncias isoladas no modelo A.

partir da configuração estacionária (2ª simulação).

Analisando o gráfico 8.1, vemos que a densidade de trincas 000 só torna-se nula a partir de $\rho^* \approx 0.66$, quando iniciamos a simulação em uma configuração aleatória. Assim, para $1/3 < \rho < \rho^*$, nossa suposição inicial quanto à forma do estado ativo não é válida. Como o cálculo via matriz de transferência (seção (7.4)) inclui explicitamente o fato de que $P(000)$ é nula, os resultados obtidos não descrevem o sistema nesse intervalo.

Os gráficos 8.2, 8.3 e 8.4, que exibem as densidades de vacâncias duplas e isoladas e a densidade de partículas ativas, confirmam esta primeira análise, no que refere-se à 1ª simulação, pois os dados simulados afastam-se dos resultados analíticos para densidades baixas. Para densidades altas, os dois conjuntos de resultados tornam-se idênticos entre si e convergem para os resultados analíticos.

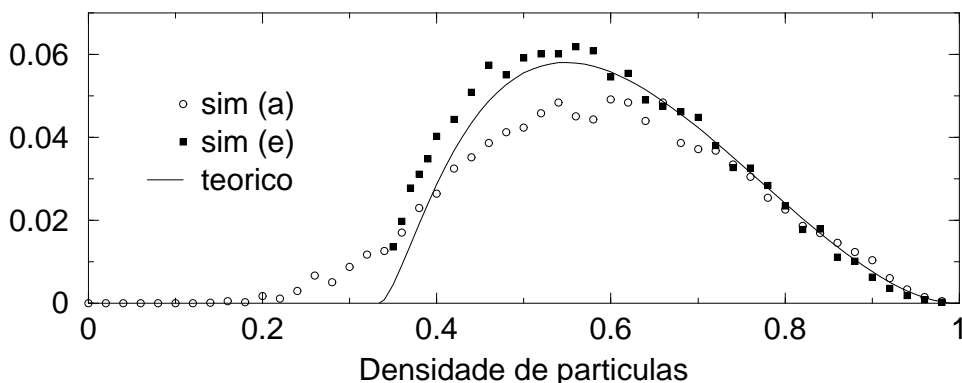


Figura 8.4: Densidade de partículas ativas no modelo A.

Entretanto, o segundo conjunto de dados também se afasta das curvas analíticas para baixas densidades. Este é um indício de que algum outro pressuposto assumido nos cálculos não deve ser válido. De fato, é possível mostrar que o estado ativo assumido para o modelo A não é ergódico, o que inutiliza os cálculos.

Sejam as configurações (8.1) e (8.2), que são permitidas pois nenhuma possui uma trinca 000:

$$\dots 1 10 111 10 100 1 \dots \quad (8.1)$$

$$\dots 1 10 100 10 111 1 \dots \quad (8.2)$$

É impossível alcançar a segunda configuração partindo da primeira, pois o par vacante só pode se deslocar para a esquerda quando há, no mínimo, dois sítios ocupados à sua esquerda. Assim, ele não pode entrar no espaço compreendido pelas duas vacâncias isoladas, o que corresponderia à segunda configuração, e o modelo deixa de ser ergódico dentro do subespaço de configurações em que a sequência 000 é proibida.

Nesta situação, o conjunto de configurações divide-se em um número muito grande de subconjuntos, determinados pela ordem de aparecimento de vacâncias duplas e simples, os quais são ergódicos separadamente. Esta condição permitiria, em princípio, que o método de matrizes de transferência fosse utilizado para descrever cada subconjunto do estado ativo. Entretanto, também seria necessário incluir explicitamente o ordenamento de vacâncias existente.

No entanto, devemos explicar ainda porque os resultados obtidos na segunda simulação coincidem com as curvas analíticas na região de altas densidades. Baseados no exemplo acima, podemos supor, qualitativamente, que a ausência de ergodicidade é mais evidente quando um par vacante interage mais frequentemente com uma vacância isolada, o que deve acontecer na região de baixas densidades, onde as densidades de vacâncias são mais elevadas. Já na região de altas densidades (de partículas), a interação entre vacâncias é muito menos frequente que o movimento difusivo de vacâncias duplas, o que resulta em uma proximidade maior entre os cálculos e as simulações.

8.2 Modelo B – PCCI de segundos vizinhos

O último modelo a ser visto neste trabalho é definido pelas regras (5.1) e pelo seguinte par:

$$1110 \rightarrow 1011 \qquad 0111 \rightarrow 1101 \qquad (8.3)$$

Os dois pares de transições podem ser descritos por apenas um par de transições:

$$11x0 \rightarrow 10x1 \qquad 0x11 \rightarrow 1x01 \qquad (8.4)$$

onde x representa 0 ou 1.

Assim, este modelo coincide com o PCCI de 2^{os} vizinhos, definido brevemente no capítulo 4: uma partícula salta para o segundo sítio vizinho em um sentido, se este sítio estiver vazio e o sítio vizinho à partícula no sentido oposto estiver ocupado.

Vamos expandir as transições (8.4) para abranger cinco sítios consecutivos:

$$11000 \rightarrow 10010 \qquad 00011 \rightarrow 01001 \qquad (8.5)$$

$$11001 \rightarrow 10011 \qquad 10011 \rightarrow 11001 \qquad (8.6)$$

$$11100 \rightarrow 10110 \qquad 00111 \rightarrow 01101 \qquad (8.7)$$

$$11101 \rightarrow 10111 \qquad 10111 \rightarrow 11101 \qquad (8.8)$$

Notamos que as transições (8.5) retiram vacâncias duplas de cadeias vacantes maiores, aumentando $P(1001)$ às custas de $P(000)$; as transições (8.7) retiram sítios vazios isolados de cadeias vacantes maiores, aumentando $P(101)$ às custas de $P(00)$; as transições (8.6) e (8.8) promovem difusão de vacâncias duplas e isoladas. Como resultado de todas as transições, $P(000)$ tende a diminuir, enquanto $P(101)$ aumenta e $P(1001)$ possui comportamento indefinido. Vamos supor que o estado estacionário ativo deste modelo seja caracterizado por $P(000) = 0$, sem impor restrições a $P(1001)$.

Realizamos simulações deste modelo numa rede de 4000 sítios, a partir de duas condições iniciais, como na seção anterior: primeiramente, fixando $P(000) = 0$ (modelo já no estado estacionário); depois, com condições iniciais aleatórias. Obtemos os gráficos 8.5 a 8.7.

O gráfico 8.5 exhibe a densidade estacionária de trincas 000 em função de ρ ,

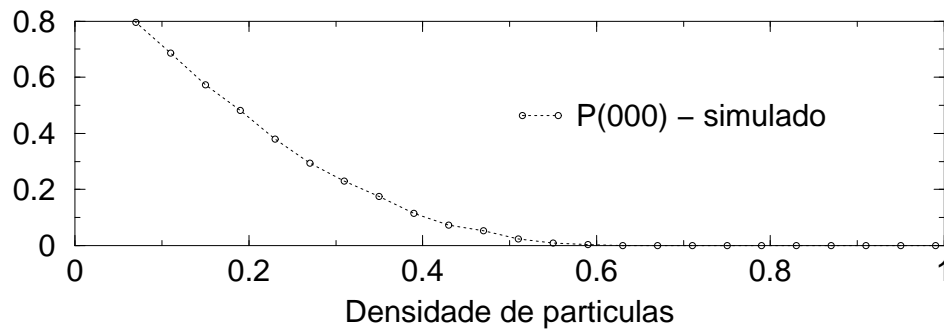


Figura 8.5: Densidade de trincas 000, com condição inicial aleatória, para o modelo B

partindo de condições iniciais aleatórias. Vemos que $P(000)$ se anula para $\rho = \rho^* \approx 0.6$: para valores menores de ρ não podemos afirmar quais classes de sítios vacantes estão presentes no estado ativo, logo, não podemos definir um ensemble microcanônico, o qual é um passo necessário para utilizar o formalismo de matrizes de transferência.

O gráfico 8.6 exhibe as densidades de vacâncias simples e duplas, para as duas simulações. Podemos ver que os dois conjuntos de dados se superpõem a partir de $\rho = \rho^*$, o que era esperado devido ao resultado anterior, pois para densidades maiores que ρ , $P(000)$ se anula para os dois conjuntos de dados.

Vemos também que $P(1001)$ também se anula nesta região de altas densidades

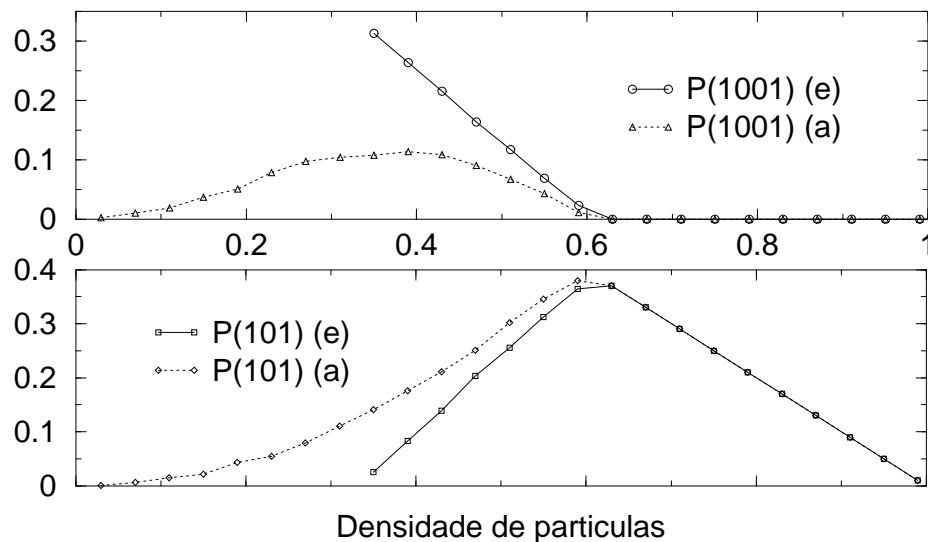


Figura 8.6: Densidade de vacâncias isoladas e duplas para o modelo B.

e $P(101)$ torna-se uma função linear de ρ . Este fato decorre de que, como só existe a classe de sítios vacantes isolados,

$$P(101) = P(0) = 1 - \rho \quad (8.9)$$

O gráfico 8.7 mostra as densidades de partículas ativas para as transições (5.1) e (8.3) em função de ρ , para as duas simulações. Nele, vemos que podemos dividir o espaço de fase do sistema em três regiões com comportamentos distintos. Para $1 \leq \rho \leq \rho^0 \approx 0.15$, tanto $P(1100)$ como $P(1110)$ se anulam e o sistema cai num estado absorvente. Para $\rho^0 \leq \rho \leq \rho^*$, o sistema se encontra numa região ativa em relação às regras (5.1). Nesta região, vacâncias duplas são extraídas de aglomerados maiores e passeiam pela cadeia, sem que $P(000)$ se anule. Vacâncias simples podem ser criadas, mas não se movem, devido ao fato de a densidade não ser alta o suficiente. Para $\rho^* \leq \rho \leq 1$, o sistema é ativo quanto à transição (8.3). No estado ativo, todas as vacâncias estão isoladas e podem passear pela rede, mas caminham dois sítios em cada passo. Assim, uma vacância que esteja num sítio par e uma vacância que esteja num sítio ímpar não são equivalentes.

Por fim, o gráfico 8.8 mostra as densidades de pares 11 e 00, para a simulação do modelo B partindo de condições aleatórias e compara os resultados obtidos com as mesmas densidades do modelo (1) (linhas pontilhadas), exibido anteriormente

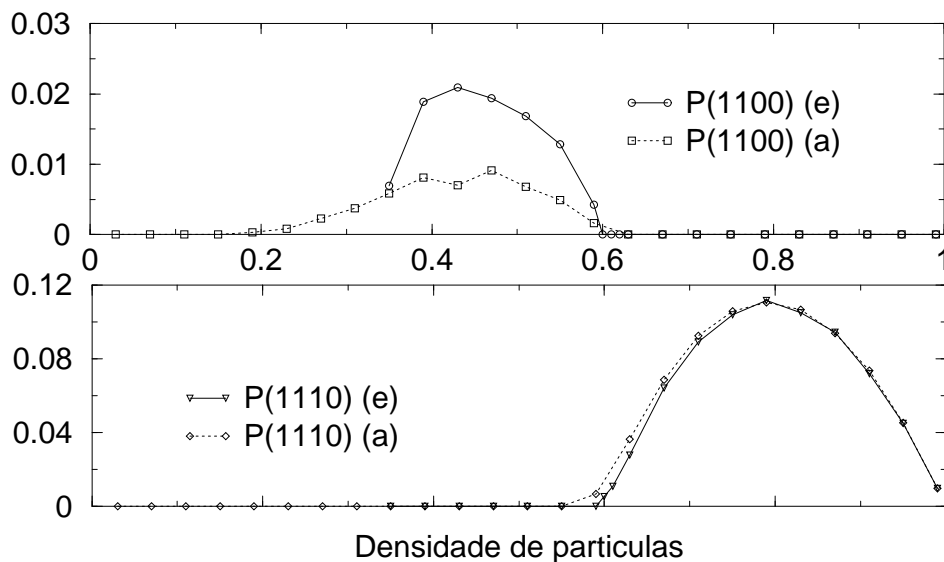


Figura 8.7: Densidade de partículas ativas.

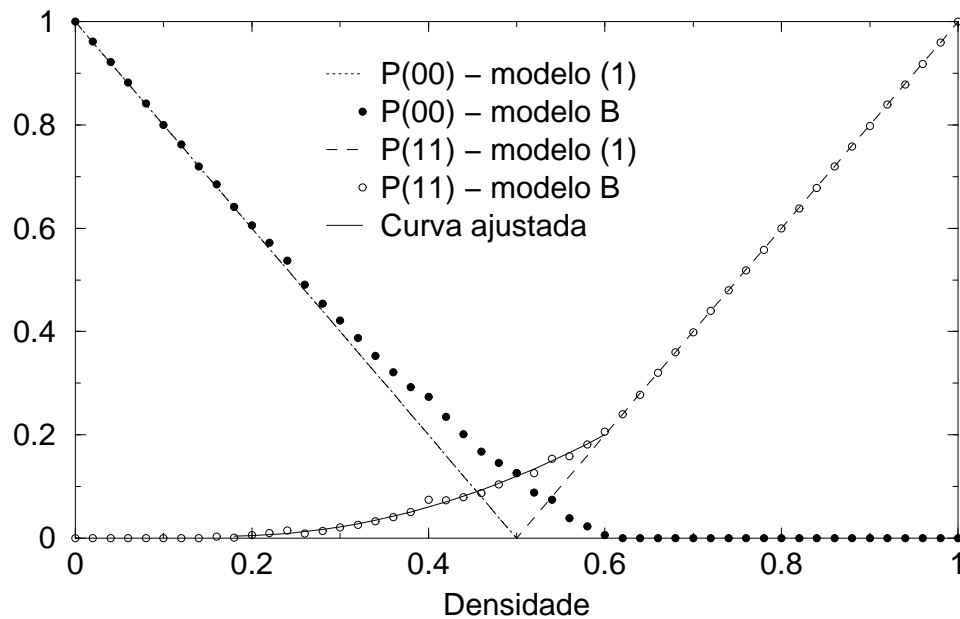


Figura 8.8: Densidades de pares de sítios para os modelos (1) e B.

no gráfico 4.1 (página 29). Lembrando que estes modelos correspondem ao PCCI para dois valores distintos de n , vemos que existe uma coincidência de resultados nas regiões de baixas densidades ($\rho \leq \rho^0$), onde o sistema se encontra num estado absorvente, e de altas densidades ($\rho \geq \rho^*$), onde existem apenas vacâncias simples. Na região de densidades médias, os dois modelos se separam: enquanto as densidades de pares do modelo (1) são lineares em ρ , podemos ajustar curvas quadráticas em ρ às densidades de pares do modelo B. A curva ajustada que aparece no gráfico 8.8 corresponde à seguinte equação:

$$P(11) = 0.0352 - 0.363\rho + 1.064\rho^2, \quad (8.10)$$

e podemos escrever $P(00)$ como uma função quadrática em ρ lembrando que $P(00) = 1 - 2\rho + P(11)$.