

Comportamento Crítico do Modelo de Reação Monômero-Monômero com Taxa de Desorção

Edio Cunha da Costa* e Flávio Roberto Rusch†

Palavras-chave: Transição de fase, catálise heterogênea, campo médio-simulação.

O estudo das transições de fase em sistemas fora do equilíbrio vem crescendo de maneira progressiva nos últimos anos, devido a sua aplicação em sistemas complexos como processo de contato, separação de fases e catálise heterogênea, entre outros. Um dos modelos de catálise heterogênea usado para estudar transições de fases é o modelo de reação monômero-monômero, descrito pela reação $A + B \rightarrow AB$, ocorrendo em uma superfície catalítica. Esse modelo de catálise exibe uma transição de fase de primeira ordem no ponto crítico $y_{B_c} = \frac{1}{2}$, onde y_B representa a probabilidade de um monômero B chegar a rede. Para $y_B > \frac{1}{2}$ ($< \frac{1}{2}$) o sistema entra em um estado de rede saturada de monômeros do tipo B (A). Somente para $y_B = \frac{1}{2}$ o sistema exibe um estado estacionário ativo no qual a reação $A + B \rightarrow AB$ sempre ocorre. Em 1992, Albano [PRL **69**, 656 (1992)] estudou o comportamento crítico dinâmico deste modelo considerando a desorção dos monômeros B com probabilidade um e verificou que os expoentes críticos dinâmicos são diferentes daqueles previsto para a classe de universalidade da percolação dirigida. Estudamos, no presente trabalho, o comportamento crítico estático do modelo de reação de monômero-monômero $A + B \rightarrow AB$ numa superfície catalítica em uma dimensão e atribuímos ao monômero B uma taxa de desorção α . Usando a aproximação de campo médio e simulações de Monte Carlo verificamos uma mudança no tipo de transição, sendo agora uma transição contínua de um estado absorvente para um estado ativo, e o ponto crítico (y_{B_c}) depende do valor de α . Nossos resultados mostram que os expoentes críticos estáticos pertencem a classe de universalidade da percolação dirigida.

*Orientador, Professor do Departamento de Física DFIS - CCT - endereço de email dfi2ecc@joinville.udesc.br

†Acadêmico do curso de Licenciatura em Física - CCT, bolsista de iniciação científica PIBIC/CNPq