

Probabilidad de Supervivencia en Presencia de una Trampa Dinámica

Miguel A. Ré, Carlos E. Budde

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba,
Ciudad Universitaria - 5010 - Córdoba - Argentina
e-mail: re@roble.fis.uncor.edu

Manuel O. Cáceres

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro - Comisión Nacional de Energía Atómica,
8400 - San Carlos de Bariloche - Río Negro - Argentina

La Probabilidad de Supervivencia (SP) es una magnitud de esencial importancia en numerosos fenómenos físicos y químicos. En particular, en el modelo de Glarum para la relajación dieléctrica, esta cantidad interviene en el cálculo de la constante dieléctrica dependiente de la frecuencia. En esta comunicación se estudia la SP para una trampa dinámica en presencia de un conjunto de defectos móviles con concentración c . El proceso de difusión se realiza en una red unidimensional y la absorción de los defectos se produce cuando uno de los mismos se encuentra en la posición de la trampa y esta última está activada. La SP se calcula a partir de la Densidad de Probabilidad de Absorción (presentada en una comunicación anterior). En el modelo de Glarum esta absorción representa la relajación del dipolo eléctrico. Se muestra la SP para distintas dinámicas del proceso de activación-desactivación de la trampa y el correspondiente comportamiento asintótico para tiempos grandes y pequeños.

The Survival Probability (SP) is a very important magnitude in a great number of physical and chemical phenomena. In the Glarum model for dielectric relaxation, the SP is involved in the calculation of the frequency dependent dielectric permittivity. In this communication the SP for a dynamic trap in the presence of a random distribution of noninteracting mobile defects with initial concentration c is calculated. The diffusion process is assumed on a one-dimensional lattice and the absorption of a defect is produced when it reaches the trap position and the trap is activated. We calculate the SP from the Absorption Probability Density (presented in a previous communication). In the Glarum model the absorption represents the dipole relaxation. It is showed the SP for different dynamics in the activation-deactivation process and the corresponding asymptotic behaviour is determined for long and short times.

Pacs N^o 05.40+j; 05.60.+w; 02.50+Ey; 82.20 Fd

1 INTRODUCCIÓN

La Probabilidad de Supervivencia (SP) es una herramienta útil para el estudio de diversos problemas en física y química⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾. Citamos en este sentido el modelo de Glarum⁽⁴⁾ para la relajación dieléctrica controlada por difusión, en el cual cada dipolo puede reorientarse por algún mecanismo dando lugar a un único tiempo de relajación. Se supone además la existencia de defectos móviles en el sistema, tales que cuando alcanzan la posición del dipolo lo relajan instantáneamente. La relajación queda determinada por la función respuesta

$$\Psi(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \Phi(t) \quad (1)$$

donde la contribución exponencial corresponde a la relajación del dipolo en una zona libre de defectos y $\Phi(t)$

(SP) es la probabilidad de que ningún defecto haya alcanzado la posición del dipolo al tiempo t .

En este trabajo presentamos una generalización de este "modelo del blanco"⁽²⁾ que, si bien mantiene la condición de relajación instantánea al producirse el encuentro del dipolo (que también denominaremos trampa) y el defecto (que denominaremos también caminante), la misma depende de un estado interno del dipolo. Sólo si la trampa está activa se produce la relajación.

En nuestro modelo caracterizaremos el comportamiento de la trampa por dos funciones de cambio de estado $f_{ij}(t)$ tales que $f_{ij}(t) dt$ da la probabilidad de que la trampa efectúe una transición al estado i entre t y $t + dt$, suponiendo que alcanzó el estado j en $t = 0$. Los subíndices i, j ($i \neq j$) toman los valores 1 correspondiendo al estado activo o de trampa perfecta (relajación instantánea en el encuentro) y 2 correspon-

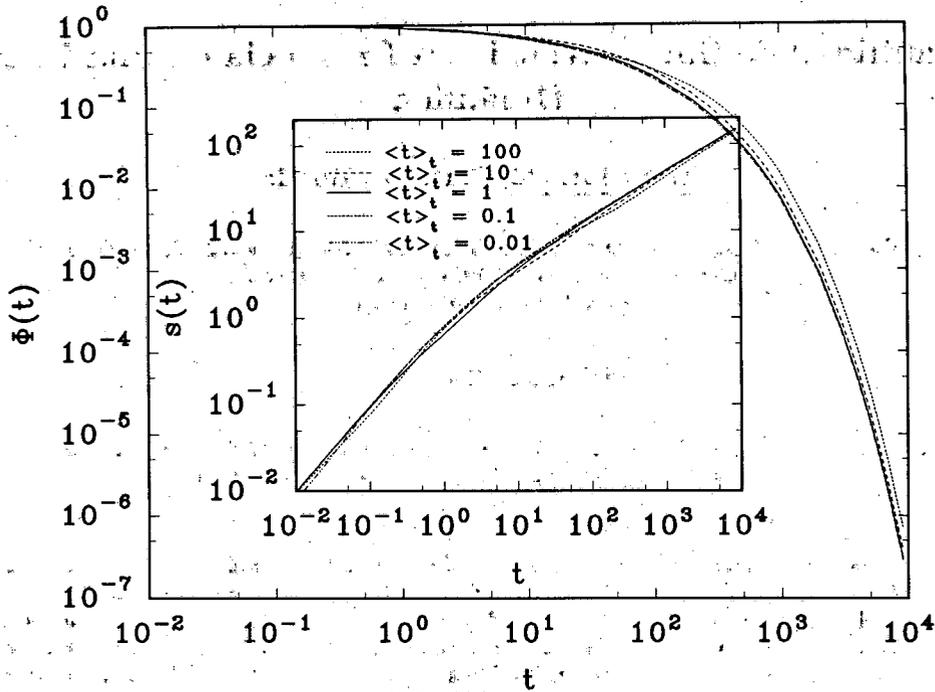


Figura 1: Probabilidad de Supervivencia vs. tiempo para el caso Markoviano simétrico. Para todas las curvas el tiempo medio de pausa se mantiene constante: $\langle t \rangle_w = 1$. En la figura insertada se muestra la variación del exponente con el tiempo. Los valores medios del tiempo de cambio de estado se incluyen en el gráfico.

diendo al estado inactivo o sitio regular de red (no hay relajación en el encuentro). Este comportamiento establece que el dipolo relaja (el caminante abandona el sistema) si al producirse el encuentro la trampa está activa o se activa antes de que el caminante pase a otro sitio.

2 PROBABILIDAD DE SUPERVIVENCIA

Para efectuar el cálculo de la SP procedemos como Bendler y Shlesinger⁽⁵⁾, suponiendo la trampa ubicada en el origen de una red de V sitios y N defectos móviles con una distribución uniforme para los caminantes en la red pero excluyendo inicialmente ($t = 0$) el origen.

Definimos la SP como la probabilidad de que ninguno de los caminantes haya sido absorbido al tiempo t . En el límite termodinámico: $N, V \rightarrow \infty$; $c = N/V = cte$, la concentración de defectos en la red; la SP resulta

$$\Phi(t) = \exp \left\{ -c \sum_{s_0 \neq 0} \int_0^t d\tau R_{11}(0, s_0; \tau) \right\} \quad (2)$$

donde hemos sustituido en la expresión original de Bendler y Shlesinger (ec. (38) en⁽⁵⁾) la densidad del tiempo del primer pasaje (FPT) por la Densidad de Probabilidad de Absorción (APD) correspondiente a este problema, representada por $R_{11}(0, s_0; t)$ en (2). $R_{11}(0, s_0; t) dt$ da la probabilidad de que el caminante

sea absorbido por la trampa en $s = 0$ entre t y $t + dt$, condicionado a que haya partido del sitio s_0 en el tiempo $t = 0$, considerado éste como un instante anterior en que la trampa efectúa una transición al estado trampa activa.

Esta densidad de probabilidad fue presentada en una comunicación anterior⁽⁶⁾⁽⁷⁾ y resuelta explícitamente en la representación de Laplace para el caso unidimensional sin polarización, *i.e.* para una estructura de saltos del caminante

$$B(s - s') = \frac{\lambda_w}{2} (\delta_{s, s'-1} + \delta_{s, s'+1}) \quad (3)$$

con $\lambda_w = \sum_{s'} B(s - s')$, la recíproca del tiempo medio de espera del caminante en un sitio de red ($\langle t \rangle_w$).

En este caso la APD resulta (en la representación de Laplace)

$$R_{11}(s_1, s_0; u) = \frac{\xi(u_w) + g \frac{\rho(u_w)}{\rho(u_t)} \xi(u_t)}{1 + g \frac{\rho(u_w)}{\rho(u_t)}} \quad (4)$$

con las definiciones

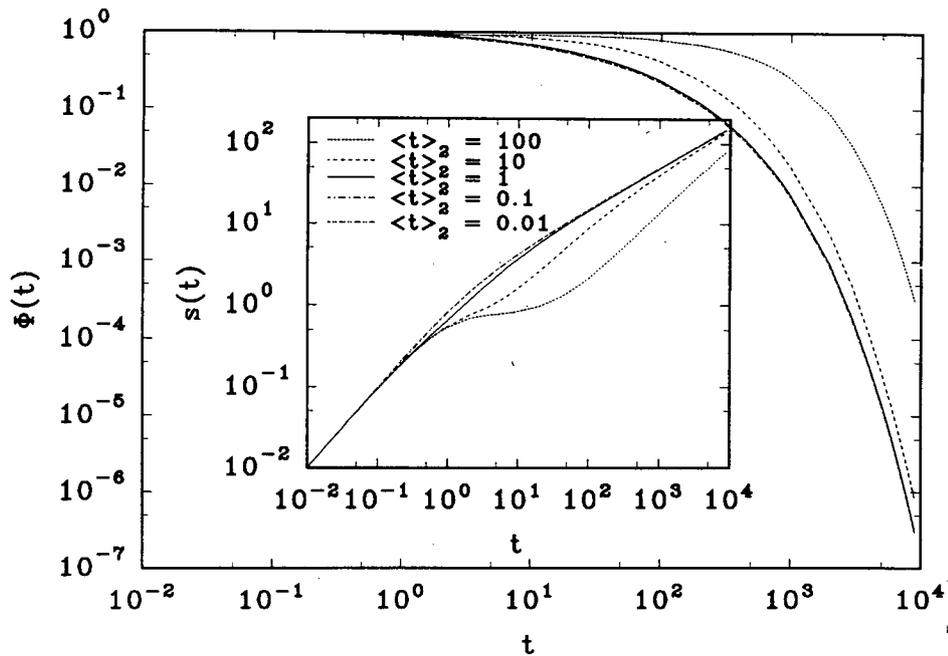


Figura 2: Probabilidad de Supervivencia vs. tiempo para el caso Markoviano no simétrico (ver texto). Para todas las curvas se han mantenido fijos el tiempo medio de pausa: $\langle t \rangle_w = 1$, y el tiempo medio de estado activo: $\langle t \rangle_1 = 1$. En la figura insertada se muestra la variación del exponente con el tiempo. Los valores del tiempo medio de estado inactivo se incluyen en el gráfico.

$$\begin{aligned}
 r &= |s_1 - s_0| \\
 f_{12} &\equiv f_{12}(u + \lambda_w) & f_{21} &\equiv f_{21}(u + \lambda_w) \\
 g &= \frac{f_{21} 1 - f_{12}}{f_{12} 1 - f_{21}} & \Theta &= \frac{1 - f_{12} f_{21}}{(1 - f_{12})(1 - f_{21})} \\
 u_w &= \frac{u}{\lambda_w} & u_t &= \frac{\Theta}{\lambda_w} (u + \lambda_w) - 1 \\
 \rho(x) &= \sqrt{x(2+x)} & \xi(x) &= [1 + x - \rho(x)]^r \quad (5)
 \end{aligned}$$

Si tomamos la transformada de Laplace del exponente en (2) y sustituimos el resultado (4), obtenemos finalmente

$$s(u) = \frac{1}{u} \frac{2}{u_w + \rho(u_w)} \frac{\left\{ 1 + g \frac{\rho(u_w) u_w + \rho(u_w)}{\rho(u_t) u_t + \rho(u_t)} \right\}}{\left\{ 1 + g \frac{\rho(u_w)}{\rho(u_t)} \right\}} \quad (6)$$

Deseamos resaltar en este punto que la fórmula (6) es exacta para cualquier densidad de cambios de estado que caracterice la trampa dinámica: $f_{ij}(t)$.

3 LÍMITES ASINTÓTICOS

El comportamiento asintótico para tiempos largos se determina a partir de la expresión exacta en la re-

presentación de Laplace (6) en el límite $u \rightarrow 0$. En este límite las funciones f_{ij} pueden aproximarse por

$$\begin{aligned}
 f_{ij}(u) &\simeq a_j + b_j \cdot u \quad \text{con} \quad a_j = f_{ij}(\lambda_w) \\
 b_j &= \frac{df_{ij}}{du}(\lambda_w) \quad (7)
 \end{aligned}$$

debido al corrimiento introducido en la transformación de Laplace⁽⁷⁾. Manteniendo hasta dos órdenes de corrección en el cálculo de $s(u)$ y usando un teorema Tauberiano, obtenemos en el límite $t \rightarrow \infty$

$$s(t) \simeq \sqrt{\frac{2\lambda_w}{\pi}} 2t^{1/2} - \left(1 + 2\frac{g_0}{\rho_0} \right)$$

$$\text{con} \quad g_0 = \frac{a_1 1 - a_2}{a_2 1 - a_1} \quad (8)$$

$$u_0 = \frac{a_1}{1 - a_1} + \frac{a_2}{1 - a_2}$$

$$\rho_0 = \sqrt{u_0(2 + u_0)}$$

Tenemos así que para tiempos largos el comportamiento asintótico es básicamente el mismo (hasta este orden de corrección) que para el caso de una trampa estática (siempre activa) excepto por el término $2g_0/\rho_0$ en el coeficiente del término de corrección de segundo orden donde aparecen las escalas de tiempo de la trampa.

Para tiempos cortos el cálculo se lleva adelante en forma similar, esta vez tomando el límite de (6)

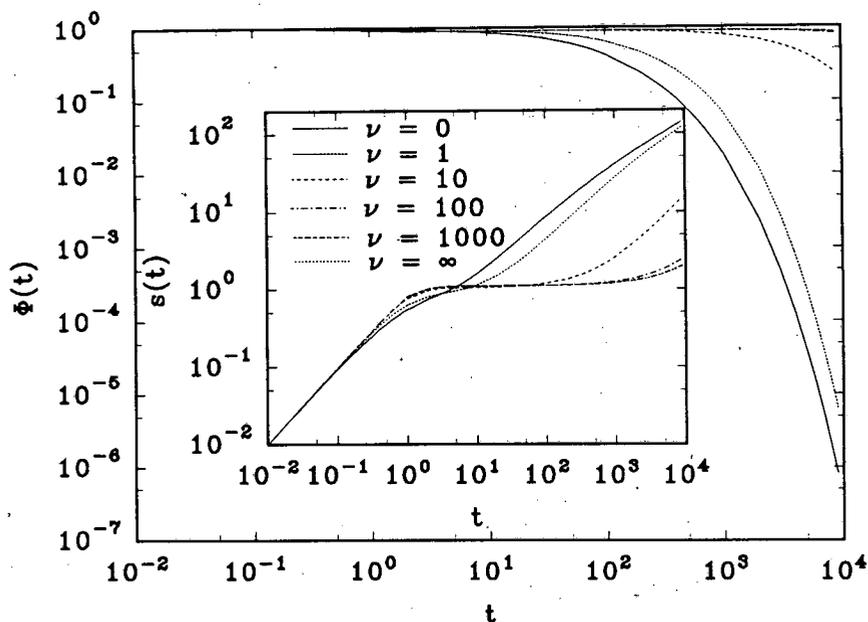


Figura 3: Probabilidad de Supervivencia vs. tiempo para el caso más general no Markoviano no simétrico. Para todas las curvas se han mantenido fijos el tiempo medio de pausa: $\langle t \rangle_w = 1$, el tiempo medio de estado activo: $\langle t \rangle_1 = 1$, y el tiempo medio de estado inactivo: $\langle t \rangle_2 = 10$. En la figura insertada se muestra la variación del exponente con el tiempo. Los valores del parámetro de familia usado se incluyen en el gráfico.

$u \rightarrow \infty$. En este caso sólo podemos asegurar que las funciones $f_{ij} \rightarrow 0$ para este límite, pero podemos calcular explícitamente el término dominante que, a través de un teorema de Abeliano nos determina para $t \rightarrow 0$

$$s(t) \simeq \lambda_w t \quad (9)$$

Nuevamente en el primer orden de aproximación coincide con el comportamiento de trampa estática. La dinámica de la trampa aparecerá en el segundo orden de corrección, aunque para determinar el coeficiente será necesario contar con una expresión explícita de la dinámica de la trampa.

4 RESULTADOS OBTENIDOS

El resultado (6) se ilustra en las figuras 1 a 3 para algunas dinámicas de cambio de estado típicas. En la primera figura se muestra el resultado para una dinámica markoviana controlada por una única función (cambio simétrico - $f_{12} = f_{21} \equiv f_t(t)$)

$$f_t(t) = \lambda_t \exp(-\lambda_t \cdot t) \quad \text{con} \quad \lambda_t^{-1} = \langle t \rangle_t \quad (10)$$

En la figura 2 consideramos una dinámica markoviana para el cambio de estado, pero esta vez con $f_{12} \neq f_{21}$ (cambio asimétrico)

$$f_{ij}(t) = \lambda_j \exp(-\lambda_j \cdot t) \quad \text{con} \quad \lambda_j^{-1} = \langle t \rangle_j \quad (11)$$

En la figura 3, presentamos finalmente el comportamiento para una dinámica no markoviana

asimétrica, determinada por la función

$$f_{ij}(t) = \frac{[\lambda_j(\nu+1)]^\nu}{\Gamma(\nu+1)} \lambda_j(\nu+1) \exp[-\lambda_j(\nu+1)t]$$

$$\text{con} \quad \lambda_j^{-1} = \langle t \rangle_j \quad (12)$$

Referencias

- [1] J.W. Haus & K.W. Kehr; Phys. Rep. **150**, 263 (1987) and references therein.
- [2] A. Blumen, J. Klafter & G. Zumofen, in: Optical Spectroscopy of glasses, Ed. I. Zschokke, Dordrecht: Reidel 1986.
- [3] A. Blumen, in: Molecular Dynamics and Relaxation Phenomena in glasses, Eds. Th. Dorfmueller & G. Williams, Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1987.
- [4] S.H. Glarum; J. Chem. Phys. **33**, 1371 (1960).
- [5] J.T. Bendler & M.F. Shlesinger; in: The Wonderful World of Stochastics, Eds. M.F. Shlesinger & G.H. Weiss, Elsevier Science Publishers, B.V. 1985.
- [6] M.A. Ré, C.E. Budde y M.O. Cáceres; 79ª R.N.F. - A.F.A. '94 8-3.
- [7] M.O. Cáceres, C.E. Budde & M.A. Ré; Phys. Rev. E **52**, 3462 (1995).