



Artigo Propriedades críticas fora do equilíbrio e transição de fase em uma reação catalítica com efeito de volume excluído

Mendonça, S.M.^{1,*}, Centenaro, E. F.² e Arashiro, E.³

- ¹ Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto Universidade de São Paulo; suzielli@usp.br
- ² Universidade Federal de Santa Maria; en.filippo@gmail.com
- ³ Instituto de Matemática, Estatística e Física Universidade Federal do Rio Grande; earashiro@furg.br

* Correspondence: suzielli@usp.br

Received: 01/12/22; Accepted: 13/12/22; Published: 31/01/23

Resumo: Simulamos um modelo de reação catalítica em uma rede unidimensional onde partículas grandes e pequenas poderiam ser adsorvidas, obedecendo probabilidades características. A sua dinâmica consistia na adsorção das partículas na rede, a reação entre elas e a dessorção espontânea do par partícula grande-pequena. Obtivemos então a probabilidade crítica em que acontecia a transição de fase do seu estado absorvente para ativo, bem como obtivemos os expoentes críticos dinâmicos que caracterizavam essa transição e os valores se compararam bem como os conhecidos da classe de universalidade da percolação direcionada.

Palavras-chave: expoentes críticos dinâmicos; modelo catalítico; probabilidade crítica; simulação computacional

Non-equilibrium critical properties and phase transitions in a catalytic reaction with excluded volume effect

Abstract: We simulated a catalytic reaction model in a one-dimensional lattice, where big and small particles could be adsorbed in, obeying their own probabilities. The dynamic consisted of the adsorption of particles in the lattice, the reaction between them and the spontaneous desorption of the big-small particle pair. Then, the critical probability in which the phase transition took place from its absorbent to active state was obtained, as well as the dynamic critical exponents that characterized this transition. The values obtained with the simulations compared well with those known for the directed percolation universality class.

Keywords: dynamic critical exponents; catalytic model; critical probability; computer simulation

1. Introdução

Em vários campos da ciência, como física (Landau, Binder, 2005; Lobo *et al.* 2019), biologia (Keesen *et al.*, 2017; Keesen *et al.*, 2023; Lobo *et al.*, 2020; Lourenço *et al.*, 2020; Ruziska *et al.*, 2018), engenharia (Mordechai, 2011), finanças (Shonkwiler, 2013) entre outros (Carsey, Harden, 2013; Seco, Verhaegen, 2013), muitos problemas numéricos são resolvidos pelo método de Monte Carlo, ou seja, por um método computacional que utiliza números aleatórios e



estatísticas para resolver problemas. Além disso, o uso do método de Monte Carlo para o estudo de sistemas fora do equilíbrio (Arashiro, Drugowich de Felício, 2003; Arashiro *et al.*, 2007; Argolo *et al.*, 2010; Fernandes *et al.*, 2016) tem sido amplamente estudado ao longo das últimas décadas e, com isso, tem-se obtido um grande progresso no seu entendimento. Em relação à transição de fase de sistemas em equilíbrio, a dos sistemas fora do equilíbrio é muito menos entendida, por conta da falta de estrutura geral (Hua *et al.*, 2004). No caso de transições de fase contínuas, em um ponto crítico, uma vasta gama de correlações é estabelecida dentro do sistema e uma série de expoentes críticos pode ser definida para descrever o comportamento crítico de algumas propriedades termodinâmicas (da Costa, Figueiredo, 2003).

Este estudo foi muito empregado para estudar o modelo de oxidação catalítica do dióxido de carbono introduzido por Ziff, Gulari e Barshard (ZGB) (Ziff *et al.*, 1986; Meakin, Scalapino, 1987). Neste modelo de reação catalítica, a superfície catalítica é representada por uma rede quadrada, onde moléculas de oxigênio e monóxido de oxigênio, podem ser adsorvidas nos sítios da rede. O modelo apresenta uma transição de fase para um estado absorvente, onde o sistema fica repleto de partículas grandes ou pequenas, e o comportamento crítico deste pertence à mesma classe de universalidade da percolação direcionada (Jensen *et al.*, 1990). Através de simulações de Monte Carlo, foi possível encontrar os expoentes críticos estáticos do modelo.

Durante muito tempo acreditou-se não haver um comportamento universal nos sistemas críticos dinâmicos não termalizados, ou seja, quando as configurações do sistema ainda não obedecem à distribuição de Boltzmann; por isso os expoentes críticos eram calculados numericamente somente a partir da geração de configurações no equilíbrio. O problema é que, nas vizinhanças do ponto crítico, as correlações são muito intensas, o que torna cada vez mais oneroso obter as configurações descorrelacionadas para fazer as médias termodinâmicas. Esse foi um dos principais motivos para o interesse pelos trabalhos de Huse (1989) e Janssen *et al.* (1989) que descobriram um comportamento universal muito antes que o sistema pudesse atingir o equilíbrio. Tudo se passa como se o tempo funcionasse como o comprimento, na teoria de escala para sistemas finitos. Esse novo enfoque, que tem sido chamado na literatura de simulação em tempos curtos, abriu um leque de alternativas antes não disponíveis para o estudo das propriedades dinâmicas.

Para sistemas com estados absorventes, essa descoberta pode ser traduzida na seguinte relação de escala geral (Hinrichsen, 2000), dada pela Equação (1):

$$\langle \rho(t) \rangle \sim t^{-\beta/\nu_{||}} f\left((p - p_c) t^{1/\nu_{||}}, t^{d/z} L^{-d}, \rho_0 t^{\beta/\nu_{||} + \theta} \right)$$
(1)

onde $\rho(t) = \rho_V(t)$, a densidade de sítios vazios, é o parâmetro de ordem do modelo que pode ser definido como

$$\rho(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} s_i,$$
(2)

onde $s_i = 1$ (0) quando os sítios *i* são vazios (preenchidos com a partícula pequena ou com a partícula grande). Na Equação (1), $\langle \rho(t) \rangle$ significa a média das diferentes evoluções do sistema, *d* é a dimensão do sistema, *L* é o tamanho linear da rede e t é o tempo. Os expoentes β , $v_{||}$ e v_{\perp} são os expoentes estáticos, $z = v_{||}/v_{\perp}$ e $\theta = \frac{d}{z} - \frac{2\beta}{v_{||}}$ são os expoentes dinâmicos, e ρ_c é o ponto crítico, no caso do modelo a probabilidade de absorção das partículas grandes (ρ_g).

No primeiro caso, todos os sítios disponíveis da rede estarão inicialmente vazios e espera-se que a densidade de sítios vazios decaia algebricamente como está representado na Equação (3):

$$\langle \rho(t) \rangle \sim t^{-\beta/\nu_{||}} = t^{-\delta}.$$
(3)

Já quando a simulação começa com todos os sítios da rede repleta por partículas pequenas, exceto por um único sítio vazio escolhido aleatoriamente, a Equação (1) conduz a

$$\langle \rho(t) \rangle \sim \rho_0 t^{\frac{d}{z} - 2\frac{\beta}{v_{||}}} = \rho_0 t^{\theta}.$$
(4)

Portanto, em escala de log-log, as inclinações das leis de potência dadas pelas duas equações anteriores são respectivamente os $\beta/\nu_{||} = \delta$ e θ .

O expoente crítico dinâmico z pode ser encontrado independentemente quando se combina as duas condições iniciais (Da Silva *et al.*, 2002), levando ao seguinte comportamento da lei de potência-descrita na Equação (5):

$$F_2(t) = \frac{\langle \rho \rangle_{\rho_{0=\frac{1}{L}}}(t)}{\langle \rho \rangle_{\rho_{0=1}}^2(t)} \sim t^{\frac{d}{Z}}.$$
(5)

Além disso, o expoente $v_{||}$ também pode ser encontrado independentemente quando se considera a derivada

$$P(t) = \frac{\partial ln\langle \rho \rangle}{\partial p} \bigg|_{p=p_c}$$
(6)

que leva à Equação 7

$$P(t) = t^{\frac{1}{\nu_{||}}}$$
(7)

A partir dessas leis de potência, é possível obter os expoentes z, θ , β , ν_{\parallel} , ν_{\perp} separadamente. Essas leis de potência são observadas apenas quando o sistema está no ponto crítico. Portanto, para utilizá-la precisamos primeiramente determinar as probabilidades críticas do modelo.

No presente trabalho, é apresentado um modelo mais simples do que o proposto por Ziff *et al.* (1986), mas não simplista, construído em uma dimensão. A partir da simulação de um modelo proposto por Park *et al.* (1993) para uma reação catalítica com efeito de volume excluído, determinamos os expoentes críticos dinâmicos que ainda não haviam sido determinados para o modelo.

2. Dinâmica do Modelo

A dinâmica do modelo consiste de uma rede unidimensional com um determinado número de sítios L para se alocar partículas. Esses sítios possuem um tamanho uniforme em toda a rede e podem adsorver partículas pequena ou grandes, aqui representadas pelas letras P e G respectivamente.

A simulação foi dividida em tempos, onde em cada tempo havia n sorteios. O número de sorteios foi estabelecido como sendo n igual ao número de sítios na rede. Um sorteio é a escolha de que partícula, P ou G, será adsorvida em qual sítio da rede. A escolha da partícula é estabelecida através de uma probabilidade,

$$p_g = 1 - p_p \tag{8}$$

onde $p_p = p_g$ são respectivamente as probabilidades das partículas pequenas ou grandes de serem escolhidas.

As partículas pequenas P, por serem menores que o tamanho dos sítios da rede, podem ser adsorvidos por quaisquer sítios que estejam vazios. Já as partículas grandes G, são ligeiramente maiores que o tamanho dos sítios, e por isso, para que um sítio possa adsorvê-lo, os sítios vizinhos precisam, necessariamente conter uma partícula pequena P ou estar vazio.

Na rede, cada partícula adsorvida reage exclusivamente com seus sítios adjacentes, da direita e da esquerda. Quando dois sítios vizinhos são preenchidos por uma partícula pequena e uma grande, há a dessorção espontânea do par partícula pequena-grande, através de um processo determinístico. Após o processo de dessorção, os dois sítios, que antes se encontravam ocupados pelas partículas grande e pequena, ficam vazios, possibilitando então a adsorção de novas partículas nesses espaços. Os processos dinâmicos da rede estão representados pelas seguintes relações:

$$G + S' \stackrel{p_g}{\to} G_S \tag{9}$$

$$P + S \xrightarrow{p_p} P_S \tag{10}$$

$$G_S + P_S \xrightarrow{deterministico} PG + S + S'$$
(11)

onde:

G: representa uma partícula grande;

S': representa o espaço vazio da rede que pode ser ocupado por uma partícula grande (espaço equivalente a dois sítios adjacentes vazios);

 p_g : representa a probabilidade de uma partícula grande ser adsorvida em um sítio S';

Gs: representa uma partícula grande adsorvida em um sítio S';

P: representa uma partícula pequena;

S: representa o espaço vazio da rede que pode ser ocupado por uma partícula pequena (espaço equivalente a um sítio vazio);

 p_{ρ} : representa a probabilidade de uma partícula pequena ser adsorvida em um sítio S;

Ps: representa uma partícula pequena adsorvida em um sítio S;

PG: representa o par partícula pequena-grande, que é formado por duas partículas (uma grande e uma pequena) adsorvidas em dois sítios imediatamente vizinhos da rede.

A Equação (9) representa o processo de adsorção de uma partícula grande no espaço vazio *S'*, a partir de sua respectiva probabilidade de adsorção; a Equação (10) representa um processo semelhante, mas em relação a uma partícula pequena, a ser adsorvida na rede a partir da sua respectiva probabilidade de adsorção. Já a Equação (11) representa o processo determinístico de dessorção do par partícula pequena-grande, que deixa os sítios *S* e *S'* vazios, totalizando ao final da reação três sítios adjacentes vazios na rede. Na Figura 1 é mostrada esquematicamente a dinâmica dos processos descritos.



Figura 1. Absorção e dessorção de partículas grandes e partículas pequenas em uma rede unidimensional.

3. Resultados e Discussões

Modelada a dinâmica do modelo, foram feitas simulações com uma rede inicialmente vazia de tamanho L = 500, 650 passos de tempo, 1000 amostras e probabilidade $p_g = 0,6$. A evolução temporal da densidade de sítios ocupados por partículas pequenas e grandes e de sítios vazios pode ser vista na Figura 2. Observa-se que a rede fica saturada por partículas pequenas para um tempo maior do que 300.



Figura 2. Evolução temporal do preenchimento da rede.

A partir disto, foram feitas simulações com as mesmas condições iniciais de tamanho de rede, passos de tempo e amostras, variando-se somente a probabilidade de adsorção de partículas grandes (p_g) na rede. Esta probabilidade de adsorção foi variada de 0 (probabilidade nula de adsorção de partículas grandes na rede) até 1 (probabilidade máxima de preenchimento da rede por partículas grandes), como mostra o diagrama de fase da Figura 3. Nela, o eixo y mostra a quantidade de sítios da rede ocupados por partículas pequenas (curva em preto) quanto por partículas grandes (curva em azul) em ambos os casos quanto t = 500, bem como o eixo x mostra os valores da probabilidade p_g .



Figura 3. Diagrama de fase da ocupação de sítios pela probabilidade de absorção de partículas grandes p_q .

A partir da Figura 3, é possível notar que há uma transição de fase para as condições supracitadas do modelo, e que esta se dá entre as probabilidades $p_g = 0,6$ e $p_g = 0,8$. A partir do momento em que é conhecida em qual probabilidade a transição de fase ocorre, é possível obter os expoentes críticos do modelo.

Mas como saber então quais as probabilidades críticas do modelo, ou seja, o valor exato em que ocorre a sua transição de fase? Segundo Henkel *et al.* (2008), o comportamento da curva da quantidade de sítios (no nosso caso, vazios) ao longo do tempo em um gráfico do tipo log-log é diferente quando a simulação é feita abaixo da probabilidade crítica, acima dela ou exatamente nela. Quando se tem a curva resultante da simulação feita na probabilidade crítica, onde $p_g = p_c$, esta é uma curva linear. A Figura 4 mostra diferentes curvas da densidade de sítios vazios (ρ) ao longo do tempo em escala log-log, a partir de simulações com a probabilidade p_g nas proximidades da probabilidade crítica p_c , bem como quando $p_q = p_c \approx 0.653$.



Figura 4. Gráfico log-log da evolução temporal da densidade de sítios vazios com a rede inicialmente vazia nas proximidades da probabilidade crítica.

Encontrado o valor da probabilidade crítica, resta agora fazer a regressão linear desta curva para a obtenção de um dos expoentes críticos dinâmicos. A Figura 5 mostra a regressão linear feita a partir da simulação com uma rede com L = 1000, 20000 passos de tempo, 5000 amostras e probabilidade $p_g = p_c = 0.65325(5)$. Para a obtenção do expoente crítico δ , foi usada uma rede inicialmente vazia, e chegou-se ao valor de $\delta = \beta/v_{\parallel} = 0,160(5)$. Com isto, a partir da relação $\beta = \delta/v'$ (Hinrichsen, 2000), é fornecido o valor do expoente crítico β .



Figura 5. Gráfico log-log da evolução temporal de densidade de sítios vazios com a rede inicialmente vazia na probabilidade crítica. A linha corresponde à regressão linear considerando uma lei de potência e fornecem os valores do expoente δ .

Da mesma forma, para encontrar o expoente θ , é feita a regressão linear do gráfico log-log da evolução temporal de sítios vazios proveniente de uma simulação com condições iniciais muito semelhantes às da simulação da Figura 5, com $p_g = p_c = 0.65325(5)$ (probabilidade crítica), mas com uma rede inicialmente preenchida, com apenas um sítio vazio, como mostra a Figura 6. A partir disso, obtém-se então $\theta = 0.312(3)$.



Figura 6. Gráfico log-log da evolução temporal de densidade de sítios vazios com a rede inicialmente com apenas com um sítio vazio. A linha corresponde à regressão linear considerando uma lei de potência e fornecem os valores do expoente θ.

Finalmente, para se obter o expoente crítico z, resta calcular a função F₂, que combina as duas condições de preenchimento inicial da rede vistas anteriormente (rede inicial completamente vazia e rede inicialmente preenchida, com apenas um sítio vazio). Combinando-se essas duas condições iniciais, basta fazer o gráfico em log-log desta função

ao longo do tempo, bem como fazer a regressão linear, como mostra a Figura 7. Com isso, é obtido 1/z=0,627(2), ou seja, z = 1.595(5).



Figura 7. Gráfico log-log da evolução temporal F₂ com condições iniciais mistas. A linha corresponde à regressão linear considerando uma lei de potência e fornecem os valores do expoente 1/z.

Na Tabela 1 estão apresentados os resultados obtidos para os expoentes críticos dinâmicos para o modelo da reação catalítica com efeito de volume excluído, na sua probabilidade crítica, e os valores prescritos para a classe de universalidade da percolação direcionada em 1 dimensão.

Tabela 1. Valores dos expoentes críticos dinâmicos do modelo da reação catalítica simulado comparados co	om os da
classe de universalidade da percolação direcionado em 1 dimensão.	

	Valores		
Expoente	Percolação Direncionada em 1 dimensão ¹	Simulação da reação catalítica	
δ	0.159464(6)	0.160(5)	
θ	0.313686(8)	0.312(3)	
Z	1.580745(10)	1.595(5)	

¹ H. Hinrichsen, Adv. Phys. 49, 815 (2000)

Os valores encontrados a partir das simulações encontram-se de acordo com os estimados na bibliografia (Hinrichsen, 2000). Com isso, pode-se afirmar que os expoentes críticos dinâmicos do modelo estão de acordo com à da classe de universalidade da percolação direcionada.

4. Conclusões

No estudo do processo catalítico com efeito de volume excluído, fizemos a modelagem de uma superfície catalítica em uma dimensão, através de uma rede unidimensional de comprimento L. Inspiradas no modelo de *dollars* e *dimmers* (Park *et al*, 1993) e em uma variação mais simples do modelo ZGB (Ziff *et al*, 1986), a dinâmica do modelo consistiu na adsorção, reação e dessorção de partículas grandes e pequenas na rede, obedecendo a regras específicas e probabilidades bem determinadas para cada tipo de partícula. Com isso, conseguimos obter a probabilidade crítica do modelo, crítica $p_c = 0.65325(5)$ em que ocorria a transição de fase. Assim, fizemos simulações de tempos curtos do modelo na sua probabilidade crítica, a fim de encontrar os seus expoentes críticos dinâmicos. E os valores encontrados θ = 0.312(3), δ = 0.160(5) e z = 1.595(5) estão em boa concordância com os da classe de universalidade da percolação direcionada.

Financiamento: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. **Agradecimentos:** Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. **Conflito de interesse:** Os autores declaram não haver conflito de interesse.

Referências

- 1. Landau, D.P.; Binder, K. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, 2nd ed.; Cambridge University Press: New York, USA, 2005.
- Lobo, P. H. F.; Arashiro, E.; Silva, A. C.; Pinheiro, C. F. S. A smooth path to plot hydrogen atom via Monte Carlo method. *Rev. Bras. Ens. Fis.* 2019, 41, e20190073-2. https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2019-0073
- 3. Keesen, F.; e Silva, A. C.; Arashiro, E.; Pinheiro, C. F. S. Simulations of populations of Sapajus robustus in a fragmented landscape. *Ecol. Modell.* **2017**, *344*, 38-47. https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2016.11.003
- Keesen, F.; e Silva, A. C.; Pinheiro, C. F. S.; Arashiro, E.; Ligeiro, Y.; de Viveiros Grelle, C. E. New applications of an old individual-based model for biological dynamics. *Ecol. Modell.* 2023, 476, 110234. https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2022.110234
- Lobo, P. H. F.; Mendonça, S. M.; Lazo, M. J.; Arashiro, E. Study of patterns of emerging clusters in a dynamic of chase and escape. *Ci. e Nat.* 2020, 42, 1-9. https://doi.org/10.5902/2179460X37562
- Lourenço, G. M.; Keesen, F.; Fagundes, R.; Luna, P.; Silva, A. C.; Ribeiro, S. P.; Arashiro, E. Recruitment and entropy decrease during trail formation by foraging ants. *Insect. Soc.* 2020, 67, 59–69. https://doi.org/10.1007/s00040-019-00728-6
- 7. Ruziska, F. M.; Arashiro, E.; Tomé, T. Stochastic dynamics for two biological species and ecological niches. *Physica* A **2018**, 489, 56-64. https://doi.org/10.1016/j.physa.2017.07.016
- 8. Mordechai, S. (Ed). *Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering*, 1st ed.; IntechOpen: London, England, 2011.
- 9. Shonkwiler, R. W. Finance with Monte Carlo, 1st ed.; Springer: New York, USA, 2013.
- 10. Carsey, T. M.; Harden, J. J. *Monte Carlo simulation and resampling methods for social science*. 1st ed.; Sage Publications: Los Angeles, USA, 2013.
- 11. Seco, J.; Verhaegen, F. (Eds.). *Monte Carlo techniques in radiation therapy*. 1st ed.; CRC Pres: Boca Raton, USA, 2013.
- 12. Arashiro, E.; Drugowich de Felício, J. R. Short-time critical dynamics of the Baxter-Wu model. *Phys. Rev. E* **2003**, *67*, 046123. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.046123
- 13. Arashiro, E.; Drugowich de Felício, J. R.; Hansmann, U. H. Short-time dynamics of polypeptides. *J. Chem. Phys.* **2007**, *126*, 045107. https://doi.org/10.1063/1.2430709
- 14. Argolo, C.; Otaviano, H.; Gleria, I.; Arashiro, E.; Tome, T. Critical behavior and threshold of coexistence of a predator-prey stochastic model in a 2D lattice. *Int J Bifurcat Chaos* **2010**, *20*, 309-314. https://doi.org/10.1142/S0218127410025752
- 15. Fernandes, H. A.; Silva, R.; Santos, E. D.; Gomes, P. F.; Arashiro E. Alternative method to characterize continuous and discontinuous phase transitions in surface reaction models. *Phys. Rev. E* **2016**, *94*, 022129. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.022129
- 16. Hua, D. Y.; Zhu, Y. J.; Ma, Y. Q. Critical exponents of the continuous phase transition in Ziff-Gulari-Barshad model. *Int. J. Mod. Phys. B* **2004**, *18*, 859-866. https://doi.org/10.1142/S0217979204024008
- 17. Da Costa, E. C.; Figueiredo, W. Catalysis with Competitive Reactions: Static and Dynamical Critical Behavior. *Braz. J. Phys.* **2003**, *33*, 487-500. https://doi.org/10.1590/S0103-97332003000300010
- Ziff, R. M.; Gulari E.; Barshad, Y. Kinetic Phase Transitions in an Irreversible Surface-Reaction Model. *Phys. Rev. Lett.* 1986, *56*, 2553. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.2553
- 19. Meakin, P.; Scalapino, D. J. Simple models for heterogeneous catalysis: Phase transition-like behavior in nonequilibrium systems. *J. Chem. Phys.* **1987**, *87*, 731-741. https://doi.org/10.1063/1.453570

- 20. Jensen, I.; Fogedby, H. C.; Dickman, R. Critical exponents for an irreversible surface reaction model, *Phys. Rev. A* **1990**, *41*, 3411(R). https://doi.org/10.1103/PhysRevA.41.3411
- 21. Huse, D. A. Remanent magnetization decay at the spin-glass critical point: A new dynamic critical exponent for nonequilibrium autocorrelations. *Phys. Rev. B* **1989**, 40, 304. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.304
- 22. Janssen, H.K.; Schaub, B.; Schmittmann, B. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes. Z. Physik B Condensed Matter **1989**, *73*, 539–549. https://doi.org/10.1007/BF01319383
- 23. Hinrichsen, H. Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. *Adv. Phys.* **2000**, *49*, 815–958. https://doi.org/10.1080/00018730050198152
- 24. Da Silva, R.; Alves, N. A.; De Felício, J. R. D. Mixed initial conditions to estimate the dynamic critical exponent in short-time Monte Carlo simulation. *Phys. Lett. A* **2002**, *298*, 325-329. https://doi.org/10.1016/S0375-9601(02)00571-6
- 25. Park, H.; Köhler, J.; Kim I. M.; ben Avraham, D.; Redner, S., Excluded volume effects in heterogeneous catalysis: Reactions between "dollars" and "dimes". *J. Phys. A* **1993**, *26*, 2071–2079.
- 26. Henkel, M.; Hinrichsen, H.; Lübeck, S. Non-equilibrium phase transitions, 1st ed.; Springer: Berlin, Germany, 2008.