

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**César Menezes Vieira**

**Uma abordagem contínua para sistemas  
dissipativos de partículas repulsivas**

Fortaleza

2017

**César Menezes Vieira**

# **Uma abordagem contínua para sistemas dissipativos de partículas repulsivas**

Tese de Doutorado submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira

**Fortaleza**

**2017**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

V714a Vieira, César Menezes.

Uma abordagem contínua para sistemas dissipativos de partículas repulsivas / César Menezes Vieira. – 2017.

103 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2017.

Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.

1. Dinâmica Molecular. 2. Dinâmica superamortecida. 3. Mecânica estatística não-extensiva. 4. Difusão não-linear. I. Título.

CDD 530

---

**César Menezes Vieira**

# **Uma abordagem contínua para sistemas dissipativos de partículas repulsivas**

Tese de Doutorado submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física

Aprovada em 15/12/2017

## **BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. André Auto Moreira (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Hans Jürgen Herrmann  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Luciano Rodrigues da Silva  
Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN)

---

Prof. Dr. Evaldo Mendonça Fleury Curado  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)

*Aos meus amados pais,  
César e Silvia.*

*“If you have an apple and I have an apple and we exchange these apples then you and I will still each have one apple. But if you have an idea and I have an idea and we exchange these ideas, then each of us will have two ideas.”*

GEORGE BERNARD SHAW

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer *imensamente* aos meus pais, César e Silvia, por todo o amor e pelo apoio que me vem sendo dado desde sempre. O valor dado à educação é, na minha opinião, um dos maiores presentes e formadores de caráter que um filho pode receber, e que nunca lhe podem ser tomados. Agradeço também à minha irmã, Nara, pela grande amizade e o apoio incondicionais. Esta tese é certamente um pequeno fruto de tudo o que vocês me deram.

À minha querida esposa, Rosa, pelo enorme companheirismo, amor, amizade e compreensão despendidos. *Merci pour tout!*

Ao meu orientador, professor André Auto Moreira, que com sua paciência e dedicação esteve sempre presente no meu trabalho e nunca deixou de me apoiar e orientar o caminho dos trabalhos desde a época do meu mestrado, o meu *muitíssimo* obrigado!

Ao professor José Soares de Andrade Júnior, que, além de participar da banca examinadora e da banca do exame de qualificação, acompanhou o trabalho e forneceu ótimas sugestões ao longo de todo esse tempo.

Ao professor Humberto de Andrade Carmona, pela participação na banca do exame de qualificação, além de contribuições e sugestões dadas, sobretudo com relação ao nosso artigo publicado.

Aos professores Evaldo Curado (CBPF), Luciano da Silva (UFRN) e Hans Herrmann (ETH Zürich) por aceitarem participar da banca examinadora, e ao César Sampaio, pela participação na banca do exame de qualificação.

Aos meus amigos do departamento de Física da UFC, especialmente os que já passaram e os que ainda fazem parte do Laboratório de Sistemas Complexos, além dos amigos do GTMC.

Aos meus colegas de trabalho do IFCE, sobretudo os que fazem parte do campus avançado de Jaguaruana e do campus Acaraú, a minha sincera gratidão por toda a compreensão necessária quando precisei conciliar os meus trabalhos.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

# Resumo

Neste trabalho, propomos um método geral do tipo “coarse-graining” para obter uma equação da continuidade que descreve qualquer sistema dissipativo de partículas repulsivas interagindo por meio de potenciais de curto alcance, em princípio. Em nossa abordagem, o efeito de correlações partícula-partícula é incorporado ao balanço de energia, e uma equação de difusão não-linear é obtida para representar a dinâmica superamortecida. Em particular, quando o potencial de interação repulsiva é uma lei de potência, nosso modelo revela uma correspondência entre a energia partícula-partícula e a termoestatística generalizada de Tsallis para qualquer valor não-positivo do índice entrópico,  $q$ . Para esse caso, investigamos a consistência do modelo proposto para o estado estacionário, bem como durante a evolução do perfil de concentração. Sob certas condições, a solução para o perfil de concentração obedece à hipótese de similaridade, isto é, as distribuições de densidade em diferentes instantes de tempo podem ser mapeadas por um fator de escala adequado. Nesse caso, a distribuição de velocidades das partículas segue aproximadamente a mesma forma funcional observada no caso do perfil de concentração. Ainda para este potencial de interação, apresentamos alguns resultados iniciais para o caso em que ruídos térmicos são adicionados ao sistema. Nossa metodologia pode também ser aplicada a modelos microscópicos de vórtices em supercondutores e plasmas complexos, onde correlações partícula-partícula são pronunciadas em baixas concentrações. Por fim, aplicamos o nosso modelo para o caso de um sistema de partículas que apresenta transições de fase conforme variamos a concentração. As descrições contínuas resultantes fornecem informações úteis e esclarecedoras sobre o comportamento microdinâmico de tais sistemas físicos. A consistência do modelo é demonstrada por meio de comparações com resultados de simulação de dinâmica molecular.

**Palavras-chave:** Dinâmica Molecular. Dinâmica superamortecida. Mecânica Estatística não-extensiva. Difusão não-linear.



# Abstract

We propose a general coarse-graining method to derive a continuity equation that describes any dissipative system of repulsive particles interacting through short-ranged potentials, in principle. In our approach, the effect of particle-particle correlations is incorporated to the overall balance of energy, and a non-linear diffusion equation is obtained to represent the overdamped dynamics. In particular, when the repulsive interaction potential is a short-ranged power-law, our approach reveals a distinctive correspondence between particle-particle energy and the generalized thermostatistics of Tsallis for any non-positive value of the entropic index  $q$ . For this interaction potential, we investigate the consistence of the proposed approach both in the stationary state as well as during the dynamical evolution of the density profile. Under certain conditions the solution for the density profile obeys a similarity condition, that is, the density distributions in different instants can be mapped one on other by a suitable scaling. In this case, we observe that the distribution of particles velocities follows closely the same functional form observed for the density profile. We also show here some initial studies for the case where thermal noise are relevant. Our methodology can also be applied to microscopic models of superconducting vortices and complex plasma, where particle-particle correlations are pronounced at low concentrations. Lastly we apply our continuum approach to a system of particles which shows phase transitions with respect to the concentration. The resulting continuum descriptions provide elucidating and useful insights on the microdynamical behavior of these physical systems. The consistency of our approach is demonstrated by comparison with molecular dynamics simulations.

**Keywords:** Molecular Dynamics. Overdamped dynamics. Nonextensive statistical Mechanics. Nonlinear diffusion.

# Lista de Tabelas

1	Valores de $a_{fit}$ utilizados na Figura 15 para cada valor de $k$ utilizado. O erro relativo foi calculado utilizando o valor teórico previsto anteriormente, $a_{teo} = 2\pi$ . . . . .	p. 51
2	Valores do coeficiente $C_\lambda$ para cada valor de $\lambda$ utilizado ( $D = 2$ ). Esses coeficientes foram obtidos a partir da equação (3.13), que deram origem às curvas tracejadas presentes na Figura 16. . . . .	p. 53
3	Valores do coeficiente $\alpha_{\lambda D}$ para cada valor de $D$ e $\lambda$ utilizado. Esses coeficientes foram obtidos a partir de ajustes não-lineares do tipo $y = x + \alpha_{\lambda D}x^{\lambda/D}$ , que deram origem às curvas presentes nos painéis internos das Figuras 25 e 26. . . . .	p. 68

# Lista de Figuras

- 1 Esboço de  $|A(\kappa)|^2$  em função de  $\ln \kappa$ . A forma das curvas é meramente ilustrativa. . . . . p. 21
- 2 Diagrama de fase  $B$ - $T$  de um supercondutor do tipo 2. Abaixo de um campo crítico  $B_{c1}$ , o material é supercondutor e repele completamente o campo magnético. Entre  $B_{c1}$  e  $B_{c2}$ , o supercondutor está em um estado misto, onde os vórtices podem ser observados. No diagrama,  $T_c$  é a temperatura crítica do material supercondutor quando o campo magnético é desligado. Figura de Frédéric Bouquet e Julien Bobroff. . . . . p. 23
- 3 Imagem topográfica de uma rede triangular de vórtices  $250\text{nm} \times 250\text{nm}$  em um supercondutor de  $\text{NbSe}_2$ . . . . . p. 24
- 4 Primeiro cristal de plasma obtido (por Thomas *et al.*). A figura mostra uma vista de topo da luz do laser refletida por um cristal de plasma de uma camada. . . . . p. 25
- 5 Dispersão coloidal composta por partículas de acrílico (PMMA) imersas em um hidrocarboneto. . . . . p. 25
- 6 Ilustração esquemática mostrando algumas diferenças entre plasmas complexos e dispersões coloidais. À esquerda, as partículas de poeira estão cercadas por um gás diluído fracamente ionizado. À direita, as partículas coloidais estão no interior de um solvente contendo íons. . . . . p. 26
- 7 Ilustração de uma partícula Browniana de massa  $m$  imersa em um fluido composto de partículas muito mais leves e menores do que a partícula suspensa. . . . . p. 27
- 8 **(a)** Posição média da frente de penetração em função do tempo; **(b)** Perfis de densidade para diferentes valores de  $f_0$ . Os painéis internos dos gráficos mostram os colapsos das curvas obtidas para diferentes valores de  $f_0$ , que está relacionado à intensidade da força externa. Essas figuras foram extraídas dos resultados de simulação da Referência [1]. . . . . p. 30

- 9 Comparação entre o perfil de densidade de partículas no estado estacionário obtido por meio de simulação (símbolos) e o resultado teórico (linhas sólidas) na situação de temperatura nula ( $T = 0$ ). A curva foi obtida com o auxílio de um ajuste dos dados numéricos, que indicou o valor do parâmetro  $a = 4,82$ . Figura retirada da Referência [2]. . . . . p. 32
- 10 Comparação entre o perfil de densidade de partículas no estado estacionário obtido por meio de simulação (símbolos) e o resultado teórico (linhas sólidas). O parâmetro das curvas representadas pelas linhas sólidas foi o mesmo obtido no ajuste do perfil de densidade da Figura 9 ( $T = 0$ ). Figura retirada da Referência [2]. . . . . p. 33
- 11 Configuração de partículas no estado estacionário. As partículas interagem entre si através do potencial de London, além de serem atraídas para a região de  $x = 0$  por meio de uma força de confinamento do tipo  $-kx$ . O painel interno da figura mostra como a variação da densidade é localmente muito pequena dentro do raio de interação ( $r_c$ ) da força de interação. . . . . p. 35
- 12 Ilustração do procedimento utilizado para calcular  $U_{int}$ . A rede utilizada depende do potencial de interação, e, portanto, não é necessariamente quadrada (essa representação quadrada foi escolhida para fins didáticos). Na figura,  $\ell$  é o parâmetro de rede, que controla a densidade,  $r_c$  é o raio de atuação da força de interação, e  $v$  é um vértice qualquer da rede. . . p. 42
- 13 A função  $a(\rho) = |\mathbf{f}_{int}|/|\nabla\rho|$  é determinada através da equação (2.30). Dois sistemas são investigados: coloides, que interagem através do potencial de Yukawa,  $V_Y = \varepsilon\sigma \exp(-r/\sigma)/r$ , formando redes hcp em três dimensões; enquanto o potencial de interação de vórtices é modelado por  $V_S = \varepsilon K_0(r/\sigma)$ , formando redes triangulares (rede de Abrikosov). Como indicado pelas linhas tracejadas, para altas concentrações,  $\rho > \sigma^{-D}$ , as curvas convergem para os valores previstos pela equação (2.19),  $a = 4\pi\varepsilon\sigma^3$  e  $a = 2\pi\varepsilon\sigma^2$ , para sistemas em três e em duas dimensões, respectivamente. A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-D}$ , enquanto  $a(\rho)$  é expresso em unidades de  $\varepsilon\sigma^D$ . . . . . p. 46

- 14 Perfis de densidade no estado estacionário obtidos pela simulação (símbolos) para a interação de vórtices, que é modelada por  $K_0(r)$ . As simulações foram realizadas usando  $N = 800$  partículas,  $L_y = 20\sigma$  e para quatro valores diferentes de  $k$ . As curvas tracejadas representam ajustes parabólicos de acordo com a equação (3.6). A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-2}$ , enquanto que a constante  $k$  é escrita em unidades de  $\varepsilon\sigma^{-2}$  e  $x$  em  $\sigma$ . . . . . p. 49
- 15 Perfis de densidade no estado estacionário obtidos pela simulação (símbolos) para a interação de vórtices, que é modelada por  $K_0(r)$ . As simulações foram realizadas usando  $N = 800$  partículas,  $L_y = 20\sigma$  e para quatro valores diferentes de  $k$ . As curvas tracejadas representam as previsões do modelo contínuo. A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-2}$ , enquanto que a constante  $k$  é escrita em unidades de  $\varepsilon\sigma^{-2}$  e  $x$  em  $\sigma$ . . . p. 50
- 16 Perfis de densidade no estado estacionário obtidos através de simulações (símbolos). Consideramos sistemas bidimensionais de  $N = 900$  partículas interagindo através do potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ . Na direção  $x$ , as partículas são confinadas por um potencial externo harmônico,  $U_{ext}(x) = kx^2/2$ , com  $k = 10^{-5}\varepsilon\sigma^{-2}$ . Na direção  $y$ , a caixa de simulação tem um comprimento  $L_y = 60\sigma$ , com condições periódicas de contorno. Os resultados de simulação apresentados consideraram três valores de  $\lambda$ . As linhas tracejadas representam as soluções contínuas, Eq. (3.12). A concentração  $\rho$  é expressa em unidades de  $\sigma^{-2}$ , enquanto que a posição  $x$  está em unidades de  $\sigma$ . . . . . p. 53
- 17 Distribuições normalizadas de posição **(a)** e velocidade **(b)** para o caso onde as partículas interagem por meio do potencial de London. Cada símbolo representa a distribuição para um instante de tempo  $t$  indicado nas legendas. Os eixos foram transformados de modo a permitir o colapso das curvas. . . . . p. 55
- 18 Evolução temporal de um sistema composto por  $N = 4000$  partículas no interior de uma caixa de largura  $L_y = 20$  confinados na direção  $x$  por uma força do tipo  $-kx$ , onde  $k = 10^{-3}$ . As partículas se repelem com uma força repulsiva e de curto alcance que depende do potencial  $V_\lambda(r)$ . p. 56

- 19 Curvas de  $f(t)$  e  $\dot{f}(t)$  considerando os casos em que  $\lambda = 4$  e  $\lambda = 6$  a partir da Eq. (3.24) e da sua derivada,  $\dot{f}(t) \equiv df/dt$ . Uma vez que as partículas estão inicialmente confinadas em uma região muito estreita, utilizamos  $t_0 = 0$  para a construção das curvas, ou seja, não houve parâmetros de ajuste em nenhuma das curvas. . . . . p. 58
- 20 Distribuições de posição em diferentes instantes de tempo  $t$ . Simulamos  $N = 4000$  partículas interagindo por meio do potencial de lei de potência,  $V(r) \sim r^{-\lambda}$ , para  $\lambda = 4$  ( $q = -1$ ) e  $\lambda = 6$  ( $q = -2$ ). As curvas pretas são  $q$ -Gaussianas. Aqui utilizamos  $k = 10^{-3}$  e  $L_y = 20$ . . . . . p. 58
- 21 Distribuições de velocidade em diferentes instantes de tempo  $t$ . Simulamos  $N = 4000$  partículas interagindo por meio do potencial de lei de potência,  $V(r) \sim r^{-\lambda}$ , para  $\lambda = 4$  ( $q = -1$ ) e  $\lambda = 6$  ( $q = -2$ ). As curvas pretas são  $q$ -Gaussianas. Aqui utilizamos  $k = 10^{-3}$  e  $L_y = 20$ . . . . . p. 59
- 22 Distribuições  $\ln P(\xi)$  fixando-se uma posição  $x$  e um instante de tempo  $t$ . (a)  $t = 2,0$  e  $x = 0,8f(t)$ ; (b)  $t = 2,0$  e  $x = 0,9f(t)$ ; (c)  $t = 10,0$  e  $x = 0,8f(t)$ ; (d)  $t = 10,0$  e  $x = 0,9f(t)$ . As curvas vermelhas representam ajustes de distribuições Laplacianas,  $P(\xi) \sim e^{-|\xi|/h}$ , onde  $h$  é um parâmetro de ajuste. . . . . p. 60
- 23 Distribuições de velocidade em diferentes instantes de tempo  $t$ . Simulamos  $N = 4000$  partículas interagindo por meio do potencial de lei de potência,  $V(r) \sim r^{-\lambda}$ , para  $\lambda = 4$  ( $q = -1$ ) e  $\lambda = 6$  ( $q = -2$ ). As curvas pretas são convoluções entre  $q$ -Gaussianas e Laplacianas. Aqui utilizamos  $k = 10^{-3}$  e  $L_y = 20$ . . . . . p. 61
- 24 Perfis de densidade no estado estacionário obtidos a partir das simulações (símbolos). Simulamos  $N = 400\ 000$  partículas interagindo com o potencial de Yukawa,  $V_Y(r) = \varepsilon \exp(-r/\sigma)/r$ , em três dimensões. As partículas são confinadas por um potencial externo radial,  $U_{ext}(r) = kr^2/2$ , com resultados para três valores de  $k$ . As curvas tracejadas representam as previsões do modelo contínuo. A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-3}$ , enquanto que a posição  $r$  e a constante  $k$  estão, respectivamente, em unidades de  $\sigma$  e  $\varepsilon\sigma^{-2}$ . . . . . p. 63

25	Resultados de Monte Carlo considerando um sistema de partículas imerso em um meio com temperatura $T \neq 0$ para um sistema bidimensional ( $D = 2$ ). O potencial de interação entre as partículas é o potencial de lei de potência, $V_\lambda(r)$ , e as simulações foram realizadas para valores distintos de $\lambda$ e $T$ , sendo $T_0 = 10^{-6}$ . Pelo gráfico, observa-se que existem dois regimes diferentes, sendo um regime linear ( $\rho < 1$ ) e outro regime ( $\rho > 1$ ) seguindo uma lei de potência com expoente igual a $\lambda/D$ . Para efeitos de simulação, consideramos o valor da constante de Boltzmann igual à unidade ( $k_B = 1$ ) . . . . .	p. 65
26	Resultados de Monte Carlo considerando um sistema de partículas imerso em um meio com temperatura $T \neq 0$ para um sistema tridimensional ( $D = 3$ ). O potencial de interação entre as partículas é o potencial de lei de potência, $V_\lambda(r)$ , e as simulações foram realizadas para valores distintos de $\lambda$ e $T$ , sendo $T_0 = 10^{-6}$ . Pelo gráfico, observa-se que existem dois regimes diferentes, sendo um regime linear ( $\rho < 1$ ) e outro regime ( $\rho > 1$ ) seguindo uma lei de potência com expoente igual a $\lambda/D$ . Para efeitos de simulação, consideramos o valor da constante de Boltzmann igual à unidade ( $k_B = 1$ ) . . . . .	p. 67
27	Soluções das equações diferenciais (3.39) para três valores de temperatura para o caso onde as partículas interagem com o potencial de lei de potência, $V_\lambda(r)$ , sendo $\lambda = 4$ . As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (3.39). . . . .	p. 69
28	Comparação entre os resultados de simulação (círculos) e as soluções das equações diferenciais (3.39) para $T = 10^{-2}$ considerando o caso em que as partículas interagem com o potencial de lei de potência, $V_\lambda(r)$ , sendo $\lambda = 4$ . As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (3.39). . . . .	p. 70
29	<b>(a)</b> Representação do potencial $V_\alpha$ em função da posição $r$ com os parâmetros $\alpha = 1,2$ e $r_c = 1,0$ ; <b>(b)</b> Representação de $V_\alpha(r)$ em escala logarítmica; <b>(c)</b> Representação de $V_\alpha(r_c - r)$ em escala logarítmica. O parâmetro $\alpha$ controla a forma com que o potencial converge para zero ao se aproximar do raio de corte, $r_c$ . . . . .	p. 71
30	Ilustração das redes construídas (triangular, quadrada e hexagonal). . .	p. 72

31	Energia mínima de interação por partícula ( $U_{int}$ ) como função da concentração $\rho$ para o caso em que as partículas interagem com o potencial $V_\alpha(r)$ . A depender do valor da concentração, podemos observar que a estrutura do sistema de partículas pode assumir três arranjos distintos, a saber: estrutura triangular, estrutura quadrada, e estrutura amorfa. .	p. 72
32	Perfil de concentração para um sistema composto por $N = 15\ 000$ partículas interagindo com o potencial $V_\alpha(r)$ , onde $\alpha = 1,2$ . As partículas estão sujeitas a uma força externa dada por $-kx$ , onde $k = 10^{-3}$ . A curva representada por uma linha sólida representa o perfil de concentração a partir dos resultados de simulação, enquanto que a curva representada por uma linha tracejada representa o perfil de concentração obtido a partir do modelo contínuo. A figura ao fundo mostra uma pequena região do sistema. Nessa figura, cada círculo representa uma partícula, e a cor do círculo está relacionada com a quantidade de partículas vizinhas que cada uma tem ao seu redor. . . . .	p. 73
33	Configurações de vórtices de supercondutores do tipo 2 no estado estacionário para $N = 500$ , $N = 1500$ , $N = 2500$ e $N = 3500$ . . . . .	p. 77
34	Ilustração da implementação das condições de contorno periódicas. Para casos em que o sistema não é bidimensional, a implementação é análoga.	p. 80
35	Duas maneiras de calcular a interação entre uma partícula de interesse, representada pelo círculo amarelo da figura, e suas vizinhas, representadas pelos demais círculos: <b>a)</b> calcular todas as distâncias entre a partícula de interesse e as demais que estão no sistema; <b>b)</b> dividir o sistema em diversas células ( <i>cell-list</i> ), de modo que as distâncias calculadas se restringem apenas à região onde se encontram as partículas que estão na mesma célula da partícula de interesse (região cinza escuro) e nas células adjacentes (região cinza claro). . . . .	p. 82
36	Ilustração do cálculo de uma determinada área utilizando o método de Monte Carlo. <b>a)</b> Uma dada superfície de área $S$ contida dentro de um quadrado de lado unitário. <b>b)</b> Sorteamos $n$ pontos no interior do quadrado unitário. . . . .	p. 86



37 Rede triangular de partículas, representadas por círculos. Os vizinhos da partícula central a serem considerados no cálculo aproximado de  $C_\lambda$  estão preenchidos na figura. Sendo  $r_v$  o módulo da distância entre uma dada partícula (vértice da rede) e a partícula central, o número no interior de cada círculo representa a razão  $(r_v/\ell)$ , onde  $\ell$  é o parâmetro da rede. . p.90

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 19
1.1	Estrutura da Tese . . . . .	p. 19
1.2	Sistemas superamortecidos . . . . .	p. 20
1.3	Vórtices em supercondutores do tipo 2 . . . . .	p. 22
1.4	Plasmas complexos e coloides . . . . .	p. 23
1.5	A equação de Langevin . . . . .	p. 26
1.5.1	A equação de Langevin no limite superamortecido . . . . .	p. 28
1.6	Dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo 2 . . . . .	p. 29
1.6.1	Penetração de fluxo magnético em supercondutores do tipo 2 . . . . .	p. 29
1.6.2	Confinamento de vórtices de supercondutores do tipo 2 em uma região com temperatura . . . . .	p. 30
<b>2</b>	<b>Modelos</b>	p. 34
2.1	Modelo discreto . . . . .	p. 34
2.2	Modelo contínuo . . . . .	p. 37
2.2.1	A função $a(\rho)$ . . . . .	p. 38
2.2.2	Cálculo da energia potencial de interação . . . . .	p. 41
<b>3</b>	<b>Resultados</b>	p. 45
3.1	Estudos com temperatura $T = 0$ . . . . .	p. 45
3.1.1	Casos bidimensionais ( $D = 2$ ) . . . . .	p. 46
3.1.1.1	Potencial de London . . . . .	p. 47
3.1.1.2	Potencial de lei de potência ( $V_\lambda$ ) . . . . .	p. 51

3.1.1.2.1	Correspondência com a distribuição de Tsallis . . . . .	p. 54
3.1.1.2.2	Estudo da dinâmica do sistema . . . . .	p. 55
3.1.2	Caso tridimensional ( $D = 3$ ) . . . . .	p. 62
3.1.2.1	Potencial de Yukawa . . . . .	p. 62
3.2	Estudos com temperatura $T \neq 0$ . . . . .	p. 63
3.2.1	Determinação da concentração no estado estacionário . . . . .	p. 68
3.3	Sistemas com transição de fase estrutural . . . . .	p. 71
<b>4</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	p. 75
	<b>Apêndice A – Métodos computacionais</b>	p. 78
A.1	Dinâmica Molecular . . . . .	p. 78
A.1.1	Condições de contorno periódicas . . . . .	p. 80
A.1.2	O método <i>cell-list</i> . . . . .	p. 81
A.1.3	Integrando as equações do movimento . . . . .	p. 83
A.1.4	Distribuições não-uniformes . . . . .	p. 84
A.1.4.1	O método Box-Muller . . . . .	p. 84
A.2	Monte Carlo . . . . .	p. 85
A.2.1	O algoritmo de Metropolis . . . . .	p. 87
	<b>Apêndice B – Cálculo aproximado de <math>C_\lambda</math></b>	p. 89
	<b>Apêndice C – Artigo publicado</b>	p. 92
	<b>Referências</b>	p. 94

# 1 Introdução

A simulação computacional de partículas que constituem sistemas físicos e biomoleculares tem resultado em uma nova compreensão sobre fenômenos de escala molecular que ocorrem nesses sistemas. Entretanto, muitos processos que ocorrem em líquidos, materiais moles (*soft matter*), e sistemas biomoleculares ocorrem em escalas de tamanho e de tempo que estão muito além das capacidades atuais de simulações computacionais. Para possibilitar a investigação de tais sistemas, uma das abordagens que podemos utilizar é uma aproximação do tipo *coarse-graining* (CG) [3]. Esse tipo de abordagem é frequentemente utilizada juntamente com os métodos de simulação de Dinâmica Molecular e Monte Carlo. Embora as simulações possam atualmente ser realizadas para sistemas com um número de partículas muito grande, isto ainda pode ser muito pequeno quando comparado à escala real de sistemas biológicos [4]. De um modo geral, no tipo de abordagem CG, o problema é simplificado de modo que as partículas são substituídas por sítios de um meio contínuo que interagem entre si por meio de interações computacionalmente mais eficientes. Desse modo, torna-se possível o estudo de sistemas com escalas de comprimento e de tempo muito grandes.

Entre os variados sistemas de partículas que podemos estudar por meio de simulação computacional, destacamos os sistemas superamortecidos, que incluem a dinâmica de vórtices de supercondutores do tipo 2, de sistemas coloidais, de plasmas complexos, entre outros.

## 1.1 Estrutura da Tese

Nesse trabalho, estudaremos sistemas de partículas imersos em meios dissipativos, que, a depender do potencial de interação utilizado, podem ser aplicados a vórtices em supercondutores do tipo 2 (para o caso do potencial de London), a coloides e plasmas complexos (para o caso do potencial de interação de Yukawa), bem como a sistemas de gases diluídos, que podem ser modelados como partículas que interagem por meio de um

potencial repulsivo que depende da distância entre as partículas na forma de uma lei de potência [5]. Além dessas possíveis aplicações, nós estudamos também o caso de um potencial em que, a depender do valor da concentração, as partículas podem estabelecer-se em diferentes arranjos, como uma rede triangular ou uma rede quadrada, por exemplo.

Para esses sistemas, apresentaremos duas maneiras de descrevê-los, sendo uma forma discreta, que será explorada através de simulações computacionais, e a outra contínua, que será abordada por meio de uma descrição baseada na equação da continuidade.

Este trabalho está dividido da seguinte maneira. Na Seção 1.2 discutiremos sobre sistemas amortecidos, que podem ser, por exemplo, vórtices em supercondutores do tipo 2 (Seção 1.3), plasmas complexos e coloides (Seção 1.4). A Seção 1.5 trata sobre a equação de Langevin utilizada para descrever o nosso sistema de partículas, e a Seção 1.6 descreve alguns trabalhos já realizados sobre a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo 2. No Capítulo 2, apresentaremos os modelos discreto (Seção 2.1) e contínuo (Seção 2.2) que nos permitiram descrever os sistemas físicos abordados neste trabalho. Os resultados produzidos a partir das descrições discreta e contínua serão mostrados no Capítulo 3. No Capítulo 4 serão apresentadas as nossas conclusões e perspectivas. No Apêndice A, apresentamos uma revisão de alguns dos principais conceitos sobre os métodos computacionais necessários para o desenvolvimento desta tese.

## 1.2 Sistemas superamortecidos

Nesta seção, discutimos sobre alguns aspectos de sistemas superamortecidos, sobretudo em que situação é conveniente descrever sistemas de partículas sob essa abordagem. Por uma questão de simplicidade, consideremos uma partícula imersa em um meio dissipativo à temperatura zero em uma dimensão. O movimento dessa partícula pode ser governado pela equação

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F}{m} - \frac{\gamma}{m} \frac{dx}{dt}, \quad (1.1)$$

onde o termo  $-\gamma(dx/dt)$  descreve a força dissipativa entre o meio e a partícula,  $m$  é a massa da partícula, e  $F$  representa o somatório de todas as outras forças que eventualmente atuam sobre ela. Aplicando a transformada de Fourier em ambos os lados, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{dt} e^{ikt} dt = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} F e^{ikt} dt - \frac{\gamma}{m} \int_{-\infty}^{\infty} v(t) e^{ikt} dt, \quad (1.2)$$

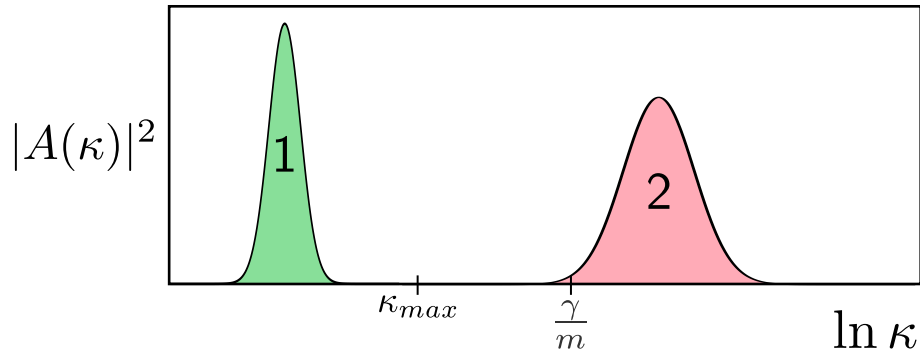


Figura 1: Esboço de  $|A(\kappa)|^2$  em função de  $\ln \kappa$ . A forma das curvas é meramente ilustrativa.

onde  $v(t) \equiv (dx/dt)$ . Definindo  $A(\kappa) \equiv (1/m) \int_{-\infty}^{\infty} F \exp(ikt) dt$ , e  $V(\kappa) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} v \exp(ikt) dt$ , e utilizando a integração por partes<sup>1</sup> para escrever a transformada de Fourier da derivada de  $v(t)$  em função de  $V(\kappa)$ , obtemos a expressão

$$-i\kappa V(\kappa) = A(\kappa) - \frac{\gamma}{m} V(\kappa). \quad (1.3)$$

Resolvendo essa equação para  $V(\kappa)$ , obtemos

$$V(\kappa) = \frac{A(\kappa)}{\frac{\gamma}{m} - i\kappa}, \quad (1.4)$$

e conseqüentemente

$$|V(\kappa)|^2 = \frac{|A(\kappa)|^2}{\left(\frac{\gamma}{m}\right)^2 + \kappa^2}. \quad (1.5)$$

Lembrando que  $A(\kappa)$  é a transformada de Fourier da equação horária da força  $F(t)$ , é razoável considerar que as frequências presentes estejam associadas a tempos característicos do problema físico. Portanto, frequências muito menores que o inverso desses tempos devem estar pouco representadas nesse espectro. Da mesma forma, o espectro não será intenso em frequências muito maiores que o inverso dos tempos característicos. A Figura 1 mostra um esboço do espectro de potência  $|A(\kappa)|^2$  para duas possíveis forças  $F(t)$ . No caso 1, o espectro de potência vai a zero em um  $\kappa_{max}$  bem menor que  $\gamma/m$  ( $\kappa \ll \gamma/m$ ), portanto podemos considerar que

$$\left(\frac{\gamma}{m}\right)^2 + \kappa^2 \approx \left(\frac{\gamma}{m}\right)^2, \quad (1.6)$$

<sup>1</sup>Nesse passo, utilizamos a propriedade da transformada de Fourier de derivadas de ordem  $n$  de uma função  $f$ :  $\mathcal{F}(f^{(n)})(\kappa) = (-i\kappa)^n \mathcal{F}(f)(\kappa)$ . Essa propriedade pode ser demonstrada utilizando a integração por partes, juntamente com o fato de que a função  $f$  e suas derivadas são integráveis.

e a equação (1.5) pode ser reescrita como

$$A(\kappa) = \frac{\gamma}{m}V(\kappa) \quad (\text{baixas frequências}). \quad (1.7)$$

Aplicando a transformada inversa, obtemos

$$F(t) = \gamma v(t), \quad (1.8)$$

Essa é a equação do movimento da partícula no limite superamortecido. Fisicamente, isto significa que se os tempos característicos com que as forças mudam são bem menores que  $(\gamma/m)^{-1}$ , os efeitos dissipativos, proporcionais à velocidade, serão mais importantes que os efeitos de inércia, proporcionais à aceleração. É importante salientar que se o espectro de potência  $|A(\kappa)|^2$  for descrito pela curva 2 da Figura 1, isto é, quando estão presentes frequências mais altas que  $\gamma/m$ , a aproximação da Eq. (1.6), não é mais válida, e os efeitos inerciais devem ser considerados. Embora essa discussão tenha sido feita para uma partícula em uma dimensão, a generalização para  $N$  partículas em mais dimensões é direta.

### 1.3 Vórtices em supercondutores do tipo 2

Existem muitos exemplos de fenômenos físicos que podem ser modelados por sistemas dissipativos de partículas repulsivas. Alexei A. Abrikosov mostrou [6] em seu trabalho que um campo magnético aplicado pode penetrar uma amostra supercondutora na forma de linhas quantizadas de fluxo magnético chamadas de *vórtices*, que possuem um núcleo onde o campo magnético é máximo [7]. Na medida em que nos afastamos do núcleo de um vórtice, o campo magnético decai em um comprimento característico conhecido como comprimento de penetração de London.

Em um material supercondutor do tipo 2, à medida que aumenta-se o campo magnético aplicado, desde que o valor do campo seja inferior a um valor crítico ( $B < B_{c1}$ ), o material expulsa as linhas de campo, fenômeno que é conhecido por efeito Meissner (Figura 2)<sup>2</sup>. Ao submeter esses materiais a um campo magnético acima da magnitude de  $B_{c1}$  e abaixo de um outro valor  $B_{c2}$ , é observado um estado misto, onde uma parte das linhas de campo penetra a amostra e outra parte é desviada. Acima do campo crítico  $B_{c2}$ , as linhas de fluxo atravessam o material, e o estado supercondutor é destruído.

Quando o material supercondutor se encontra no estado misto, em seu interior pode

---

<sup>2</sup>Esta figura está disponível em <http://www.supraconductivite.fr/>

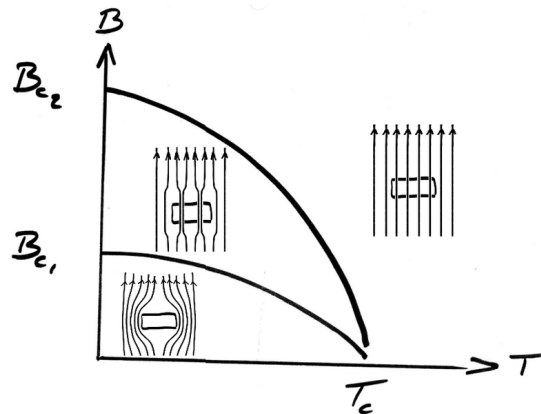


Figura 2: Diagrama de fase  $B$ - $T$  de um supercondutor do tipo 2. Abaixo de um campo crítico  $B_{c1}$ , o material é supercondutor e repele completamente o campo magnético. Entre  $B_{c1}$  e  $B_{c2}$ , o supercondutor está em um estado misto, onde os vórtices podem ser observados. No diagrama,  $T_c$  é a temperatura crítica do material supercondutor quando o campo magnético é desligado. Figura de Frédéric Bouquet e Julien Bobroff.

haver vórtices que atravessam o material na direção do campo magnético aplicado [8]. Esses vórtices (Figura 3)<sup>3</sup> podem ser considerados macroscopicamente como partículas que se repelem entre si através de um potencial de interação (potencial de London) que é descrito em termos da função de Bessel modificada de segundo tipo ( $K_0$ ) e que dissipam energia na medida em que se deslocam [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]. No limite superamortecido, a equação do movimento da partícula pode ser aproximada por uma equação de primeira ordem, Eq. (1.8). Segundo a Referência [21], H. Suhl [22] estudou a relevância da contribuição inercial para o caso de vórtices de supercondutores, e mostrou que esta é relevante somente em frequências superiores a  $10^{12}$  Hz. Além dos vórtices em supercondutores, outros exemplos interessantes de fenômenos físicos que podem ser modelados por sistemas dissipativos de partículas repulsivas são os plasmas complexos e as dispersões coloidais.

## 1.4 Plasmas complexos e coloides

O termo *plasma* representa um gás neutro contendo muitas partículas, como íons, elétrons e nêutrons. É provável que quase toda a matéria presente no universo esteja na forma de plasma. Na maioria dos casos, o plasma coexiste com partículas (partículas de poeira) muito pequenas, com dimensão da ordem de micrômetros ( $\mu\text{m}$ ), que podem estar carregadas positiva ou negativamente. A essa mistura de plasma e partículas de poeira, denominamos o plasma de poeira (ou *dusty plasma*, em inglês), que também é chamado de

<sup>3</sup>Esta figura está disponível em <http://www.unisoku.com/products/SPMSampleImage.html>



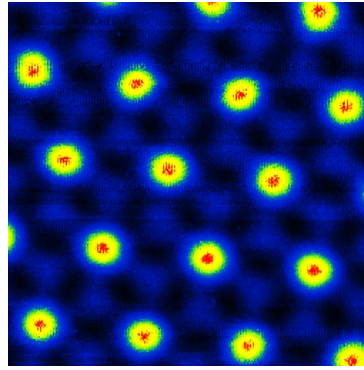


Figura 3: Imagem topográfica de uma rede triangular de vórtices  $250\text{ nm} \times 250\text{ nm}$  em um supercondutor de  $\text{NbSe}_2$ .

plasma complexo, pelo fato de que a adição dessas partículas ao plasma elevam o seu nível de complexidade [23]. A Figura 4 mostra um resultado do primeiro artigo científico [24] sobre cristalização em um *dusty plasma* obtido experimentalmente<sup>4</sup>.

Quando as partículas de plasma são deslocadas de suas posições de equilíbrio, surge um campo elétrico de modo a restaurar a neutralidade do plasma, realocando as partículas de volta às suas posições originais. Nesse processo, devido à inércia das partículas, elas ultrapassam suas posições originais e oscilam continuamente em torno de suas posições de equilíbrio. A frequência de tais oscilações depende de cada tipo de plasma, isto é, não será a mesma para elétrons, íons e grãos de poeira, por exemplo, mas dependerá da massa  $m_p$ , da densidade  $n_p$  e da carga  $q_p$  das partículas de plasma. Para um plasma de elétrons, por exemplo, os elétrons oscilam em torno dos íons com a frequência dada por  $\omega_{pe} = \sqrt{(4\pi n_e q_e^2 / m_e)}$  [23], o que representa uma frequência da ordem de  $9 \cdot 10^3 n_e^{1/2}$  Hz, acima da qual os efeitos de inércia passam a ser relevantes.

---

<sup>4</sup>Essa figura foi retirada da referência [25].



Figura 4: Primeiro cristal de plasma obtido (por Thomas *et al.*). A figura mostra uma vista de topo da luz do laser refletida por um cristal de plasma de uma camada.

Dispersões coloidais, ou simplesmente coloides, consistem em partículas mesoscópicas, com tamanhos tipicamente da ordem entre nanômetros (nm) e micrômetros ( $\mu\text{m}$ ), que ficam suspensas em um fluido solvente. Coloides estão presentes em tintas, no leite, em produtos cosméticos, entre outros [26]. A Figura 5 mostra uma dispersão coloidal composta por partículas de acrílico (PMMA) imersas em um hidrocarboneto<sup>5</sup>. Nessas figuras, é possível observarmos que a disposição das partículas tende a ser uma estrutura triangular.

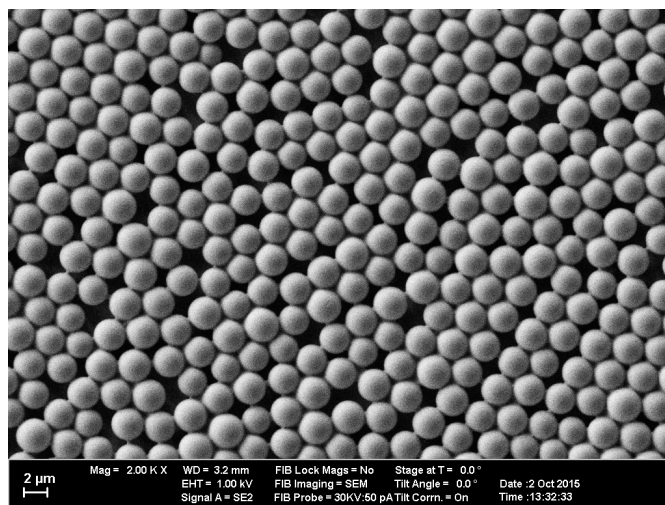


Figura 5: Dispersão coloidal composta por partículas de acrílico (PMMA) imersas em um hidrocarboneto.

<sup>5</sup>Esta figura está disponível em <http://www.mcat.de>.

Uma ilustração bem simples que mostra algumas diferenças entre coloides e plasmas complexos é apresentada na Figura 6, que foi adaptada de uma figura da Referência [26]. Em ambos os casos, as trajetórias individuais de cada partícula podem ser acompanhadas no tempo e no espaço, uma vez que o tempo característico que leva para a partícula se locomover uma distância da ordem do seu tamanho é da ordem de segundos, permitindo a utilização de técnicas experimentais de microscopia de vídeo. Além disso, nos dois casos, as partículas podem ser facilmente manipuladas em diferentes formas, o que facilita que experimentos possam ser realizados no intuito de se investigar processos gerais em líquidos ou sólidos [26, 27, 28, 29]. Essas características fazem com que coloides e plasmas complexos sejam ideais para se investigar comportamentos coletivos de sistemas. A interação entre as partículas em ambos os casos é geralmente descrita como uma força repulsiva que é escrita em função do potencial de Yukawa [30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37].

Os estudos da dinâmica em sistemas coloidais na presença de uma força externa são importantes para o desenvolvimento de dispositivos como aqueles empregados no processo de migração de partículas sob a influência de um campo elétrico (eletroforese), e também no processo de eletrosmose [7, 38], por exemplo. Tais dispositivos podem ser utilizados na separação de proteínas e também do DNA [7].

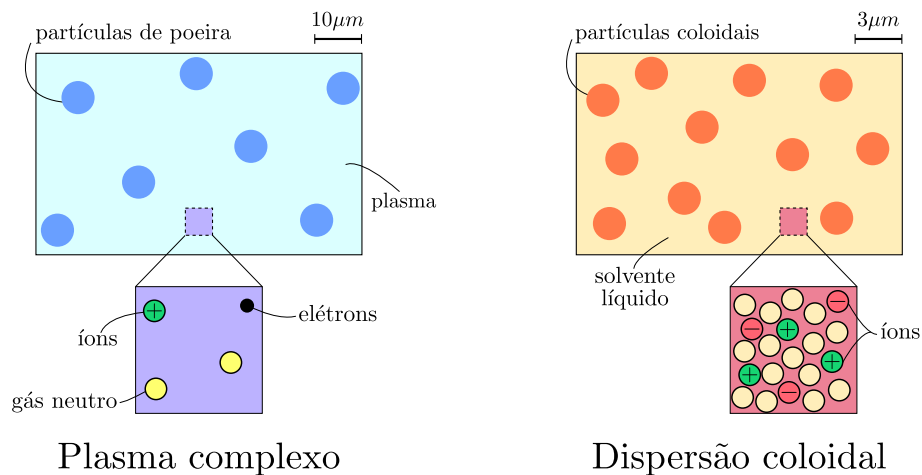


Figura 6: Ilustração esquemática mostrando algumas diferenças entre plasmas complexos e dispersões coloidais. À esquerda, as partículas de poeira estão cercadas por um gás diluído fracamente ionizado. À direita, as partículas coloidais estão no interior de um solvente contendo íons.

## 1.5 A equação de Langevin

Seja uma partícula de massa  $m$  imersa em um fluido composto de muitas partículas muito mais leves e menores do que a partícula imersa, como ilustra a Figura 7. Devido às

constantemente colisão aleatória que ocorrem a todo instante entre as partículas, o movimento da partícula grande é muito mais lento do que o movimento dos componentes do fluido. Isto é, em uma mistura composta de partículas suspensas ou dispersas em um líquido, o

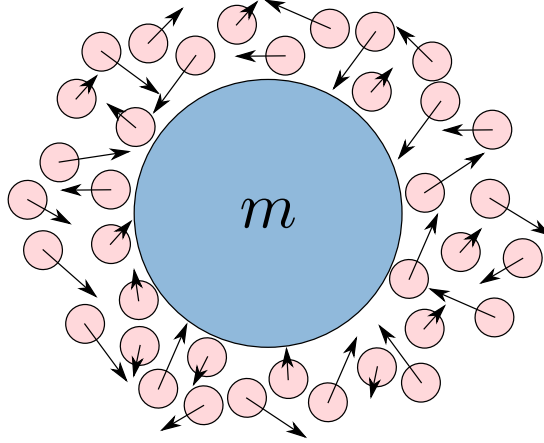


Figura 7: Ilustração de uma partícula Browniana de massa  $m$  imersa em um fluido composto de partículas muito mais leves e menores do que a partícula suspensa.

tempo característico do movimento das moléculas do solvente é consideravelmente diferente do tempo característico do movimento das partículas suspensas. Experimentalmente falando, ao observar tal sistema físico, veríamos somente o movimento ativo das moléculas do solvente em torno da partícula suspensa. Desse modo, estes sistemas são difíceis de serem tratados numericamente utilizando a forma tradicional do método de Dinâmica Molecular, e portanto diz-se que esse método é claramente não-realista como uma técnica de simulação para esses casos [39].

Uma abordagem que pode ser utilizada para contornar este problema visa analisar as moléculas do líquido solvente como um meio contínuo, em vez de se investigar o movimento de cada partícula do líquido. Nesse caso, a influência das moléculas do líquido é incluída nas equações do movimento das partículas suspensas como um termo de força aleatória. É possível observar esse movimento quando grãos de pólen estão suspensos em água, como observou o botânico Robert Brown [40] por volta de 1827. Essa abordagem, chamada de Dinâmica Browniana, permite que simulemos o movimento aleatório de partículas suspensas (partículas Brownianas) que é induzido pelas moléculas do líquido. Se uma suspensão é significativamente diluída a ponto de que o movimento de cada partícula possa ser considerado independente, o movimento dessas partículas Brownianas é governado pela equação de Langevin [39, 41],

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} - \gamma \mathbf{v} + \boldsymbol{\eta}(t), \quad (1.9)$$

onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade da partícula suspensa. O termo  $-\gamma\mathbf{v}$  representa a força viscosa que as partículas experimentam devido ao solvente, onde  $\gamma$  é chamado de coeficiente de fricção e depende da viscosidade do meio<sup>6</sup>. O termo  $\mathbf{F}$  representa uma força externa adicionada ao sistema, e o termo  $\boldsymbol{\eta}(t)$  representa o termo de força aleatória devido ao movimento das moléculas de solvente (agitação térmica), que possui as propriedades

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \eta_i^2(t) \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t - t') \quad (1.10)$$

para cada uma das componentes  $\eta_i(t)$  da força aleatória. Isto significa que o tempo de correlação é praticamente zero, isto é, muito menor do que a escala de tempo física. No movimento Browniano, o tempo de correlação para a força é da ordem de  $10^{-20}$  s (tempo de colisão molecular). Isso é certamente muito menor do que a escala de tempo observacional. Portanto, para fins práticos, uma partícula Browniana é influenciada por ruídos brancos [42].

É interessante comentar que a equação diferencial (1.9) é equivalente à equação utilizada para a corrente (no lugar da velocidade) no caso de um circuito elétrico RL, onde a massa  $m$  passa a ser a indutância elétrica ( $L$ ), e o coeficiente  $\gamma$  passa a ser equivalente à razão  $R/L$ , onde  $R$  é a resistência elétrica. No caso elétrico, o análogo da força  $\mathbf{F}$  passa a ser uma voltagem variável devido ao ruído térmico [42].

### 1.5.1 A equação de Langevin no limite superamortecido

Em sistemas coloidais, assim como nos outros sistemas mencionados de nosso interesse, a frequência de vibração das partículas é pequena de modo que os efeitos inerciais ( $m d\mathbf{v}/dt$ ) sejam negligenciados quando comparados à contribuição viscosa ( $\gamma\mathbf{v}$ ), conforme a discussão realizada na Seção 1.2 sobre sistemas superamortecidos. Sendo assim, podemos negligenciar o termo que contém a derivada na velocidade, isto é,  $m d\mathbf{v}/dt \approx 0$ . As velocidades de cada partícula suspensa atinjam o equilíbrio antes de sua posição ter mudado uma distância comparável ao seu tamanho. Desse modo, a partícula terá sua velocidade aproximadamente constante no decorrer desse intervalo de tempo (tempo de relaxação) [43]. Nessas situações, dizemos que as partículas imersas obedecem a uma dinâmica superamortecida e a equação do movimento para a  $i$ -ésima partícula se torna

$$\gamma\mathbf{v}_i = \mathbf{F}_i + \boldsymbol{\eta}_i(t). \quad (1.11)$$

---

<sup>6</sup>Para uma partícula esférica de diâmetro  $d$ , temos que  $\gamma = 3\pi\eta d$  (lei de Stokes), onde  $\eta$  é a viscosidade do líquido solvente [39].

## 1.6 Dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo 2

No intuito de descrever o comportamento desses sistemas, sobretudo a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo 2, trabalhos anteriores [9, 44, 1, 2, 45] empregaram uma aproximação do tipo CG que tem como finalidade descrever tais sistemas através de uma função  $\rho(\mathbf{r}, t)$  que nos fornece a concentração de partículas em cada ponto do sistema. Nesse tipo de abordagem, as partículas são substituídas por uma descrição contínua da densidade, definida como a densidade média de partículas. A vantagem de se fazer uma abordagem desse tipo é que, a princípio, podemos estudar um sistema com um número suficientemente grande de partículas a ponto de que somente a descrição contínua seja viável, uma vez que nessa situação uma simulação numérica poderia necessitar de um custo computacional muito elevado.

Assumindo que a concentração  $\rho$  em torno de uma partícula é constante, e desconsiderando correlações partícula-partícula, poderíamos escrever a energia potencial de interação  $U_{int}$  na região em torno da partícula como

$$U_{int} \approx \frac{\rho}{2} \int dv V(r), \quad (1.12)$$

onde a integral é feita em todo o volume e  $V(r)$  é o potencial repulsivo de interação partícula-partícula. Sendo a integral acima uma constante, então  $U_{int} \propto \rho$ . Na Seção (2.2.1), veremos que a força de interação entre as partículas ( $\mathbf{f}_{int}$ ) pode ser expressa por  $\mathbf{f}_{int} = -a(\rho)\nabla\rho$ , onde  $a(\rho)$  é dado pela equação (2.15),

$$a(\rho) = 2\frac{dU_{int}}{d\rho} + \rho\frac{d^2U_{int}}{d\rho^2}.$$

Desse modo, considerando  $U_{int}$  dado pela equação (1.12), temos que  $a$  é igual uma constante, uma vez que nesse caso  $dU_{int}/d\rho = (1/2) \int dv V(r)$  e  $d^2U_{int}/d\rho^2 = 0$ , isto é,  $\mathbf{f}_{int} = -a\nabla\rho$ . A seguir, comentaremos brevemente sobre alguns aspectos de trabalhos anteriores que utilizaram modelos contínuos similares à abordagem que tratamos aqui, e que contribuíram enormemente para que nós pudéssemos dar continuidade ao estudo nesse campo de pesquisa.

### 1.6.1 Penetração de fluxo magnético em supercondutores do tipo 2

Zapperi *et al.* [1] estudaram a dinâmica de vórtices interagentes em materiais supercondutores cuja abordagem contínua descreve a evolução da concentração  $\rho$  por intermédio

da equação

$$\Gamma \frac{d\rho}{dt} = \nabla \cdot (a\rho \nabla \rho - \rho \mathbf{F}_c) + k_B T \nabla^2 \rho, \quad (1.13)$$

onde o termo  $a\rho \nabla \rho$  ( $a$  constante) representa a corrente de interação entre as partículas, e  $\mathbf{F}_c$  representa uma força externa entre as partículas e centros fixadores, que atuam como uma resistência ao movimento dos vórtices, enquanto que o último termo está ligado à temperatura  $T$  do meio. Observe que o termo relacionado à força entre as partículas insere uma não-linearidade ao termo difusivo da equação, uma vez que o coeficiente de difusão ( $a\rho$ ) depende da concentração  $\rho$ . Eles mostraram numericamente que a frente de penetração do fluxo magnético, bem como o perfil de densidade dos vórtices obedecem a uma lei de escala. Os resultados obtidos que mostram o colapso das curvas para a frente de penetração e para o perfil de concentração são apresentados na Figura 8.

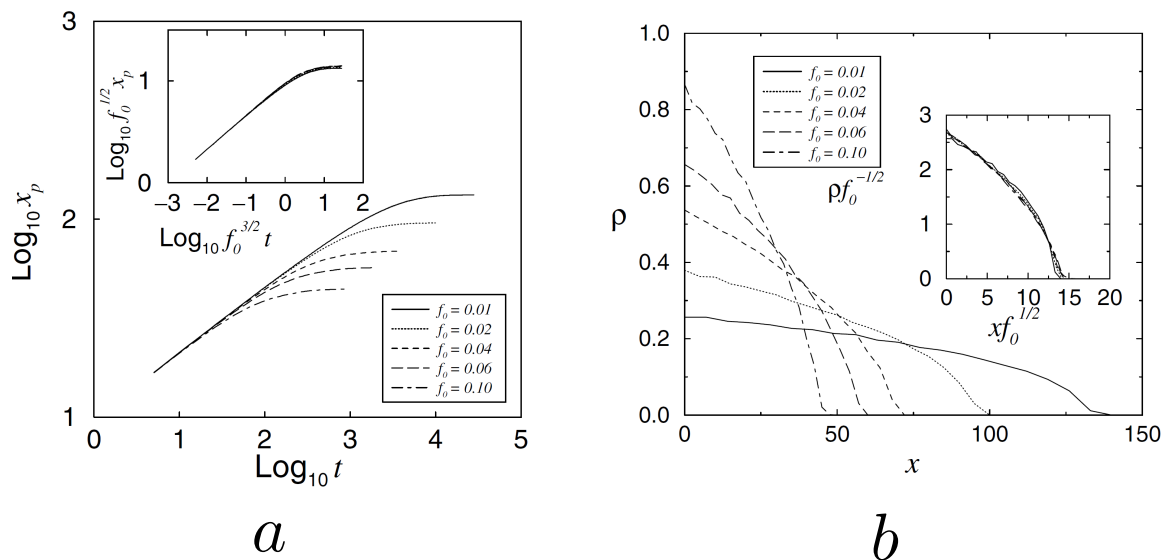


Figura 8: **(a)** Posição média da frente de penetração em função do tempo; **(b)** Perfis de densidade para diferentes valores de  $f_0$ . Os painéis internos dos gráficos mostram os colapsos das curvas obtidas para diferentes valores de  $f_0$ , que está relacionado à intensidade da força externa. Essas figuras foram extraídas dos resultados de simulação da Referência [1].

### 1.6.2 Confinamento de vórtices de supercondutores do tipo 2 em uma região com temperatura

Andrade *et al.* [44, 2] realizaram o estudo de partículas que modelam o movimento de vórtices em supercondutores do tipo 2 em um meio superamortecido. Em meio aos muitos aspectos abordados nesse trabalho, existe um em especial que se assemelha muito com o que pretendemos estudar aqui: o perfil de concentração das partículas no estado

estacionário, cuja descrição contínua é dada por [44]

$$\gamma \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ a \rho \frac{\partial \rho}{\partial x} + k x \rho \right] + k_B T \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}. \quad (1.14)$$

Nesse sistema, as partículas, além de interagirem entre si, sofrem a ação de uma força externa harmônica do tipo  $-kx$  que confina as partículas na direção do centro da célula de simulação. Considerando a situação onde  $k_B T \ll a$  (baixas temperaturas), a equação diferencial acima pode ser reescrita como

$$\gamma \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ a \rho \frac{\partial \rho}{\partial x} + k x \rho \right], \quad (1.15)$$

e, no estado estacionário, se torna

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ a \rho \frac{\partial \rho}{\partial x} + k x \rho \right] = 0, \quad (1.16)$$

o que significa que o termo entre colchetes deve ser uma constante relacionada à corrente de partículas. Uma vez que não há fluxo de partículas atravessando as bordas do sistema, essa constante é igual a 0, e portanto temos que

$$\int a \, d\rho = -k \int x \, dx. \quad (1.17)$$

Resolvendo essas integrais, pode-se encontrar o perfil de concentração  $\rho(x)$  no estado estacionário,

$$\rho(x) = \frac{k}{2a} (x_e^2 - x^2) \quad |x| < x_e, \quad (1.18)$$

onde  $x_e$  pode ser obtido por uma condição de normalização [2]. O perfil de densidade obtido para este caso está apresentado na Figura 9. Observe que o perfil de densidade assume, necessariamente, a forma do potencial externo, que no caso é parabólico. Isto acontece porque  $a$  é um termo constante na equação a ser integrada, Eq. (1.17). Para obter a curva teórica (representada pela linha sólida da figura), é necessário o auxílio de um ajuste parabólico de modo a encontrar o valor de  $a$  que se ajuste melhor ao conjunto de pontos oriundos da simulação computacional. Além disso, neste modelo, o valor teórico de  $a$  é dado por [44]

$$a \equiv -\frac{1}{2} \int \int r \, dr \, d\theta \, \mathbf{r} \cdot \nabla V(r), \quad (1.19)$$

em que  $V(r)$  é o potencial de interação entre as partículas. Para o caso de interação entre vórtices de supercondutores do tipo 2, temos que  $-\nabla V(r) = K_1(r) \hat{\mathbf{r}}$ , onde  $K_1(r)$  é a função modificada de Bessel de segundo tipo. Substituindo na equação (1.19), encontramos que  $a = 2\pi$ .



Para este caso de temperatura nula, foi observado que o perfil de densidade assume a forma de uma  $q$ -Gaussiana,

$$G_q(x) \sim [1 - \beta(1 - q)x^2]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (1.20)$$

que para  $q = 0$  é equivalente a uma parábola.

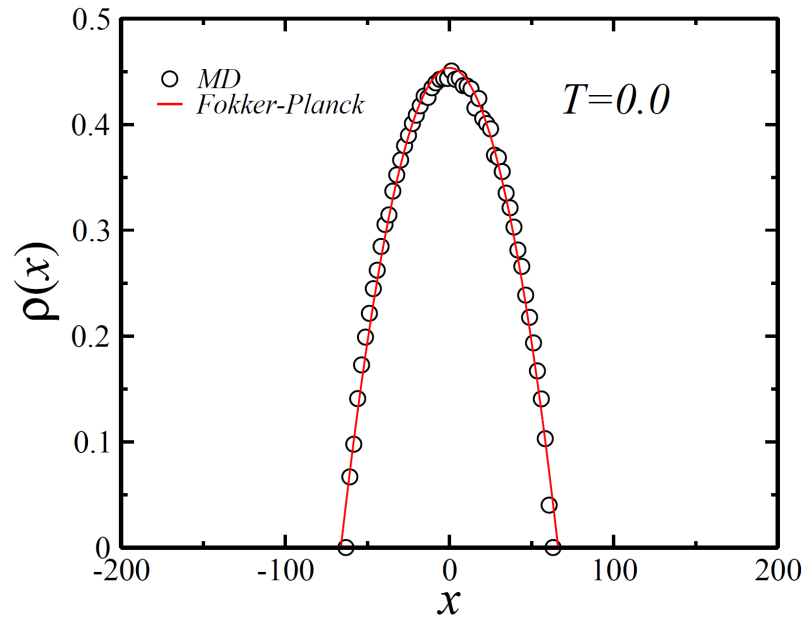


Figura 9: Comparação entre o perfil de densidade de partículas no estado estacionário obtido por meio de simulação (símbolos) e o resultado teórico (linhas sólidas) na situação de temperatura nula ( $T = 0$ ). A curva foi obtida com o auxílio de um ajuste dos dados numéricos, que indicou o valor do parâmetro  $a = 4,82$ . Figura retirada da Referência [2].

Além disso, eles também estudaram o comportamento do perfil de concentração no estado estacionário para o regime de  $T \neq 0$ . Para estes casos, foi observado que para baixas temperaturas ( $k_B T \ll a$ ), o perfil de concentração é descrito por uma  $q$ -Gaussiana com  $q = 0$ , e que para altas temperaturas ( $k_B T \gg a$ ), o perfil de densidade assume a forma de uma Gaussiana, como mostram os resultados da Figura 10. Entretanto, é importante frisar que, neste último caso, sendo a temperatura maior que a temperatura crítica, o estado supercondutor é destruído.

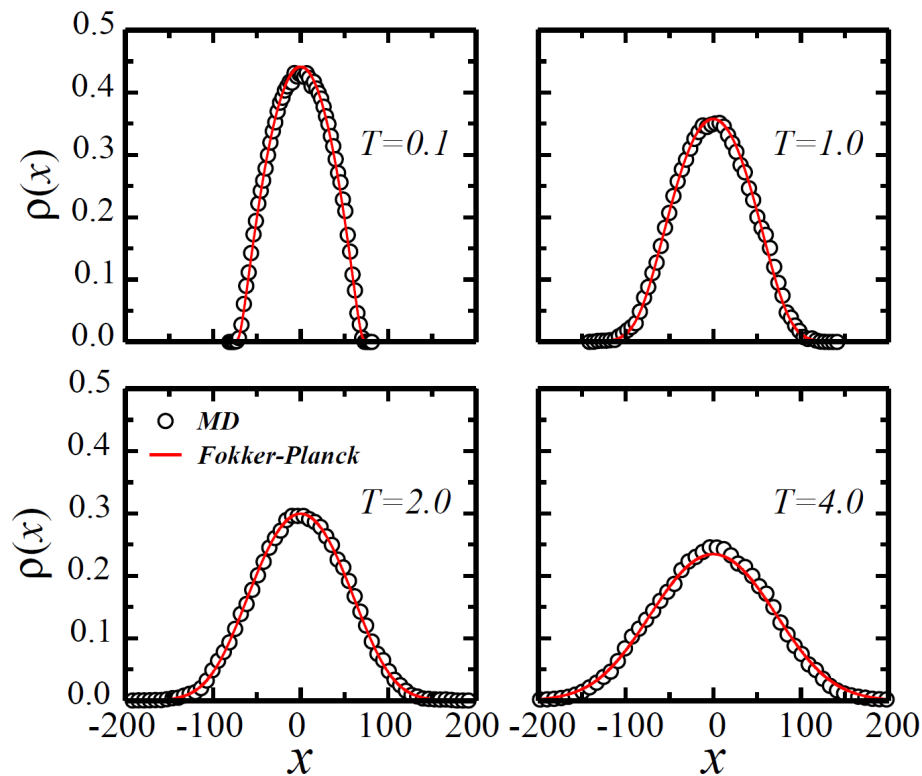


Figura 10: Comparação entre o perfil de densidade de partículas no estado estacionário obtido por meio de simulação (símbolos) e o resultado teórico (linhas sólidas). O parâmetro das curvas representadas pelas linhas sólidas foi o mesmo obtido no ajuste do perfil de densidade da Figura 9 ( $T = 0$ ). Figura retirada da Referência [2].

Para ambos os casos ( $T = 0$  e  $T \neq 0$ ), as curvas teóricas foram obtidas com o auxílio de um ajuste dos dados numéricos, que indicou o valor do parâmetro  $a = 4,82$ , que representa um erro relativo de aproximadamente 23,3%. Este valor de  $a$  foi o mesmo utilizado para todas as curvas das Figuras 9 e 10. Adicionalmente ao estudo do perfil de concentração no estado estacionário, o trabalho também aborda dois regimes de difusão associados aos regimes de baixa temperatura (difusão anômala) e alta temperatura (difusão normal).

## 2 Modelos

Neste capítulo, apresentamos duas formas diferentes de analisar os sistemas físicos que desejamos estudar, e as relacionamos de forma que uma possa dar uma contribuição à outra. Na primeira abordagem, tratamos o sistema de forma discreta, isto é, estudamos o movimento de cada partícula constituinte do sistema, baseando-se na equação de Langevin no limite superamortecido. Na segunda, tratamos o sistema de forma contínua, ou seja, estudamos o sistema sem nos preocuparmos com a dinâmica individual de cada partícula, mas com um comportamento médio de todo o sistema, baseando-se na equação da continuidade, que descreve a evolução temporal da densidade média de partículas do sistema.

### 2.1 Modelo discreto

O objetivo do modelo discreto é proporcionar a descrição de um sistema de  $N$  partículas interagentes imersas em um meio dissipativo, utilizando o método de Dinâmica Molecular para realizar as simulações. As partículas interagem entre si através de uma força repulsiva e de curto alcance, além de estarem submetidas a uma força externa.

Uma descrição discreta para tais sistemas de partículas interagentes é matematicamente expressa pela equação de Langevin no limite superamortecido,

$$\gamma \mathbf{v}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + \sum_e \mathbf{F}_e + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_i(t), \quad (2.1)$$

onde  $\mathbf{v}_i$  é a velocidade da partícula  $i$ . O primeiro somatório leva em conta a interação partícula-partícula, sendo então igual à força resultante interna  $\mathbf{F}_{int}^i$  sobre a  $i$ -ésima partícula,  $\mathbf{F}_{int}^i \equiv \sum_j \mathbf{F}_{ij}$ . O segundo somatório leva em conta todas as possíveis influências externas ao sistema, como a ação de um campo elétrico ou gravitacional, por exemplo. Sendo assim, essa contribuição é a força resultante externa  $\mathbf{F}_{ext}^i$  sobre a  $i$ -ésima partícula,  $\mathbf{F}_{ext}^i \equiv \sum_e \mathbf{F}_e$ . Como mencionado na Seção 1.5, o termo  $\gamma \mathbf{v}_i$  representa a força

dissipativa de arraste devido ao meio em que as partículas se encontram imersas (lei de Stokes), e o termo dependente de  $\boldsymbol{\eta}_i(t)$  leva em conta uma flutuação térmica (ruído), e também depende da temperatura  $T$  do meio onde as partículas se encontram imersas.

A Figura 11 mostra um exemplo de um resultado no estado estacionário para as posições  $x$  e  $y$  de um sistema bidimensional obtidas por meio da solução numérica (Dinâmica Molecular) das equações (3.20) com  $T = 0$  para cada partícula, onde está presente uma força de confinamento na direção  $x$ , dada por  $\mathbf{F}_{ext}^i = -k\mathbf{x}_i$ , onde  $k$  é constante. Além disso, neste exemplo, as partículas interagem entre si através de uma força derivada do potencial de London, que modela a interação macroscópica entre vórtices de supercondutores do tipo 2. Essa força tem um curto alcance definido pelo raio de corte ( $r_c$ ). Isto significa que, ao redor de uma partícula qualquer, só é contabilizada a interação com as outras partículas que estão a uma distância de até  $r_c$  da primeira.

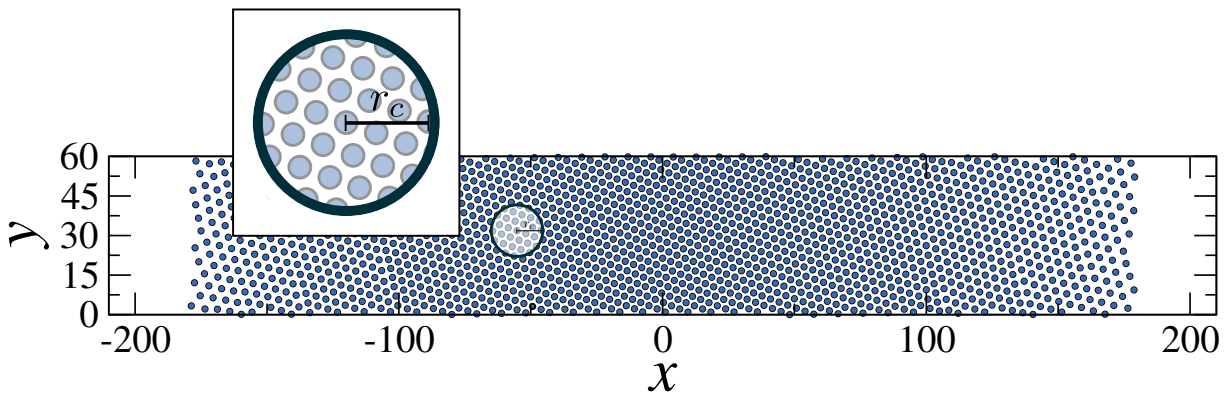


Figura 11: Configuração de partículas no estado estacionário. As partículas interagem entre si através do potencial de London, além de serem atraídas para a região de  $x = 0$  por meio de uma força de confinamento do tipo  $-kx$ . O painel interno da figura mostra como a variação da densidade é localmente muito pequena dentro do raio de interação ( $r_c$ ) da força de interação.

Note que o confinamento provoca a formação de um gradiente de densidade, onde a densidade atinge o valor máximo na região em torno de  $x = 0$ . Embora exista esse gradiente de concentração na configuração de partículas, podemos considerar que a densidade varia muito lentamente dentro do raio de interação da força, como se pode observar no painel interno da figura. Note ainda que, apesar de existir um confinamento, as partículas se estabelecem em uma estrutura organizada, porém não-homogênea. Isto ocorre devido à forma da interação entre elas. Neste exemplo, onde foi utilizado o potencial de interação de London, as partículas se organizariam em uma rede triangular (configuração de concentração constante) se não existisse a força de confinamento. Desse modo, observamos nessa figura os efeitos de cada força: o efeito do gradiente de concentração, causado pela força externa, e o efeito de organização entre as partículas, causado pela força de interação repulsiva de curto alcance que depende do potencial de London. A partir da configuração de posições de cada partícula, podemos utilizar um método não-paramétrico (*Kernel Density Estimation* ou KDE) [46] que nos permite obter a densidade como uma função da posição a partir das posições  $x_i$  de cada uma das  $N$  partículas que compõe o sistema.

## 2.2 Modelo contínuo

Para estudar o comportamento de sistemas superamortecidos, podemos utilizar uma abordagem visando a descrição do sistema através de uma função contínua  $\rho(\mathbf{r}, t)$  que fornece em um instante de tempo  $t$  a concentração média de partículas em cada posição  $\mathbf{r}$  do sistema. Essa abordagem tem uma grande vantagem, pois ela permite que descrevamos um sistema com um número de partículas grande o suficiente ao ponto de que um experimento computacional seja impraticável. Uma vez que o número de partículas é conservado, podemos partir da equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t), \quad (2.2)$$

onde  $\mathbf{J} \equiv \rho \mathbf{v}$  e as velocidades das partículas agora são representadas pelo campo vetorial  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ , que deve ser proporcional ao campo de força total  $\mathbf{f}_1$  ( $\mathbf{f}_1 = \gamma \mathbf{v}$ ) que atua sobre uma partícula nas proximidades de  $\mathbf{r}$ . Sendo  $\mathbf{f}_{int}$  e  $\mathbf{f}_{ext}$  as contribuições interna e externa do campo de força  $\mathbf{f}_1$ , respectivamente, temos que  $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext}$ . É importante salientar uma sutil diferença entre  $\mathbf{F}_i$  da equação (1.11) e  $\mathbf{f}_1$ . Enquanto que a primeira é a força resultante sobre uma partícula (associada à descrição discreta) do sistema, a segunda é uma forma contínua, ou seja, é o campo de força que atua em uma partícula que se encontra nas proximidades de  $\mathbf{r}$  devido a outras partículas,  $\mathbf{f}_{int}$ , e às forças externas,  $\mathbf{f}_{ext}$ . Reescrevendo a equação da continuidade, temos que

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}_1) = -\nabla \cdot [\rho(\mathbf{f}_{ext} + \mathbf{f}_{int})]. \quad (2.3)$$

O campo da força externa,  $\mathbf{f}_{ext}(\mathbf{r})$ , é dado simplesmente em função do potencial externo, ou seja,

$$\mathbf{f}_{ext}(\mathbf{r}) = -\nabla U_{ext}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

uma vez que só deve depender da posição onde se encontram as partículas. Para o campo da força de interação, podemos supor que este deva depender da concentração de partículas, bem como de seu gradiente, isto é,  $\mathbf{f}_{int} = \mathbf{f}_{int}(\rho, \nabla \rho)$ .

Devido à presença de forças externas, ou fora do estado de equilíbrio mecânico, partículas repulsivas podem formar configurações não-homogêneas, como pudemos observar na Figura 11. Desse modo, podemos esperar que a energia  $U_1$  de uma partícula dependa da concentração de partículas e de suas derivadas. Analogamente à força  $\mathbf{f}_1$ , podemos expressar  $U_1 = U_{int} + U_{ext}$ , onde  $U_{int}$  e  $U_{ext}$  são as contribuições das energias provenientes das forças de interação e das forças externas, respectivamente, para uma

partícula que se encontra no meio contínuo. Nas condições em que a força de interação tem um raio de alcance finito, e onde  $\nabla\rho$  varia muito lentamente, o suficiente para ser considerado constante dentro do raio de atuação da força, podemos considerar a expansão da concentração  $\rho$  até primeira ordem, ou seja,  $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{0}, t) + \mathbf{r} \cdot \nabla\rho(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}}$ . Além disso, para potenciais repulsivos, o estado de mínima energia é sempre um estado de concentração constante. Portanto, qualquer contribuição de  $\nabla\rho$  na energia  $U_{int}$  deve ser de segunda ordem, uma vez que a força resultante (contribuição de primeira ordem em  $U_{int}$ ) em um estado de concentração constante é nula. Desse modo, podemos expressar que  $U_{int} = U_{int}(\rho)$  em primeira ordem. A energia  $U_{ext}$ , por outro lado, só depende da posição nos casos de nosso interesse ( $U_{ext} = U_{ext}(\mathbf{r})$ ), onde geralmente a força externa é uma força de confinamento parabólico, isto é,  $U_{ext} = kx^2/2$ . Desse modo, podemos escrever

$$U_1 = U_1(\rho, \mathbf{r}) = U_{int}(\rho) + U_{ext}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

### 2.2.1 A função $a(\rho)$

Em nossa descrição contínua, tomemos uma região  $dv$  do espaço que contém um número de partículas dado por  $\rho dv$ . Sendo assim, a energia potencial total  $U_T$  é dada pela integral

$$U_T = \int_v dv \rho U_1(\rho, \mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Derivando essa expressão com respeito ao tempo, temos que

$$\frac{dU_T}{dt} = \int_v dv \frac{\partial\rho}{\partial t} \left( U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial\rho} \right). \quad (2.7)$$

Utilizando a equação da continuidade,  $\partial\rho/\partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}$ , temos que

$$\frac{dU_T}{dt} = - \int_v dv \left( U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial\rho} \right) \nabla \cdot \mathbf{J}. \quad (2.8)$$

Utilizando a identidade  $W(\nabla \cdot \mathbf{J}) = \nabla \cdot (W\mathbf{J}) - \mathbf{J} \cdot \nabla W$ , onde  $W$  cumpre o papel do termo que está entre parênteses, a equação anterior pode ser reescrita como

$$\frac{dU_T}{dt} = - \int_v dv \nabla \cdot \left[ \left( U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial\rho} \right) \mathbf{J} \right] + \int_v dv \mathbf{J} \cdot \nabla \left( U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial\rho} \right). \quad (2.9)$$

Pelo teorema de Gauss, a primeira integral representa o fluxo de energia que atravessa as bordas do sistema. Uma vez que não há fluxo de corrente de partículas  $\mathbf{J}$  atravessando a borda do sistema, essa contribuição é nula, o que resulta em

$$\frac{dU_T}{dt} = \int_v dv \mathbf{J} \cdot \nabla \left( U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial\rho} \right). \quad (2.10)$$

Por outro lado, a potência dissipada pela força total ( $P_T$ ) é dada pelo negativo da variação da energia potencial total, isto é,  $P_T = \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{v}_i = -dU_T/dt$ , que na forma contínua é escrita como

$$\frac{dU_T}{dt} = - \int_v dv \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}_1 = - \int_v dv \mathbf{J} \cdot \mathbf{f}_1. \quad (2.11)$$

Comparando as equações (2.10) e (2.11), verificamos que

$$\mathbf{f}_1 = -\nabla \left( U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right), \quad (2.12)$$

uma vez que a integral é feita em um volume arbitrário. Uma vez que  $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext}$  e  $U_1 = U_{int} + U_{ext}$ , temos que

$$\mathbf{f}_{int} - \nabla U_{ext} = -\nabla \left( U_{int} + U_{ext} + \rho \frac{\partial U_{int}}{\partial \rho} + \rho \frac{\partial U_{ext}}{\partial \rho} \right), \quad (2.13)$$

onde utilizamos a equação (2.4). Sendo  $U_{int} = U_{int}(\rho)$ ,  $U_{ext} = U_{ext}(\mathbf{r})$  e  $\partial U_{ext}/\partial \rho = 0$ , chegamos a

$$\mathbf{f}_{int} = - \left( 2 \frac{dU_{int}}{d\rho} + \rho \frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2} \right) \nabla \rho. \quad (2.14)$$

Definindo  $a(\rho)$  como sendo a razão entre os módulos da força interna e do gradiente de concentração, isto é,

$$a(\rho) = 2 \frac{dU_{int}}{d\rho} + \rho \frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2}, \quad (2.15)$$

temos que  $\mathbf{f}_{int} = -a(\rho) \nabla \rho$ , e a equação da continuidade, Eq. (2.3), fica expressa na forma

$$\gamma \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho (\mathbf{f}_{ext} - a(\rho) \nabla \rho)]. \quad (2.16)$$

É interessante notar que, na ausência de forças externas ( $f_{ext} = 0$ ), a equação (2.16) é uma equação de difusão,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot [D'(\rho, \mathbf{r}) \nabla \rho(\mathbf{r}, t)], \quad (2.17)$$

sendo o coeficiente de difusão  $D'$  da equação (2.17) neste caso igual a  $a(\rho)\rho/\gamma$ . Portanto, nesta circunstância, temos uma equação de difusão não-linear, uma vez que o coeficiente de difusão não é constante. A depender de como se comporte com relação à concentração, a função  $a(\rho)$  pode exercer um papel de introduzir mais não-linearidades à equação que governa o modelo contínuo, Eq. (2.16).

No Capítulo 1, foi comentado brevemente sobre a aproximação de que a energia de interação seja dada por  $U_{int} \approx (\rho/2) \int dv V(r)$ , ou, mais explicitamente,

$$U_{int} \approx \frac{\rho}{2} \int_v dv V(r) = \rho \frac{\Omega_D}{2} \int_0^\infty dr r^{D-1} V(r), \quad (2.18)$$



onde  $V(r)$  é o potencial repulsivo de interação partícula-partícula e  $D$  é a dimensionalidade do sistema. Em duas dimensões ( $D = 2$ ),  $\Omega_2 = 2\pi$  é o ângulo compreendido por uma circunferência, enquanto que em três dimensões ( $D = 3$ )  $\Omega_3 = 4\pi$  é o ângulo sólido de uma esfera. Substituindo essa aproximação na equação (2.14), temos que

$$\mathbf{f}_{int} \approx -\nabla\rho \Omega_D \int_0^\infty dr r^{D-1} V(r), \quad (2.19)$$

que está de acordo com a forma proposta em [1] para um sistema bidimensional. Isto é, substituindo  $V(r)$  pelo potencial de London,  $V(r) \sim K_0(r)$  e  $D = 2$ , temos que  $\mathbf{f}_{int} \approx -2\pi\nabla\rho$ . Nesse caso, a integral presente na equação (2.19) é igual a uma constante e, conseqüentemente, a função  $a(\rho)$  também é constante, isto é,  $\mathbf{f}_{int} = -a\nabla\rho$ . Esse resultado, no entanto, pode levar a uma consequência não-física devido à omissão de correlações partícula-partícula. Mostraremos a seguir que o resultado da equação (2.19) é uma boa aproximação somente em algumas condições.

Para estudar os efeitos de correlações locais em uma situação que gere uma consequência imprevista fisicamente, podemos estudar, por exemplo, interações que são escritas na forma de uma lei de potência, ou seja,

$$V_\lambda(r) = \varepsilon \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{-\lambda}. \quad (2.20)$$

Se  $\lambda$  é grande o suficiente ( $\lambda > D$ ), a força é dita de curto alcance, mas a integral presente em (2.19) diverge em  $r \rightarrow 0$ . Essa divergência ocorre porque consideramos que o meio é contínuo, e, nesse caso, as partículas estão muito próximas umas das outras. Não é provável, entretanto, que duas partículas repulsivas em um meio dissipativo colidam, então podemos dizer que essa divergência, que é provocada quando  $r$  se aproxima de zero, não é esperada. Portanto, dizemos que negligenciar que uma partícula possa ter uma distância mínima de separação entre as partículas que a cercam significa que estaríamos desconsiderando efeitos de correlações locais (ou correlações partícula-partícula). Uma maneira qualitativa de levar esses efeitos em consideração seria simplesmente trocar o limite inferior da integral em (2.19) por um valor  $r_o$  ( $r_o \neq 0$ ), que deve se tornar menor quanto maior for a concentração, isto é,  $r_o = \alpha\rho^{-\frac{1}{D}}$ . Utilizando esse limite inferior em (2.19), juntamente com o potencial  $V_\lambda(r)$ , encontramos que

$$a_\lambda(\rho) = \Omega_D \frac{\varepsilon\sigma^\lambda\alpha^{D-\lambda}}{\lambda - D} \rho^{\frac{\lambda}{D}-1} \quad (\lambda > D), \quad (2.21)$$

isto é, a razão entre os módulos da força interna e do gradiente de concentração,  $|\mathbf{f}_{int}|/|\nabla\rho|$ , é necessariamente uma função da densidade e, portanto, não é mais uma constante para

todo valor de  $\rho$ . Apesar de ser somente uma discussão qualitativa, essa correção deixa claro que correlações partícula-partícula afetam a força resultante, e também indica que um modelo contínuo precisa levar em conta esses efeitos substituindo o parâmetro  $a$  por uma função,  $a(\rho)$ . É interessante perceber ainda que na medida em que a densidade aumenta ( $\rho \rightarrow \infty$ ) o valor de  $r_o$  vai se aproximando cada vez mais de zero ( $r_o \rightarrow 0$ ), e consequentemente a correção vai ficando cada vez menos importante. Por isso, podemos imaginar que, para sistemas muito diluídos, a dependência da função  $a(\rho)$  com respeito a  $\rho$  seja mais relevante do que para sistemas muito densos. Em outras palavras, podemos esperar que os efeitos de correlação local se tornem menos pronunciados nos casos em que o sistema tenha uma concentração tendendo ao infinito, onde a distância de separação entre as partículas se torne suficientemente pequena.

Nesse trabalho, nosso objetivo principal é resolver a equação que descreve o sistema de forma contínua, isto é,

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho (\mathbf{f}_{ext} - a(\rho) \nabla \rho)]. \quad (2.22)$$

No estado estacionário, o lado esquerdo da equação acima é nulo. Uma vez que  $a(\rho)$  é dado pela equação (2.15), que só depende de  $U_{int}(\rho)$ , precisamos obter a energia potencial de interação,  $U_{int}$ , encontrar  $a(\rho)$  e posteriormente resolver a equação (2.22) no estado estacionário.

## 2.2.2 Cálculo da energia potencial de interação

Por causa do meio dissipativo, as partículas tendem a formar estruturas de mínima energia. O estado de mínima energia pode depender da forma da interação e da densidade de partículas. Porém, para interações repulsivas, esse estado deve possuir uma concentração constante ( $\nabla \rho = \mathbf{0}$ ), cuja configuração é de uma rede regular. Em duas dimensões, para a maioria dos potenciais de interação de interesse, as partículas se apresentam em uma rede triangular (também chamada de rede de Abrikosov) no estado de menor energia. Em três dimensões, para o caso de interações em plasmas complexos ou coloides, que podem ser modeladas pelo potencial de Yukawa, as partículas podem se estabelecer em uma rede hexagonal de empacotamento compacto (hcp, do inglês *Hexagonal Close-Packed*) no estado de menor energia. Desse modo, podemos, de forma aproximada, utilizar a estrutura da rede assumida pelas partículas no estado de concentração constante para calcular a energia  $U_{int}$ , dada por

$$U_{int}(\rho) = \frac{1}{2} \sum_v V(r_v), \quad (2.23)$$

onde  $V(r)$  é o potencial de interação.

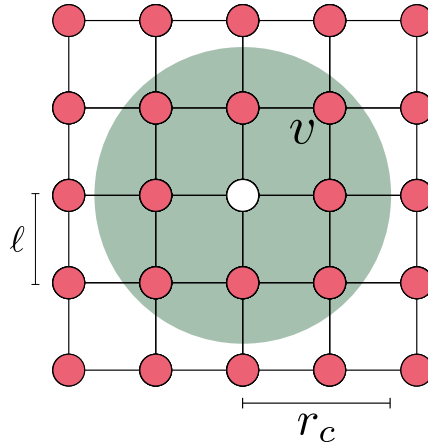


Figura 12: Ilustração do procedimento utilizado para calcular  $U_{int}$ . A rede utilizada depende do potencial de interação, e, portanto, não é necessariamente quadrada (essa representação quadrada foi escolhida para fins didáticos). Na figura,  $\ell$  é o parâmetro de rede, que controla a densidade,  $r_c$  é o raio de atuação da força de interação, e  $v$  é um vértice qualquer da rede.

A Figura 12 ilustra de que maneira o cálculo de  $U_{int}$  é realizado. O somatório da equação (2.23) é realizado sobre todos os vértices  $v$  de uma dada rede cristalina uniforme que estão a uma dada distância  $r_v$  de um ponto de referência da rede (círculo central da figura), desde que os pontos da rede estejam dentro do raio de interação da força, isto é,  $r_v \leq r_c$ . Como essa interação é calculada duas vezes para cada par de vértices da rede, é necessário dividir o resultado por 2. As dependências em relação à concentração  $\rho$  e ao parâmetro da rede  $\ell$  estão implícitas nas posições  $r_v$ . Com o objetivo de calcular  $a(\rho)$ , Eq. (2.15), precisamos calcular a derivada de  $U_{int}$  com relação a  $\rho$ , ou seja,

$$\frac{dU_{int}}{d\rho} = \frac{1}{2} \sum_v \frac{dV(r_v)}{d\rho}. \quad (2.24)$$

É de se esperar que o parâmetro de rede  $\ell$  dependa da densidade como  $\ell \sim \rho^{-1/D}$ , o que implica em  $d\ell/d\rho = -\ell/(D\rho)$ . A posição  $r_v$  do vértice, por sua vez, deve ser proporcional ao parâmetro de rede. Sendo  $r_v \propto \ell$ , temos que  $dr_v/d\ell = r_v/\ell$ . Desse modo, a equação anterior se torna

$$\frac{dU_{int}}{d\rho} = \frac{1}{2} \sum_v \frac{dV(r_v)}{dr_v} \frac{dr_v}{d\ell} \frac{d\ell}{d\rho}. \quad (2.25)$$

Observando que a primeira derivada é igual ao negativo da força de interação, isto é,  $f(r) = -dV/dr$ , e substituindo as demais derivadas, encontramos

$$\frac{dU_{int}}{d\rho} = \frac{1}{2D\rho} \sum_v f(r_v)r_v. \quad (2.26)$$

Derivando novamente a equação (2.26) em relação a  $\rho$ , encontramos

$$\frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2} = -\frac{1}{2D\rho^2} \sum_v f(r_v) r_v + \frac{1}{2D\rho} \sum_v r_v \frac{df(r_v)}{dr_v} \frac{dr_v}{d\ell} \frac{d\ell}{d\rho} + \frac{1}{2D\rho} \sum_v f(r_v) \frac{dr_v}{d\ell} \frac{d\ell}{d\rho}. \quad (2.27)$$

Substituindo as derivadas, temos

$$\frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2} = -\frac{1}{2D\rho^2} \sum_v f(r_v) r_v - \frac{1}{2D^2\rho^2} \sum_v [r_v^2 f'(r_v) - f(r_v) r_v]. \quad (2.28)$$

Agrupando os termos, chegamos a

$$\frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2} = -\frac{1}{2D^2\rho^2} \sum_v r_v [(D+1)f(r_v) + r_v f'(r_v)]. \quad (2.29)$$

Utilizando as equações (2.26) e (2.29) e substituindo na expressão para  $a(\rho)$ , Eq. (2.15), encontramos finalmente a expressão

$$a(\rho) = \frac{1}{2D^2\rho^2} \sum_v r_v [(D-1)f(r_v) - r_v f'(r_v)]. \quad (2.30)$$

A equação (2.30) nos permite encontrar a força interna  $\mathbf{f}_{int} = -a(\rho)\nabla\rho$  sobre uma partícula cuja concentração ao seu redor é  $\rho$ , e cujo gradiente de concentração local é  $\nabla\rho$ . Como podemos ver, o somatório que aparece leva em consideração todos os vértices de uma rede homogênea de densidade  $\rho$ , e inclui termos proporcionais à força  $f$  e sua derivada,  $f' = df/dr$ . Para a maioria dos potenciais de interação que vamos utilizar, essa soma não pode ser analiticamente determinada. Entretanto, tendo informações sobre a rede homogênea e a forma da interação, podemos utilizar a equação (2.30) para obter numericamente  $a(\rho)$  para qualquer valor de concentração.

Para obter a concentração em função da posição no estado estacionário, precisamos resolver a equação da segunda lei de Newton no equilíbrio, ou seja,

$$\mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext} = \mathbf{0}. \quad (2.31)$$

Pelo que vimos acima, essa equação é equivalente a

$$-a(\rho)\nabla\rho - \nabla U_{ext} = \mathbf{0}. \quad (2.32)$$

Se  $\hat{\mathbf{x}}_g$  é a direção do gradiente de concentração ( $\nabla\rho \equiv \frac{d\rho}{dx_g} \hat{\mathbf{x}}_g$ ), temos que

$$-a(\rho) \frac{d\rho}{dx_g} \hat{\mathbf{x}}_g - \sum_i \frac{\partial U_{ext}}{\partial x_i} \hat{\mathbf{x}}_i = \mathbf{0}, \quad (2.33)$$

o que resulta em

$$a(\rho) \frac{d\rho}{dx_g} = f_{ext}. \quad (2.34)$$

Integrando em ambos os lados, podemos obter a concentração,

$$\int_{\rho_o}^{\rho} a(\rho') d\rho' = \int_0^x f_{ext} dx_g, \quad (2.35)$$

onde  $\rho_o \equiv \rho(x = 0)$ . Se soubermos a forma analítica de  $a(\rho)$ , podemos obter  $\rho(x)$  analiticamente a partir da equação acima. Caso contrário, podemos obter o perfil de densidades de forma numérica. De ambas as formas, sendo  $N$  o número de partículas, podemos obter uma curva para a concentração de partículas em função da posição, através do vínculo

$$\int_v \rho dv = N \quad (2.36)$$

e comparar com os resultados de simulação.

## 3 Resultados

Neste capítulo, apresentamos os resultados de simulação (modelo discreto), comparando com os resultados do modelo contínuo, com o intuito de mostrar a validade do nosso modelo.

Nos casos em que não há flutuações térmicas ( $T = 0$ ), estudamos sistemas bidimensionais ( $D = 2$ ) e tridimensionais ( $D = 3$ ). Para  $D = 2$ , estudamos o caso de partículas que modelam o movimento de vórtices de supercondutores do tipo 2 (potencial de London), bem como partículas que interagem seguindo o potencial de interação de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ . E para  $D = 3$ , estudamos o caso de partículas que modelam o movimento de plasmas complexos e coloides (potencial de Yukawa).

Na Seção 3.2, apresentamos os resultados para os estudos que fizemos para sistemas de partículas imersos em meios com  $T \neq 0$  utilizando os métodos de Monte Carlo e Dinâmica Molecular.

### 3.1 Estudos com temperatura $T = 0$

A Figura 13 mostra a função  $a(\rho)$ , calculada numericamente a partir da equação (2.30), para dois sistemas: coloides (potencial de Yukawa) e vórtices em supercondutores do tipo 2 (potencial de London em duas dimensões), sendo o primeiro calculado em três dimensões ( $D = 3$ ), a partir de uma rede hexagonal de empacotamento compacto (hcp), e o segundo calculado em duas dimensões ( $D = 2$ ) a partir de uma rede triangular.

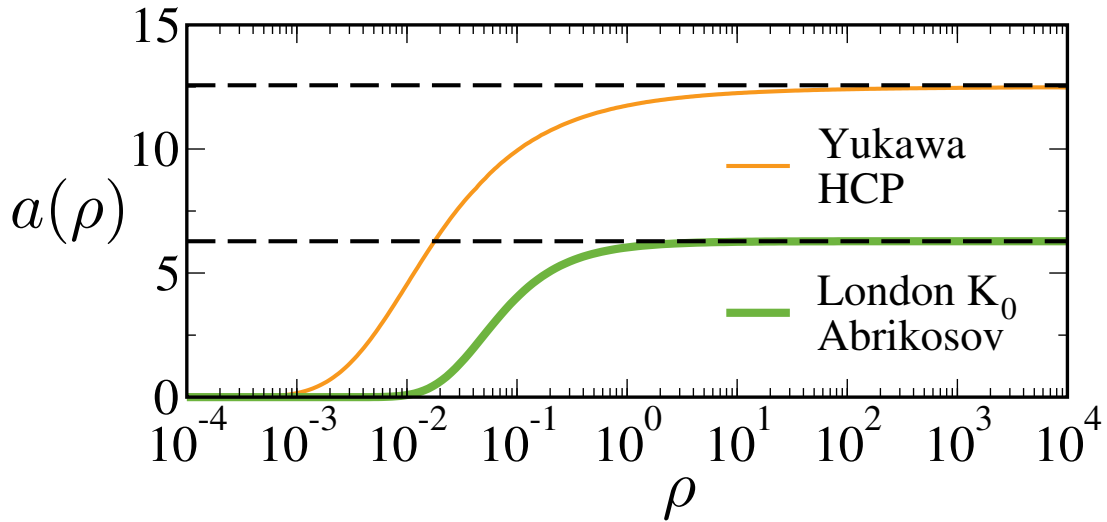


Figura 13: A função  $a(\rho) = |\mathbf{f}_{int}|/|\nabla\rho|$  é determinada através da equação (2.30). Dois sistemas são investigados: coloides, que interagem através do potencial de Yukawa,  $V_Y = \varepsilon\sigma \exp(-r/\sigma)/r$ , formando redes hcp em três dimensões; enquanto o potencial de interação de vórtices é modelado pelo potencial de London,  $V_S = \varepsilon K_0(r/\sigma)$ , formando redes triangulares (rede de Abrikosov). Como indicado pelas linhas tracejadas, para altas concentrações,  $\rho > \sigma^{-D}$ , as curvas convergem para os valores previstos pela equação (2.19),  $a = 4\pi\varepsilon\sigma^3$  e  $a = 2\pi\varepsilon\sigma^2$ , para sistemas em três e em duas dimensões, respectivamente. A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-D}$ , enquanto  $a(\rho)$  é expresso em unidades de  $\varepsilon\sigma^D$ .

Para densidades grandes ( $\rho > \sigma^{-D}$ ) vemos que a função satura nos mesmos valores previstos pela aproximação sem correlação, Eq. (2.19), isto é,  $a = 4\pi\sigma^3$  e  $a = 2\pi\sigma^2$  para o caso de coloides e vórtices, respectivamente. Entretanto, para densidades menores, as correlações partícula-partícula se tornam mais importantes e  $a(\rho)$  deixa de ser uma constante.

É importante comentar sobre a função  $a(\rho)$  para o caso onde o potencial que descreve a interação entre as partículas é dado por uma lei de potência,  $V_\lambda(r)$ , onde  $\lambda$  é o expoente do potencial. Nesse caso, como veremos um pouco mais adiante, a função  $a_\lambda(\rho)$  também varia com a concentração como uma lei de potência,  $a_\lambda(\rho) \propto \rho^{\frac{\lambda}{2}-1}$  em duas dimensões, e, portanto, não satura para nenhum valor de densidade. Desse modo, para esse tipo de interação, podemos esperar que a nossa abordagem contínua seja igualmente relevante para qualquer região de densidade.

### 3.1.1 Casos bidimensionais ( $D = 2$ )

Nessa seção, apresentamos os resultados para os casos bidimensionais em que a interação é escrita em termos de uma lei de potência e também para o caso do potencial de

London, que modela interação entre vórtices de supercondutores do tipo 2. Em ambos os casos, além da força de interação partícula-partícula, existe uma força externa que confina as partículas por meio de uma força externa igual a  $\mathbf{f}_{ext} = -k\mathbf{x}_i$ , sendo  $\mathbf{x}_i$  a coordenada  $x$  da partícula  $i$ .

### 3.1.1.1 Potencial de London

Em supercondutores do tipo 2, o fluxo magnético é confinado em pequenas regiões do material supercondutor, onde cada região é um vórtice de supercorrentes. Uma vez que os vórtices atravessam o material na direção do campo magnético aplicado, podemos dizer que esse sistema é quasi-2d. Os vórtices dissipam energia ao se deslocarem, e interagem entre si através de um potencial que pode ser modelado pela função de Bessel modificada de segundo tipo [14, 15, 16, 17],

$$V_S(r) = \varepsilon K_0 \left( \frac{r}{\sigma} \right), \quad (3.1)$$

também chamado de potencial de London [8]. O estado de menor energia desse sistema é uma rede triangular, também chamada de rede de Abrikosov, em homenagem ao primeiro a pensar que uma rede periódica triangular poderia minimizar a energia livre de alguns supercondutores [6].

Para esse potencial, simulamos um sistema com  $N = 800$  partículas em um sistema bidimensional, confinadas na direção  $x$  por um potencial externo  $U_{ext}(x) = kx^2/2$ , e com condições periódicas de contorno na direção  $y$ . Após o equilíbrio mecânico, a simulação é finalizada, e podemos comparar os resultados da simulação com a previsão do modelo contínuo.

No estado estacionário, a equação diferencial a ser resolvida se resume a

$$f_{ext} = a(\rho) \frac{d\rho}{dx}, \quad (3.2)$$

uma vez que o problema tem simetria na direção  $y$  e, portanto, no estado estacionário temos  $\rho = \rho(x)$ . Utilizando que  $f_{ext} = -kx$ , temos que

$$\int_{\rho_o}^{\rho} d\rho' a(\rho') = -k \int_0^x dx' x', \quad (3.3)$$

onde  $\rho_o \equiv \rho(x = 0)$ . Se considerarmos que  $a(\rho)$  é uma constante,  $a(\rho) = a$ , podemos integrar em ambos os lados, obtendo



$$\rho(x) = \rho_o \left[ 1 - \left( \frac{x}{x_e} \right)^2 \right], \quad (3.4)$$

onde definimos  $x_e^2 \equiv 2a\rho_o/k$ . Utilizando a condição de normalização,  $\int_{-x_e}^{x_e} \rho(x) dx = n$ , onde  $n \equiv N/L_y$ , encontramos a relação

$$a = \frac{9kn^2}{32\rho_o^3}. \quad (3.5)$$

Desse modo, a solução que considera  $a(\rho)$  constante, Eq. (3.4), se torna

$$\rho(x) = \rho_o \left[ 1 - \left( \frac{4\rho_o x}{3n} \right)^2 \right]. \quad (3.6)$$

Observe que, uma vez conhecido o parâmetro  $\rho_o$ , a solução (3.6) fica completamente determinada. Para encontrar a solução, devemos fazer um ajuste não-linear e encontrar o valor do parâmetro  $\rho_o$  da parábola a partir dos resultados de cada simulação. Uma das desvantagens dessa maneira é que é necessário fazer um ajuste para cada curva de simulação. Os resultados provenientes desses ajustes estão apresentados na Figura 14. A Figura 14 mostra os resultados de simulação (símbolos) juntamente com as previsões (curvas tracejadas) dadas pela equação (3.6).

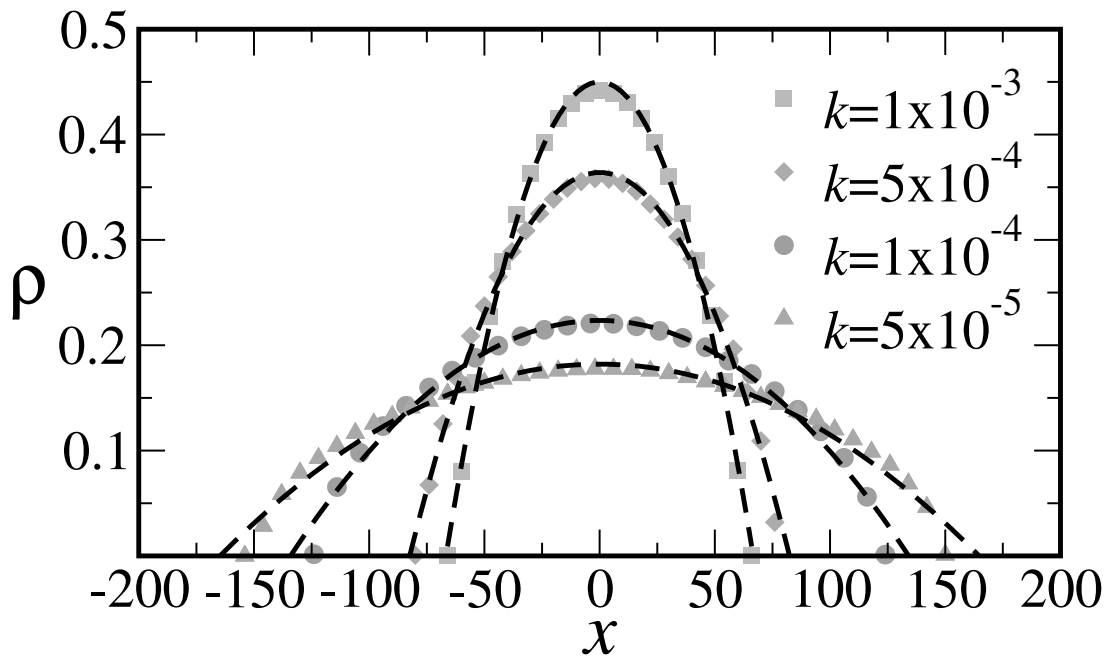


Figura 14: Perfis de densidade no estado estacionário obtidos pela simulação (símbolos) para a interação de vórtices, que é modelada por  $K_0(r)$ . As simulações foram realizadas usando  $N = 800$  partículas,  $L_y = 20\sigma$  e para quatro valores diferentes de  $k$ . As curvas tracejadas representam ajustes parabólicos de acordo com a equação (3.6). A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-2}$ , enquanto que a constante  $k$  é escrita em unidades de  $\varepsilon\sigma^{-2}$  e  $x$  em  $\sigma$ .

Pela figura, podemos observar que as curvas tracejadas se ajustam melhor aos resultados de simulação para as curvas com os maiores valores de densidade (no caso da Figura 14, também os maiores valores de  $k$ ). É importante não esquecer que essas curvas foram obtidas a partir da aproximação de que  $a(\rho) = a$ . Consistentemente com o que foi apresentado na curva de  $a(\rho)$  da Figura 13, quando a densidade é grande o suficiente,  $a(\rho)$  satura em uma constante, que para o potencial de London em duas dimensões é dado por  $a = 2\pi$ .

Utilizando agora o nosso modelo contínuo, que leva em conta a variação da função  $a$  com a concentração, resolvemos numericamente a equação

$$\int_{\rho_0}^{\rho} d\rho' a(\rho') = -k \int_0^x dx' x' \quad (3.7)$$

e obtivemos o perfil de concentração  $\rho(x)$  no estado estacionário. Os resultados da previsão do modelo contínuo são apresentados na Figura 15 para os mesmos resultados de simulação da Figura 14.

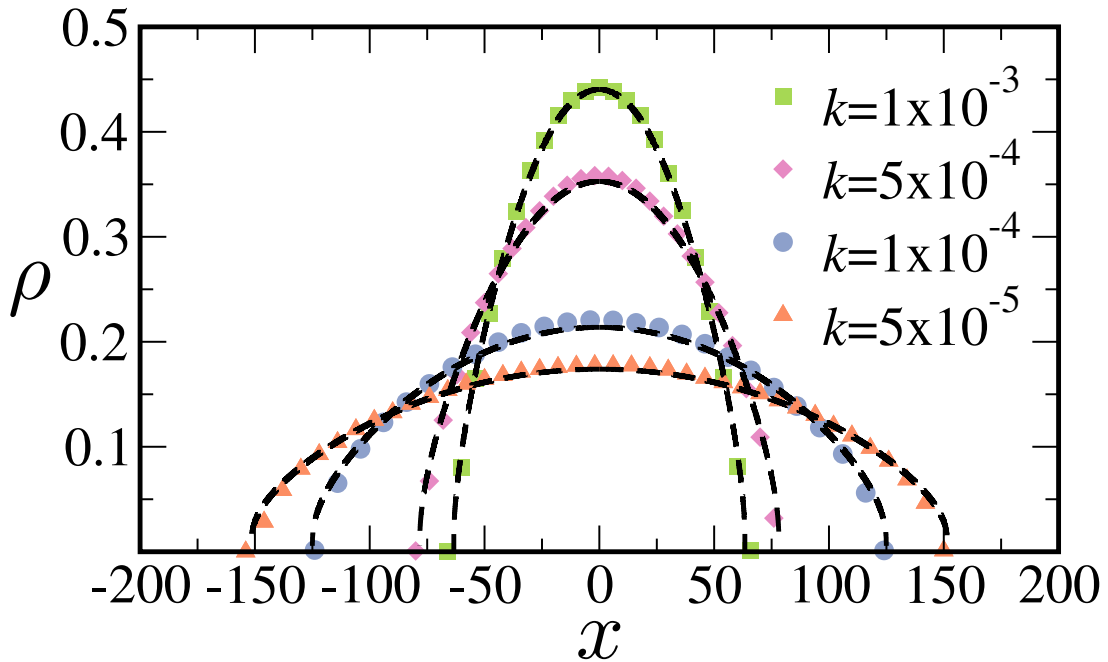


Figura 15: Perfis de densidade no estado estacionário obtidos pela simulação (símbolos) para a interação de vórtices, que é modelada por  $V_S(r)$ . As simulações foram realizadas usando  $N = 800$  partículas,  $L_y = 20\sigma$  e para quatro valores diferentes de  $k$ . As curvas tracejadas representam as previsões do modelo contínuo. A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-2}$ , enquanto que a constante  $k$  é escrita em unidades de  $\varepsilon\sigma^{-2}$  e  $x$  em  $\sigma$ .

A partir das Figuras 14 e 15, podemos observar que os resultados do nosso modelo contínuo (Figura 15) parecem mais coerentes com os resultados de simulação, sobretudo nos casos em que a densidade é pequena e os efeitos de correlação local são mais pronunciados, como no caso em que  $k = 5 \cdot 10^{-5}\varepsilon\sigma^{-2}$ , por exemplo. Entretanto, para os casos de densidade alta, como é o caso em que  $k = 1 \cdot 10^{-3}\varepsilon\sigma^{-2}$ , por exemplo, vemos que o modelo em que  $a$  é constante, previsto por [1, 44, 2], é uma aproximação muito boa. No entanto, é importante frisar que para cada curva é preciso fazer um ajuste e obter um valor diferente para o parâmetro  $a$ . Para quantificar essa análise, construímos a Tabela 1, que apresenta, para cada valor de  $k$  utilizado na simulação, o valor de  $a_{fit}$  calculado a partir do ajuste do parâmetro  $\rho_0$ , juntamente com a equação (3.5). Na Tabela 1, apresentamos o erro relativo

$k$	$a_{fit}$	Erro relativo
$1 \cdot 10^{-3}$	4,94	21,38%
$5 \cdot 10^{-4}$	4,67	25,67%
$1 \cdot 10^{-4}$	4,03	35,86%
$5 \cdot 10^{-5}$	3,73	40,64%

Tabela 1: Valores de  $a_{fit}$  utilizados na Figura 15 para cada valor de  $k$  utilizado. O erro relativo foi calculado utilizando o valor teórico previsto anteriormente,  $a_{teo} = 2\pi$ .

ao valor teórico de  $a$  previsto anteriormente,  $a = 2\pi$ . Como podemos observar, à medida que o sistema é submetido a confinamentos mais fracos, a concentração de partículas diminui e, conseqüentemente, a descrição que considera  $a = 2\pi$  torna-se menos precisa.

É interessante comentar, ainda, que estudar altas concentrações para o caso de vórtices em supercondutores do tipo 2 pode apresentar uma dificuldade prática, uma vez que o campo magnético crítico impõe uma restrição na concentração máxima de vórtices [8], tornando ainda mais relevante o estudo da região de baixas concentrações para esse caso.

### 3.1.1.2 Potencial de lei de potência ( $V_\lambda$ )

No caso de um sistema bidimensional ( $D = 2$ ) que interage através de um potencial do tipo lei de potência,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ , o sistema se estabelece em uma rede triangular, cujo parâmetro de rede  $\ell$  é dado por  $\ell = 2^{1/2}/(3^{1/4}\rho^{1/2})$ . Nesse caso, a função  $a(\rho)$  calculada em (2.30) pode ser escrita como

$$a_\lambda(\rho) = \rho^{\frac{\lambda}{2}-1} \left[ \frac{3^{\frac{\lambda}{4}}(2+\lambda)\lambda\varepsilon\sigma^\lambda}{2^{\frac{\lambda}{2}+3}} \sum_v \left( \frac{\ell}{r_v} \right)^\lambda \right]. \quad (3.8)$$

Lembrando que  $r_v$  é a distância de uma partícula até o vértice da rede, é interessante notar que, uma vez que essa distância é proporcional ao parâmetro de rede  $\ell$ ,  $r_v \propto \ell$ , o somatório acima independe de  $\rho$ . Portanto, a equação (3.8) é consistente com a previsão qualitativa (2.21), ou seja, a função  $a_\lambda(\rho)$  depende da densidade na forma de uma lei de potência com expoente igual a  $\lambda/2 - 1$  em duas dimensões. Nossa hipótese é que, de modo geral, em  $D$  dimensões o expoente seja igual a  $\lambda/D - 1$  [ $a_\lambda(\rho) \propto \rho^{\lambda/D-1}$ ], isto é,

$$a_\lambda(\rho) = \rho^{\frac{\lambda}{D}-1} \left[ \frac{3^{\frac{\lambda}{4}}(2+\lambda)\lambda\varepsilon\sigma^\lambda}{2^{\frac{\lambda}{2}+3}} \sum_v \left( \frac{\ell}{r_v} \right)^\lambda \right], \quad (3.9)$$

e conseqüentemente

$$U_{int}(\rho) \propto \rho^{\lambda/D}. \quad (3.10)$$

Para esse potencial de interação, simulamos um sistema com  $N = 900$  partículas em um sistema bidimensional, confinadas na direção  $x$  por um potencial externo  $U_{ext}(x) = kx^2/2$ , e com condições periódicas de contorno na direção  $y$ . Após o equilíbrio mecânico, a simulação é finalizada, e então a equação (2.34) pode ser resolvida utilizando a condição de que

$$\int \rho(x) dx = \frac{N}{L_y}, \quad (3.11)$$

onde  $L_y$  é o tamanho da dimensão  $y$  da caixa de simulação. Para o caso do potencial de lei de potência, tendo a forma analítica de  $a(\rho)$ , Eq. (3.9), encontramos a solução

$$\rho(x) = \left[ \rho_o^{\frac{\lambda}{D}} - \frac{\lambda}{2C_\lambda} U_{ext}(x) \right]^{\frac{D}{\lambda}}, \quad (3.12)$$

onde  $\rho_o \equiv \rho(x = 0)$ , e  $C_\lambda$  foi definido como sendo o termo de  $a_\lambda(\rho)$  que independe de  $\rho$ , isto é,

$$C_\lambda \equiv \frac{3^{\frac{\lambda}{4}}(2 + \lambda)\lambda\varepsilon\sigma^\lambda}{2^{\frac{\lambda}{2}+3}} \sum_v \left( \frac{\ell}{r_v} \right)^\lambda. \quad (3.13)$$

As soluções do modelo contínuo (3.12) estão apresentadas como linhas tracejadas na Figura 16 juntamente com as soluções de simulação para três valores de  $\lambda$ , representadas por símbolos. A figura mostra um bom acordo entre as simulações e o nosso modelo contínuo.

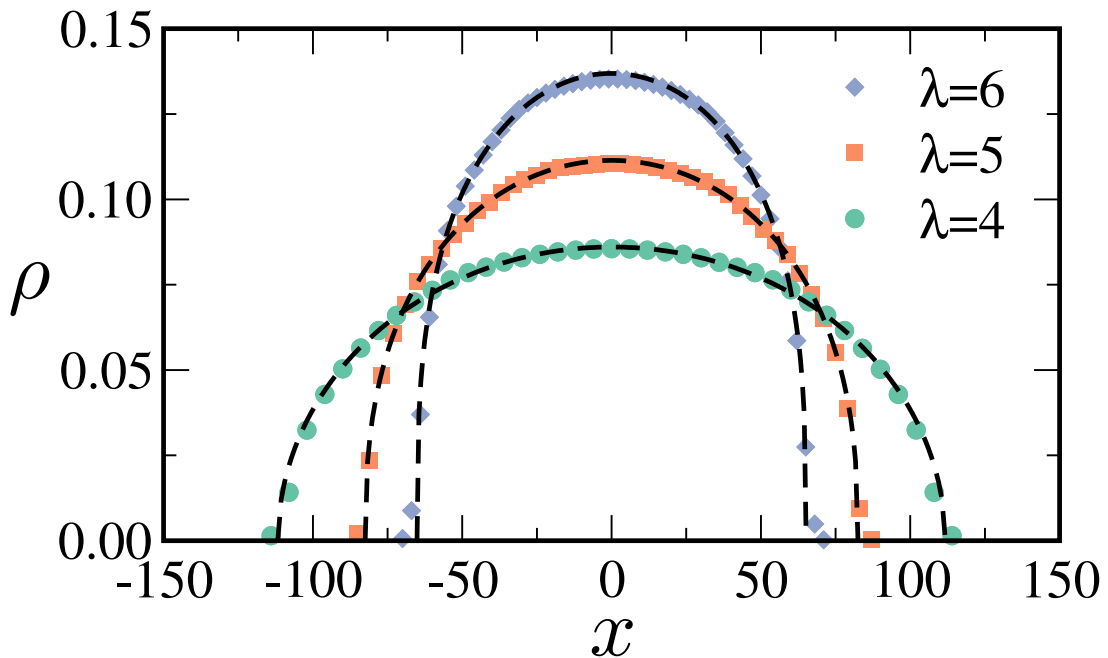


Figura 16: Perfis de densidade no estado estacionário obtidos através de simulações (símbolos). Consideramos sistemas bidimensionais de  $N = 900$  partículas interagindo através do potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ . Na direção  $x$ , as partículas são confinadas por um potencial externo harmônico,  $U_{ext}(x) = kx^2/2$ , com  $k = 10^{-5}\varepsilon\sigma^{-2}$ . Na direção  $y$ , a caixa de simulação tem um comprimento  $L_y = 60\sigma$ , com condições periódicas de contorno. Os resultados de simulação apresentados consideraram três valores de  $\lambda$ . As linhas tracejadas representam as soluções contínuas, Eq. (3.12). A concentração  $\rho$  é expressa em unidades de  $\sigma^{-2}$ , enquanto que a posição  $x$  está em unidades de  $\sigma$ .

A Tabela 2 apresenta alguns valores aproximados<sup>7</sup> para  $C_\lambda$  obtidos por meio da equação (3.13). Os três primeiros valores da tabela ( $\lambda = 4, 5$  e  $6$ ) são os mesmos utilizados nas curvas do modelo contínuo da Figura 16.

$\lambda$	$C_\lambda$
4	16,56
5	20,43
6	24,78
7	29,47
8	34,33
9	39,23
10	44,07

Tabela 2: Valores do coeficiente  $C_\lambda$  para cada valor de  $\lambda$  utilizado ( $D = 2$ ). Esses coeficientes foram obtidos a partir da equação (3.13), que deram origem às curvas tracejadas presentes na Figura 16.

<sup>7</sup>Para mais detalhes do cálculo aproximado de  $C_\lambda$ , consulte o Apêndice B.

**3.1.1.2.1 Correspondência com a distribuição de Tsallis** Para um sistema de partículas que interagem com o potencial  $V_\lambda(r)$  e que estão submetidas a um potencial externo harmônico no limite superamortecido e a temperatura nula, temos que a energia total  $U_T$ , Eq. (2.6), pode ser reescrita de maneira geral na forma

$$U_T = \int dy \int dx \rho \left( A_1 \rho^{\frac{\lambda}{D}} + A_2 x^2 \right), \quad (3.14)$$

onde os termos dentro do parênteses são  $U_{int}$  e  $U_{ext}$ , respectivamente. Se  $\rho^*(A_1, A_2)$  é o estado que minimiza a energia total  $U_T$ , então esse é o estado de equilíbrio mecânico. Como no nosso caso o sistema tem simetria em  $y$ , a integral nessa direção resulta na largura  $L_y$  da célula de simulação, resultando em

$$U_T = L_y \int dx \left( A_1 \rho^{\frac{\lambda}{D}+1} + \rho \frac{kx^2}{2} \right). \quad (3.15)$$

Para um sistema de partículas semelhantes que obedece à termoestatística generalizada de Tsallis, a quantidade minimizada é a energia livre de Helmholtz,  $F = U_q - TS_q$ , onde [47, 48]

$$S_q = \frac{1}{q-1} \int dx (\rho^{2-q} - \rho). \quad (3.16)$$

Para fazer uma correspondência entre os dois formalismos, podemos tomar  $2-q = 1+\lambda/D$ , ou seja,

$$q = 1 - \frac{\lambda}{D}, \quad (3.17)$$

e também que  $T = A_1 L_y \lambda / D$ , além de

$$U_q = \frac{TD}{\lambda} \int dx \rho + L_y \int dx \rho U_{ext}(x), \quad (3.18)$$

onde  $U_{ext}(x) = kx^2/2$ , de modo que  $F_q = U_T$ . Nesse formalismo, a parte da energia potencial relacionada às interações partícula-partícula é reinterpretada como um termo entrópico. A entropia  $S_q$  dá conta da parte da energia relativa às interações. Essa correspondência foi apontada anteriormente para o caso de vórtices em supercondutores do tipo 2 [2]. Note que a energia a ser minimizada tem dois parâmetros, e o estado de equilíbrio  $\rho^*(A_1, k)$  deve depender desses parâmetros,

$$U_T = L_y \int dx \left( A_1 \rho^{\frac{\lambda}{D}+1} + \rho \frac{kx^2}{2} \right), \quad (3.19)$$

portanto o equilíbrio mecânico desse sistema superamortecido de partículas que se repelem é equivalente ao equilíbrio termodinâmico de um gás ideal de partículas que minimiza a entropia de Tsallis. Apesar dessa associação com a entropia de Tsallis, no nosso trabalho

não é feita nenhuma enumeração de estados. Independentemente dos valores de  $A_1$  e  $k$ , a solução para o perfil de concentração é uma  $q$ -Gaussiana,  $\rho(x) \sim [1 - (1 - q)\beta U_{ext}(x)]^{\frac{1}{1-q}}$ . Além disso, uma vez que  $U$  e  $\rho$  dependem de dois parâmetros ( $A_1$  e  $k$ ), é possível encontrar uma série de relações semelhantes às relações de Maxwell entre as derivadas da energia livre [49, 50].

**3.1.1.2.2 Estudo da dinâmica do sistema** Até agora, nos preocupamos apenas em estudar o perfil de concentração no estado estacionário. A Referência [51] estudou a evolução temporal das distribuições de velocidade e de posição para um sistema superamortecido de partículas confinadas por um potencial parabólico e que interagem por meio do potencial de London. Eles mostraram que ambas as distribuições podem ser descritas por uma parábola, que é associada com uma  $q$ -Gaussiana [52], com  $q = 0$ . A Figura 17 mostra uma reprodução dos resultados mostrados na Referência [51].

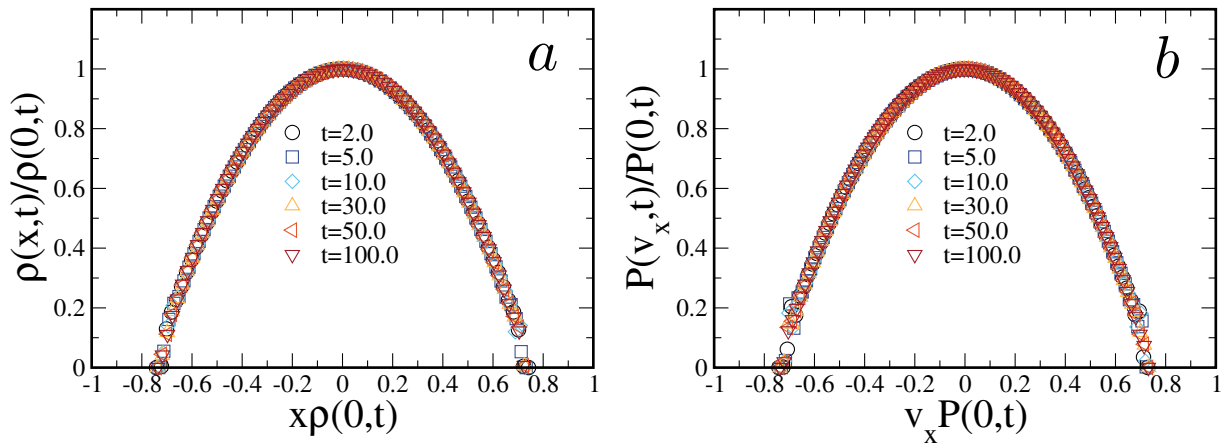


Figura 17: Distribuições normalizadas de posição (a) e velocidade (b) para o caso onde as partículas interagem por meio do potencial de London. Cada símbolo representa a distribuição para um instante de tempo  $t$  indicado nas legendas. Os eixos foram transformados de modo a permitir o colapso das curvas.

Para cada simulação, as partículas inicialmente se encontram em posições aleatórias dentro de uma região muito estreita (*water-bag*) da célula de simulação. Durante a evolução temporal, como ilustrado na Figura 18, devido à repulsão entre as partículas, o sistema vai se expandindo e ocupando a célula de simulação, até que em um dado instante, a força de confinamento se torna igual à contribuição de repulsão, e o sistema atinge o estado de equilíbrio. De modo a reduzir a dependência da condição inicial, cada curva da Figura 17 foi feita para uma média de 100 amostras.

Na seção anterior, nós mostramos que, se o potencial de interação partícula-partícula for uma lei de potência,  $V_\lambda(r) \sim r^{-\lambda}$ , com  $\lambda > D$ , o perfil de concentração no estado de



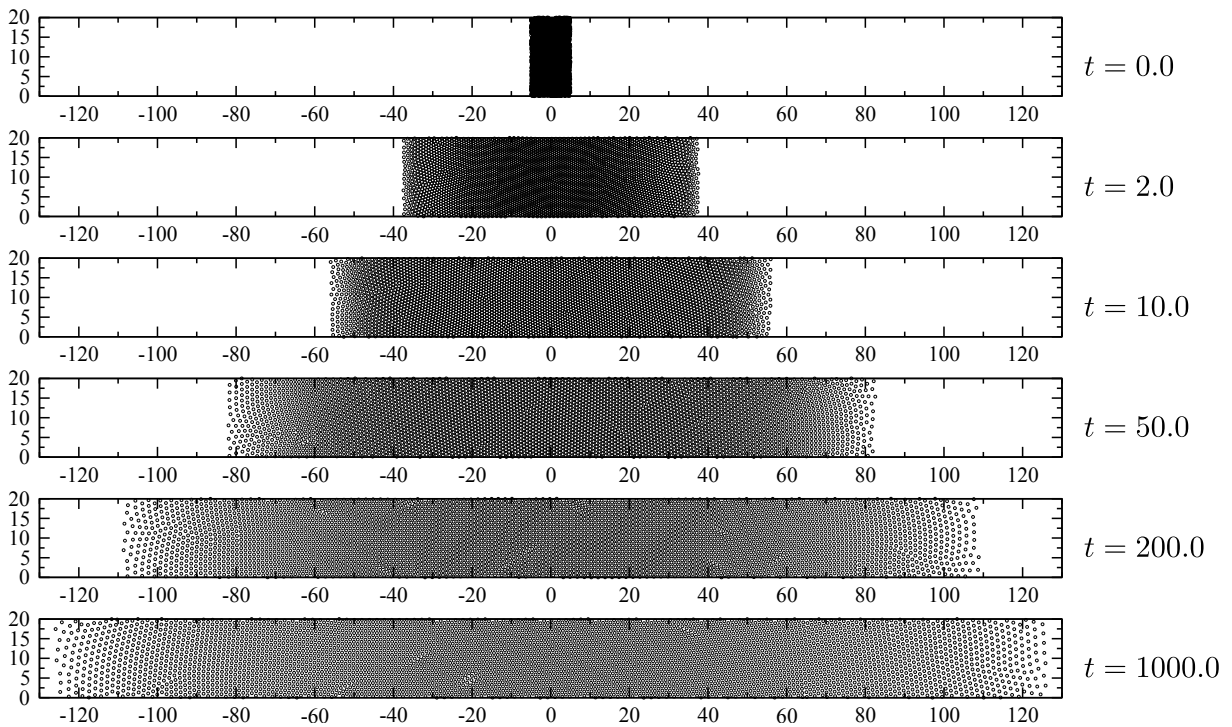


Figura 18: Evolução temporal de um sistema composto por  $N = 4000$  partículas no interior de uma caixa de largura  $L_y = 20$  confinados na direção  $x$  por uma força do tipo  $-kx$ , onde  $k = 10^{-3}$ . As partículas se repelem com uma força repulsiva e de curto alcance que depende do potencial  $V_\lambda(r)$ .

equilíbrio pode ser descrito como uma  $q$ -Gaussiana, com  $q = 1 - \lambda/D$ . Nesta seção, o nosso objetivo é investigar se esse resultado também é válido fora do equilíbrio, isto é, se o perfil de concentração ao longo da dinâmica do sistema se mantém na mesma forma de uma  $q$ -Gaussiana, além de também estudar o perfil de velocidades, a exemplo do que fez a Referência [51].

Partindo da equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \rho \left( \nabla U_{ext} + C_\lambda \rho^{\frac{\lambda}{D}-1} \nabla \rho \right) \right], \quad (3.20)$$

que governa a dinâmica do sistema, testamos uma solução auto-similar [53] do tipo  $\rho(x, t) = g(z)/f(t)$ , onde  $z = x/f(t)$ . Substituindo na Equação (3.20), obtemos

$$\frac{f^{1+\frac{\lambda}{D}}}{C_\lambda} \left( \frac{df}{dt} + kf \right) = - \frac{\frac{d}{dz} \left( g^{\frac{\lambda}{D}} \frac{dg}{dz} \right)}{\frac{d}{dz}(gz)}. \quad (3.21)$$

O lado esquerdo da equação depende apenas de  $t$ , enquanto que o lado direito depende apenas de  $z$ . Sendo assim, a única maneira de a igualdade ser válida é se cada um dos

lados seja igual a uma constante,  $\nu$ . Portanto, o lado esquerdo se torna

$$\frac{df}{dt} = \frac{\nu C_\lambda}{f^{\frac{\lambda}{D}+1}} - kf \quad (3.22)$$

e o lado direito se torna

$$\frac{d}{dz} \left( g^{\frac{\lambda}{D}} \frac{dg}{dz} + \nu g z \right) = 0. \quad (3.23)$$

Resolvendo as Eqs. (3.22) e (3.23), obtemos

$$f(t) = \left\{ \frac{\nu C_\lambda}{k} \left[ 1 - e^{-k(\frac{\lambda}{D}+2)(t-t_0)} \right] \right\}^{\frac{D}{\lambda+2D}} \quad (3.24)$$

e

$$g(z) = \left[ \frac{\lambda \nu}{2D} (1 - z^2) \right]^{\frac{D}{\lambda}}, \quad (3.25)$$

onde  $t_0$  é o instante inicial, e  $z = 1$  é o ponto em que a concentração vai a zero,  $g(1) = 0$ , isto é, quando  $x = f(t)$  temos que  $\rho[f(t), t] = 0$ . Portanto  $f(t)$  pode ser visto como o valor de  $x$  em que a concentração vai a zero, ou ainda, em outras palavras,  $f(t)$  é igual à posição  $x$  da partícula que está mais distante da origem,  $f(t) = x_{max}(t)$ . Além disso, note que a Equação (3.25) é uma  $q$ -Gaussiana. A condição de normalização  $\int \rho(x, t) dx dy = N$  leva a  $\int g dz = N/L_y$ . Essa condição nos permite encontrar uma expressão para  $\nu$ ,

$$\nu = \frac{2D}{\lambda} \left[ \frac{N}{L_y} \frac{\Gamma(\frac{3}{2} + \frac{D}{\lambda})}{\Gamma(1 + \frac{D}{\lambda}) \sqrt{\pi}} \right]^{\frac{\lambda}{D}}. \quad (3.26)$$

Na Figura 19 mostramos as curvas de  $f(t)$  e a sua derivada,  $\dot{f}(t)$ , para cada instante de tempo  $t$  considerando os casos em que  $\lambda = 4$  e  $\lambda = 6$ . Se  $f(t)$  pode ser interpretado como a posição da partícula do sistema que está mais distante do centro da célula de simulação em um determinado instante, então, de forma análoga,  $\dot{f}(t)$  é o valor da velocidade dessa partícula no mesmo instante de tempo  $t$ . Pela figura, podemos observar que o sistema está próximo de atingir o estado estacionário, quando  $f(t)$  satura em um valor constante.

Nas Figuras 20 e 21 apresentamos resultados similares ao da Figura 17, com a diferença de que o potencial de interação é dado por  $V_\lambda(r)$ . De modo a reduzir a dependência da condição inicial, cada curva dessas figuras foi feita para uma média de 800 amostras. Observe que existe um bom acordo entre os resultados de simulação (símbolos) e a  $q$ -Gaussiana, especialmente para o caso das distribuições de posição. Nos casos das distribuições de velocidade, há uma maior diferença entre os resultados de simulação e a  $q$ -Gaussiana. Nesses casos, podemos observar que os resultados de simulação divergem da

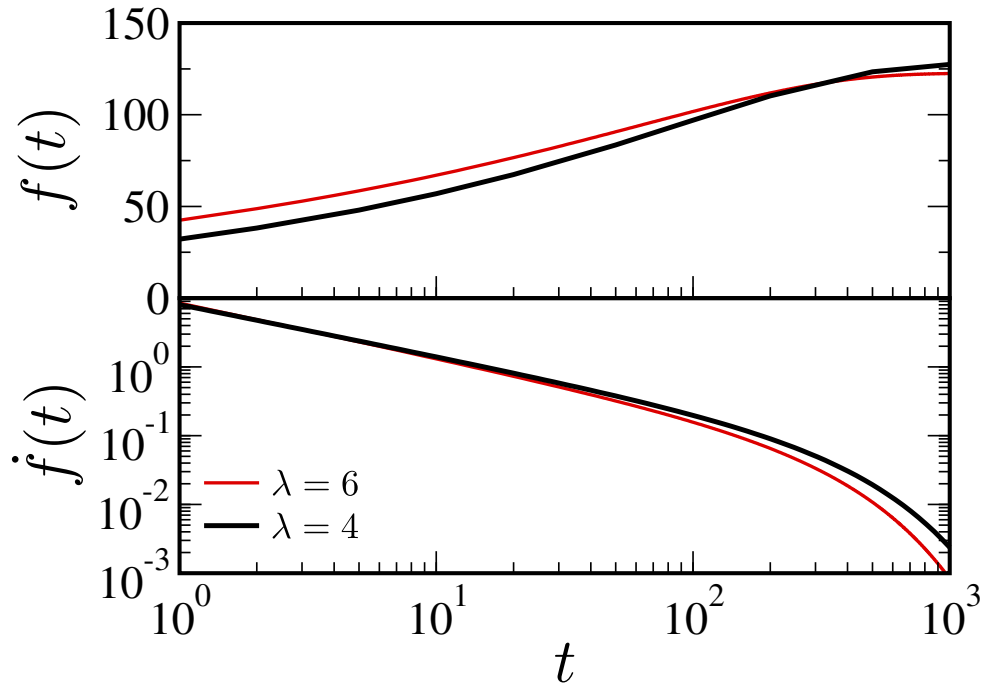


Figura 19: Curvas de  $f(t)$  e  $\dot{f}(t)$  considerando os casos em que  $\lambda = 4$  e  $\lambda = 6$  a partir da Eq. (3.24) e da sua derivada,  $\dot{f}(t) \equiv df/dt$ . Uma vez que as partículas estão inicialmente confinadas em uma região muito estreita, utilizamos  $t_0 = 0$  para a construção das curvas, ou seja, não houve parâmetros de ajuste em nenhuma das curvas.

$q$ -Gaussiana, especialmente nas bases da distribuição.

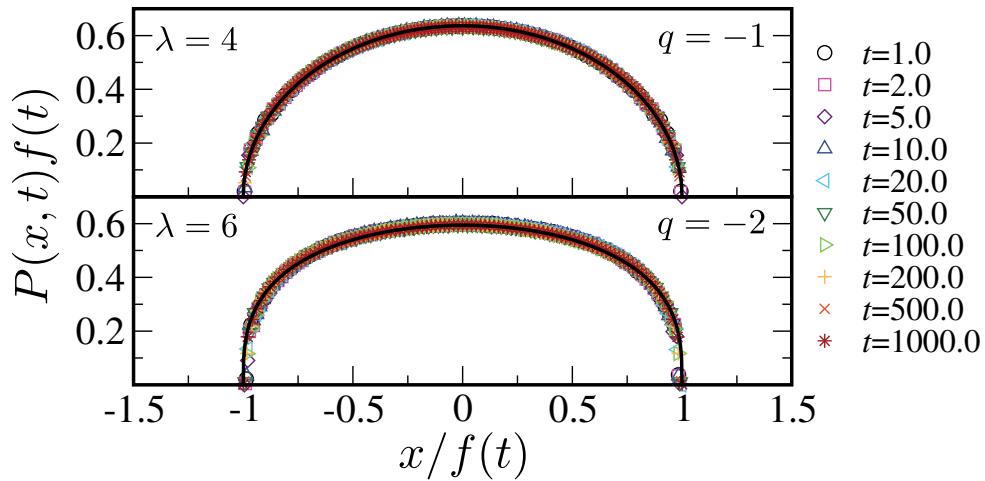


Figura 20: Distribuições de posição em diferentes instantes de tempo  $t$ . Simulamos  $N = 4000$  partículas interagindo por meio do potencial de lei de potência,  $V(r) \sim r^{-\lambda}$ , para  $\lambda = 4$  ( $q = -1$ ) e  $\lambda = 6$  ( $q = -2$ ). As curvas pretas são  $q$ -Gaussianas. Aqui utilizamos  $k = 10^{-3}$  e  $L_y = 20$ .

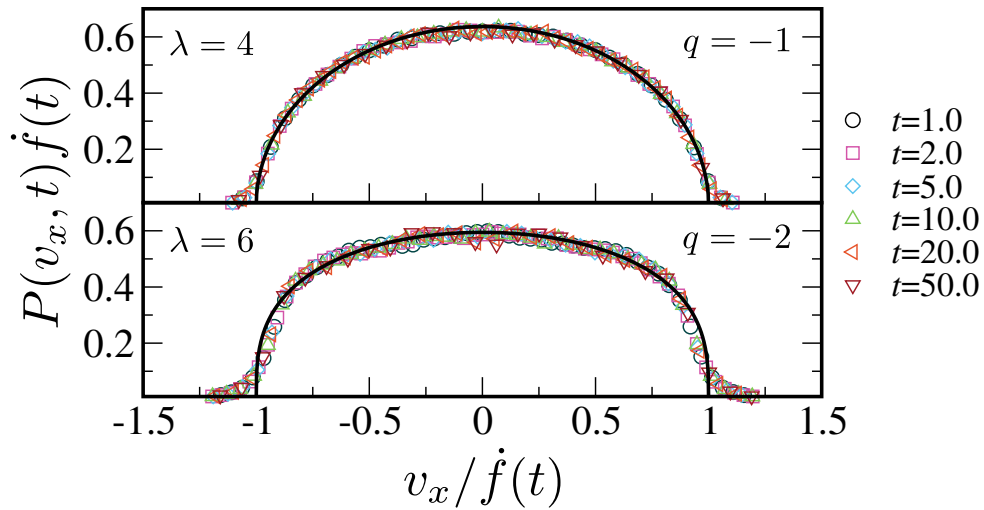


Figura 21: Distribuições de velocidade em diferentes instantes de tempo  $t$ . Simulamos  $N = 4000$  partículas interagindo por meio do potencial de lei de potência,  $V(r) \sim r^{-\lambda}$ , para  $\lambda = 4$  ( $q = -1$ ) e  $\lambda = 6$  ( $q = -2$ ). As curvas pretas são  $q$ -Gaussianas. Aqui utilizamos  $k = 10^{-3}$  e  $L_y = 20$ .

Assim como a concentração  $\rho(x, t)$ , é razoável supor que a velocidade média  $\bar{v}(x, t)$  das partículas em uma dada posição  $x$  e em um instante de tempo  $t$  também seja uma função auto-similar, isto é,

$$\bar{v}(x, t) = \dot{f}(t)b(z), \quad (3.27)$$

onde  $z = x/f(t)$  e  $\dot{f}(t) = df/dt$ . Observe que na borda do sistema, quando  $x = f(t)$ , a velocidade média  $\bar{v}(x, t) = \dot{f}(t)b(1)$ . Escrevendo a equação da continuidade utilizando  $\mathbf{J} = \rho\bar{\mathbf{v}}$ , temos que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [\rho(x, t)\bar{v}(x, t)]. \quad (3.28)$$

Substituindo  $\rho(x, t) = g(z)/f(t)$  e  $\bar{v}(x, t) = \dot{f}(t)b(z)$ , obtemos

$$\frac{\dot{f}(t)}{f^2(t)} \frac{d}{dz} [g(b-z)] = 0, \quad (3.29)$$

portanto  $b(z) = z$  e, conseqüentemente,

$$\bar{v}(x, t) = \frac{\dot{f}(t)}{f(t)}x, \quad (3.30)$$

ou seja, a velocidade média das partículas cresce linearmente com a posição  $x$ . Uma relação linear entre duas variáveis (no caso  $\bar{v}$  e  $x$ ) é suficiente para concluirmos que as duas variáveis são distribuídas da mesma maneira, sugerindo que nós deveríamos obter distribuições  $q$ -Gaussianas para as velocidades médias,  $P(\bar{v})$ , dado que a distribuição de posições pode ser descrita como tal. Entretanto, aqui estamos interessados em obter a distribuição  $P(v_x, t)$  da componente  $x$  das velocidades das partículas. Como se pode ver

pela Figura 21, existe um desvio na base da distribuição de velocidades  $P(v_x, t)$ , isto é, a  $q$ -Gaussiana não é uma descrição muito boa para a distribuição  $P(v_x, t)$ . Esse desvio ocorre provavelmente porque as partículas que possuem o módulo de  $v_x$  elevado encontram uma maior dificuldade em rearranjarem suas posições à medida que a concentração de partículas varia.

Para tentar buscar uma forma mais adequada de descrever a distribuição de velocidades, analisamos a distribuição da quantidade  $\xi_i \equiv (v_x)_i/\dot{f} - x_i/f$  entre todas as partículas de todas as amostras e apresentamos alguns resultados da distribuição  $P(\xi)$  na Figura 22. Nos gráficos da Figura 22, as curvas pretas são o logaritmo de  $P(\xi)$ , e as curvas vermelhas são distribuições Laplacianas,  $P(\xi) \sim e^{-|\xi|/h}$ , onde  $h$  é um parâmetro de ajuste.

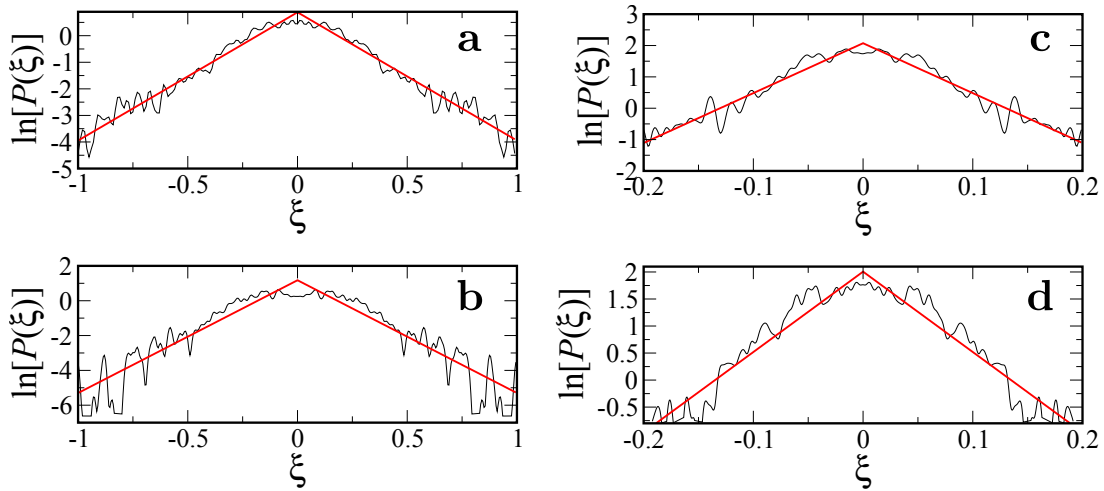


Figura 22: Distribuições  $\ln P(\xi)$  fixando-se uma posição  $x$  e um instante de tempo  $t$ . (a)  $t = 2,0$  e  $x = 0,8f(t)$ ; (b)  $t = 2,0$  e  $x = 0,9f(t)$ ; (c)  $t = 10,0$  e  $x = 0,8f(t)$ ; (d)  $t = 10,0$  e  $x = 0,9f(t)$ . As curvas vermelhas representam ajustes de distribuições Laplacianas,  $P(\xi) \sim e^{-|\xi|/h}$ , onde  $h$  é um parâmetro de ajuste.

Como foi observado na Figura 20, a distribuição de posições pode ser bem descrita por meio de uma  $q$ -Gaussiana,  $P(x/f) \sim G_q(x/f)$ . Uma vez que  $f(t)$  e  $\dot{f}(t)$  dependem somente do tempo, e  $(v_x)_i/\dot{f} = x_i/f + \xi_i$ , então a distribuição de velocidades  $P(v_x, t)$  pode ser encontrada por meio de uma convolução [54] entre uma  $q$ -Gaussiana e a distribuição da quantidade  $\xi_i$ , isto é,

$$P(v_x/\dot{f}) = (F_1 * F_2)(v_x/\dot{f}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi F_1(v_x/\dot{f} - \xi)F_2(\xi), \quad (3.31)$$

onde  $F_1$  e  $F_2$  representam as distribuições das quantidades  $(\dot{f}/f)x$  e  $\xi$ , respectivamente. Considerando que a quantidade  $\xi$  se distribui como uma Laplaciana [ $P(\xi) \sim e^{-|\xi|/h}$ ], temos que

$$P\left(\frac{v_x}{\dot{f}}\right) \sim \int_{-\infty}^{\infty} d\xi G_q\left(\frac{v_x}{\dot{f}} - \xi\right) e^{-\frac{|\xi|}{h}}. \quad (3.32)$$

A Figura 23 mostra uma tentativa qualitativa de corrigir o problema encontrado na Figura 21. Nessa tentativa, as curvas sólidas foram obtidas a partir de uma solução numérica da integral (3.32).

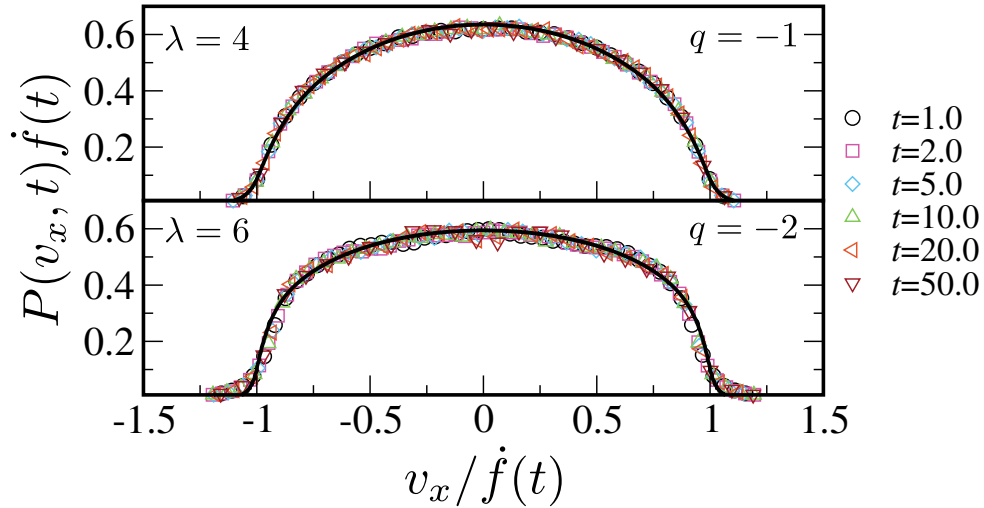


Figura 23: Distribuições de velocidade em diferentes instantes de tempo  $t$ . Simulamos  $N = 4000$  partículas interagindo por meio do potencial de lei de potência,  $V(r) \sim r^{-\lambda}$ , para  $\lambda = 4$  ( $q = -1$ ) e  $\lambda = 6$  ( $q = -2$ ). As curvas pretas são convoluções entre  $q$ -Gaussianas e Laplacianas. Aqui utilizamos  $k = 10^{-3}$  e  $L_y = 20$ .

### 3.1.2 Caso tridimensional ( $D = 3$ )

Nessa seção, apresentamos os resultados para o caso tridimensional em que a interação é escrita em termos do potencial de Yukawa, que é útil na descrição de sistemas coloidais e de plasmas complexos.

#### 3.1.2.1 Potencial de Yukawa

Em três dimensões ( $D = 3$ ), estudamos o caso do plasma complexo. As cargas livres no gás atenuam a interação de Coulomb, e o potencial de Yukawa,  $V_Y(r) = \varepsilon \exp(-r/\sigma)/r$ , é um bom modelo para estudar a repulsão entre as partículas, assim como no caso de coloides [55]. Considerando que o estado de menor energia é uma rede hcp [56] (ou fcc), construímos uma rede do tipo hcp e calculamos a função  $a(\rho)$  através da equação (2.30),

$$a(\rho) = \frac{1}{2D^2\rho^2} \sum_v r_v [(D-1)f(r_v) - r_v f'(r_v)],$$

de forma similar ao que foi feito para o caso bidimensional.

Para testar o nosso modelo, simulamos um sistema tridimensional composto por  $N = 400\,000$  partículas sob a ação de um potencial externo radial,  $U_{ext}(r) = kr^2/2$ , confinando as partículas em todas as direções para o centro da célula de simulação. Para obter a previsão numérica, resolvemos numericamente a equação

$$a(\rho) \frac{d\rho}{dr} = -kr,$$

porém o vínculo de normalização nesse caso é dado por

$$4\pi \int dr r^2 \rho(r) = N. \quad (3.33)$$

A comparação entre as simulações e a previsão do modelo contínuo para esse caso é mostrada na Figura 24. Para  $r$  distante das bordas do sistema, observamos um bom acordo entre teoria e simulação, porém na extremidade do perfil de densidade vemos um desvio considerável.

Para tentar entender essa discrepância, note que assumimos anteriormente que o gradiente de densidade das partículas varia muito lentamente dentro do raio de atuação do potencial de interação. Uma vez que não há concentração negativa, essa suposição falha quando a distância para a borda do perfil de densidade ( $\rho/|\nabla\rho|$ ) é menor do que o comprimento característico da interação,  $\sigma$ . Desse modo, na borda do perfil, uma descrição

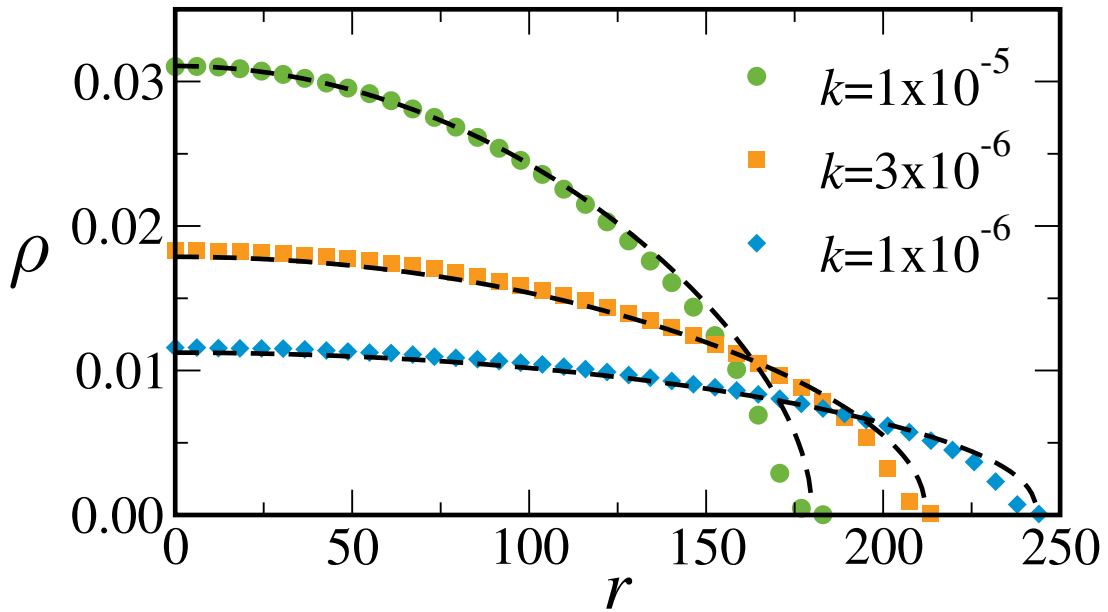


Figura 24: Perfis de densidade no estado estacionário obtidos a partir das simulações (símbolos). Simulamos  $N = 400\,000$  partículas interagindo com o potencial de Yukawa,  $V_Y(r) = \varepsilon \exp(-r/\sigma)/r$ , em três dimensões. As partículas são confinadas por um potencial externo radial,  $U_{ext}(r) = kr^2/2$ , com resultados para três valores de  $k$ . As curvas tracejadas representam as previsões do modelo contínuo. A concentração  $\rho$  está expressa em unidades de  $\sigma^{-3}$ , enquanto que a posição  $r$  e a constante  $k$  estão, respectivamente, em unidades de  $\sigma$  e  $\varepsilon\sigma^{-2}$ .

contínua requer que haja uma aproximação em ordens maiores. Porém, esse efeito se torna irrelevante em sistemas onde o perfil de densidade não é muito confinado [57]. É importante comentar que no caso do potencial de lei de potência utilizado anteriormente,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ , não existe uma escala característica para a interação, uma vez que só existe, efetivamente, um parâmetro no potencial, já que o potencial de interação pode ser reescrito na forma  $V_\lambda(r) = \varepsilon r^{-\lambda}$ . Nesse caso, a primeira aproximação funciona desde que a distância  $\rho/|\nabla\rho|$  até a borda do sistema seja maior do que o parâmetro de rede  $\ell \sim \rho^{-1/D}$ , ou seja, que  $|\nabla\rho| < \rho^{(D+1)/D}$ , sendo  $D$  a dimensionalidade do sistema.

## 3.2 Estudos com temperatura $T \neq 0$

Nesta seção, são apresentados os nossos primeiros estudos que foram feitos utilizando os métodos de Monte Carlo e Dinâmica Molecular. Diferentemente do que foi analisado até aqui, neste caso nós consideramos que o meio onde as partículas estão imersas possui uma temperatura diferente de zero.

Primeiramente apresentamos os resultados extraídos a partir do método de Monte Carlo. Para cada parâmetro  $\lambda$  do potencial de interação  $V_\lambda(r)$ , realizamos simulações de



Monte Carlo iniciando o sistema de  $N$  partículas em um estado de posições aleatórias a uma temperatura  $T$  e uma densidade  $\rho$  fixa. A partir dessa configuração, utilizamos o algoritmo de Metropolis<sup>8</sup>, e extraímos a energia por partícula do sistema em cada passo de Monte Carlo, segundo a equação

$$U_{int} = \frac{1}{2N} \sum_i \sum_{j \neq i} V(r_{ij}), \quad (3.34)$$

que é análoga à equação (2.23) utilizada para o cálculo da energia de interação para  $T = 0$  (rede regular). Para um número muito grande de passos de Monte Carlo, a energia tende a flutuar em torno de um valor constante. Nesse regime, calculamos o valor médio da energia e, para cada valor de temperatura, obtivemos um gráfico da energia por partícula,  $U_{int}$ , contra a densidade.

O gráfico da Figura 25 mostra como a energia  $U_{int}$  por partícula varia com a concentração  $\rho$  para diferentes valores de temperatura e do expoente  $\lambda$ , considerando o potencial de interação entre as partículas como sendo o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ , em um sistema bidimensional ( $D = 2$ ).

---

<sup>8</sup>Para mais detalhes sobre o algoritmo de Metropolis, consulte a Seção (A.2.1) do Apêndice A.

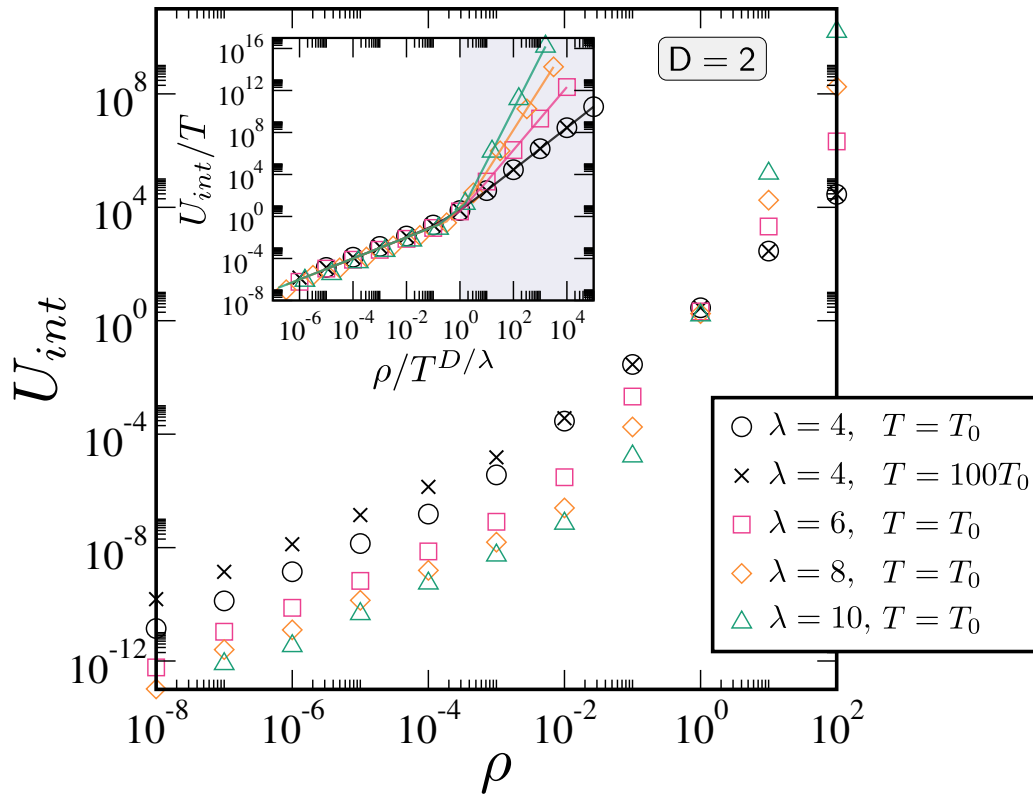


Figura 25: Resultados de Monte Carlo considerando um sistema de partículas imerso em um meio com temperatura  $T \neq 0$  para um sistema bidimensional ( $D = 2$ ). O potencial de interação entre as partículas é o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ , e as simulações foram realizadas para valores distintos de  $\lambda$  e  $T$ , sendo  $T_0 = 10^{-6}$ . Pelo gráfico, observa-se que existem dois regimes diferentes, sendo um regime linear ( $\rho < 1$ ) e outro regime ( $\rho > 1$ ) seguindo uma lei de potência com expoente igual a  $\lambda/D$ . Para efeitos de simulação, consideramos o valor da constante de Boltzmann igual à unidade ( $k_B = 1$ ).

No painel interno do gráfico, são apresentados os mesmos dados, porém com os eixos transformados, sendo o eixo vertical dado pela razão  $U_{int}/T$ , e o eixo horizontal dado pela razão  $\rho/T^{D/\lambda}$ , com o objetivo de estudar o comportamento da função  $U_{int}$  com a variação da temperatura ( $T$ ) e do parâmetro da interação ( $\lambda$ ). As curvas do painel interno são ajustes não-lineares do tipo  $y = x + \alpha_{\lambda D} x^{\lambda/D}$ , onde  $x$  neste caso é o eixo horizontal do painel interno, que é igual a  $\rho/T^{D/\lambda}$ , e  $y$  é igual ao eixo vertical do painel interno, que é igual a  $U_{int}/T$ . Para efeitos de simulação, consideramos o valor da constante de Boltzmann igual à unidade ( $k_B = 1$ ).

A partir do gráfico, é possível observar dois regimes. Para  $\rho T^{-D/\lambda} > 1$  (região sombreada do painel interno), vemos que o comportamento da função  $U_{int}/T$  é tipicamente uma lei de potência com expoente igual a  $\lambda/D$ , ou seja, um comportamento similar ao que foi verificado anteriormente quando discutimos o problema para  $T = 0$ , em que  $U_{int}(\rho, T = 0) \propto \rho^{\frac{\lambda}{D}}$  [Eq. (3.10)]. Por outro lado, para a região onde  $\rho T^{-D/\lambda} < 1$ ,

observamos um comportamento linear da função  $U_{int}/T$ . Diante dessas observações, os resultados do gráfico nos permitiram supor que

$$U_{int}(\rho, T) = (k_B T)^{1-D/\lambda} \rho + \alpha_{\lambda D} \rho^{\frac{\lambda}{D}}, \quad (3.35)$$

onde o segundo termo está relacionado à contribuição estudada anteriormente com temperatura zero (Seção 3.1.1.2), isto é,  $\alpha_{\lambda D}$  é proporcional ao coeficiente  $C_\lambda$  [ $a_\lambda(\rho) = C_\lambda \rho^{\frac{\lambda}{D}-1}$ ] estudado anteriormente,  $C_\lambda \approx \alpha_{\lambda D} \frac{\lambda}{D} \left(1 + \frac{\lambda}{D}\right)$ . Na discussão anterior, quando estudamos esse sistema com temperatura zero, vimos na discussão qualitativa que fizemos ao mostrar a equação (2.21) que naquele caso a energia dependia da concentração como uma lei de potência com expoente  $\lambda/D$ , uma vez que  $a_\lambda(\rho) = C_\lambda \rho^{\frac{\lambda}{D}-1}$ . Através do gráfico da Figura 25, observamos que o expoente dessa lei de potência permanece o mesmo observado anteriormente para uma dada região de densidade (próxima de  $\rho = 1\sigma^{-D}$ ). Para densidades menores, entretanto, vemos que a introdução de temperatura ao sistema modifica a curva nesta região.

É interessante enfatizar que essa mudança de regime acontece quando  $\rho > T^{\frac{D}{\lambda}}$ . Em outras palavras, o comportamento da energia muda de linear para uma lei de potência quando  $\rho > T^{D/\lambda}$ . Isto é consistente com o que observamos no caso anterior, uma vez que para  $T = 0$ , a energia depende da concentração como uma lei de potência com expoente igual a  $\lambda/D$  para qualquer valor de concentração. Para uma concentração fixa, na medida em que aumentamos a temperatura do meio, a razão  $U_{int}/T$  cai como uma lei de potência até o momento em que  $\rho = T^{D/\lambda}$  e, a partir de então, o aumento de temperatura reduz a razão  $U_{int}/T$  de forma linear.

Em seguida, para testarmos a hipótese de que a dimensionalidade está inserida no expoente  $\lambda/D$ , realizamos simulações de Monte Carlo de forma análoga ao que foi feito no caso da Figura 25, porém para sistemas tridimensionais ( $D = 3$ ). O gráfico da Figura 26 mostra como a energia  $U_{int}$  varia com a concentração  $\rho$  para diferentes valores de temperatura e do expoente  $\lambda$ , considerando o potencial de interação entre as partículas como sendo o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r) = \varepsilon \sigma^\lambda r^{-\lambda}$ , em três dimensões. Assim como na figura anterior, no painel interno do gráfico são apresentados os mesmos dados, porém com os eixos transformados, sendo o eixo vertical dado pela razão  $U_{int}/T$ , e o eixo horizontal dado pela razão  $\rho/T^{D/\lambda}$ . Para efeitos de simulação, consideramos o valor da constante de Boltzmann igual à unidade ( $k_B = 1$ ).

Através da Figura 26, observamos novamente a presença de dois regimes distintos, sendo um regime linear para  $\rho < T^{D/\lambda}$  e um regime em que a função  $U_{int}/T$  se comporta

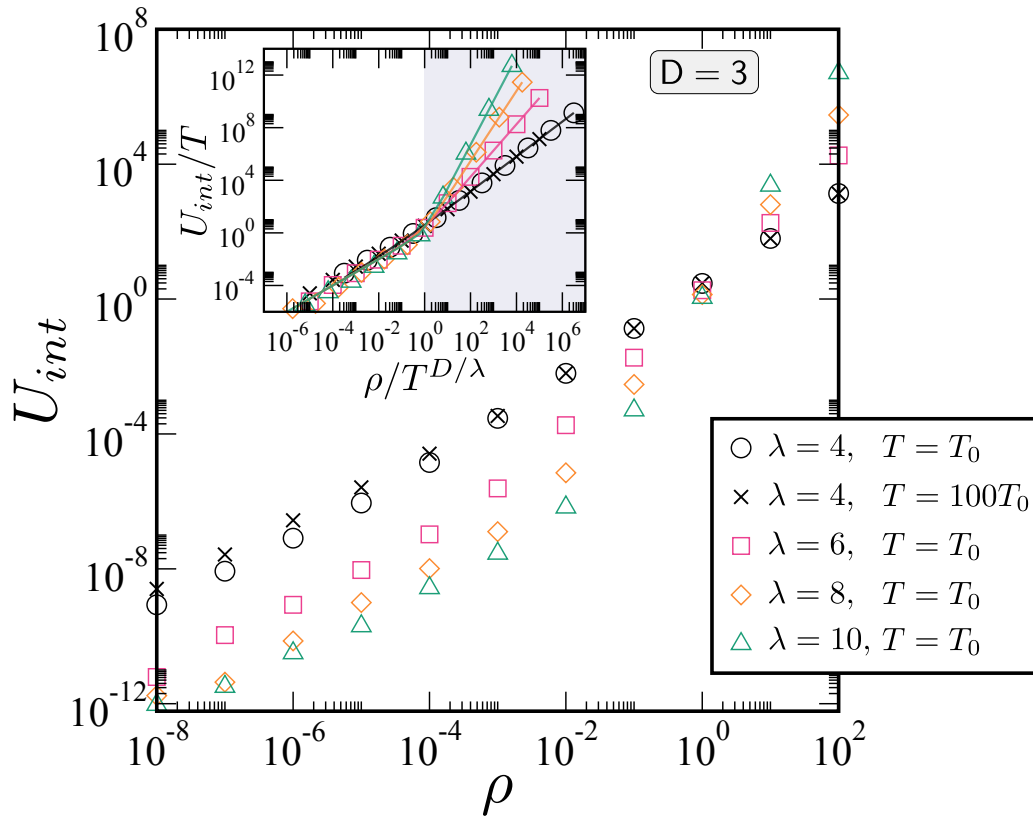


Figura 26: Resultados de Monte Carlo considerando um sistema de partículas imerso em um meio com temperatura  $T \neq 0$  para um sistema tridimensional ( $D = 3$ ). O potencial de interação entre as partículas é o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ , e as simulações foram realizadas para valores distintos de  $\lambda$  e  $T$ , sendo  $T_0 = 10^{-6}$ . Pelo gráfico, observa-se que existem dois regimes diferentes, sendo um regime linear ( $\rho < 1$ ) e outro regime ( $\rho > 1$ ) seguindo uma lei de potência com expoente igual a  $\lambda/D$ . Para efeitos de simulação, consideramos o valor da constante de Boltzmann igual à unidade ( $k_B = 1$ ).

como uma lei de potência quando  $\rho > T^{D/\lambda}$ . Consistentemente com a nossa observação anterior, o expoente da lei de potência é igual a  $\lambda/D$ . A Tabela 3 apresenta os valores de  $\alpha_{\lambda D}$  obtidos a partir dos ajustes não-lineares que geraram as curvas que aparecem nos painéis internos das Figuras 25 e 26.

<b>D</b>	<b><math>\lambda</math></b>	<b><math>\alpha_{\lambda D}</math></b>
2	4	2,86
2	6	2,11
2	8	1,78
2	10	1,56
3	4	2,89
3	6	1,82
3	8	1,33
3	10	1,09

Tabela 3: Valores do coeficiente  $\alpha_{\lambda D}$  para cada valor de  $D$  e  $\lambda$  utilizado. Esses coeficientes foram obtidos a partir de ajustes não-lineares do tipo  $y = x + \alpha_{\lambda D}x^{\lambda/D}$ , que deram origem às curvas presentes nos painéis internos das Figuras 25 e 26.

### 3.2.1 Determinação da concentração no estado estacionário

Escrevendo a equação da difusão levando em conta o termo dependente da temperatura  $T$ , temos [1, 2]

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \{\rho [\mathbf{f}_{ext} - a(\rho, T)\nabla \rho]\} + k_B T \nabla^2 \rho = 0, \quad (3.36)$$

onde o último termo é o termo dependente da temperatura. Note que incluímos aqui uma possível dependência da temperatura na função  $a$ , isto é,  $a = a(\rho, T)$ . Para o estado estacionário, temos que

$$\nabla \cdot \{\rho [\mathbf{f}_{ext} - a(\rho, T)\nabla \rho]\} = k_B T \nabla^2 \rho. \quad (3.37)$$

Para resolver esta equação, precisamos conhecer a função  $a(\rho, T)$ , além da força externa  $\mathbf{f}_{ext}$  e do valor da temperatura  $T$ . Analogamente ao que fizemos anteriormente para o caso em que  $T = 0$ , vamos supor novamente que  $a(\rho, T)$  pode ser determinado por meio da energia  $U_{int}$ , equação (2.15). Reescrevendo essa equação com a inclusão da dependência da temperatura na função  $a$ , temos

$$a(\rho, T) = 2 \frac{\partial U_{int}}{\partial \rho} + \rho \frac{\partial^2 U_{int}}{\partial \rho^2}, \quad (3.38)$$

uma vez que agora  $U_{int} = U_{int}(\rho, T)$ . É interessante comentar que quando estudamos os casos onde  $T = 0$  determinamos a função  $U_{int}$  a partir de uma rede regular de partículas. Não é de se esperar, entretanto, que para o caso de  $T \neq 0$  as partículas se estabeleçam em uma rede regular, uma vez que agora existe um ruído que perturba o sistema a todo instante. Portanto, é razoável esperar que a configuração de mínima energia em um sistema com temperatura não seja uma rede regular. Desse modo, com a ajuda

da equação (3.35), que foi gerada a partir dos resultados de simulação de Monte Carlo, podemos inserir  $U_{int}$  na equação (3.38) e resolver numericamente a equação da difusão no estado estacionário, Eq. (3.37).

Com a finalidade de testar a validade do modelo contínuo levando em conta a temperatura, bem como compreender as contribuições dos termos que dependem da temperatura, resolvemos numericamente as equações

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, T) \nabla \rho] + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (3.39a)$$

$$-\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}_{ext}) + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (3.39b)$$

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, 0) \nabla \rho] = 0 \quad (3.39c)$$

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, 0) \nabla \rho] + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (3.39d)$$

e apresentamos os resultados da solução de cada uma das equações na Figura 27, onde, para efeito de visualização, mostramos apenas o eixo positivo da posição  $x$  do perfil de concentração.

A equação (3.39a) é uma descrição que leva em conta a temperatura dentro da função  $a$ , além do termo proporcional a  $k_B T$ . A equação (3.39b) é uma boa descrição quando as partículas não interagem entre si, porém o meio está a uma temperatura  $T$  diferente de zero, como é o caso de um gás ideal. A equação (3.39c) é eficiente quando existe interação, porém sem flutuações térmicas, exatamente a mesma abordagem que utilizamos na seção que estudamos sistemas com  $T = 0$ , Sec. (3.1). E a equação (3.39d) é uma alternativa à Eq. (3.39a), com a diferença em que a função  $a$  depende apenas da concentração.

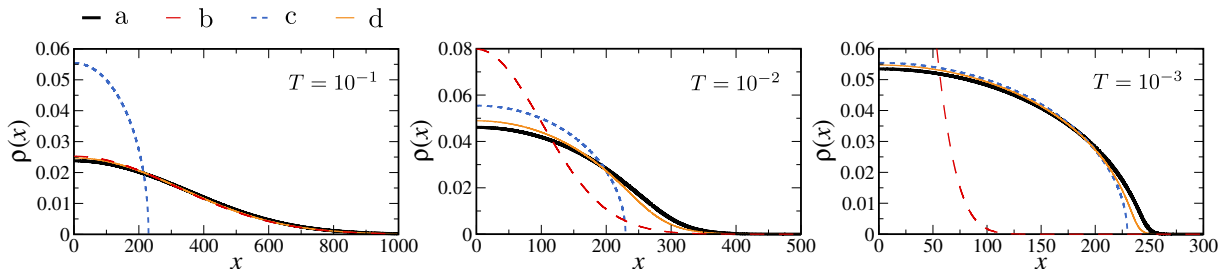


Figura 27: Soluções das equações diferenciais (3.39) para três valores de temperatura para o caso onde as partículas interagem com o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ , sendo  $\lambda = 4$ . As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (3.39).

Através da Figura 27, podemos observar que o caso de  $T = 10^{-2}$  apresenta uma maior diferença entre as quatro soluções das equações (3.39). Por esse motivo, realizamos simulações de Dinâmica Molecular com  $N = 1000$  partículas no interior de uma caixa de largura  $L_y = 50$  interagindo com o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ , e imersas em um

meio com temperatura  $T = 10^{-2}$ . Após um tempo suficientemente longo de simulação, na situação em que a energia potencial varia muito pouco, traçamos o perfil de densidade a partir da configuração final de partículas, utilizando o método do KDE. Os resultados estão apresentados na Figura 28, onde os símbolos representam os resultados de simulação, enquanto que as linhas representam os resultados de previsão do modelo contínuo inserindo a dependência da temperatura no modelo. Assim como na Figura 27, cada uma das linhas da Figura 28 representa uma das soluções das equações diferenciais (3.39).

Através dos resultados da Fig. 28, podemos observar que a descrição mais completa, Eq. (3.39a) é aquela que melhor descreve o nosso sistema. Ao observar as equações e suas respectivas soluções das Figs. 27 e 28, podemos fazer uma breve análise sobre a importância dos termos nas equações diferenciais. Para temperaturas muito baixas, a ponto de que o efeito das interações seja muito mais importante do que os efeitos relacionados às flutuações térmicas, a Eq. (3.39c) é suficiente para descrever o sistema, e a curva *a* torna-se muito semelhante à curva *c*. Por outro lado, para temperaturas muito elevadas, a ponto de que os termos proporcionais a  $T$  sejam muito mais relevantes, a descrição do sistema como um gás ideal poderia ser suficiente. Nesse caso de altas temperaturas, como observou a Referência [44, 2] para o caso de vórtices de supercondutores do tipo 2, o perfil de densidade é Gaussiano, e a curva *a* deveria ser muito semelhante à curva *b* na Figura 28.

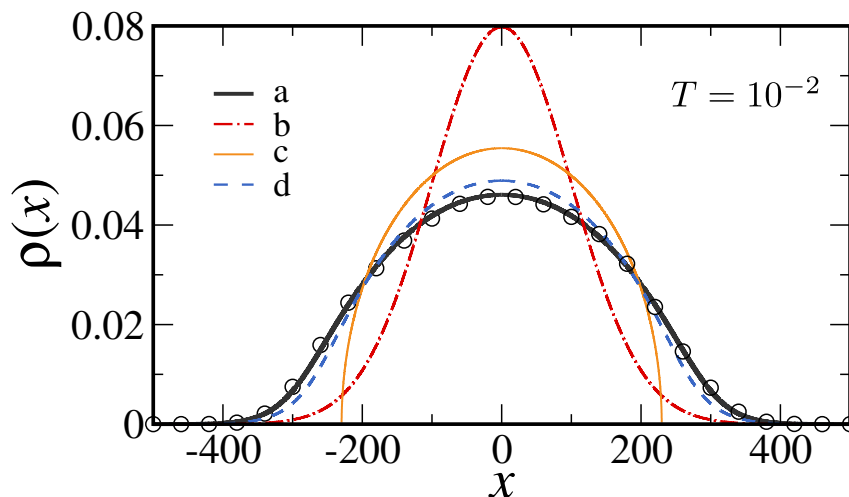


Figura 28: Comparação entre os resultados de simulação (círculos) e as soluções das equações diferenciais (3.39) para  $T = 10^{-2}$  considerando o caso em que as partículas interagem com o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ , sendo  $\lambda = 4$ . As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (3.39).

### 3.3 Sistemas com transição de fase estrutural

Por fim, testamos o modelo contínuo com temperatura  $T = 0$  para o caso em que as partículas interagem com um potencial  $V_\alpha(r)$  dado por

$$V_\alpha(r) = \varepsilon \frac{(r_c - r)^\alpha}{r}, \quad (3.40)$$

onde  $\alpha = 1,2$  e  $r_c$  é o raio de corte do potencial, que foi definido como unitário ( $r_c = 1$ ). Esse potencial foi escolhido por uma peculiaridade que ele tem frente aos demais estudados até aqui: observamos que, a depender do valor da densidade, um sistema de partículas interagentes pode assumir três estruturas diferentes. Por esse motivo, decidimos colocá-lo em uma seção separada dos demais. A Figura 29 mostra o comportamento da função  $V_\alpha$  em função da posição  $r$ .

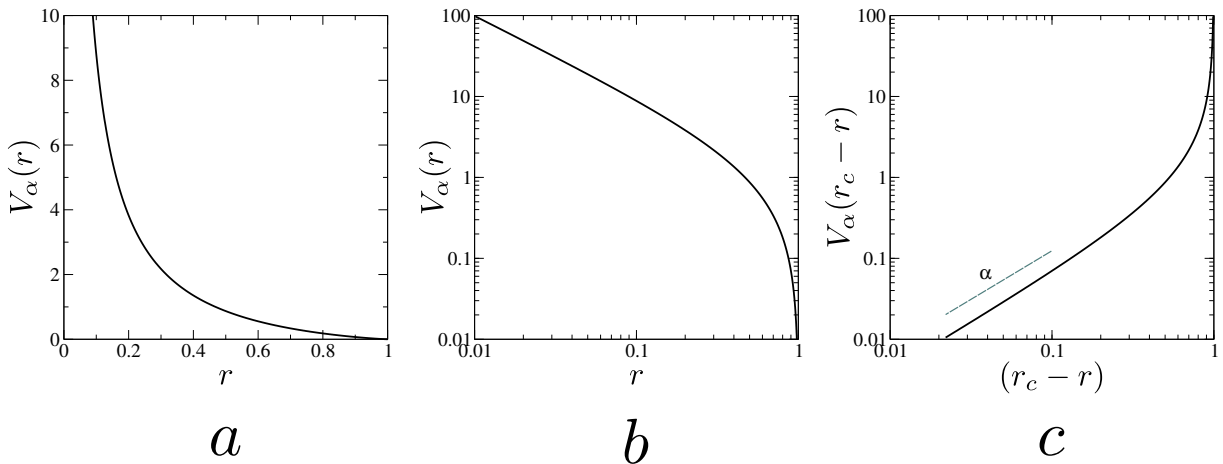


Figura 29: **(a)** Representação do potencial  $V_\alpha$  em função da posição  $r$  com os parâmetros  $\alpha = 1,2$  e  $r_c = 1,0$ ; **(b)** Representação de  $V_\alpha(r)$  em escala logarítmica; **(c)** Representação de  $V_\alpha(r_c - r)$  em escala logarítmica. O parâmetro  $\alpha$  controla a forma com que o potencial converge para zero ao se aproximar do raio de corte,  $r_c$ .

Para estudar o comportamento da energia com relação à concentração  $\rho$ , construímos redes triangulares, quadradas e do tipo hexagonal ou colmeia (*honeycomb*), como ilustra a Figura 30 e, a partir de tais estruturas, fizemos variar o valor da densidade da rede e calculamos a energia média por partícula. Para cada valor de  $\rho$ , escolhemos o menor valor de energia dentre as três estruturas para representar em um gráfico, uma vez que as partículas se arranjam em estruturas que minimizem a sua energia. Ao realizar simulações de Dinâmica Molecular para verificar o aparecimento de tais estruturas, observamos que na região *supostamente* do tipo hexagonal as partículas se rearranjam em uma estrutura diferente que não se assemelha com uma rede. Para essa região, realizamos simulações de



Dinâmica Molecular e obtivemos os valores da energia por partícula,  $U_{int}$ .

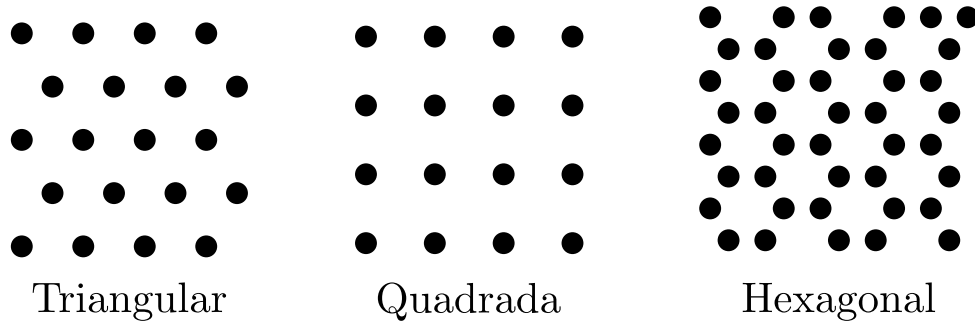


Figura 30: Ilustração das redes construídas (triangular, quadrada e hexagonal).

A Figura 31 apresenta o gráfico  $U_{int}$  em função de  $\rho$  obtidos similarmente ao procedimento explicado no parágrafo anterior. Na figura, podemos destacar a presença de três regiões sombreadas. Em cada uma das regiões, são mostrados pequenos painéis internos circulares que mostram a configuração de partículas obtida por meio de simulação de Dinâmica Molecular para cada caso: **estrutura triangular**, **estrutura quadrada**, e uma estrutura não-identificada, que vamos chamar de **estrutura amorfa**. Na região da estrutura amorfa, os valores de energia apresentados no gráfico são provenientes de simulação, dado a impossibilidade de se construir uma rede com essa configuração. A

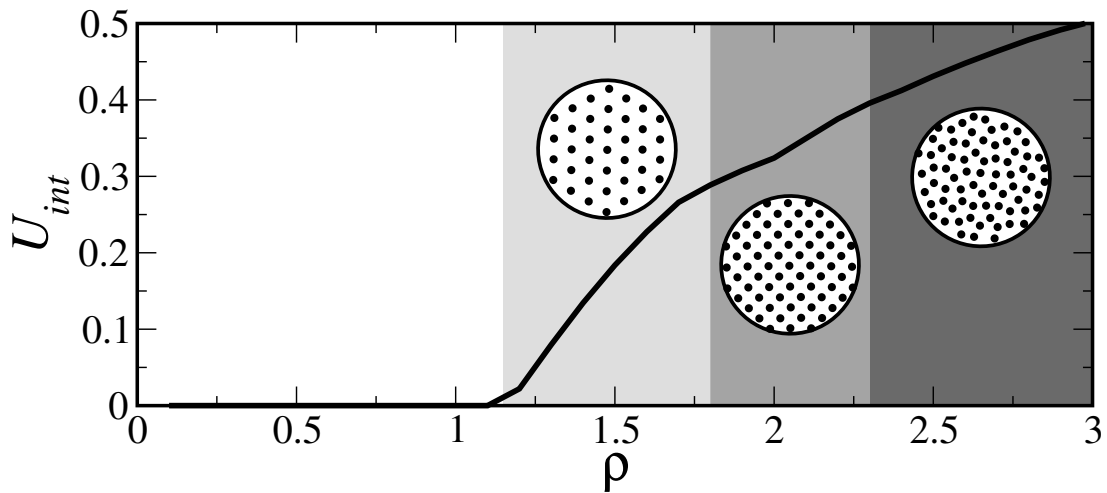


Figura 31: Energia mínima de interação por partícula ( $U_{int}$ ) como função da concentração  $\rho$  para o caso em que as partículas interagem com o potencial  $V_\alpha(r)$ . A depender do valor da concentração, podemos observar que a estrutura do sistema de partículas pode assumir três arranjos distintos, a saber: estrutura triangular, estrutura quadrada, e estrutura amorfa.

partir do gráfico de  $U_{int}$ , podemos resolver numericamente a equação

$$\int a(\rho) d\rho = \int f_{ext} dx, \quad (3.41)$$

e prever o perfil de concentração no estado estacionário. Para testar o modelo, simulamos um sistema com  $N = 15\,000$  partículas interagindo com o potencial  $V_\alpha(r)$ , e confinadas na direção  $x$  por um potencial externo parabólico,  $U_{ext} = kx^2/2$ . Por causa da forma do potencial de interação, verificamos que existem muitos estados de mínimo local de energia e, portanto, para esse caso foi necessário utilizar o método de recozimento (*annealing*), que em poucas linhas consiste basicamente em aquecer o sistema e resfriá-lo em seguida, para que o sistema saia do mínimo local e possa encontrar o menor estado de energia possível. A configuração de mínima energia que encontramos se encontra ao fundo da Figura 32. Por uma questão de visualização, apresentamos aqui somente a metade ( $x$  positivo) do sistema. Cada círculo representa uma partícula, e o seu preenchimento está relacionado à quantidade de vizinhos próximos que a partícula possui. Isto nos permite visualizar melhor os três arranjos discutidos anteriormente. Na região de maior densidade ( $x \lesssim 25$ ), vemos a estrutura amorfa, enquanto que nas outras duas regiões vemos as estruturas quadradas ( $25 \lesssim x \lesssim 55$ ) e triangulares ( $x \gtrsim 55$ ). A curva preta representa o perfil de concentração obtido a partir de um KDE da configuração final de partículas, enquanto que a linha tracejada é a previsão do modelo a partir da integração numérica da equação (3.41), lembrando que  $a(\rho)$  é obtido a partir da equação

$$a(\rho) = \frac{dU_{int}}{d\rho} + \rho \frac{d^2U_{int}}{d\rho^2},$$

e  $U_{int}$  nesse caso é obtido a partir da curva da Figura 31.

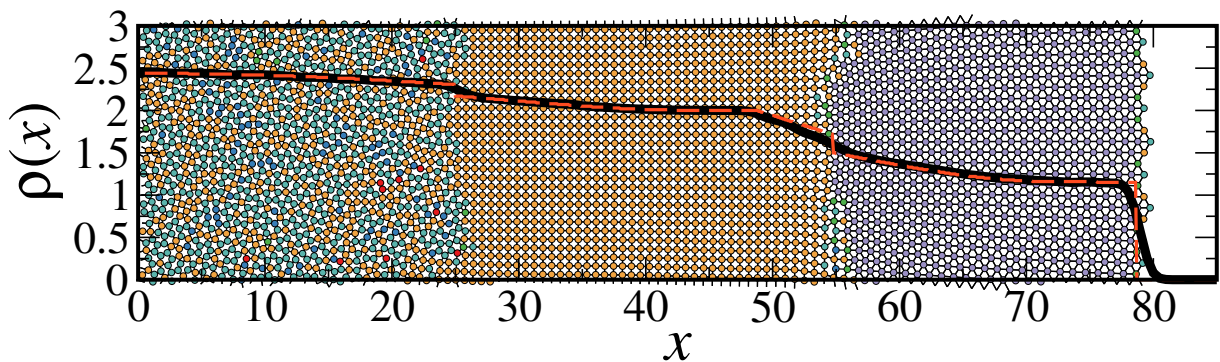


Figura 32: Perfil de concentração para um sistema composto por  $N = 15\,000$  partículas interagindo com o potencial  $V_\alpha(r)$ , onde  $\alpha = 1,2$ . As partículas estão sujeitas a uma força externa dada por  $-kx$ , onde  $k = 10^{-3}$ . A curva representada por uma linha sólida representa o perfil de concentração a partir dos resultados de simulação, enquanto que a curva representada por uma linha tracejada representa o perfil de concentração obtido a partir do modelo contínuo. A figura ao fundo mostra uma pequena região do sistema. Nessa figura, cada círculo representa uma partícula, e a cor do círculo está relacionada com a quantidade de partículas vizinhas que cada uma tem ao seu redor.

Pela figura, podemos observar que o modelo contínuo consegue prever com uma boa

precisão os resultados de simulação computacional.

## 4 Conclusões e perspectivas

Introduzimos uma abordagem para a construção de um modelo contínuo que descreve sistemas de partículas repulsivas imersas em um meio dissipativo considerando que a força sobre as partículas é proporcional ao gradiente de concentração, onde o termo de proporcionalidade,  $a(\rho)$ , é uma função da densidade. Nós mostramos que, sobretudo para baixas densidades, a função  $a(\rho)$  depende do potencial de interação, bem como da estrutura da rede formada pelas partículas no estado de concentração constante ( $\nabla\rho = \mathbf{0}$ ).

Para o potencial de interação na forma de uma lei de potência, o modelo contínuo se mostrou eficaz na previsão dos perfis de concentração. Ademais, conseguimos relacionar o perfil de concentração obtido com a distribuição de Tsallis. Mais precisamente, encontramos uma relação entre o expoente de interação  $\lambda$  e o  $q$  de Tsallis, de forma que a densidade  $\rho$  pode ser expressa como  $\rho(x) \sim [1 - (1 - q)\beta U_{ext}(x)]^{\frac{1}{1-q}}$  para qualquer  $q \leq 0$ , em princípio. Estudamos também a dinâmica desse sistema e observamos que a solução para o perfil de concentração obedece à hipótese de similaridade, significando que as distribuições de posição  $P(x, t)$  em diferentes instantes de tempo podem ser colapsadas umas nas outras a partir de um fator de escala. Analisamos também as distribuições de velocidades e obtivemos um resultado similar, isto é, as distribuições de velocidades apresentam uma forma parecida com a forma das distribuições de posição  $P(x, t)$ .

Além disso, para outros dois sistemas físicos estudados aqui (vórtices de supercondutores do tipo 2, plasma complexo e colóides),  $a(\rho)$  converge para um valor obtido através da equação (2.19) para valores elevados de concentração ( $\rho > \sigma^{-D}$ ). Na verdade, contanto que a força repulsiva e de curto alcance divirja mais lentamente do que  $r^{-(D+1)}$  na origem, a equação (2.19) converge e  $a(\rho)$  satura em um valor fixo para concentrações suficientemente grandes. Portanto, a hipótese de uma função  $a(\rho)$  constante é uma boa aproximação para muitos casos de interesse, especialmente aqueles muito densos. Para sistemas mais diluídos, ou para interações na forma de uma lei de potência, onde a equação (2.19) diverge, entretanto, é necessário que se leve em consideração a variação da razão  $a(\rho)$  com a densidade. É interessante destacar, ainda, que esse regime de baixa

concentração em sistemas de vórtices de supercondutores do tipo 2 é relevante, uma vez que o campo magnético crítico impõe uma restrição na densidade máxima de vórtices [8], acima da qual o estado de vórtices é destruído.

Após testar o modelo contínuo na ausência de flutuações térmicas, propusemos um modelo contínuo que leva em conta a temperatura, e testamos esse modelo para o caso em que as partículas interagem com o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ .

Por último, apresentamos resultados iniciais para um sistema de partículas que apresenta transições de fase. A depender do valor da concentração, a configuração das partículas desse sistema pode ser apresentada como uma rede triangular, uma rede quadrada, ou uma estrutura amorfa. Os nossos resultados preliminares sugerem que o modelo contínuo proposto se mostra eficaz.

Como perspectivas, esperamos testar a validade desse modelo para potenciais de interação com outras peculiaridades. Para exemplificar, poderíamos estudar o caso um potencial que contenha termos atrativos além de termos repulsivos, como é o caso do potencial que modela a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo 1,5 [58]. A Figura 33 é uma reprodução de um dos resultados da referência [58] que mostra o que acontece quando partículas interagem com um potencial com contribuições repulsivas e atrativas. Para pequenas densidades, ilhas de partículas são encontradas, como se pode ver no canto superior esquerdo da figura ( $N = 500$ ). À medida que a densidade aumenta, essas ilhas aumentam de tamanho (canto superior direito da figura,  $N = 1500$ ), até que se formam labirintos (canto inferior esquerdo da figura,  $N = 2500$ ) e posteriormente regiões de bolhas (canto inferior direito da figura,  $N = 3500$ ). Para densidades ainda mais elevadas, essas bolhas acabam desaparecendo e um estado de concentração constante de uma rede triangular é obtido. Esse resultado é compatível com a observação experimental realizada [59] em supercondutores do tipo 1,5. É interessante notar que, diferentemente dos casos estudados nesse trabalho, neste sistema de partículas o estado de mínima energia não apresenta necessariamente a concentração constante, como se pode ver pela Figura 33.

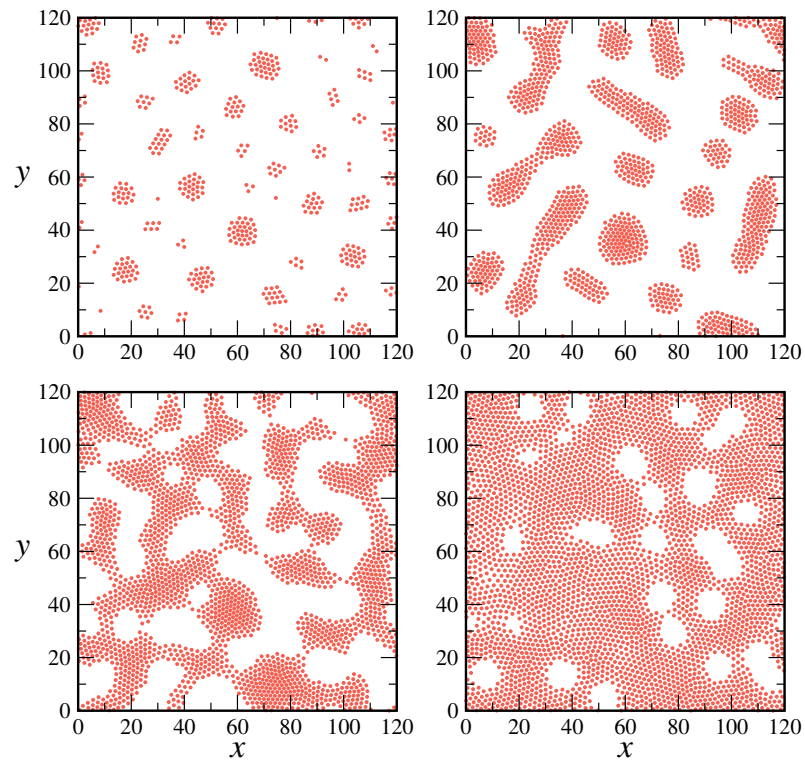


Figura 33: Configurações de vórtices de supercondutores do tipo 1,5 no estado estacionário para  $N = 500$ ,  $N = 1500$ ,  $N = 2500$  e  $N = 3500$ .

Como outra perspectiva, podemos destacar o estudo com temperatura para o potencial de London, que modela a interação entre vórtices de supercondutores do tipo 2. Isto pode ser feito similarmente ao estudo que fizemos para o potencial de lei de potência,  $V_\lambda(r)$ . Esse caso pode ser estudado e comparado com os resultados obtidos na Referência [2].

## Apêndice A – Métodos computacionais

Dada a impossibilidade de obtenção de uma solução analítica para um problema geral de um conjunto de muitos corpos, uma solução numérica é imprescindível. À medida que os computadores ficam cada vez mais sofisticados, os métodos computacionais permitem soluções numéricas de problemas cada vez mais complicados.

Simulações computacionais nos fornecem um caminho entre os detalhes microscópicos de um sistema (massa dos corpos, interação entre partículas, entre outros) e propriedades macroscópicas de interesse experimental (energia do sistema, coeficientes de transporte, temperatura, entre outras) [60]. Provavelmente o primeiro trabalho de simulação computacional foi realizado por Nicholas Metropolis e colaboradores [61], em 1953, lançando as bases do que hoje é conhecido como o método de Monte Carlo.

O campo de pesquisa de modelagem molecular e simulações, bem como seus conceitos teóricos relacionados, tem contribuído significativamente para a evolução contínua nas áreas de biologia, química, e ciência dos materiais. Um dos melhores exemplos de métodos que contribuíram nesse sentido certamente é o método de Dinâmica Molecular, onde as equações do movimento de cada partícula em um modelo atomístico são integradas no tempo para um dado sistema de interesse [4]. Neste capítulo, discutimos um pouco sobre os métodos de Dinâmica Molecular e Monte Carlo.

### A.1 Dinâmica Molecular

O problema de muitos corpos, originado na tentativa de descrever a dinâmica de um sistema planetário, é analiticamente insolúvel para três ou mais corpos. A técnica de Dinâmica Molecular consiste basicamente em resolver as equações do movimento para cada partícula que compõe o sistema, em qualquer escala de tamanho, em princípio. Ela permite que realizemos um experimento, ainda que virtual, que se assemelhe a um experimento físico real. Além disso, simular sistemas sob condições extremas, como valores

elevados de temperatura e pressão, por exemplo, pode ser um experimento muito mais fácil e seguro de ser preparado do que um experimento real. Da mesma forma que em um experimento, preparamos uma amostra, e a ela conectamos um instrumento de medida, de modo a realizar a medida ao longo do tempo. Nas simulações de Dinâmica Molecular, acontece algo semelhante: ao passo em que resolvemos as equações do movimento e o sistema evolui, podemos calcular propriedades do sistema que nos interessam até que o sistema entre em um estado de equilíbrio e possamos extrair alguma informação final sobre o mesmo. É importante comentar também que em uma simulação computacional tem-se uma informação completa sobre todo o sistema, enquanto que a informação que se obtém durante um experimento é parcial. Por outro lado, esta informação da simulação é compatível com um modelo que tenta explicar um determinado fenômeno da natureza, enquanto que um experimento é compatível com a própria natureza do fenômeno.

O primeiro trabalho utilizando o método, realizado por Berni Alder e Thomas Wainwright, foi publicado em 1957 [62]. Eles estudaram a distribuição de moléculas em um líquido, considerando um modelo no qual as moléculas são representadas por esferas rígidas. A simulação foi realizada no computador mais rápido da época, um IBM-704, permitindo a simulação do movimento de 32 e 108 moléculas, com tempo de simulação de 10 até 30 horas [63], o que rendeu a Alder a medalha Boltzmann, em 2001, pela criação do método. Hoje em dia, devido aos grandes avanços tecnológicos, simulações de dinâmica molecular podem ser feitas em computadores relativamente simples, embora haja um método que demande mais trabalho computacional, como é o caso da dinâmica molecular de primeiros princípios, também chamada de *ab initio* [64, 65]. Neste caso, interações interatômicas são levadas em conta, permitindo que ligações químicas se formem ou se rompam, necessitando, portanto, de uma abordagem bem mais apurada do problema, fazendo-se o uso da mecânica quântica.

Diferentemente da forma Newtoniana, com a qual abordamos o método neste trabalho, também é possível utilizar os formalismos de Lagrange e de Hamilton para descrever o sistema. Adicionalmente, embora seja um método a priori determinístico, uma vez que permite que possamos especificar as velocidades e posições das partículas em qualquer instante de tempo, a dinâmica molecular também permite que simulemos um sistema em contato térmico com um reservatório, de modo que sua temperatura seja constante e envolva, portanto, forças estocásticas.



### A.1.1 Condições de contorno periódicas

Em simulações de dinâmica molecular, colocamos as coordenadas dos pontos que representam as partículas dentro de uma região de simulação e deixamos o sistema evoluir com o tempo. Em sistemas finitos, da ordem de  $10^3$  partículas, por exemplo, uma parcela significativa das partículas se encontrará nas bordas do sistema, o que pode produzir efeitos indesejáveis se o objetivo for estudar um sistema infinito. Assim, à medida que o número de partículas é aumentado, o percentual de partículas presentes na borda se torna cada vez menos significativo, de forma que os resultados ficam cada vez mais realistas. Entretanto, o custo computacional aumenta com o aumento do número de partículas, o que resulta em um tempo de simulação maior. E não existe uma resposta definitiva para a questão do quão grande deve ser um sistema relativamente pequeno de forma que ele reproduza resultados similares a um sistema infinito [66].

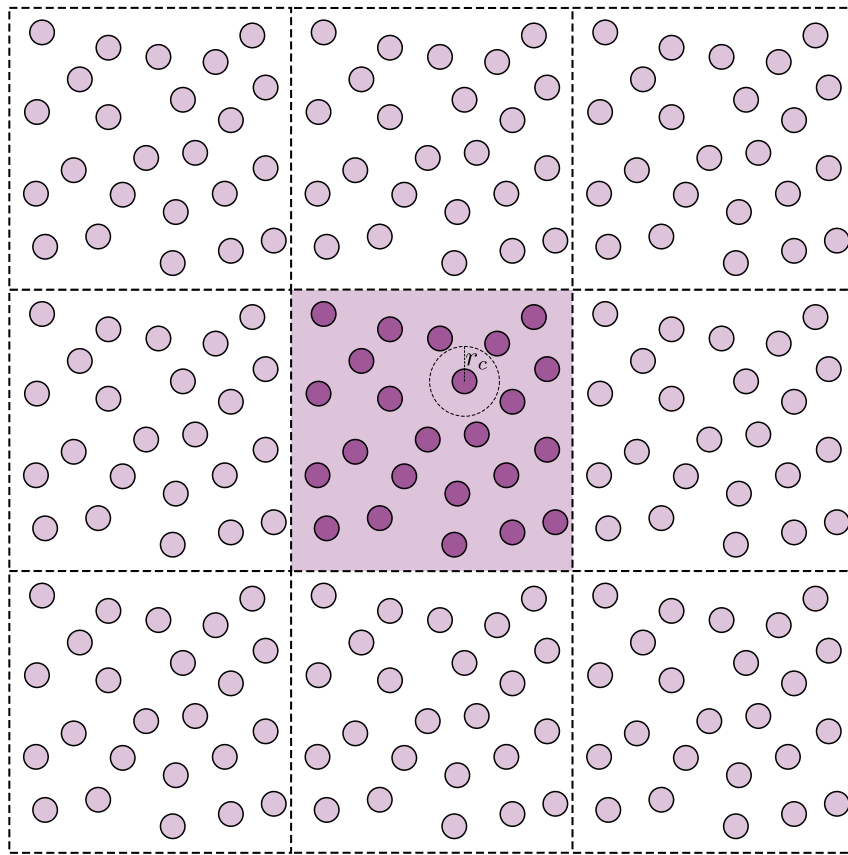


Figura 34: Ilustração da implementação das condições de contorno periódicas. Para casos em que o sistema não é bidimensional, a implementação é análoga.

Para resolver esse problema, implementamos as condições de contorno periódicas a partir de um sistema com um número reduzido de partículas de forma que estas não sejam influenciadas pelas bordas do sistema. Essas condições são facilmente implementadas

repetindo-se a célula de simulação, que está representada pela célula central da Figura 34, em todas as direções do sistema. No caso ilustrado, que é bidimensional, se uma partícula atravessa a região de simulação, ela reentrará imediatamente na região através da aresta oposta da célula sem mudança na direção ou na intensidade da velocidade. Esse procedimento é realizado ao deslocarmos a partícula, durante a integração das equações do movimento, que será explicado posteriormente. Além disso, existe ainda uma outra característica da implementação das condições de contorno periódicas, que é a convenção da mínima imagem, realizada durante o cálculo de interação de curto alcance<sup>9</sup> entre as partículas, e descrita a seguir: quando o módulo de uma certa componente da distância entre duas partículas é superior à metade do comprimento da célula de simulação na mesma direção, a interação entre essas partículas é contada como se uma das partículas estivesse a uma distância reduzida de  $L$ , onde  $L$  é o comprimento da aresta da célula de simulação na direção associada à componente. Em outras palavras, uma partícula interage com uma outra partícula ou com a sua imagem, dependendo de qual for a menor distância. Adicionalmente, em potenciais de curto alcance, que interessam ao nosso trabalho, normalmente existe uma distância além da qual não há interação entre as partículas, chamada de raio de corte ( $r_c$ ), utilizada convenientemente de forma a evitar cálculos de interação que não contribuem de forma relevante. Portanto, para que a convenção da mínima imagem seja implementada corretamente, é necessário que  $r_c$  seja no máximo igual à metade do comprimento da célula, pois, em caso contrário, uma dada partícula poderia interagir com outra e com a sua respectiva imagem, o que seria incoerente com uma situação real. Embora tenhamos abordado um caso bidimensional, esse artifício pode ser trivialmente estendido para três dimensões.

### A.1.2 O método cell-list

Dada uma partícula  $i$  qualquer de um sistema físico, podemos calcular numericamente as interações entre esta e as demais partículas do sistema de diferentes maneiras. A forma mais intuitiva de se fazer isto é simplesmente calcular a distância  $r_{ij}$  para cada partícula  $j$  ( $j \neq i$ ) presente no sistema. Sabendo-se a distância e a função do potencial de interação, podemos calcular a força resultante somando-se todas as contribuições das forças de interação entre as partículas  $j$  e a partícula  $i$  (Figura 35a), desde que a distância seja menor ou igual ao raio de corte do potencial,  $r_c$ . Entretanto, essa maneira pode ser muito dispendiosa, uma vez que ela leva em conta o cálculo de distâncias entre a

---

<sup>9</sup>Interações de curto alcance são interações cujo decaimento com a distância  $r$  é mais acentuado que  $r^{-D}$ , sendo  $D$  a dimensionalidade do sistema.

$i$ -ésima partícula e partículas que estão suficientemente distantes da primeira a ponto de não contribuírem significativamente para a energia. Alternativamente, podemos pensar em um método que consista em dividir a caixa de simulação em pequenas células, cujas arestas tenham um comprimento mínimo estabelecido, e computar a interação entre a  $i$ -ésima partícula e todas as outras partículas que se encontrem na mesma célula de  $i$  ou nas células adjacentes (Figura 35b).

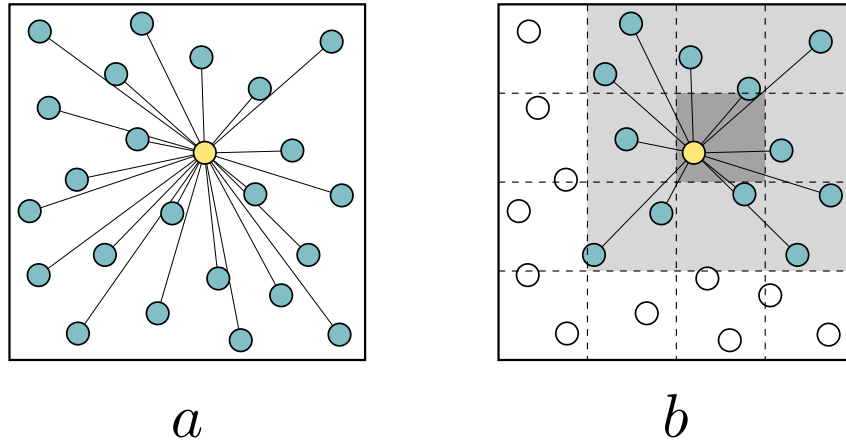


Figura 35: Duas maneiras de calcular a interação entre uma partícula de interesse, representada pelo círculo amarelo da figura, e suas vizinhas, representadas pelos demais círculos: **a)** calcular todas as distâncias entre a partícula de interesse e as demais que estão no sistema; **b)** dividir o sistema em diversas células (*cell-list*), de modo que as distâncias calculadas se restringem apenas à região onde se encontram as partículas que estão na mesma célula da partícula de interesse (região cinza escuro) e nas células adjacentes (região cinza claro).

O método *cell-list* (também chamado em inglês de *cell linked-lists method*) é muito utilizado em simulações de dinâmica molecular e Monte Carlo para aumentar a eficiência do programa, de forma a acelerar os cálculos de interação entre as partículas. A ideia principal do método é dividir a região de simulação onde se encontram  $N$  partículas em  $M \times M'$  diversas células menores, com arestas maiores ou iguais a  $r_c$ , de forma que uma partícula que se encontre em uma dada célula só interaja com as partículas que se encontrem na mesma célula e nas células adjacentes. Portanto, em um problema bidimensional, por exemplo, existem aproximadamente  $N_c = N/(MM')$  partículas em cada célula, e cada partícula interage com as partículas que se encontram nas 9 células mais próximas, incluindo a célula em que a partícula se encontra. Utilizando esse método em duas dimensões, precisamos examinar apenas  $9NN_c$  pares de partículas (ou a metade desse número se usarmos a terceira lei de Newton a nosso favor), em contraste com  $\frac{1}{2}N(N-1)$  pares utilizando o método convencional com ajuda da terceira lei [60], aumentando consideravelmente a vantagem da utilização do método à medida que aumentamos o número

total de células ( $MM'$ ) para um dado número de partículas. A seguir apresentamos a ideia básica do algoritmo para a implementação do método:

---

```

para (todos os pares de células vizinhas,  $C_i$  e  $C_j$ ) faça
  para (todas as partículas  $i$  pertencentes a  $C_i$ ) faça
    para (todas as partículas  $j$  pertencentes a  $C_j$ ) faça
       $r^2 = \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2$ 
      se  $r^2 \leq r_c^2$  então
        Calcula a interação entre  $i$  e  $j$ 
        Armazena a força que  $i$  e  $j$  experimentam
      fim se
    fim para
  fim para
fim para

```

---

Como foi mencionado anteriormente, as partículas de uma dada célula interagem somente com as partículas contidas na mesma célula e nas células vizinhas. Para que isso seja realizado, é necessário sabermos quais partículas estão em uma determinada célula. Para solucionar esse problema, utilizamos dois vetores, sendo um com a mesma dimensão do número total de células para guardar o número da primeira partícula que entrou em uma dada célula, e outro com a mesma dimensão do número total de partículas, que nos dá a informação sobre para qual partícula uma dada partícula aponta. Essa construção é feita de modo que, a partir do conhecimento de qual partícula entrou primeiro em determinada célula, podemos combinar os dois vetores de forma que saibamos todas as partículas que entraram naquela célula, conhecendo assim, quais partículas devem ser levadas em consideração e evitando que se perca tempo computacional com partículas que tenham contribuição irrelevante para as forças que desejamos calcular. Para mais detalhes, veja o capítulo 5 da referência [60] e o capítulo 3 da referência [66].

No caso de simulações de Monte Carlo, a seleção da partícula que a ser movida é dada verificando-se uma célula e suas vizinhas, e não o sistema como um todo [60]. O método *cell-list* tem sido usado com sucesso considerável em simulações de problemas que exigem um número elevado de partículas, tais como em simulações de plasmas, galáxias e cristais iônicos [60].

### A.1.3 Integrando as equações do movimento

Como será discutido no próximo capítulo, para o caso superamortecido, o termo de segunda ordem da segunda lei de Newton é negligenciado e, portanto, a equação a ser integrada é de primeira ordem, o que torna o algoritmo de integração mais simples. Para

resolvê-la, utilizamos o método de Euler, que é o método mais simples para a resolução de problemas de valor inicial descritos por equações diferenciais de primeira ordem.

Para calcular as forças que atuam em uma determinada partícula, utilizamos a equação do movimento superamortecido, que será apresentada na Seção 2.1 do próximo capítulo. No nosso problema, existem duas forças que atuam em uma dada partícula: a força de interação devido às outras partículas e a força de confinamento, que tende a concentrar todas as partículas no centro da célula de simulação. Dessa maneira, dada uma configuração de partículas em um instante de tempo  $t$ , calculamos a força que cada partícula sofre, e armazenamos em um vetor cuja dimensão é igual ao número de partículas. Em seguida, de posse desta informação, calculamos o deslocamento que cada partícula terá no instante de tempo posterior utilizando o método de Euler, que será explicado na próxima seção.

Para o caso onde não há superamortecimento, tem-se que levar em conta o termo de derivada segunda e resolver a equação de Newton propriamente dita. Neste caso, é mais recomendável a utilização de métodos mais sofisticados, como o método de Gear de ordem superior em  $\Delta t$  utilizando o algoritmo *predictor-corrector*, *Velocity-Verlet*, dentre outros [66, 67].

## A.1.4 Distribuições não-uniformes

Existem algumas situações em que é preciso gerar números aleatórios em uma distribuição não-uniforme, como uma distribuição Gaussiana, por exemplo<sup>10</sup>. Este é o caso quando se deseja simular um sistema de partículas em um ensemble canônico sujeito a uma temperatura fixa.

### A.1.4.1 O método Box-Muller

O método Box-Muller (também chamado de transformação de Box-Muller) é uma maneira proposta em 1958 por G. E. P. Box e M. E. Muller [69] de se gerar números seguindo uma distribuição Gaussiana de média 0 e variância unitária a partir de números uniformemente distribuídos. O método consiste originalmente em tomar duas distribuições uniformes,  $u$  e  $v$ , no intervalo  $[0, 1]$  e mapear em duas amostras de pontos,  $x$  e  $y$ , seguindo distribuições Gaussianas. Mais precisamente, as equações que geram  $x$  e  $y$  a partir de  $u$

---

<sup>10</sup>Para mais detalhes, veja a Referência [68].

e  $v$  são

$$x = R(u) \cos \Theta(v) \quad \text{e} \quad y = R(u) \sin \Theta(v), \quad (\text{A.1})$$

onde  $R^2(u) \equiv -2 \ln u$  e  $\Theta(v) \equiv 2\pi v$ . Como a variância do ruído precisa ser igual a  $2\gamma k_B T \delta(t - t')$  (equação 1.10), e o método de Box-Muller gera números aleatórios com variância unitária e média nula, então nas simulações de Dinâmica Molecular, é necessário multiplicar o número  $u$  por  $T\Delta t$  a fim de simular a temperatura do meio.

## A.2 Monte Carlo

As simulações computacionais nos permitem fazer experimentos numéricos e comparar com teorias aproximadas. O método de Monte Carlo é uma técnica que pode ser utilizada para calcular propriedades de equilíbrio de sistemas de muitos corpos [70]. Atualmente esse método tem sido uma ferramenta matemática comumente utilizada em diversos segmentos da ciência e da engenharia para simular diversos problemas que podem ser representados por processos estocásticos, isto é, processos que contêm componentes aleatórios que variam com o tempo. Na área de Física Médica, por exemplo, simulações do transporte de radiação podem ser realizadas por meio deste método, bem como cálculos de dose absorvida e outras grandezas de interesse nas áreas de terapêutica e diagnóstico [71].

As bases do método já eram conhecidas há muito tempo, no entanto a técnica passou a ser efetivamente utilizada somente nas últimas décadas. A origem do nome do método se deve pelo fato de as simulações estarem baseadas em eventos que ocorrem aleatoriamente. Fazendo uma referência à famosa cidade de Monte Carlo, no Principado de Mônaco, mundialmente conhecida como a cidade dos cassinos, o método foi batizado com esse nome durante o Projeto Manhattan na Segunda Guerra Mundial [71, 72].

Um exemplo muito comum de utilização desse método é para se calcular a área de uma determinada superfície [73]. Suponha uma superfície de área  $S$  inclusa dentro de um quadrado de lado unitário, como mostra a Figura 36a (em princípio, poderíamos ter um quadrado de lado  $L$ . A escolha para esta figura é uma mera questão de conveniência.).

Utilizando um gerador de números aleatórios, podemos sortear números reais aleatórios entre 0 e 1 nas coordenadas  $x$  e  $y$ , seguindo uma distribuição uniforme, como ilustra a Figura 36b. Se sorteássemos uma quantidade  $n$  muito grande de pontos, é de se esperar que teríamos a área do quadrado completamente preenchida de pontos. A partir desta configuração, poderíamos contar quantos pontos  $n'$  foram sorteados no interior da superfície  $S$ , e a proporção  $n'/n$  seria numericamente igual à área da superfície,  $S = n'/n$ .

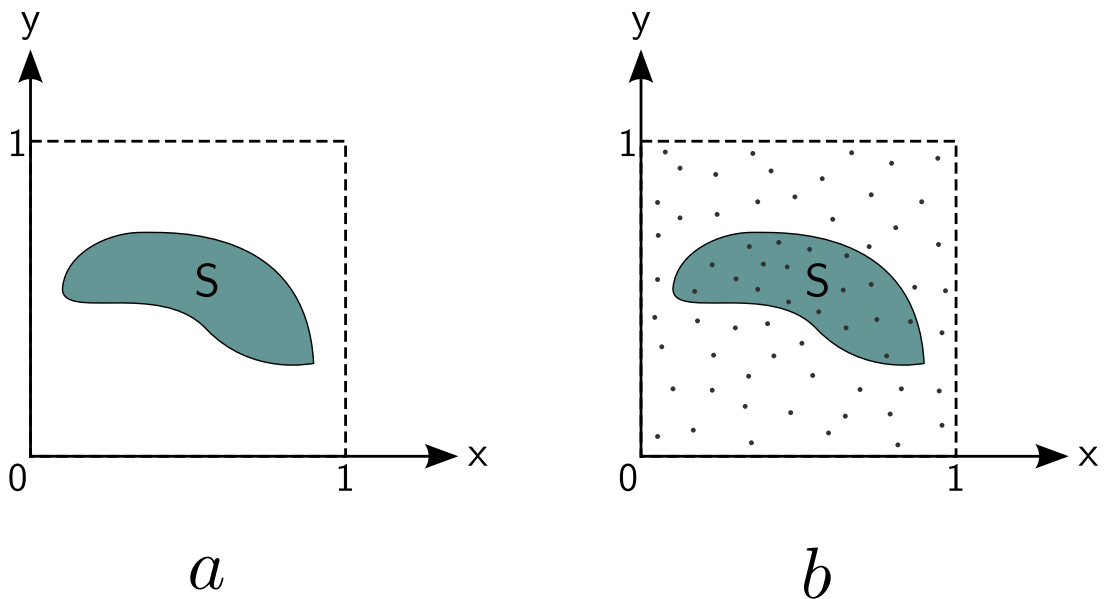


Figura 36: Ilustração do cálculo de uma determinada área utilizando o método de Monte Carlo. **a)** Uma dada superfície de área  $S$  contida dentro de um quadrado de lado unitário. **b)** Sorteamos  $n$  pontos no interior do quadrado unitário.

Um caso particular bem conhecido é o cálculo do  $\pi$  utilizando este método [74]. Nesse caso, a superfície genérica das Figuras 36a e 36b é substituída por um círculo inscrito de raio  $R$  igual à metade do lado  $L$  do quadrado ( $L = 2R$ ), e a razão  $n'/n$  nos fornece a razão entre a área do círculo inscrito e a área do quadrado, ou seja,  $S = \pi R^2 / (4R^2) = \pi/4$ . Desse modo, multiplicando-se o resultado por 4, pode-se estimar o  $\pi$  com boa precisão<sup>11</sup>.

Com este exemplo, podemos afirmar que o método de Monte Carlo consiste basicamente em uma maneira de calcular integrais utilizando amostras cujas distribuições são escolhidas. É um método extremamente geral, e seus princípios básicos nos permitem resolver qualquer problema em física estatística, em princípio [74].

Na seção anterior, vimos que no método de Dinâmica Molecular a simulação é baseada nas equações do movimento para cada partícula do sistema. O método de Monte Carlo, por outro lado, gera uma série de estados microscópicos por meio de uma regra aleatória que não depende das equações do movimento. Por ser um método que independe das equações do movimento, a simulação não se propõe a gerar a trajetória de uma partícula. É um método que ignora as trajetórias naturais de um sistema em troca de uma amostragem aleatória que reproduz uma distribuição de probabilidades com o objetivo de procurar um estado de equilíbrio termodinâmico. Desse modo, o conceito de tempo explícito não é aplicável [39] e, portanto, não é adequado utilizar Monte Carlo quando se deseja estudar propriedades dinâmicas (dependentes do tempo) de um sistema físico.

<sup>11</sup>Para mais detalhes, veja a Referência [74].

## A.2.1 O algoritmo de Metropolis

Se  $\mathbf{r}_i$  é o vetor posição de uma partícula  $i$  que compõe um conjunto de  $N$  partículas, então a energia de interação total  $U$  entre todas as partículas pode ser expressa como uma função  $U = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ . Se as variáveis constantes são  $N$ ,  $V$  e  $T$  (ensemble canônico), a probabilidade de termos um estado microscópico entre as posições  $\mathbf{r}_i$  e  $\mathbf{r}_i + \Delta\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) é dada por

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{\exp[-\beta U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)]}{\int_V \dots \int_V \exp[-\beta U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N}. \quad (\text{A.2})$$

O algoritmo de Metropolis é um método de Monte Carlo em que a probabilidade de transição ( $p_{ij}$ ) de um estado  $i$  para um estado  $j$  é dada por

$$p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \rho_j/\rho_i \geq 1 \\ \rho_j/\rho_i, & \text{se } \rho_j/\rho_i < 1 \end{cases}, \quad (\text{A.3})$$

onde  $\rho_i$  é dado pela equação (A.2) e  $\rho_j/\rho_i = e^{-\beta(U_j - U_i)}$ . Na prática, isto significa que se a diferença de energia entre os estados novo e atual for negativa ( $U_j < U_i$ ), o estado  $j$  é automaticamente aceito. Caso contrário, se o novo estado possuir uma energia superior à energia do estado antigo ( $U_j > U_i$ ), então o novo estado é aceito com uma probabilidade igual a  $e^{-\beta(U_j - U_i)}$ .

A seguir apresentamos a ideia do algoritmo do método de Monte Carlo que foi implementado neste trabalho, chamado de algoritmo de Metropolis, em homenagem a Nicholas C. Metropolis [61]:



---

Define as posições  $r_i$  de todas as partículas  
Define um vetor de deslocamento máximo,  $\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z)$   
Define a temperatura do sistema,  $T$   
Define o número máximo de passos de Monte Carlo,  $n_{max}$   
Zera o contador de passos de Monte Carlo,  $n_{step} = 0$   
**enquanto** ( $n_{step} \leq n_{max}$ ) **faça**  
    Escolhe uma partícula aleatória,  $i$   
    Calcula a energia do sistema antes de mover  $i$ ,  $U_0 = V(\mathbf{r})$   
    Gera três números aleatórios,  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$ , entre -1 e 1  
    Desloca a partícula  $i$  de  $\Delta\mathbf{r} = (a_1d_x, a_2d_y, a_3d_z)$ :  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i + \Delta\mathbf{r}$   
    Calcula a energia do sistema depois de mover  $i$ ,  $U_1 = V(\mathbf{r})$   
    Calcula  $\Delta U = U_1 - U_0$   
    **se** ( $\Delta U \leq 0$ ) **então**  
        Aceita o estado  
    **senão se** ( $\Delta U > 0$ ) **então**  
        Gera um número aleatório  $a$  entre 0 e 1  
        Aceita o estado somente se  $a < e^{-\Delta U/(kT)}$   
    **fim se**  
    **se** (o estado for rejeitado) **então**  
        Retorna ao estado anterior:  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i - \Delta\mathbf{r}$   
    **fim se**  
    Atualiza  $n_{step} = n_{step} + 1$   
**fim enquanto**

---

## Apêndice B – Cálculo aproximado de $C_\lambda$

Na Seção 3.1.1.2, mostramos os resultados de simulação para um sistema bidimensional de partículas que interagem com um potencial do tipo lei de potência,  $V_\lambda(r)$ . Naquela seção, apresentamos a expressão para o coeficiente  $C_\lambda$ , equação (3.13), que pode ser reescrita como

$$C_\lambda = \frac{3^{\frac{\lambda}{4}}(2 + \lambda)\lambda\varepsilon\sigma^\lambda}{2^{\frac{\lambda}{2}+3}} \sum_v \left(\frac{r_v}{\ell}\right)^{-\lambda}. \quad (\text{B.1})$$

Como foi comentado naquela seção, esse coeficiente está presente no cálculo de  $a_\lambda(\rho)$  e, conseqüentemente, no cálculo da energia de interação de uma partícula qualquer (partícula “central”) que se localiza em uma rede triangular de partículas, cujo parâmetro é igual a  $\ell$ . Sendo  $r_v$  o módulo da distância entre a partícula e outra partícula (vértice) da rede, temos que  $r_v \propto \ell$ .

Para calcular um valor aproximado de  $C_\lambda$ , podemos efetuar o somatório que aparece na equação (B.1) para os vértices mais próximos da partícula central. A Figura 37 ilustra uma rede triangular de partículas, representadas por círculos, onde a partícula central está representada por um círculo branco no centro da figura. Para efetuar o somatório, vamos considerar apenas as partículas mais próximas, representadas pelos círculos preenchidos. O número no interior de cada círculo representa a razão  $(r_v/\ell)$ , onde  $\ell$  é o parâmetro da rede e  $r_v$  é o módulo da distância da partícula central até uma dada outra partícula (vértice) da rede.

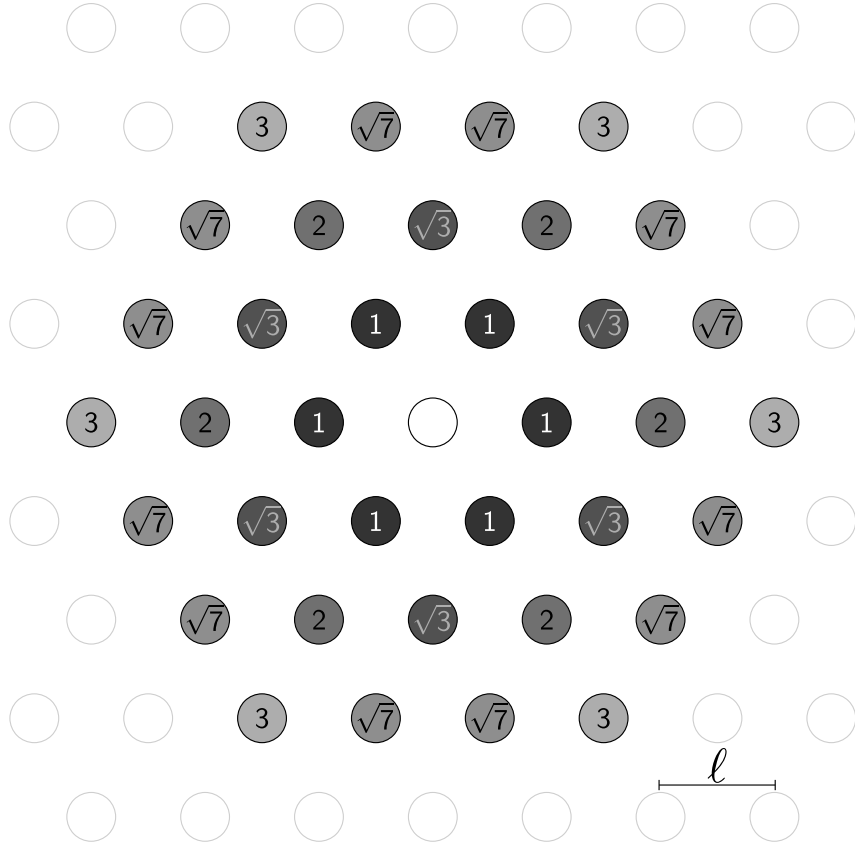


Figura 37: Rede triangular de partículas, representadas por círculos. Os vizinhos da partícula central a serem considerados no cálculo aproximado de  $C_\lambda$  estão preenchidos na figura. Sendo  $r_v$  o módulo da distância entre uma dada partícula (vértice da rede) e a partícula central, o número no interior de cada círculo representa a razão  $(r_v/\ell)$ , onde  $\ell$  é o parâmetro da rede.

A partir da figura, podemos observar que existem 6 partículas a uma distância  $\ell$  da partícula central, outras 6 partículas a uma distância  $\sqrt{3}\ell$  da partícula central, e assim por diante. Desse modo, a contribuição no somatório das primeiras partículas vizinhas é igual a 6, enquanto que as próximas 6 vizinhas contribuem com  $6\sqrt{3}^{-\lambda}$ . Considerando apenas as partículas mais próximas da partícula central, podemos escrever o somatório da equação (B.1) como

$$\sum_v \left(\frac{r_v}{\ell}\right)^{-\lambda} \approx 6(1 + \sqrt{3}^{-\lambda} + 2^{-\lambda} + 2\sqrt{7}^{-\lambda} + 3^{-\lambda}). \quad (\text{B.2})$$

Sendo assim, o coeficiente  $C_\lambda$  da equação (B.1) é aproximadamente igual a

$$C_\lambda \approx 6 \frac{3^{\frac{\lambda}{4}}(2 + \lambda)\lambda\varepsilon\sigma^\lambda}{2^{\frac{\lambda}{2}+3}} \left(1 + \sqrt{3}^{-\lambda} + 2^{-\lambda} + 2\sqrt{7}^{-\lambda} + 3^{-\lambda}\right), \quad (\text{B.3})$$

que são os valores apresentados na Tabela 2 da mesma seção, e utilizados nas curvas

tracejadas do modelo contínuo da Figura 16 por meio da equação (3.12),

$$\rho(x) = \left[ \rho_o^{\frac{\lambda}{2}} - \frac{\lambda}{2C_\lambda} U_{ext}(x) \right]^{\frac{2}{\lambda}} . \quad (\text{B.4})$$

## Apêndice C – Artigo publicado

César M. Vieira, Humberto A. Carmona, José S. Andrade, Jr., and André A. Moreira.  
*General continuum approach for dissipative systems of repulsive particles.* Phys. Rev. E  
**93**, 060103(R) – Publicado em 9 de Junho de 2016.

## General continuum approach for dissipative systems of repulsive particles

César M. Vieira, Humberto A. Carmona, José S. Andrade, Jr., and André A. Moreira

*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60451-970 Fortaleza, Brazil*

(Received 15 February 2016; published 9 June 2016)

We propose a general coarse-graining method to derive a continuity equation that describes any dissipative system of repulsive particles interacting through short-ranged potentials. In our approach, the effect of particle-particle correlations is incorporated to the overall balance of energy, and a nonlinear diffusion equation is obtained to represent the overdamped dynamics. In particular, when the repulsive interaction potential is a short-ranged power law, our approach reveals a distinctive correspondence between particle-particle energy and the generalized thermostatics of Tsallis for any nonpositive value of the entropic index  $q$ . Our methodology can also be applied to microscopic models of superconducting vortices and complex plasma, where particle-particle correlations are pronounced at low concentrations. The resulting continuum descriptions provide elucidating and useful insights on the microdynamical behavior of these physical systems. The consistency of our approach is demonstrated by comparison with molecular dynamics simulations.

DOI: [10.1103/PhysRevE.93.060103](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.060103)

Dissipative systems of repulsive particles can be representative of many physical phenomena in nature. For instance, type-II superconductors can be populated by vortices of supercurrents that pierce the system in the direction of the applied magnetic field [1]. These vortices can be considered as single particles, and will dissipate energy as long as they move [2–6]. Another notable example is complex plasma [7,8], where charged microparticles are immersed in an ionized gas. The free charges in the plasma screen the electric repulsion between particles, and electromechanical couplings between particles and media act as a drag force to the movement [7]. Colloidal systems are also well described with such approach [9,10].

A general equation of motion for systems of interacting particles in a dissipative media can be written as

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + \sum_e \mathbf{F}_e - \gamma \mathbf{v}_i + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_i(t), \quad (1)$$

where  $\mathbf{v}_i$  is the velocity of a single particle  $i$ . The first summation in Eq. (1) goes over the forces due to other particles. We refer to the effect of the other particles in the system as the internal force  $\mathbf{F}_{\text{int}} = \sum_j \mathbf{F}_{ij}$ . The second summation in Eq. (1) accounts for the action of external fields on the particle, for instance, the electric and gravitational fields in the case of complex plasma, or applied electric currents in the case of superconducting vortices. We use  $\mathbf{F}_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) = \sum_e \mathbf{F}_e$  to represent the external forces acting on the particle. The term  $-\gamma \mathbf{v}_i$  describes the dissipative force, and  $\sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_i(t)$  represents the thermal noise. Often in such systems inertial effects can be neglected, when compared to the other terms. In these situations, the system is said to obey an overdamped dynamics. Also, in situations where thermal effects can be neglected, one has the velocity of a particle proportional to the resultant force acting on it,

$$\gamma \mathbf{v}_i = \mathbf{F}_i, \quad (2)$$

where  $\mathbf{F}_i \equiv \mathbf{F}_{\text{ext}} + \mathbf{F}_{\text{int}}$ .

Solving the equations of motion for a macroscopic system can be unpractical. One possible approach is to describe the system by a “coarse-grained” continuous function  $\rho(\mathbf{r}, t)$  such

that  $\rho(\mathbf{r}, t)dv$  is the number of particles in the volume  $dv$ , at any time  $t$  and position  $\mathbf{r}$ . Since the number of particles is conserved, continuity holds,  $\partial\rho(\mathbf{r}, t)/\partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ , where  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \equiv \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r})$ , with the field  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  giving the velocity of the particles in  $dv$ . The velocity field should be proportional to the resultant force field  $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_{\text{ext}} + \mathbf{f}_{\text{int}}$  acting on each particle near  $\mathbf{r}$ . While the external force may depend explicitly on the position,  $\mathbf{f}_{\text{ext}} = \mathbf{F}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ , in order to determine the force due to particle-particle interactions  $\mathbf{f}_{\text{int}}$ , it is necessary to know the particle concentration profile. Previous efforts in this direction [11] have considered that the internal force should be proportional to the concentration gradient,  $\mathbf{f}_{\text{int}} = -a\nabla\rho$ . Here we show that this expression remains valid only if particle-particle correlations are unimportant. We then generalize the approach developed in [11] by disclosing an analytical formalism to account for these correlations in terms of a continuum model, with the only restriction being that the interaction potential decreases fast enough to be considered short range. We demonstrate the usefulness of our approach by comparing its predictions with the results from numerical simulations.

To devise our continuum approach, we note that the potential energy of a particle  $U_1$  should be a function of the local concentration and its derivatives. Under conditions where the interaction has a finite range of action, and  $\nabla\rho(\mathbf{r})$  varies slowly enough to be considered constant within this interaction range, it is reasonable to disregard higher derivatives and use a first order expansion to describe the surrounding concentration,  $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{0}, t) + \mathbf{r} \cdot \nabla\rho(\mathbf{r}, t)|_{(\mathbf{r}=\mathbf{0})}$ . Moreover, for repulsive interactions, the state of minimum energy is always homogeneous, therefore any contribution of  $\nabla\rho$  to the energy  $U_1$  should be in second order. We conclude that, in a first order approximation, the potential energy of a single particle is a function of the local concentration only,  $U_1 \equiv U_1(\rho)$ .

In our continuum description the total potential energy is

$$U_T = \int \rho(\mathbf{r}, t) U_1[\rho(\mathbf{r}, t)] dv, \quad (3)$$

where the integral is done over the volume of the system. Considering that the single particle potential energy  $U_1$

depends implicitly on time through  $\rho(\mathbf{r}, t)$ , the time variation of the total potential energy is

$$\frac{dU_T}{dt} = \int \frac{\partial \rho}{\partial t} \left( U_1 + \rho \frac{dU_1}{d\rho} \right) dv. \quad (4)$$

Let us define  $W(\mathbf{r})$  as the term between parenthesis in Eq. (4). The continuity equation together with the identity  $W \nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot (\mathbf{J}W) - \mathbf{J} \cdot \nabla W$  split Eq. (4) into two integrals. From the Gauss theorem, as long as there is no current  $\mathbf{J}$  entering the border of the system, the integral of  $\nabla \cdot (\mathbf{J}W)$  vanishes, resulting in

$$\frac{dU_T}{dt} = \int \mathbf{J} \cdot \nabla \left( U_1 + \rho \frac{dU_1}{d\rho} \right) dv. \quad (5)$$

On the other hand, the variation of the potential energy is given by the dissipated power,  $dU_T/dt = -\sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{v}_i$ , which in the continuum description can be expressed as

$$\frac{dU_T}{dt} = -\int \mathbf{J} \cdot \mathbf{f}_1 dv, \quad (6)$$

where we use  $\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$ . Comparing Eqs. (5) and (6) we find

$$\mathbf{f}_1 = -\nabla \left( U_1 + \rho \frac{dU_1}{d\rho} \right). \quad (7)$$

Considering  $U_1 = U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + U_{\text{int}}(\rho)$ , we obtain  $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_{\text{ext}} + \mathbf{f}_{\text{int}}$ , with  $\mathbf{f}_{\text{ext}} = -\nabla U_{\text{ext}}$ , and

$$\mathbf{f}_{\text{int}} = -\nabla U_{\text{int}} = -a(\rho) \nabla \rho, \quad (8)$$

with

$$a(\rho) = 2 \frac{dU_{\text{int}}}{d\rho} + \rho \frac{d^2 U_{\text{int}}}{d\rho^2}. \quad (9)$$

Therefore, the function  $a(\rho)$ , and consequently the force  $\mathbf{f}_{\text{int}}$ , are determined from the dependence of the particle-particle potential energy  $U_{\text{int}}$  on the concentration  $\rho$ . Including this in the continuity equation, we obtain

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \{ \rho [\mathbf{f}_{\text{ext}} - a(\rho) \nabla \rho] \}, \quad (10)$$

where the nonlinear term  $a(\rho) \rho \nabla \rho = -\rho \mathbf{f}_{\text{int}}$  accounts for the contribution of the interparticle forces to the local current.

The particle-particle interaction energy will depend on the concentration around a given particle as

$$U_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int \rho'(\mathbf{r}, t) V(r) dv, \quad (11)$$

where  $\rho'(\mathbf{r}, t)$  is the expected particle concentration at a point displaced by  $\mathbf{r}$  from a central particle, and  $V(r)$  is a repulsive radial interaction potential. A simple approximation to the potential energy  $U_{\text{int}}$  is obtained by disregarding particle-particle correlations and assuming that the concentration

$\rho' \equiv \rho$  is a constant within the range of the potential, leading to

$$U_{\text{int}} = \frac{\rho \Omega_D}{2} \int_0^\infty V(r) r^{D-1} dr, \quad (12)$$

where  $D$  is the dimensionality of the system. In two dimensions  $\Omega_2 = 2\pi$  is the angle of a circumference, while in three dimensions  $\Omega_3 = 4\pi$  is the solid angle of a sphere. Substituting Eq. (12) for  $U_{\text{int}}$  in Eq. (9), we conclude that  $a$  is a constant, and the internal force is proportional to the local gradient as

$$\mathbf{f}_{\text{int}} = -\nabla \rho \Omega_D \int_0^\infty V(r) r^{D-1} dr. \quad (13)$$

For the two-dimensional case, Eq. (13) is consistent with the form proposed in [11,12]. As already mentioned, this approach disregards particle-particle correlations that could be relevant, and therefore it is a good approximation only under certain conditions.

As a matter of fact, dissipative systems of repulsive particles tend to form structural lattices with at least local order. The effect of the local correlations is especially important for interactions in the fashion of a power law,  $V_\lambda(r) = \varepsilon(r/\sigma)^{-\lambda}$ . If the exponent  $\lambda$  is large enough,  $\lambda > D$ , the force is short ranged [i.e., the integral in Eq. (13) does not diverge for large distances,  $r \rightarrow \infty$ ], however, it diverges at  $r \rightarrow 0$ . It is not likely, however, that two repulsive particles in a dissipative medium will ever collide, therefore this divergence is not physical. A possible way to deal with correlations would be to consider an exclusion region of finite radius  $r_o$  around each particle, which becomes smaller as the concentration grows,  $r_o = \alpha \rho^{-1/D}$ . In this way, the integral (13) can be written as

$$\mathbf{f}_{\text{int}} = -\nabla \rho \Omega_D \int_{\alpha \rho^{-1/D}}^\infty V(r) r^{D-1} dr, \quad (14)$$

where the force  $\mathbf{f}_{\text{int}}$  is still proportional to the gradient, but now with  $a \equiv a(\rho)$ , since the exclusion radius  $r_o$  depends on  $\rho$ . For the case of a power-law potential,  $a(\rho)$  becomes finite and is given by

$$a_\lambda(\rho) = \Omega_D \frac{\varepsilon \sigma^\lambda \alpha^{D-\lambda}}{\lambda - D} \rho^{(\lambda/D)-1}, \quad (15)$$

with the condition  $\lambda > D$ . Although this is just a qualitative correction, it clearly shows that particle-particle correlations affect the resultant force. Moreover, it also indicates that these effects may be accounted for in a continuum model through replacement of the constant  $a$  by the function  $a(\rho)$ . In what follows we propose a general way to obtain an estimate of the function  $a(\rho)$ .

Due to the dissipative medium, the particles will form configurations of low potential energy. The least-energy state, or ground state, depends on the form of the interaction, and on the particle concentration. However, for repulsive interactions, this ground state should be homogeneous,  $\nabla \rho = \mathbf{0}$ . Also, often the ground state is a regular lattice. We propose that the structure formed by the particles in the ground state could be used to calculate the single particle energy,

$$U_{\text{int}}(\rho) = \frac{1}{2} \sum_v V(r_v), \quad (16)$$

where  $V(r)$  is the pair interaction potential, and the sum is over the vertices  $v$  of the homogeneous lattice. Considering the case of a binding potential, where  $V(r)$  changes from repulsive to attractive with the distance  $r$ , we would have a nonmonotonic  $U_{\text{int}}$  with a minimum at some value  $\rho \neq 0$ . This leads to a negative  $a(\rho)$  with particles moving from lower to higher concentrations, aggregating in clusters. In this case, our assumption of a slowly varying concentration should not be applicable.

The dependence on  $\rho$  is implicit in the positions  $r_v$ . To compute the variation  $dU_{\text{int}}/d\rho$  it is useful to consider that the lattice parameter of the homogeneous lattice should depend on the concentration  $\ell \sim \rho^{-1/D} \Rightarrow (d\ell/d\rho) = -\ell/D\rho$ . Note also that the positions of the vertices are proportional to  $\ell$ , that is,  $dr_v/d\ell = r_v/\ell$ . We can use this to differentiate any function in the form  $G(\rho) = \sum_v g(r_v)$ , leading to  $dG/d\rho = -(1/D\rho) \sum_v r_v [dg(r_v)/dr_v]$ . From the derivatives of  $U_{\text{int}}$  in Eq. (9), we obtain

$$a(\rho) = \frac{1}{2D^2\rho} \sum_v r_v [(D-1)f(r_v) - r_v f'(r_v)]. \quad (17)$$

From Eq. (17), the internal force over a particle is obtained from the surrounding concentration of particles  $\rho$  and local gradient concentration  $\nabla\rho$ . The sum in Eq. (17) goes over all the vertices of a homogeneous lattice of concentration  $\rho$ , and includes terms on the magnitude of interaction force  $f = -dV/dr$  as well as its derivative  $f' = df/dr$ . For most interaction potentials, this sum cannot be analytically determined. However, knowing the homogeneous lattice and interaction, it is a simple task to use Eq. (17) to obtain  $a(\rho)$  numerically for any concentration.

In the case of a two-dimensional system of particles interacting through a power law,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ , for all concentrations the homogeneous system rests in a triangular lattice with lattice parameter  $\ell = 2^{1/2}/(3^{1/4}\rho^{1/2})$ , leading to

$$a_\lambda(\rho) = \rho^{(\lambda/2)-1} \left[ \frac{3^{\lambda/4}(2+\lambda)\lambda\varepsilon\sigma^\lambda}{2^{(\lambda/2)+3}} \sum_v \left( \frac{\ell}{r_v} \right)^\lambda \right]. \quad (18)$$

Note that the positions of the vertices  $r_v$  are proportional to  $\ell$ , therefore the terms in the sum of Eq. (18) are independent on  $\rho$ , which is consistent with our qualitative prediction, Eq. (15).

We now test our approach by comparing its predictions with numerical simulations. In our first test we let  $N$  particles interact in a two-dimensional system, confined in the  $x$  direction by an external potential  $U_{\text{ext}}(x)$ , and with periodic boundary conditions in the  $y$  direction. We stop our simulation when the system reaches mechanical equilibrium, that is,

$$F_{\text{int}} + F_{\text{ext}} = -a(\rho) \frac{d\rho}{dx} - \frac{dU_{\text{ext}}(x)}{dx} = 0. \quad (19)$$

One can then determine  $\rho(x)$  by solving Eq. (19) with the condition  $L_y \int \rho dx = N$ , where  $L_y$  is the transverse dimension of the simulation cell. For the case of a power-law interaction,  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ ,  $a_\lambda(\rho)$  can be obtained from Eq. (18), and the solution of Eq. (19) is

$$\rho(x) = \left[ \rho_0^{\lambda/2} - \frac{\lambda}{2C_\lambda} U_{\text{ext}}(x) \right]^{2/\lambda}, \quad (20)$$

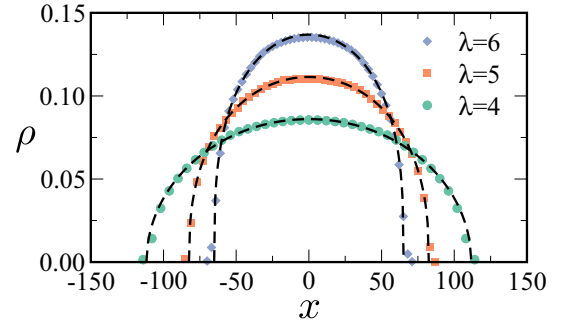


FIG. 1. Density profiles at the stationary state obtained from simulations (symbols). We consider two-dimensional systems of  $N = 900$  particles interacting through a power-law repulsive potential  $V_\lambda(r) = \varepsilon\sigma^\lambda r^{-\lambda}$ . In the  $x$  direction, the particles are confined by a quadratic potential  $U_{\text{ext}}(x) = kx^2/2$ , with  $k = 10^{-5}\varepsilon\sigma^{-2}$ . In the  $y$  direction the simulation cell has a dimension  $L_y = 60\sigma$ , with periodic boundary conditions. We present results for simulations of this system considering three different values of  $\lambda$ . The dashed lines represent the results of the continuum model via Eq. (20).

where we define the parameter independent on  $\rho$ ,  $C_\lambda = a_\lambda(\rho)\rho^{1-\lambda/2}$ . Figure 1 shows that Eq. (20) follows closely the results from numerical simulations for different values of  $\lambda$ . In our results, positions are expressed in units of  $\sigma$  and the concentration  $\rho$  is expressed in units of  $\sigma^{-D}$ .

For systems of particles interacting through power-law potentials, the density of energy is a power of the concentration,  $\rho U_{\text{int}}(\rho) \sim \rho^{1+\lambda/D}$ . In this case, considering  $q = 1 - \lambda/D$ , the internal energy density, minimized by the overdamped dynamics has a correspondence with the density of entropy in the framework of the generalized Tsallis thermostatics,  $s_q(\rho) = (\rho^{2-q} - \rho)/(q-1)$  [13], that should therefore be maximized. In fact, taking the same steps followed in [14], and first introduced in [15], it is possible to show that, as long as  $a(\rho) \sim \rho^{(\lambda/D)-1}$ , as in Eq. (18), Eq. (10) will drive the system towards an equilibrium state described by Tsallis distribution  $P_q(\mathbf{r}) \sim [1 - (1-q)\beta U_{\text{ext}}(\mathbf{r})]^{1/(1-q)}$  [16–18], thus generalizing the previous result of [14,19] for any  $q \leq 0$ .

Next, we show applications of our approach to models of two physical systems, namely, superconducting vortices and complex plasma. In type-II superconductors the magnetic flux is confined to small regions of the superconductor, each region being a vortex of super-currents carrying one quanta of magnetic flux. Since the vortices cross the sample system in the direction of the applied magnetic field, this corresponds to a quasi-two-dimensional system. Interacting through the so-called London potential [1,5],  $V_S(r) = \varepsilon K_0 (\frac{r}{\sigma})$ , vortices dissipate energy when moving. The least-energy state of this system is a triangular lattice, also called the Abrikosov lattice [20]. Figure 2 shows the function  $a(\rho)$ , computed through Eq. (17), for this system. For larger concentrations ( $\rho > \sigma^{-2}$ ) one sees that the function saturates at the value predicted by Eq. (13), namely,  $a = 2\pi\varepsilon\sigma^2$ . However, for smaller concentrations the particle-particle correlations become relevant and  $a(\rho)$  goes to zero as  $\rho$  decreases. We test this result by simulating systems confined in one direction by a potential  $U(x) = kx^2/2$ , and with periodic boundary condition in the



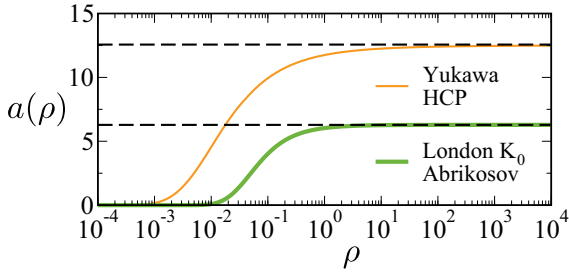


FIG. 2. The function  $a(\rho) = |\mathbf{f}_{\text{int}}|/|\nabla\rho|$  as determined through Eq. (17). Two systems are investigated, namely, complex plasma particles interacting through the Yukawa potential,  $V_Y = \varepsilon\sigma \exp(-r/\sigma)/r$ , and forming hexagonal close-packed (hcp) lattices in three dimensions; superconducting vortices interacting through the London potential,  $V_S = \varepsilon K_0(r/\sigma)$ , and forming triangular (Abrikosov) lattices. As indicated by the dashed lines, for high enough concentrations,  $\rho > \sigma^{-D}$ , the curves converge to the value given by Eq. (13),  $a = 4\pi\varepsilon\sigma^3$  and  $a = 2\pi\varepsilon\sigma^2$ , for the three- and two-dimensional systems, respectively.

other direction. Figure 3 displays the solutions of Eq. (19) with the function  $a(\rho)$  computed for this particular system, and shows that they closely follow the results from numerical simulations.

The other physical system we investigate is a complex plasma, namely, a colloidal mixture of microscopic charged particles suspended in an ionized gas. The free charges in the gas screen the Coulomb interaction, and the Yukawa potential,  $V_Y = \varepsilon\sigma \exp(-r/\sigma)/r$ , is a good model for the repulsion between these colloidal particles [21]. Considering that the ground state of this system is an hcp lattice [22,23], we can compute the function  $a(\rho)$  as also shown in Fig. 2. Similarly to the case of type-II superconducting vortices, for  $\rho > \sigma^{-3}$ , the function converges to  $a = 4\pi\varepsilon\sigma^3$ , in agreement with Eq. (13), while going to zero as the concentration  $\rho$  decreases. To test this result, we simulate a three-dimensional system of such particles under the action of an external potential  $U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = kr^2/2$  confining the particles in all three dimensions. As before, Eq. (19) is numerically solved, but the normalization must be imposed by  $4\pi \int \rho(r)r^2 dr = N$ .

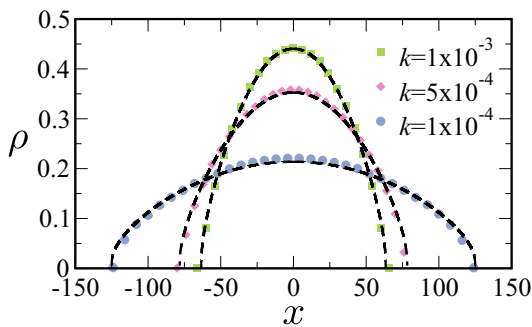


FIG. 3. Density profile at the stationary state obtained from simulations (symbols) for the London potential ( $N = 800$ ,  $L_y = 20\sigma$ ) for three different values of  $k$ . The dashed curves represent the predictions of the continuum model.

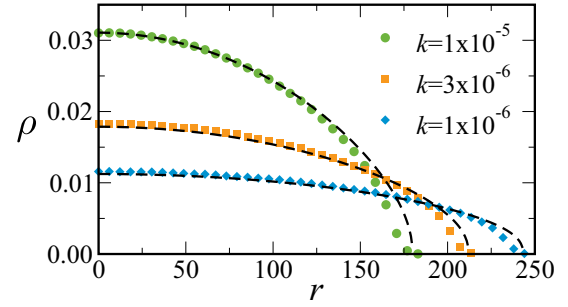


FIG. 4. Density profiles at the stationary state obtained from simulations (symbols). We consider three-dimensional systems of  $N = 400\,000$  particles interacting through the Yukawa potential,  $V_Y = \varepsilon\sigma \exp(-r/\sigma)/r$ . The particles are confined by a quadratic potential,  $U_{\text{ext}}(r) = kr^2/2$ , with results for three different values of  $k$ . The dashed lines represent the predictions of the continuum model.

The comparisons between numerical simulations and the theoretical predictions for the case of complex plasmas are shown in Fig. 4. For the bulk of the system we observe good agreement between theory and simulation, but at the edge of the density profile there is a notable deviation. To understand this deviation, note that we assumed in our approach that the particle concentration gradient varies slowly within the effective range of the interaction potential. Since there is no negative concentration, this assumption fails when the distance to the edge of the profile  $\rho/|\nabla\rho|$  is smaller than the characteristic interaction length  $\sigma$ . Thus, at the edge of the profile a continuum description should demand higher orders of approximation. However, this effect becomes negligible in systems where the density profile is not subjected to a strong confinement [24].

In summary, we introduced a general approach to build continuum models for systems of repulsive particles in dissipative media. For the two physical systems investigated here, namely, superconducting vortices and complex plasma, we show how the function  $a(\rho)$ , relating the gradient of concentration to the force, converges at high concentrations ( $\rho > \sigma^{-D}$ ) to the value predicted by Eq. (13). Therefore, the assumption of a constant ratio of force to gradient represents a good approximation for several cases of interest, especially for highly concentrated systems [11,12]. However, higher concentrations may be a practical impossibility, especially in the case of superconducting vortices, where the critical field imposes a constraint in the maximum concentration of vortices [1]. For systems of low concentration, or for interactions such as power laws, where Eq. (13) diverges, it is necessary to account for the variation of the ratio  $a(\rho)$  with concentration, as proposed here. Although we investigated only regular lattices at  $T = 0$ , this approach could be applied also for disordered cases, such as glassy systems or systems perturbed by thermal effects, by properly computing the average interaction energy per particle  $U_{\text{int}}(\rho)$  over the accessible states.

We thank the Brazilian agencies CNPq, CAPES, FUNCAP, and the National Institute of Science and Technology for Complex Systems (INCT-SC) in Brazil for financial support.

- [1] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1966).
- [2] H. J. Jensen, A. Brass, and A. J. Berlinsky, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1676 (1988).
- [3] O. Pla and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 919 (1991); R. A. Richardson, O. Pla, and F. Nori, *ibid.* **72**, 1268 (1994).
- [4] W. Barford, W. H. Beere, and M. Steer, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, L333 (1993).
- [5] C. Reichhardt, C. J. Olson, J. Groth, S. Field, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **52**, 10441 (1995); **53**, R8898 (1996); C. Reichhardt, J. Groth, C. J. Olson, S. B. Field, and F. Nori, *ibid.* **54**, 16108 (1996); **56**, 14196 (1997).
- [6] O. Pla, N. Wilkin, and H. Jensen, *Europhys. Lett.* **33**, 297 (1996); C. J. Olson, C. Reichhardt, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **56**, 6175 (1997); *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2197 (1998).
- [7] P. K. Shukla, *Introduction to Dusty Plasma Physics* (CRC Press, Abingdon, 2002).
- [8] H. Totsuji, *Phys. Plasmas* **8**, 1856 (2001).
- [9] D. Lucena, D. V. Tkachenko, K. Nelissen, V. R. Misko, W. P. Ferreira, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **85**, 031147 (2012); J. E. Galván-Moya, D. Lucena, W. P. Ferreira, and F. M. Peeters, *ibid.* **89**, 032309 (2014).
- [10] W. P. Ferreira, F. F. Munarin, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 9385 (2006).
- [11] S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3622 (2001).
- [12] A. A. Moreira, J. A. Andrade, Jr., J. Mendes Filho, and S. Zapperi, *Phys. Rev. B* **66**, 174507 (2002); P. Barrozo, A. A. Moreira, J. A. Aguiar, and J. S. Andrade, *ibid.* **80**, 104513 (2009).
- [13] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988); C. Tsallis, R. Mendes, and A. Plastino, *Physica A* **261**, 534 (1998).
- [14] J. S. Andrade, G. F. T. da Silva, A. A. Moreira, F. D. Nobre, and E. M. F. Curado, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 260601 (2010).
- [15] V. Schwämmle, E. M. Curado, and F. D. Nobre, *Eur. Phys. J. B* **58**, 159 (2007).
- [16] C. Tsallis and L. J. L. Cirto, *Eur. Phys. J.: Spec. Top.* **223**, 2161 (2014).
- [17] J. S. Andrade, M. P. Almeida, A. A. Moreira, and G. A. Farias, *Phys. Rev. E* **65**, 036121 (2002).
- [18] A. B. Adib, A. A. Moreira, J. S. Andrade, and M. P. Almeida, *Physica A* **322**, 276 (2003).
- [19] M. S. Ribeiro, F. D. Nobre, and E. M. F. Curado, *Eur. Phys. J. B* **85**, 399 (2012); *Phys. Rev. E* **85**, 021146 (2012).
- [20] A. A. Abrikosov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **32**, 1442 (1957) [*Sov. Phys. JETP* **5**, 1174 (1957)].
- [21] M. Kong, B. Partoens, and F. M. Peeters, *New J. Phys.* **5**, 23 (2003).
- [22] J. H. Chu and L. I., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994).
- [23] M. Zuzic, A. V. Ivlev, J. Goree, G. E. Morfill, H. M. Thomas, H. Rothermel, U. Konopka, R. Sütterlin, and D. D. Goldbeck, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4064 (2000).
- [24] J. S. Andrade, G. F. T. da Silva, A. A. Moreira, F. D. Nobre, and E. M. F. Curado, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 088902 (2011).

## Referências

- [1] ZAPPERI, S.; MOREIRA, A.; ANDRADE, J. Flux front penetration in disordered superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, APS, v. 86, n. 16, p. 3622–3625, 2001.
- [2] ANDRADE, J. S. et al. Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 105, p. 260601, 2010.
- [3] VOTH, G. A. *Coarse-graining of condensed phase and biomolecular systems*. Boca Raton: CRC Press, 2008.
- [4] SAUNDERS, M. G.; VOTH, G. A. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Annu. Rev. Biophys.*, Annual Reviews, v. 42, p. 73, 2013.
- [5] POTAPENKO, I. F. et al. Relaxation of the distribution function tails for gases with power-law interaction potentials. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 56, p. 7159–7165, Dec 1997.
- [6] ABRIKOSOV, A. A. On the Magnetic properties of superconductors of the second group. *Sov. Phys. JETP*, v. 5, p. 1174–1182, 1957. [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.*32,1442(1957)].
- [7] SILVA, P. B. da. *Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2009.
- [8] GENNES, P. G. de. *Superconductivity of Metals and Alloys*. New York: Benjamin, 1966.
- [9] MOREIRA, A. A. et al. Boundary effects on flux penetration in disordered superconductors. *Phys. Rev. B*, v. 66, n. 17, p. 174507, nov. 2002.
- [10] JENSEN, H. J.; BRASS, A.; BERLINSKY, A. J. Lattice deformations and plastic flow through bottlenecks in a two-dimensional model for flux pinning in type-II superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 60, p. 1676–1679, Apr 1988.
- [11] PLA, O.; NORI, F. Self-organized critical behavior in pinned flux lattices. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 67, p. 919–922, Aug 1991.
- [12] RICHARDSON, R. A.; PLA, O.; NORI, F. Confirmation of the modified bean model from simulations of superconducting vortices. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 72, p. 1268–1271, Feb 1994.
- [13] BARFORD, W.; BEERE, W. H.; STEER, M. The dynamics of the bean critical state. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 5, n. 27, p. L333, 1993.

- [14] REICHHARDT, C. et al. Microscopic derivation of magnetic-flux-density profiles, magnetization hysteresis loops, and critical currents in strongly pinned superconductors. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 52, p. 10441–10446, Oct 1995.
- [15] REICHHARDT, C. et al. Vortex plastic flow, local flux density, magnetization hysteresis loops, and critical current, deep in the bose-glass and mott-insulator regimes. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 53, p. R8898–R8901, Apr 1996.
- [16] REICHHARDT, C. et al. Spatiotemporal dynamics and plastic flow of vortices in superconductors with periodic arrays of pinning sites. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 54, p. 16108–16115, Dec 1996.
- [17] REICHHARDT, C. et al. Erratum: Spatiotemporal dynamics and plastic flow of vortices in superconductors with periodic arrays of pinning sites [phys. rev. b 54, 16 108 (1996)]. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 56, p. 14196–14197, Dec 1997.
- [18] PLA, O.; WILKIN, N.; JENSEN, H. Avalanches in the bean critical state: A characteristic of the random pinning potential. *Europhys. Lett.*, v. 33, p. 297–302, 1996.
- [19] OLSON, C. J.; REICHHARDT, C.; NORI, F. Superconducting vortex avalanches, voltage bursts, and vortex plastic flow: Effect of the microscopic pinning landscape on the macroscopic properties. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 56, p. 6175–6194, Sep 1997.
- [20] OLSON, C. J.; REICHHARDT, C.; NORI, F. Fractal networks, braiding channels, and voltage noise in intermittently flowing rivers of quantized magnetic flux. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 80, p. 2197–2200, Mar 1998.
- [21] VONDEL V., d. S. S. C. C. Z. B. Y. M. M. de; MOSHCHALKOV, V. V. Vortex-rectification effects in films with periodic asymmetric pinning. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 94, p. 057003, 2005.
- [22] SUHL, H. Inertial mass of a moving fluxoid. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 14, p. 226, 1965.
- [23] SHUKLA, P. K. *Introduction to Dusty Plasma Physics*. Abingdon: CRC Press, 2002.
- [24] THOMAS, H. et al. Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 73, p. 652–655, Aug 1994.
- [25] FORTOV, V. E.; MORFILL, G. E. *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*. Boca Raton: CRC Press, 2010.
- [26] IVLEV, A. et al. *Complex Plasmas and Colloidal Dispersions: Particle-Resolved Studies of Classical Liquids and Solids (Series in Soft Condensed Matter)*. London: World Scientific, 2012.
- [27] TOTSUJI, H. Structure and melting of two-dimensional dust crystals. *Phys. Plasmas*, v. 8, n. 5, p. 1856–1862, 2001.
- [28] CARVALHO, J. C. N. et al. Yukawa particles confined in a channel and subject to a periodic potential: Ground state and normal modes. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 83, p. 094109, Mar 2011.

- [29] CARVALHO, J. C. N. et al. Diffusion in a quasi-one-dimensional system on a periodic substrate. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 85, p. 021136, Feb 2012.
- [30] AUER, S.; FRENKEL, D. Crystallization of weakly charged colloidal spheres: a numerical study. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 14, n. 33, p. 7667, 2002.
- [31] LUCENA, D. et al. Transition from single-file to two-dimensional diffusion of interacting particles in a quasi-one-dimensional channel. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 85, p. 031147, Mar 2012.
- [32] BAUMGARTNER, H. et al. Ground states of finite spherical yukawa crystals. *New J. Phys.*, v. 10, n. 9, p. 093019, 2008.
- [33] NOSENKO, V.; GOREE, J. Shear flows and shear viscosity in a two-dimensional yukawa system (dusty plasma). *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 93, p. 155004, Oct 2004.
- [34] TOTSUJI, H. et al. Yukawa system (dusty plasma) in one-dimensional external fields. *Phys. Lett. A*, v. 221, n. 3, p. 215 – 219, 1996.
- [35] HENNING, C. et al. Ground state of a confined yukawa plasma. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 74, p. 056403, Nov 2006.
- [36] HYNINEN, A.-P.; DIJKSTRA, M. Phase diagrams of hard-core repulsive yukawa particles. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 68, p. 021407, Aug 2003.
- [37] KREMER, K.; ROBBINS, M. O.; GREY, G. S. Phase diagram of yukawa systems: Model for charge-stabilized colloids. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 57, p. 2694–2697, Nov 1986.
- [38] MEDEBACH, M.; PALBERG, T. Phenomenology of colloidal crystal electrophoresis. *J. Chem. Physics*, v. 119, p. 3360, 2003.
- [39] SATOH, A. *Introduction to Practice of Molecular Simulation*. Burlington: Elsevier, 2011.
- [40] V.P.L.S., R. B. F. H. M.. R. A. Xxvii. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Philosophical Magazine Series 2*, v. 4, n. 21, p. 161–173, 1828.
- [41] TUCKWEKK, H. C. *Elementary Applications of Probability Theory*. London: Chapman & Hall, 1996.
- [42] HUANG, K. *Introduction to Statistical Physics*. New York: Taylor & Francis, 2002.
- [43] CARVALHO, J. C. N. *Estruturas, modos normais e difusão em um sistema periódico quasi-unidimensional*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2011.
- [44] SILVA, G. F. T. da. *Termostática do Movimento Superamortecido de Partículas Interagentes*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2013.

- [45] BARROZO, P. et al. Model of overdamped motion of interacting magnetic vortices through narrow superconducting channels. *Phys. Rev. B*, v. 80, p. 104513, 2009.
- [46] PARZEN, E. On estimation of a probability density function and mode. *The annals of mathematical statistics*, JSTOR, v. 33, n. 3, p. 1065–1076, 1962.
- [47] TSALLIS, C. Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics. *J. Stat. Phys.*, Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, v. 52, n. 1-2, p. 479–487, 1988.
- [48] TSALLIS, C.; MENDES, R. S.; PLASTINO, A. The role of constraints within generalized nonextensive statistics.
- [49] SCHWÄMMLE, V. et al. A general nonlinear fokker-planck equation and its associated entropy. *The Eur. Phys. J. B*, EDP Sciences, v. 58, n. 2, p. 159–165, 2007.
- [50] SOUSA, A. M. C. et al. Thermodynamics framework for compact q-gaussian distributions. *Cond-mat*, arXiv, v. 1708, p. 00114, 2017.
- [51] RIBEIRO, M. S.; NOBRE, F. D.; CURADO, E. M. F. Time evolution of interacting vortices under overdamped motion. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 021146, Feb 2012.
- [52] UMAROV, S.; TSALLIS, C.; STEINBERG, S. On a q-central limit theorem consistent with nonextensive statistical mechanics. *Milan J. Math*, v. 76, n. 1, p. 307–328, 2008.
- [53] BRYKSIN, V.; DOROGOVTSEV, S. Nonlinear diffusion of magnetic flux in type-II superconductors. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, v. 104, p. 3735–3758, 1993.
- [54] HOGG, R. V.; CRAIG, A. T. *Introduction to Mathematical Statistics*. New York: Macmillan Publishing, 1970.
- [55] KONG, M.; PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. Structural, dynamical and melting properties of two-dimensional clusters of complex plasmas. *New J. Phys.*, v. 5, n. 1, p. 23, 2003.
- [56] CHU, J. H.; I, L. Direct observation of coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 72, p. 4009–4012, Jun 1994.
- [57] ANDRADE, J. S. et al. Andrade *et al.* reply:. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 107, p. 088902, Aug 2011.
- [58] ZHAO, H.; MISKO, V.; PEETERS, F. Vortex configurations with non-monotonic interaction. *Physica C: Superconductivity*, v. 479, p. 130 – 133, 2012.
- [59] MOSHCHALCOV, V. et al. Type-1.5 superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 102, p. 117001, Mar 2009.
- [60] ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. *Computer Simulation of Liquids (Oxford Science Publications)*. Reprint. Oxford: Oxford University Press, 1989. (Oxford science publications).
- [61] METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953.

- [62] ALDER, B.; WAINWRIGHT, T. Phase transition for a hard sphere system. *The Journal of chemical physics*, v. 27, n. 5, p. 1208, 1957.
- [63] FOSDICK, L. D. *An introduction to high-performance scientific computing*. Cambridge: MIT Press, 1996.
- [64] TUCKERMAN, M. *Statistical mechanics: theory and molecular simulation*. Oxford: Oxford University Press, 2010.
- [65] KRESSE, G.; HAFNER, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B, APS*, v. 47, n. 1, p. 558, 1993.
- [66] RAPAPORT, D. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [67] SADUS, R. J. *Molecular Simulation of Fluids: Theory, Algorithms and Object-Oriented*. Amsterdam: Elsevier, 2002.
- [68] LANDAU, D.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2005.
- [69] BOX, G. E. P.; MULLER, M. E. A note on the generation of random normal deviates. *The Annals of Mathematical Statistics*, v. 29, n. 2, p. 610, 1958.
- [70] ALVES, J. *Introdução à Física Computacional 2 (Notas de aula)*. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2014.
- [71] YORIYAZ, H. Método de Monte Carlo: princípios e aplicações em Física Médica. *Revista Brasileira de Física Médica*, v. 3, p. 1208, 2009.
- [72] ZAIDI, H.; SGOUROS, G. *Therapeutic Applications of Monte Carlo Calculations in Nuclear Medicine*. London: CRC Press, 2003.
- [73] SOBOL', I. M. *A Primer for the Monte Carlo Method*. New York: CRC Press, 1994.
- [74] KRAUTH, W. *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*. New York: Oxford, 2008.