

Auto-Organização de Aglomerados Finitos de Dipolos
Magnéticos Carregados

Italo Pereira Bezerra

26 de novembro de 2009

Italo Pereira Bezerra

*Auto-Organização de Aglomerados Finitos
de Dipolos Magnéticos Carregados*

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira

Co-orientador:

Prof. Dr. Felipe de Freitas Munarin

MESTRADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ.

Fortaleza – CE

17 de Novembro de 2009

Dissertação de Mestrado sob o título Auto-Organização de Aglomerados Finitos de Dipolos Magnéticos Carregados, defendida por Italo Pereira Bezerra e aprovada em 17 de Novembro de 2009, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira
Departamento de Física - UFC
Orientador

Prof. Dr. Felipe de Freitas Munarim
Departamento de Física - UFC
Co-orientador

Prof. Dr. Kwinten Nelissen
Universidade de Antuérpia - Bélgica

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior
Departamento de Física - UFC

À todos, que direto ou indiretamente me ajudaram até aqui.

Agradecimentos

- Inicialmente agradeço ao Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira, pelo apoio, pela confiança e paciência fundamentais para que eu pudesse realizar este trabalho. Pelo exemplo de orientador a ser seguido.
- A Felipe Munarin, pela grande ajuda no decorrer do trabalho, principalmente no início. Obrigado também pela paciência e dedicação.
- Aos professores João Milton e Kwinten Nelissen por participarem da conclusão deste trabalho, através tanto da banca examinadora quanto das sugestões.
- Aos professores do Departamento de Física da UFC, que participaram da minha formação acadêmica, em especial aos professores Gil de Aquino e Raimundo Nogueira.
- Aos colegas Claudio e Murphy.
- Aos amigos(as) e colegas do departamento: Saulo, Jedi e Nádia, exemplos de físicos, Anderson, amigo incrível, Danilo, Namor. Ao pessoal do racha das quartas-feiras. À tia da cantina da Engenharia de Pesca, por mostrar que faz bem ser lembrado. Aos companheiros da Sala da Fotografia: Munarin, João Cláudio (desertor), Andrey Chaves, por ser um exemplo, Rogelma, Luci, Neto, Heitor, Florêncio, Diego, Diego, Sukita. Ao Josa da xerox e à Amélia da Biblioteca. Aos companheiros de disciplinas no mestrado, pela ajuda e presença.
- Aos companheiros da Sala 07, os incríveis amigos de paciência infinita e impressionante prestatividade. Verdadeiros companheiros de luta: Silvia, Felipe, Igor e Alberto.
- Aos meus pais Joaquim Bezerra Pinheiro e Ana Rute Pereira, e a todos da minha família pela paciência (muita) e apoio.
- À Elaine Gomes, pelo amor e carinho, pela paciência sem limites e pelo incondicional apoio durante toda minha caminhada acadêmica. Por tornar mais fácil cada dia desta pós-graduação.

- Ao CNPQ - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo suporte financeiro.
- à CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pelo suporte financeiro.

Resumo

Estuda-se, neste trabalho, aglomerados bidimensionais de partículas dipolares magnéticas, com carga elétrica superficial, confinadas em um potencial parabólico circular. As partículas possuem mesmo módulo de momento de dipolo magnético, assim como mesmos módulo e sinal de carga superficial. O objetivo do presente estudo é a caracterização das configurações do estado fundamental e do espectro dos modos normais do aglomerado. O sistema é estudado numericamente através de simulações Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis. Utilizou-se ainda o chamado Método de Newton Modificado para auxiliar a obtenção das configurações de mínima energia. O estudo é dividido em duas partes: i) Na primeira, a dependência das configurações de equilíbrio e modos normais é analisada em função da carga superficial, na presença e ausência de campo magnético externo, considerando-se o momento de dipolo magnético constante. ii) Na segunda, a carga superficial e o momento de dipolo magnético são fixados e as configurações de equilíbrio e os modos normais são estudados em função da intensidade do campo magnético externo. Nesta parte, calcula-se ainda a magnetização do sistema em função do campo externo. O espectro de frequências dos modos normais de vibração foram obtidos através da técnica de aproximação harmônica. Devido à não-simetria espacial da interação magnética dipolar, os modos normais devem apresentar um componente extra de rotação. Observa-se que para um intervalo característico da carga superficial das partículas, o espectro de frequências sofre uma grande variação de intensidade. Observa-se que no caso dependente da carga, o sistema apresenta características que independem do campo magnético aplicado. Observa-se, no caso dependente do campo aplicado, uma menor variedade de configurações de equilíbrio deste tipo de sistema em relação ao dependente da carga.

Abstract

It is studied at this thesis a two-dimensional cluster of magnetic particles, with surface charge, confined by a circular parabolic potential. The particles have the same magnitude of magnetic dipole moment and the same amount and sign of surface charge. The goal of the present study is the characterization of the ground state configurations and the normal mode spectra of the cluster. The numerical study of the system is based on the Monte Carlo simulation technique, using the Metropolis Algorithm. It was also used the called Newton Method technique to reach the ground state configurations . The present study is divided in two parts: i) In the first one, the dependence of the equilibrium configurations and the normal modes is analyzed considering the presence or not of a external magnetic field. The magnetic dipole moment is taken as constant. ii) In the second one, the surface charge and the magnetic dipole moment are taken as constant, and the ground state configurations and the normal modes are studied as function the the external magnetic field intensity. At this part, it is also calculated the magnetization of the system as function of the external magnetic field. It was observed a great number of different ground state configurations, like concentric rings, and chains. The vibrational normal mode frequencies spectra was obtained by using the harmonic approximation. Due to the non-spatial symmetry of the magnetic dipole interaction, the normal modes must show an extra rotational component. It can be noted that due to surface charge of the particles the frequencies spectra can present elevated variation on the intensity. It can also be noted that some properties of the first case system also occurs on the second case system, and these properties are independent of the applied magnetic field, and in the second case system it can be noted that there are less different ground state configurations as compared with the first one.

Sumário

Lista de Figuras	x
1 Introdução	14
1.1 História	14
1.2 Cristal de Wigner	15
1.3 Auto-Organização	16
1.4 Nanopartículas Magnéticas	17
2 Método Numérico	22
2.1 Método Monte Carlo	22
2.1.1 Introdução	22
2.1.2 História	22
2.1.3 O Método Monte Carlo	23
2.1.4 Solução de Integrais e Amostragem por Importância	25
2.1.5 Método Monte Carlo: Algoritmo de Metropolis	27
2.2 Método de Newton Modificado	28
2.3 Modos Normais	30
3 Modelo do Sistema	33
4 Resultados	37
4.1 Introdução	37
4.2 Dependência da Carga	38

4.2.1	Carga Variando: $B=0$	38
	Propriedades Estruturais	38
	Propriedades Vibracionais	40
4.2.2	Carga Variando: $B=5$	43
	Propriedades Estruturais	44
	Propriedades Vibracionais	48
4.3	Dependência do Campo Magnético B	51
	Propriedades Estruturais	52
	Propriedades Vibracionais	55
5	Conclusões e perspectivas	61
	Referências Bibliográficas	63

Lista de Figuras

- 1 A figura mostra em (a) um circuito integrado, um dos grandes avanços tecnológicos do século XX, e o gráfico original de Gordon Moore em (b), que deu origem à Lei de Moore. O gráfico apresenta o número de componentes por circuito integrado como eixo x, custo de produção por componente em y, e três curvas, relacionadas aos anos de 1962, 1965, e 1970. Figuras retiradas de [3], e de [4]. 15
- 2 As figuras mostram exemplos de bactérias produtoras de nanopartículas. Em (a), apresenta-se nanopartículas de magnetita(Fe_3O_4), produzidas pela bactéria *M. magnetotactilum* (MS-1). Após o alinhamento com um campo magnético externo, aplica-se processo de *lise* celular, restando apenas o material manético. Em (b), bactéria do gênero *Lactobacillus* cercada por partículas de ouro. Figuras retiradas de [5] e [10], respectivamente. 16
- 3 A figura apresenta algumas das formas já encontradas de nanocristais em sistemas auto-organizados. Em (c) pode-se observar a formação de uma monocamada de partículas esféricas, arranjadas em uma super-rede hexagonal bidimensional. Esta estrutura formada é determinada pelo tamanho da partícula, e pela espessura da camada de revestimento surfactante, que no caso é de aproximadamente $2nm$. Em (b), outra possibilidade de cristalização é apresentada, agora na forma de nanorobarras (nanorods). Em (c), apresentam-se cadeias de partículas de 21 nm de diâmetro, e em (c) a coexistência de labirintos e de estruturas cilíndricas. Em todas as fotos apresentadas, o material utilizado foi o Cobalto. Estas figuras foram retiradas das referências [13] em (a e b), [14] em (c) e [15] em (d). 18
- 4 A figura ilustra uma partícula magnética revestida por uma camada de material surfactante: (a) camada simples, e (b)dupla camada. Figura retirada da referência [18]. 19

5	A figura ilustra o outro tipo de revestimento possível em partículas magnéticas: (a) Revestimento resultante de ionização em meio ácido, e (b) o mesmo ocorrendo em meio alcalino. Os íons presentes na solução são também apresentados em cada caso. Figura retirada da referência [18].	20
6	A figura representa o problema proposto inicialmente por Buffon em 1733. A solução deste problema foi apresentada em 1777, pelo próprio Buffon. Figura retirada da referência [36].	23
7	Comparação entre o número de passos necessários para se atingir uma precisão satisfatória, usando o Método de Monte Carlo e o Método de Newton Modificado para o cálculo do nível de menor energia de um sistema de 13 partículas. Figura retirada da referência [35].	29
8	As figuras (a) a (l) apresentam as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=19$ partículas com campo magnético $B=0$, para vários valores de carga Z	41
9	As figuras (a) e (b) apresentam, respectivamente, as distâncias radiais de cada partícula ao centro do potencial confinante, e o espectro de frequências dos modos normais do sistema de $N=19$ partículas no caso $B=0$, para vários valores de carga Z . Em (c) e (d) são apresentados uma ampliação na região VI das figuras (a) e (b), respectivamente. Em (e), apresenta-se a contribuição para a energia por partícula de cada termo de interação e do potencial de confinamento em função de Z	42
10	Nas figuras (a) e (b) apresentam-se as amplitudes das componentes de translação (a) e rotação (b) dos modos normais de vibração de um sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=0$, para diferentes valores de carga Z	43
11	Nas figuras (a)-(l) apresentam-se os modos normais de vibração do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=0$, para vários valores de carga Z . Os gráficos (m) e (n) apresentam a menor frequência não-nula (m), e uma ampliação da região VI da figura (m).	44
12	Nas figuras de (a)-(l) apresentam-se os modos normais de rotação do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=0$, para vários valores de carga Z . As cores indicam o sentido de rotação das partículas (horário ou anti-horário). Cada configuração tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas.	45

13	Nas figuras (a) a (o) apresentam-se as configurações do estado fundamental do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z	46
14	Nas figuras (a) e (b) apresentam-se, respectivamente, as coordenadas Y de cada partícula (a), e o espectro de frequências dos modos normais do sistema de $N=19$ partículas para campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z . Em (c), apresenta-se a contribuição para a energia por partícula de cada termo de interação e do potencial de confinamento do sistema.	47
15	Nas figuras (a)-(o) apresentam-se os modos normais de vibração do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z . O gráfico (p) apresenta a menor frequência não-nula em função de Z	49
16	Nas figuras (a)-(o) apresentam-se os modos normais de vibração do sistema de $N=19$ partícula sem campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z . As cores representam o sentido da componente de rotação dos modos normais de cada partícula. Cada configuração tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas.	50
17	Nas figuras (a) e (b) apresentam-se as amplitudes das componentes de translação (a) e rotação (b) associadas à vibração de um sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z	51
18	Nas figuras de (a) a (h) apresentam-se as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=19$ partículas em função do campo magnético externo aplicado, para valores de carga $Z=3$ [(a)-(d)], e $Z=4$ [(e)-(h)]. Em (i) e (m) são apresentados o espectro de frequências dos modos normais e a magnetização do sistema para os casos $Z = 3$ [(i)-(l)], e $Z = 4$ [(j)-(m)].	52
19	Nas figuras de (a) a (h) apresentam-se as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=19$ partículas em função do campo magnético, nos casos em que $Z=5$ [(a)-(e)], e $Z=6$ [(f)-(h)]. Em (i) e (m) são apresentados o espectro de frequências dos modos normais e a magnetização do sistema para os casos $Z = 5$ [(i) e (l)], e $Z = 6$ [(j) e (m)].	54

20	Nas figuras (a)-(h) apresentam-se os modos normais de vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos de carga $Z=3$ [(a)-(d)], e $Z=4$ [(e)-(h)]. As figuras (i)-(q) apresentam os modos de rotação do mesmo sistema para os casos de carga $Z=3$ [(i)-(m)], e $Z=4$ [(n)-(q)]. Em (r) e (s) é mostrada a menor frequência não-nula em função do campo magnético aplicado ao sistema.	56
21	Nas figuras (a)-(h) apresentam-se os modos normais de vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos de carga $Z=5$ [(a)-(e)], e $Z=6$ [(f)-(h)]. As figuras de (i) a (q) apresentam os modos de rotação do mesmo sistema para os casos de carga $Z=5$ (i)-(n), e $Z=4$ (o)-(q). Em (r) e (s) é mostrada a mínima frequência não-nula em função do campo magnético aplicado ao sistema.	57
22	Nas figuras(a)-(d) apresentam-se as amplitudes de translação [(a),(b)] e rotação [(c),(d)] associadas à vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos $Z=3$ [(a),(c)], e $Z=4$ [(b),(d)], analisando-se agora a dependência do sistema com o campo magnético B.	58
23	Nas figuras (a)-(d) as amplitudes de translação [(a),(b)] e rotação [(c),(d)] associadas à vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos $Z=5$ [(a),(c)], e $Z=6$ [(b),(d)], analisando-se agora a dependência do sistema com o campo magnético B.	59
24	Nas figuras (a)-(f) apresentam-se as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=50$ partículas em função do campo magnético externo aplicado, para carga $Z=3$. Em (g) apresentam-se a as componentes da magnetização do sistema nas coordenadas x e y.	60

1 *Introdução*

1.1 **História**

O estudo de materiais e dispositivos eletrônicos tem assumido um papel de destaque no desenvolvimento científico e tecnológico, desde o desenvolvimento do transistor, em 1947, por William Shockley, John Bardeen e Walter Brattain, e posteriormente do circuito integrado, em 1959, por Robert Noyce e Jack Kilby. Ambos os trabalhos resultaram em prêmios Nobel de Física para as duas equipes. Em 1956 para os três inventores do transistor e, em 2000 para os criadores do circuito integrado [1, 2], expressando reconhecimento à tamanha contribuição destas invenções. O circuito integrado foi desenvolvido inicialmente para solucionar o problema de atraso de propagação dos sinais elétricos em grandes circuitos. A solução era colocar os transistores cada vez mais próximos. Desta forma, ao invés de produzir transistores um a um, vários poderiam ser produzidos, ao mesmo tempo, em uma mesma peça de material semicondutor.

Um novo desafio então surgia, o de aumentar o número de transistores por unidade de área em um circuito. Este desafio direcionava o desenvolvimento científico e tecnológico ao estudo de materiais e dispositivos em dimensões sempre menores. Em 1965, Gordon Moore, um dos Co-Fundadores da Intel Corporation percebeu que, desde que o circuito integrado foi inventado, o número de transistores por polegada quadrada dobrava a cada 2 anos. Moore então previu que este padrão de miniaturização continuaria no futuro. Segundo Moore, a tecnologia de produção de transistors, que em 1972 limitava-se a 10 micrômetros, atingiria o região nanométrica em poucos anos. Deste modo, o processo de miniaturização e o conhecimento de todas as propriedades do sistema, assim como das técnicas de manipulação destes materiais, tornavam-se uma das principais áreas de pesquisa no desenvolvimento tecnológico.

Embora sem o mesmo conhecimento das propriedades físicas, da importância e muito menos do domínio de técnicas avançadas de produção, nanomateriais já eram utilizados antes do século XX. O ouro, por exemplo, quando dividido em partículas de 10 nm a

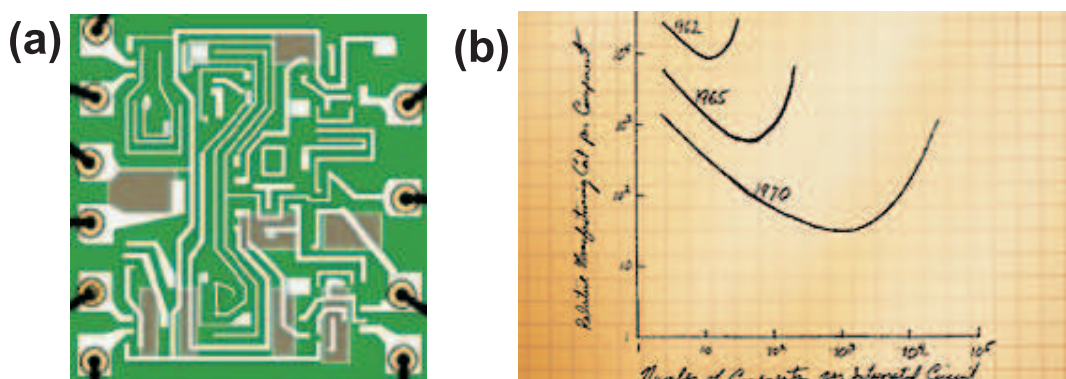


Figura 1: A figura mostra em (a) um circuito integrado, um dos grandes avanços tecnológicos do século XX, e o gráfico original de Gordon Moore em (b), que deu origem à Lei de Moore. O gráfico apresenta o número de componentes por circuito integrado como eixo x, custo de produção por componente em y, e três curvas, relacionadas aos anos de 1962, 1965, e 1970. Figuras retiradas de [3], e de [4].

500 nm de tamanho, pode ser suspenso em água. Estes colóides, eram conhecidos pelos alquimistas em Alexandria como “ouro líquido”, ao qual creditava-se poderes rejuvenescedores. Ouro coloidal também foi produzido por Faraday, em abril de 1856 [10].

Na natureza, pode-se encontrar nanopartículas, como a Magnetita (Fe_3O_4), em bactérias do tipo *Magnetosperillum magnetotacticum*. Estes seres orientam-se durante o crescimento através do campo magnético gerado pelas nanopartículas de magnetita. Bactérias da família *Lactobacillus*, quando inseridas em soluções de íons metálicos, ouro por exemplo, produzem nanopartículas deste mesmo metal (ver figura 2).

A nanotecnologia envolve a pesquisa e o desenvolvimento de novas tecnologias em dimensões entre 1 nm e 100 nm. Esta nova escala para a construção de dispositivos, pela proximidade da escala atômica, apresenta novas propriedades, completamente diferentes das observadas nos mesmos materiais em escala macroscópica, diretamente a ela ligadas. Neste capítulo, apresentaremos os conceitos básicos sobre sistemas auto-organizados de nanopartículas, além de características básicas sobre nanopartículas magnéticas, fundamentais para a compreensão deste tipo de sistema.

1.2 Cristal de Wigner

Em 1934 [6], E. P. Wigner previu que em um gás de elétrons tridimensional poderia haver cristalização caso o sistema apresentasse valores críticos de temperatura e densidade. Mais especificamente, o sistema deveria apresentar alta densidade e baixa temperatura.

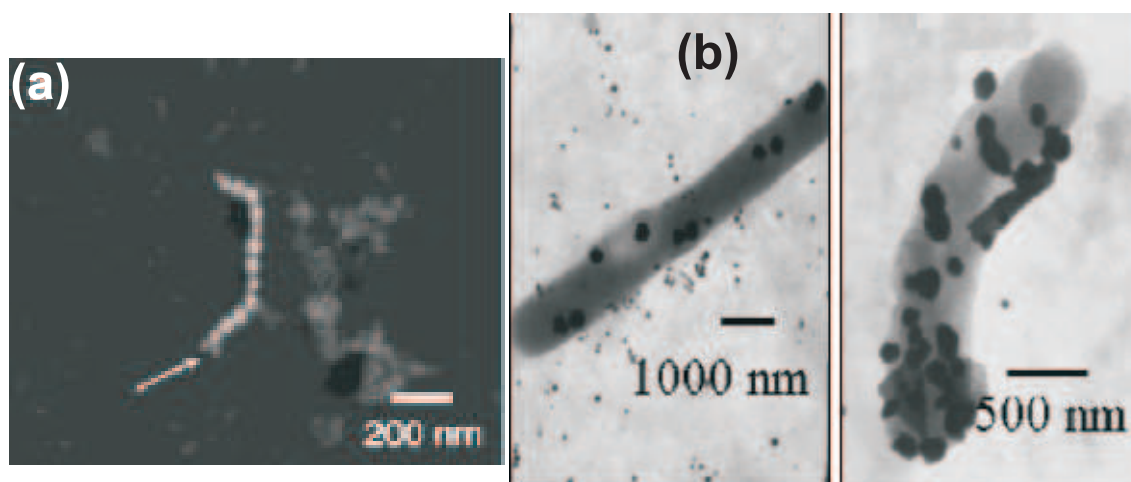


Figura 2: As figuras mostram exemplos de bactérias produtoras de nanopartículas. Em (a), apresenta-se nanopartículas de magnetita (Fe_3O_4), produzidas pela bactéria *M. magnetotactilum* (MS-1). Após o alinhamento com um campo magnético externo, aplica-se processo de *lise* celular, restando apenas o material manético. Em (b), bactéria do gênero *Lactobacillus* cercada por partículas de ouro. Figuras retiradas de [5] e [10], respectivamente.

O parâmetro utilizado para caracterizar a fase do sistema é o fator de acoplamento Γ , definido como sendo $\Gamma = \frac{\langle V \rangle}{\langle K \rangle}$, onde V é a energia potencial e K a energia cinética por partícula. Para valores $\Gamma < 1$ o sistema se comporta como um gás de elétrons. Para valores intermediários $1 \leq \Gamma \leq 100$, o sistema é correlacionado, comportando-se como um líquido. Para valores de $\Gamma > 100$ o sistema é dito fortemente correlacionado, induzindo a formação de estruturas cristalinas. A primeira observação experimental do cristal de Wigner ocorreu em 1979, por Grimes e Adams [7], em um sistema bidimensional de elétrons sobre uma superfície de hélio líquido. Atualmente, o termo Cristal de Wigner é utilizado para caracterizar estruturas cristalinas formadas por aglomerados de partículas com forte interação. Por exemplo, partículas carregadas em plasmas [8] e sistemas de microesferas metálicas [9]. A possibilidade de obtenção de variadas estruturas cristalinas, a partir de uma grande variedade de materiais interagentes, com a perspectiva de descobrimento de uma grande variedade de propriedades físicas destes materiais têm impulsionado o estudo nesta área. Além das propriedades, técnicas de produção destes materiais também têm sido estudadas. Uma delas é a auto-organização, que será apresentada na próxima seção.

1.3 Auto-Organização

A auto-organização de nanocristais inorgânicos abriu uma nova e desafiante área de pesquisa no já badalado estudo de nanomateriais. Neste ramo, estruturas mesoscópicas

sólidas de dimensões nanométricas podem ser preparadas a partir da evaporação de soluções de nanocristais. A fabricação de dispositivos e materiais usando estas novas estruturas são de grande interesse para o desenvolvimento de novas tecnologias, sobretudo na fabricação de dispositivos eletrônicos, semicondutores e ótica. Uma promissora aplicação desta técnica está no desenvolvimento de dispositivos magnéticos de alta densidade [11] para armazenamento de dados, através de arranjos de materiais magnéticos de escala nanométrica, preparados por meio de um processo de auto-organização [12]. Durante a última década, duas propriedades dos nanocristais foram intensamente estudadas: os efeitos de superfície e os efeitos quânticos relacionados à dimensão. Nos últimos anos, entretanto, uma nova característica, e suas implicações, têm sido bastante estudados: a auto-organização de nanocristais em duas (2D) e três (3D) dimensões.

Cristais inorgânicos podem se auto-organizar em diferentes tipos de estruturas. Anéis, redes hexagonais compactas, cadeias e labirintos são alguns exemplos já conhecidos destas diferentes estruturas. Verificou-se também que as propriedades destes tipos de arranjos de nanocristais diferem das propriedades apresentadas pelos mesmos cristais isolados. Outros tipos de estruturas podem ser obtidas, através da aplicação de potenciais externos ao sistema, durante o processo de formação do cristal. Entre elas, cadeias, e anéis, podem ser citadas como exemplo.

Vários tipos de substâncias já foram utilizados para a produção de nanomateriais, como a prata *Ag*, o cobre *Cu*, semicondutores *CdS*, *CdTe*, e ligas *Fe - Cu*, *CdMnS*. O cobre *Co*, em particular, tem sido intensamente estudado, tanto teórico quanto experimentalmente. Recentemente, observou-se em nanocristais de cobre a primeira propriedade intrínseca deste material, relacionada com resistência à oxidação [16]. Outras propriedades, como a dependência exponencial do tempo de relaxação magnética com o volume, a grande variedade de estruturas dependentes do tamanho do cristal, além de propriedades eletrônicas, magnéticas e catalíticas [13] têm fundamental relevância na escolha deste material. Nanocristais de *Co*, com diâmetro $d < 70nm$ são domínio magnético simples [27], ou seja, cada nanopartícula pode ser tratada como um único dipolo magnético.

1.4 Nanopartículas Magnéticas

A auto-organização de sistemas de partículas magnéticas é determinada por condições externas impostas ao sistema e pelas forças a ele internas. Tais forças, como já mencionadas, além do ordenamento do sistema, tendem a formar aglomerados de partículas.

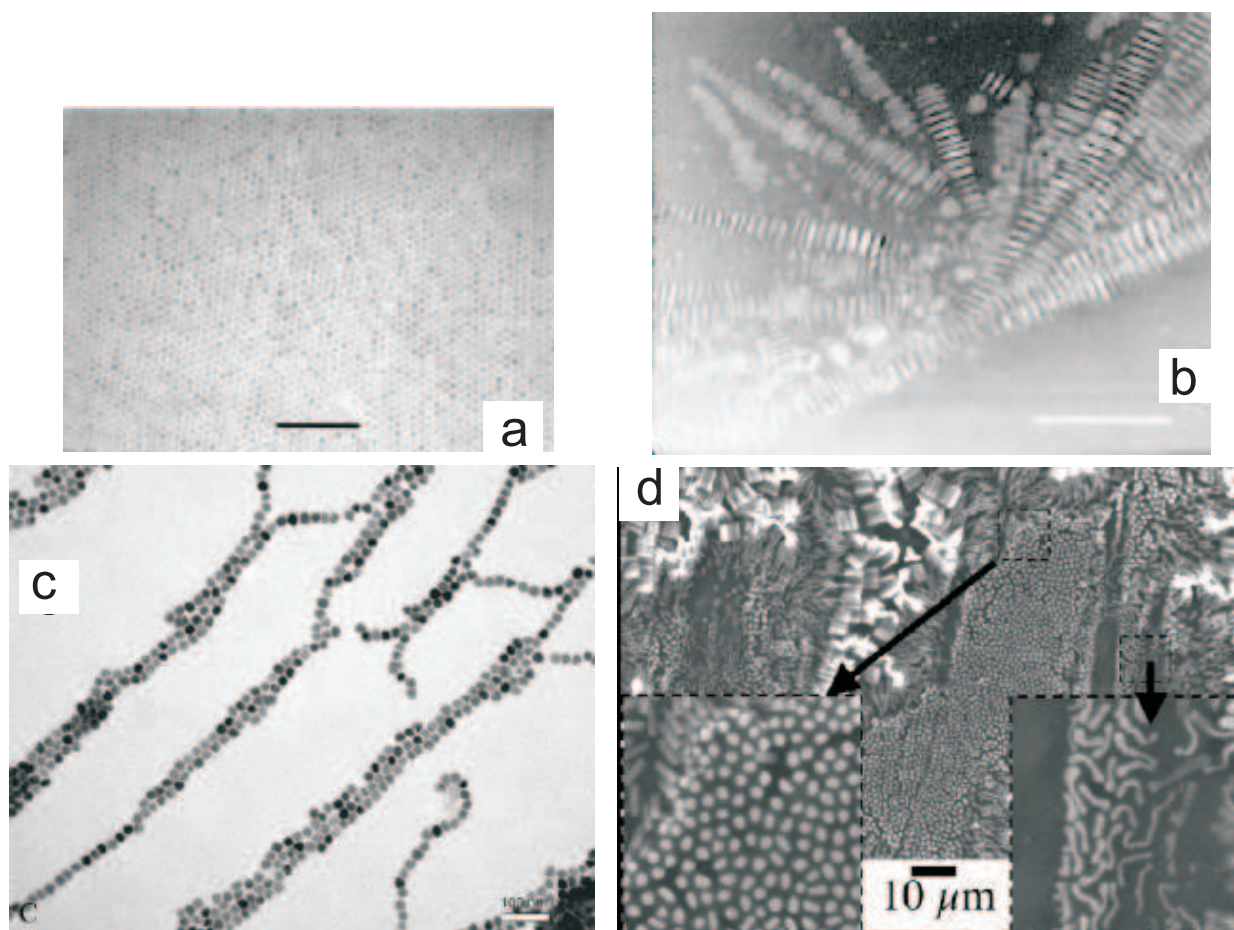


Figura 3: A figura apresenta algumas das formas já encontradas de nanocristais em sistemas auto-organizados. Em (a) pode-se observar a formação de uma monocamada de partículas esféricas, arranjadas em uma super-rede hexagonal bidimensional. Esta estrutura formada é determinada pelo tamanho da partícula, e pela espessura da camada de revestimento surfactante, que no caso é de aproximadamente 2nm . Em (b), outra possibilidade de cristalização é apresentada, agora na forma de nanorodas (nanorods). Em (c), apresentam-se cadeias de partículas de 21nm de diâmetro, e em (d) a coexistência de labirintos e de estruturas cilíndricas. Em todas as fotos apresentadas, o material utilizado foi o Cobalto. Estas figuras foram retiradas das referências [13] em (a e b), [14] em (c) e [15] em (d).

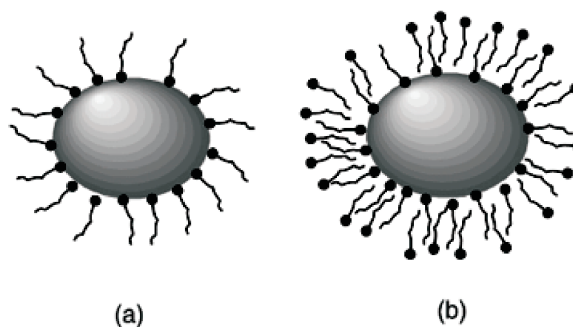


Figura 4: A figura ilustra uma partícula magnética revestida por uma camada de material surfactante: (a) camada simples, e (b) dupla camada. Figura retirada da referência [18].

Para evitar este problema, as mesmas são revestidas com uma camada de determinadas substâncias, escolhidas preferencialmente, de acordo com o fim desejado. Este processo ocorre juntamente ao crescimento dos nanocristais. Além de evitar a aglomeração, este revestimento define a distância mínima entre as partículas e protege contra oxidação [13]. Sabe-se que estes revestimentos atuam diretamente no controle do tamanho das partículas durante o processo de crescimento.

Existem dois tipos de revestimentos: surfactante e iônico. No surfactante, (ver Figura 4), (surfactante é um composto caracterizado pela capacidade de alterar as propriedades superficiais e interfaciais), a partícula magnética é revestida por materiais que dependem da polaridade da solução em que as partículas estão inseridas (exemplo: ácido eléico). Na iônica, (ver Figura 5), as nanopartículas são eletricamente carregadas, mantendo o sistema estável. O método de eletrização das partículas é o de precipitação química, seguido por uma reação ácido-base. O método de revestimento utilizando-se surfactantes é largamente utilizado na produção de dispositivos tecnológicos [18]. Outra propriedade importante sobre o estudo de nanocristais magnéticos é o superparamagnetismo. Para explicar este fenômeno, utilizaremos o conceito de ferrofluidos. Um ferrofluido coloidal consiste de aglomerado de partículas magnéticas. Embora estas partículas possuam momento de dipolo intrínseco, o fluido apresenta comportamento semelhante ao de materiais paramagnéticos. Ou seja, na ausência de campo magnético externo, a magnetização apresentada pelo fluido é zero. Isto é explicado pela orientação aleatória dos momentos de dipolo de cada partícula, visto que, embora cada uma seja um dipolo magnético, a orientação aleatória de cada um destes dipolos faz com que a medida da magnetização no volume considerado seja zero. Esta característica é alterada ao se aplicar um campo magnético, induzindo o alinhamento dos momentos de dipolo das partículas com o campo.

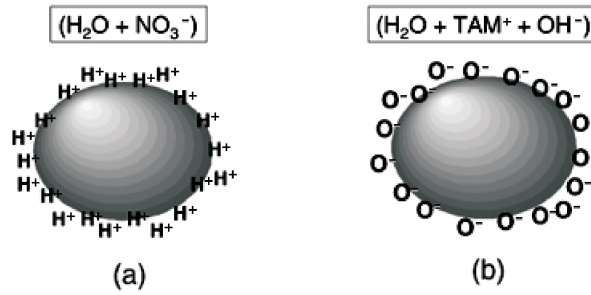


Figura 5: A figura ilustra o outro tipo de revestimento possível em partículas magnéticas: (a) Revestimento resultante de ionização em meio ácido, e (b) o mesmo ocorrendo em meio alcalino. Os íons presentes na solução são também apresentados em cada caso. Figura retirada da referência [18].

A resposta deste alinhamento ao campo aplicado é característico de cada material, apresentado na literatura pela curva de magnetização. Existem dois mecanismos de rotação dos momentos magnéticos em um ferrofluido. Um é a rotação da partícula no meio, conhecida como a rotação de Debye, ou rotação Browniana. O tempo de relaxação para esta rotação é dado por [17, 26]:

$$\tau_B = \frac{3v\eta}{K_B T}, \quad (1.1)$$

onde V é o volume da partícula, η é a viscosidade do líquido, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura. Outro mecanismo é conhecido como rotação de Néel, no qual a orientação do momento magnético é alterado em relação à partícula. O tempo de relaxação para esta rotação é dado por [17][26]:

$$\tau_N = \frac{1}{f_0} e^{\frac{KV}{k_B T}}, \quad (1.2)$$

onde K é a constante de anisotropia da partícula e f_0 é a frequência de Larmor. Quando a rotação de Néel é dominante, ou seja, $\tau_N \ll \tau_B$, a partícula possui superparamagnetismo intrínseco. Com a diminuição da temperatura, o domínio da rotação de Néel diminui, até que, para temperaturas abaixo de T_B , conhecida como temperatura de bloqueio, o mecanismo Browniano passa a ser dominante, e a partícula passa a apresentar o chamado superparamagnetismo extrínseco. Para o caso do Co , à temperatura ambiente, nanopartículas com diâmetro $d < 10\text{nm}$ são superparamagnéticas [27].

Nesta dissertação apresentamos um estudo sobre as propriedades de sistemas de partículas magnéticas, auto-organizadas, em um plano, com e sem a aplicação de um campo magnético paralelo a este plano, e submetido a um potencial parabólico confi-

nante. Diferentemente dos sistemas apresentados até então, onde os nanocristais interagem através, principalmente de interações dipolares [19], consideramos a possibilidade de estas partículas estarem carregadas, com mesma carga em módulo e sinal, incluindo assim uma interação coulombiana ao sistema. Sistemas de partículas de interação puramente coulombiana já foram intensamente estudados [20][21][22]. Esta possibilidade de nanocristais magnéticos carregados tem origem na existência dos plasmas complexos [23]. O material considerado neste trabalho é o cobalto *Co* [24][25]. Consideramos partículas esféricas de cobalto de 8 nm de diâmetro, de núcleo magnético, e uma camada de surfactante de revestimento de 2 nm, de modo que o diâmetro total da partícula considerada é 10 nm. Como já apresentado anteriormente, nanocristais de *Co* são esferas, para o diâmetro considerado, a temperatura ambiente. Nestas mesmas condições, o superparamagnetismo das partículas é garantido, de modo que o nosso sistema é coerente com as características deste material.

No Capítulo 2, são apresentados os métodos numéricos utilizados para se estudar as propriedades do sistema em questão. O Método Monte Carlo é introduzido, assim como o algoritmo de Metrópolis e o Método de Newton. O desenvolvimento matemático da Aproximação Harmônica, utilizada para a obtenção dos modos e das frequências de vibração são apresentados no fim do capítulo.

No Capítulo 3, o modelo do sistema é apresentado, explicitando-se a função Hamiltoniano do sistema. Realiza-se também a adimensionalização da mesma, e em seguida analisa-se as unidades adimensionais das grandezas principais.

No Capítulo 4, os resultados são então apresentados. Os mesmos são divididos em dois casos: O primeiro, apresenta a dependência das propriedades do sistema com relação à carga. O segundo realiza o mesmo para a dependência em relação à intensidade do campo magnético paralelo ao campo, aplicado na direção do eixo *x*.

Por fim, no Capítulo 5, apresenta-se as considerações finais e conclusões obtidas a partir deste trabalho.

2 *Método Numérico*

2.1 Método Monte Carlo

2.1.1 Introdução

Duas técnicas de simulação numérica bastante utilizadas no estudo de sistemas de partículas são: (DM) Dinâmica Molecular e (MC) Monte Carlo. Diferentemente do que ocorre na Dinâmica Molecular, onde se calcula trajetórias do sistema no espaço de fase através da integração numérica das equações do movimento do sistema, o método MC (Monte Carlo) baseia-se no cálculo de valores esperados de variáveis estatísticas, a partir da função de partição do ensemble adequado ao sistema, este último descrito pelo Hamiltoniano. As propriedades obtidas de simulações usando-se MC são referentes apenas a estados de equilíbrio, visto que o espaço de fase percorrido aleatoriamente não representa a dinâmica verdadeira do sistema.

2.1.2 História

Métodos de solução de problemas matemáticos por amostragem estatística são usados há muitos anos. Um bom exemplo é o da Agulha de Buffon[36]. Georges-Louis Leclerc, o Conde de Buffon, foi um naturalista e matemático francês do século XVIII que ficou conhecido também por este método de estimativa do valor da constante π . A idéia consistia no cálculo da probabilidade de, dada uma agulha lançada sobre uma folha de papel, com linhas paralelas e igualmente espaçadas, cair cruzando uma das linhas. A ilustração do problema pode ser vista na Figura 6. Segundo seus cálculos, esta probabilidade é dada por $P = \frac{2}{\pi}$. Buffon percebeu que esta mesma probabilidade pode ser escrita como $P = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{k}{n}$, onde k é o número de lançamentos nos quais a agulha cruza alguma linha, e n o número de lançamentos. Deste modo, igualando as equações obtém-se $\pi \approx \frac{2n}{k}$, permitindo a Buffon, certamente com o uso da paciência, estimar o valor de π . Este tipo de abordagem de problemas adquiriu bastante relevância durante os últimos anos da Se-

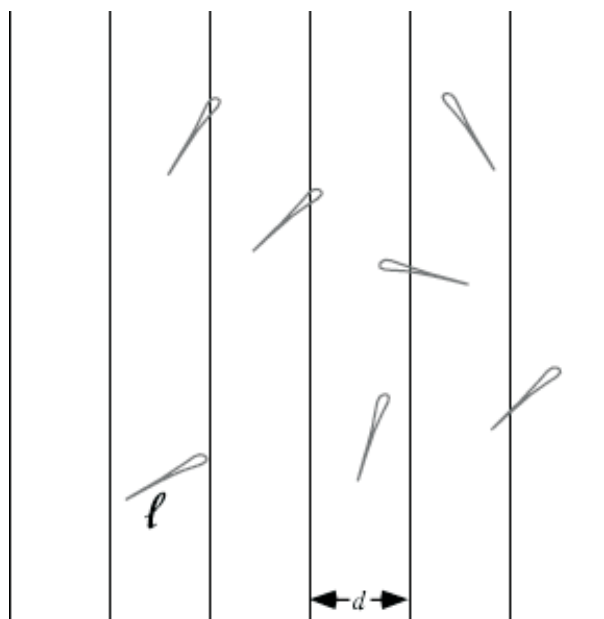


Figura 6: A figura representa o problema proposto inicialmente por Buffon em 1733. A solução deste problema foi apresentada em 1777, pelo próprio Buffon. Figura retirada da referência [36].

gunda Guerra Mundial. Os cientistas do Laboratório de Los Alamos, nos Estados Unidos, trabalhavam no projeto da bomba atômica, que poria fim a Segunda Grande Guerra. A convite de Oppenheimer, John Von Neumann fez sua primeira visita a Los Alamos em 1943, inicialmente como consultor de hidrodinâmica, acabando por trabalhar no problema da implosão. Durante o desenvolvimento da teoria, Neumann sugeriu um teste. Uma bomba nuclear não permitia testes do tipo tentativa e erro. Por isto, o mesmo von Neumann, percebendo a inadequação de cálculos analíticos propôs um método numérico de simulação das equações através de processos estocásticos (processos estocásticos são aqueles compostos por variáveis aleatórias, associadas a uma outra variável). Alguns anos depois, em 1949[33], Metrópolis e Ulam publicaram um artigo formalizando o então Método de Monte Carlo, que recebia pela primeira vez esta denominação.

2.1.3 O Método Monte Carlo

O trabalho publicado por N. Metropolis e S. Ulam [33] apresentou um método de abordagem para um certo grupo de problemas, até então sem solução. Até a época da publicação, problemas envolvendo dinâmica de corpos eram abordados ou analiticamente, ou estatisticamente. Entretanto, para haver solução no primeiro caso, o número de variáveis independentes deveria ser bastante reduzido, enquanto que no segundo, o número de partículas consideradas deveria ser muito grande. Metrópolis e Ulam apresen-

taram um método de solução de problemas compreendidos entre estas duas abordagens. Diferentemente do tratamento usado até então em problemas de sistemas físicos, estes cientistas propuseram uma abordagem estatística, em que agora os parâmetros passam a ser estimados a partir de amostras do sistema em questão. A idéia por trás deste método consiste na construção, usando uma distribuição aleatória, de uma amostra do sistema, de modo que as propriedades a serem estudadas possam ser estimadas estatisticamente. Esta distribuição é baseada na definição de Cadeia de Markov. A idéia deste tipo de distribuição é de fundamental importância, pois é o análogo probabilístico das trajetórias no espaço de fase. Nesta distribuição probabilística, o estado futuro depende apenas do presente - o sistema não tem “memória”. Uma descrição formal é dada a seguir.

Seja o conjunto de estados $(a_0, a_1, \dots, a_{n-1})$, com valores fixos (estacionários). Então, a probabilidade do estado a_n ocorrer, dados os estados $(a_0, a_1, \dots, a_{n-1})$ (probabilidade condicional) é dada por $W(a_n|a_{n-1}, \dots, a_1, a_0)$. Sendo assim, para uma cadeia de Markov, deveremos ter:

$$W(a_n|a_{n-1}, \dots, a_1, a_0) = W(a_n|a_{n-1}), \text{ para qualquer } n. \quad (2.1)$$

Consideremos agora que cada estado a_i ocorre com um peso dado pela função $P(i)$. Sendo também W_{ij} a probabilidade de transição de um estado a_i para um estado a_j de uma cadeia de Markov, obtém-se que depois de um tempo muito longo, o sistema atingirá um estado estacionário se algumas condições forem obedecidas:

$$(i) \quad W_{ij} \geq 0, \text{ para todo } i, j; \quad (2.2)$$

$$(ii) \quad \sum_i W_{ij} = 1; \quad (2.3)$$

$$(iii) \quad P_i \cdot W_{ij} = P_j \cdot W_{ji}, \text{ para todo } i, j; \quad (2.4)$$

De (2.4):

$$\frac{W_{ji}}{W_{ij}} = \frac{P_i}{P_j}. \quad (2.5)$$

Considerando um sistema descrito através do ensemble canônico, com energia dada pelo Hamiltoniano $H(x_i)$ em equilíbrio, a uma temperatura T , podemos reescrever a Eq.

2.5 da seguinte forma:

$$\frac{W_{ji}}{W_{ij}} = \frac{P_i}{P_j} = e^{-[H(x_i) - H(x_j)]/k_B T}, \quad (2.6)$$

de modo que a probabilidade de transição entre dois estados i e j depende apenas da diferença de energia entre estes estados, e k_B é a constante de Boltzmann.

Como pode-se observar, a Eq. (2.6) impõe a positividade de todas transições de estado e a Eq. (2.3) é uma restrição de conservação, uma vez que a soma das probabilidades de transição de um estado para todos os outros estados possíveis tem que ser igual a 1. A condição (iii) é necessária para se garantir a reversibilidade microscópica do sistema. Outro ponto importante é que o Método (MC) baseia-se na igualdade entre a média temporal e a média do ensemble de um observável (Teorema da Ergodicidade). Isto ocorrerá se o espaço de fase for percorrido por todos os seus pontos homogeneamente. A implementação deste método para a solução de um problema físico foi apresentada em 1953 [34], por N. Metropolis et al., fazendo uso do conceito de amostragem por importância, e que ficou conhecido como o Método de Metropolis. Antes de apresentar detalhes deste método, faz-se necessário o comentário a respeito da idéia de amostragem por importância.

2.1.4 Solução de Integrais e Amostragem por Importância

O conceito de amostragem por importância está diretamente ligado ao uso de sequências aleatórias para a solução de integrais. Portanto, analisemos, inicialmente, a seguinte integral:

$$I = \int_a^b f(x) dx, \quad (2.7)$$

Do cálculo, sabemos que $\langle f(x) \rangle = \frac{I}{b-a}$, onde $\langle f(x) \rangle$ é o valor esperado da função $f(x)$. Sendo assim, se estimarmos o valor de $\langle f(x) \rangle$ podemos obter um resultado aproximado para a integral I , agora escrita na forma:

$$I = \langle f(x) \rangle \cdot (b - a). \quad (2.8)$$

Para o valor esperado de $f(x)$, utilizamos a seguinte idéia: Escolhe-se, aleatoriamente, n pontos x_i dentro do intervalo (a, b) , obtendo-se assim n valores correspondentes $f(x_i)$, de modo que:

$$\langle f(x) \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \quad (2.9)$$

e, conseqüentemente:

$$I \approx \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \quad (2.10)$$

No método de amostragem direta, que foi utilizado anteriormente, todos os pontos sobre os quais a função é estudada são escolhidos uniformemente, de modo que é dada a mesma importância para todos os pontos, tanto os de maior quanto os de menor contribuição para o valor final da média. Isto resulta num gasto de tempo elevado no cálculo de pontos no espaço de fase com contribuição desprezível para o valor esperado da função. Para tentar resolver este problema, façamos o seguinte: Por suposição, consideremos a existência de uma função $\rho(x)$ tal que seu comportamento é semelhante ao da função $f(x)$, e que

$$\int_a^b \rho(x) dx = 1, \quad \rho(x) > 0, \quad (2.11)$$

depois de normalizada. Sendo assim, podemos escrever:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{\rho(x)} \rho(x) dx, \quad (2.12)$$

Fazendo:

$$\rho(x) dx = ds, \quad (2.13)$$

$$\Rightarrow I = \int_{s(a)}^{s(b)} \frac{f[x(s)]}{\rho[x(s)]} ds \quad (2.14)$$

Então, podemos estimar o valor da integral I pelo mesmo método aplicado à integral anterior:

$$I \approx \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \frac{f[x(s_i)]}{\rho[x(s_i)]} \quad (2.15)$$

Como a utilização da função $\rho(x)$ implica na não utilização de todos os pontos do espaço de fase, a Integral (2.15) possui um erro que depende da escolha da função densidade de probabilidade. Sem perda de generalidade, pode-se escolher $\rho(x)$ tal que:

$$\rho(x) = \frac{f(x)}{\sum_{i=1}^N f(x_i)}, \quad (2.16)$$

reduzindo a praticamente zero a variância. A idéia por traz da Amostragem por importância é a mesma usada na solução da integral por meio da função densidade de probabilidade $\rho(x)$: A escolha de pontos, desprezando aqueles de menor relevância, para a construção de uma amostra pequena mas com incerteza estatística tão pequena quanto a fornecida por uma amostra homogênea com um número bastante elevado de pontos. Esta idéia é fundamental no método de Monte Carlo, que será discutido em seguida.

2.1.5 Método Monte Carlo: Algoritmo de Metropolis

Na mecânica estatística, o cálculo de um observável \hat{F} de um sistema, através do ensemble canônico, é feito a partir a seguinte integral:

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{\int_{\Omega} \hat{F}(p^N, r^N) e^{-H(p^N, r^N)/k_B T} dp^N dr^N}{\int_{\Omega} e^{-H(p^N, r^N)/k_B T} dp^N dr^N}, \quad (2.17)$$

onde $e^{-H(p^N, r^N)/k_B T}$ é a função peso do ensemble canônico e (p^N, r^N) são as coordenadas e momentos de todas as partículas do sistema. A integração com respeito aos momentos pode ser deixada de lado, visto que o termo de contribuição da energia cinética do sistema pode ser calculado separadamente de forma analítica, permitindo então a análise da integral apenas com respeito ao espaço de configurações. A solução analítica desta integral é praticamente inviável. Para contornar este problema, utiliza-se o método de Monte Carlo, aproximando-se $\langle \hat{F} \rangle$ ao somatório:

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N \hat{F}(x_i) e^{-H(x_i)/k_B T}}{\sum_{i=1}^N e^{-H(x_i)/k_B T}}, \quad (2.18)$$

que é a única aproximação do método, considerar o espaço de fase discreto. Considera-se então as probabilidades de transição deste sistema W_{ij} são dadas por:

$$W_{ij} = e^{-\Delta H_{ij}/k_B T}, \quad \text{se } \Delta H_{ij} > 0 \quad (2.19)$$

$$W_{ij} = 1, \quad \text{se } \Delta H_{ij} \leq 0, \quad (2.20)$$

onde ΔH_{ij} é a diferença de energia entre os dois estados considerados. No caso do cálculo dos valores de mínima energia e, conseqüentemente, da posição de equilíbrio do sistema, considera-se inicialmente o sistema em uma configuração de energia E_i . Então, atribui-se aleatoriamente às partículas novas posições e então calcula-se a energia do sistema E_j . Se a energia E_j for menor do que E_i então $E_i = E_j$ e repete-se o processo, partindo da configuração de energia E_j . Caso contrário, a configuração de maior energia ainda pode ser aceita com uma probabilidade $e^{-\Delta E/k_B T}$. Isto é feito escolhendo-se um número aleatório ξ , entre 0 e 1 e comparando-o com $e^{-\Delta E/k_B T}$: Se $\xi < e^{-\Delta E/k_B T}$, então aceita-se a configuração encontrada. Caso contrário, repete-se o processo.

2.2 Método de Newton Modificado

Embora o Método de Metrópolis Monte Carlo seja uma poderosa ferramenta, existem sistemas para os quais o número de testes necessários para se atingir o mínimo de energia torna a simulação bastante demorada. Para contornar este problema, Schweigert e Peeters[35] apresentaram em 1994 a Técnica de Newton Modificada, que descreveremos adiante:

Inicialmente, consideremos um sistema nas vizinhanças do estado fundamental, depois de n testes Monte Carlo: $(r^n_{\alpha,i}; \alpha = x, y; i = 1, \dots, N)$. Em seguida, expande-se a energia potencial deste sistema em torno desta região de equilíbrio, em uma série de Taylor, até segunda ordem:

$$H = H(r^n_{\alpha,i}) - \sum_i \sum_{\alpha} H_{\alpha,i}(r_{\alpha,i} - r^n_{\alpha,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} H_{\alpha\beta,ij}(r_{\alpha,i} - r^n_{\alpha,i})(r_{\beta,j} - r^n_{\beta,j}), \quad (2.21)$$

onde $H_{\alpha,i} = -\frac{\partial H}{\partial r_{\alpha,i}}$ é a força em cada partícula e $H_{\alpha\beta,ij}$ é a matriz dinâmica:

$$H_{\alpha\beta,ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}}. \quad (2.22)$$

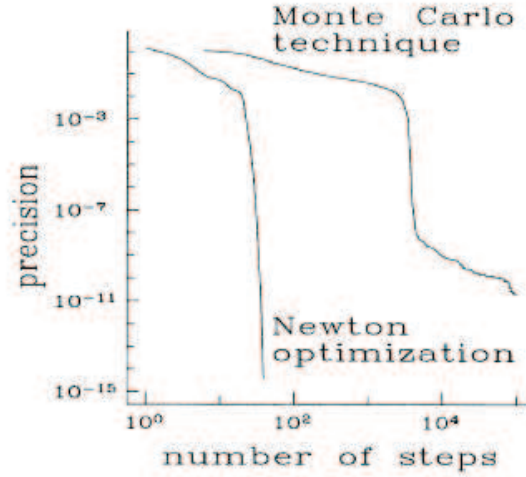


Figura 7: Comparação entre o número de passos necessários para se atingir uma precisão satisfatória, usando o Método de Monte Carlo e o Método de Newton Modificado para o cálculo do nível de menor energia de um sistema de 13 partículas. Figura retirada da referência [35].

Em seguida, como consequência do estado de equilíbrio do sistema, aplica-se a condição de mínima energia, da qual resulta:

$$\sum_j \sum_{\beta} (\eta \delta_{\alpha\beta,ij} + H_{\alpha\beta,ij})(r_{\beta,j} - r^n_{\beta,j}) = H_{\alpha,i}, \quad (2.23)$$

onde $\delta_{\alpha\beta,ij}$ é a matriz identidade e η é o coeficiente inserido para garantir a estabilidade do algoritmo. O segundo termo do lado direito da igualdade da Eq. 2.21 é zero como condição do equilíbrio do sistema. A convergência é garantida apenas nas vizinhanças do mínimo de energia. Nas primeiras iterações atribuímos um valor alto para η : $\eta = 10 - 100$. Se houver uma diminuição da energia do sistema, este mesmo parâmetro é diminuído. No contrário, aumenta-se o valor de η . Após encontrar o valor de mínimo de energia calcula-se os autovetores e autovalores da matriz dinâmica (Eq. 2.22). As autofrequências deste sistema são o quadrado dos autovalores. Utilizamos a técnica de diagonalização de Houserholder [35] na matriz dinâmica. É importante o cálculo dos autovalores da matriz dinâmica, pois garante-se a estabilidade dos sistema quando o menor autovalor for positivo.[35]

2.3 Modos Normais

Após encontrarmos a configuração de mínima energia, com a utilização do algoritmo de Metrópolis, e em seguida com o Método de Newton Modificado, utilizamos esta configuração para o cálculo dos modos normais de vibração e suas respectivas frequências. Este cálculo é feito a partir da aproximação harmônica. Considera-se o sistema inicialmente na configuração do estado fundamental, onde cada partícula tem sua posição definida pelo vetor \vec{R}_i , onde i é o índice da partícula. Faz-se, então, um pequeno deslocamento \vec{d}_i em torno de \vec{R}_i , de modo que a posição da i -ésima partícula agora é dada por: $\vec{r}_i = \vec{R}_i + \vec{d}_i$. Então, expandimos o potencial de interação de pares em torno destas posições de equilíbrio, de modo que o mesmo passa a ser dado por:

$$H = U(\vec{R}) + \sum_{ij} \vec{d}_i \cdot \mathbf{G} \cdot \vec{d}_j, \quad (2.24)$$

onde o último termo da Eq. (2.24) corresponde à segunda derivada da expansão, $U(\vec{R})$ é a energia potencial de interação calculado nas posições de equilíbrio e \mathbf{G} é a matriz dinâmica do sistema, dada por:

$$\mathbf{G}_{ij} = \frac{\partial^2 H(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}{\partial R_i \partial R_j} \quad (i \neq j), \quad (2.25)$$

$$\mathbf{G}_{ii} = \sum_{j \neq i} \frac{\partial^2 H(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}{\partial^2 R_i} \quad (i = j). \quad (2.26)$$

Estes componentes da matriz dinâmica podem ser condensados na forma matricial, como segue:

No caso ($i \neq j$):

$$\mathbf{G}_{ij} = \begin{pmatrix} g_{ij}^{xx} & g_{ij}^{xy} & g_{ij}^{x\theta} \\ g_{ij}^{yx} & g_{ij}^{yy} & g_{ij}^{y\theta} \\ g_{ij}^{\theta x} & g_{ij}^{\theta y} & g_{ij}^{\theta\theta} \end{pmatrix},$$

e no caso ($i = j$):

$$\mathbf{G}_{ii} = \begin{pmatrix} g_{ii}^{xx} & g_{ii}^{xy} & g_{ii}^{x\theta} \\ g_{ii}^{yx} & g_{ii}^{yy} & g_{ii}^{y\theta} \\ g_{ii}^{\theta x} & g_{ii}^{\theta y} & g_{ii}^{\theta\theta} \end{pmatrix}.$$

Sendo assim, podemos então reescrever $\vec{d}_i \cdot \mathbf{G} \cdot \vec{d}_j$ da seguinte forma:

$$\vec{d}_i \cdot \mathbf{G} \cdot \vec{d}_j = \begin{pmatrix} d_{x_i} & d_{y_i} & d_{\theta_i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_{ij}^{xx} & g_{ij}^{xy} & g_{ij}^{x\theta} \\ g_{ij}^{yx} & g_{ij}^{yy} & g_{ij}^{y\theta} \\ g_{ij}^{\theta x} & g_{ij}^{\theta y} & g_{ij}^{\theta\theta} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} d_{x_j} \\ d_{y_j} \\ d_{\theta_j} \end{pmatrix},$$

resultando em:

$$\begin{aligned} \vec{d}_i \cdot \mathbf{G} \cdot \vec{d}_j &= g_{ij}^{xx} d_{x_i} d_{x_j} + g_{ij}^{xy} d_{x_i} d_{y_j} + g_{ij}^{x\theta} d_{x_i} d_{\theta_j} + \\ &+ g_{ij}^{yx} d_{y_i} d_{x_j} + g_{ij}^{yy} d_{y_i} d_{y_j} + g_{ij}^{y\theta} d_{y_i} d_{\theta_j} + \\ &+ g_{ij}^{\theta x} d_{\theta_i} d_{x_j} + g_{ij}^{\theta y} d_{\theta_i} d_{y_j} + g_{ij}^{\theta\theta} d_{\theta_i} d_{\theta_j}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

As equações de movimento da i -ésima partícula para as coordenadas x , y e θ são:

$$m \frac{\partial^2 d_{x_i}}{\partial t^2} = - \frac{\partial H}{\partial d_{x_i}}, \quad (2.28)$$

$$m \frac{\partial^2 d_{y_i}}{\partial t^2} = - \frac{\partial H}{\partial d_{y_i}}, \quad (2.29)$$

$$m \frac{\partial^2 d_{\theta_i}}{\partial t^2} = - \frac{\partial H}{\partial d_{\theta_i}}, \quad (2.30)$$

as quais, utilizando as Eqs. (2.24) e (2.27), podem ser reescritas da seguinte forma:

$$m \frac{\partial^2 d_{x_i}}{\partial t^2} = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (g_{ij}^{xx} d_{x_j} + g_{ij}^{xy} d_{y_j} + g_{ij}^{x\theta} d_{\theta_j}), \quad (2.31)$$

$$m \frac{\partial^2 d_{y_i}}{\partial t^2} = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (g_{ij}^{yx} d_{x_j} + g_{ij}^{yy} d_{y_j} + g_{ij}^{y\theta} d_{\theta_j}), \quad (2.32)$$

$$m \frac{\partial^2 d_{\theta_i}}{\partial t^2} = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (g_{ij}^{\theta x} d_{x_j} + g_{ij}^{\theta y} d_{y_j} + g_{ij}^{\theta\theta} d_{\theta_j}), \quad (2.33)$$

A solução para este tipo de equação diferencial é bem conhecida, sendo dada por:

$$\vec{d}_i(t) = \vec{d}_i \cdot e^{-i\omega t}, \quad (2.34)$$

onde $\vec{d}(t)_i = [d_{x_i}(t), d_{y_i}(t), d_{\theta_i}(t)]$ e $\vec{d}_i = [d_{x_i}, d_{y_i}, d_{\theta_i}]$.

Substituindo a Eq. (2.34) nas Eqs. (2.31), (2.32) e (2.33), obtêm-se:

$$-m\omega^2 d_{x_i} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (g_{ij}^{xx} d_{x_j} + g_{ij}^{xy} d_{y_j} + g_{ij}^{x\theta} d_{\theta_j}), \quad (2.35)$$

$$-m\omega^2 d_{y_i} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (g_{ij}^{yx} d_{x_j} + g_{ij}^{yy} d_{y_j} + g_{ij}^{y\theta} d_{\theta_j}), \quad (2.36)$$

$$-m\omega^2 d_{\theta_i} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (g_{ij}^{\theta x} d_{x_j} + g_{ij}^{\theta y} d_{y_j} + g_{ij}^{\theta\theta} d_{\theta_j}), \quad (2.37)$$

Reescrevendo as Eqs. (2.35), (2.36) e (2.37):

$$\sum_{j=1}^N [(2m\omega^2 \delta_{ij} - g_{ij}^{xx}) d_{x_j} - g_{ij}^{xy} d_{y_j} - g_{ij}^{x\theta} d_{\theta_j}] = 0, \quad (2.38)$$

$$\sum_{j=1}^N [-g_{ij}^{xy} d_{y_j} + (2m\omega^2 \delta_{ij} - g_{ij}^{yy}) d_{y_j} - g_{ij}^{x\theta} d_{\theta_j}] = 0, \quad (2.39)$$

$$\sum_{j=1}^N [-g_{ij}^{x\theta} d_{x_j} - g_{ij}^{y\theta} d_{y_j} + (2m\omega^2 \delta_{ij} - g_{ij}^{\theta\theta}) d_{\theta_j}] = 0, \quad (2.40)$$

onde δ_{ij} é a delta de Dirac.

Deste modo, as frequências e os modos de vibração do sistema são encontrados, respectivamente, como sendo os autovalores e autovetores da matriz derivada das Eqs. (2.38), (2.39), (2.40), de ordem $3N$.

3 Modelo do Sistema

O modelo estudado neste trabalho consiste de um sistema bidimensional de partículas dipolares magnéticas de mesma massa, raio e momento de dipolo, cujas superfícies são carregadas com mesma carga (módulo e polaridade), confinadas em uma região finita do plano por um potencial parabólico. A este sistema é aplicado um campo magnético de orientação e intensidade fixas. A orientação dos dipolos magnéticos pode variar apenas no plano do confinamento. O estudo é realizado tendo como parâmetros a carga e o momento de dipolo de cada partícula, assim como a intensidade do campo magnético. O estudo deste sistema tem por objetivo conhecer as configurações do estado fundamental, o espectro dos modos normais e sua dependência com a carga e o campo magnético. Para isso, é necessário o conhecimento da energia total do sistema.

A energia do sistema é descrita pela seguinte expressão:

$$H = \sum_i \left(\frac{1}{2} m \omega_0^2 r_i^2 - \boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{B} \right) + \sum_{i < j=1}^N \left[4\kappa \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} + \frac{1}{4\pi\mu_0} \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) + \frac{\mathbf{q}^2}{4\pi\epsilon r_{ij}} \right] \quad (3.1)$$

onde o primeiro somatório é a contribuição de cada partícula à energia total, submetidas ao potencial parabólico (primeiro termo) e a um campo magnético externo (segundo termo, negativo). O segundo somatório é a energia de interação entre as partículas, a qual tem no primeiro termo um potencial repulsivo de curto alcance, para evitar a superposição entre as partículas. Os dois seguintes termos representam a energia de interação entre os dipolos magnéticos e o último termo a contribuição da interação coulombiana. Os parâmetros $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} são vetores e representam, respectivamente, o vetor momento de dipolo magnético de cada partícula i e o campo magnético aplicado ao sistema. A coordenada r_i é o módulo do vetor posição de cada partícula em relação ao centro do potencial de confinamento, e m a massa, considerada a mesma para cada uma das partículas do sistema.

O estudo deste sistema é feito numericamente. Dentre os métodos disponíveis para este tipo de análise, utiliza-se o método de Monte Carlo, através do algoritmo de Metropolis, visto que as configurações de equilíbrio ocorrem para os mínimos de energia, e não

nos interessa detalhes da dinâmica entre as partículas. Devemos agora, para uma análise numérica do sistema, adimensionalizar a equação (3.1). Podemos citar três fatores importantes que a justificam:

- As equações ficam bastante simplificadas, uma vez que todas as constantes do problema são “absorvidas” pelas unidades adimensionais.
- O sistema é resolvido sem que haja a especificação de parâmetros físicos (estes, inclusos nas unidades adimensionais). Portanto, a solução é geral para qualquer unidade física do sistema.
- A análise é realizada com valores em torno da unidade, evitando-se problemas de extrapolação.

Na adimensionalização de uma equação, primeiro devemos identificar quais as variáveis dependentes e independentes do problema. Como o sistema será estudado em função da carga, do momento de dipolo e do campo, estas serão as variáveis independentes e, conseqüentemente, energia e posição as variáveis dependentes.

Em seguida introduzimos as seguintes unidades adimensionais:

$$\begin{aligned}
 B &= B_0 \cdot \mathbf{B} \\
 \mu &= \mu' \cdot \mu^* \\
 q &= \nu \cdot \mathbf{Z} \\
 r &= \sigma \cdot r^* \\
 H &= \kappa \cdot \mathbf{H},
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde o termo esquerdo do produto é o termo dimensional, e o termo em negrito (ou com *) o termo adimensional.

Substituindo as equações (3.2) em (3.1) e, em seguida, dividindo ambos os lados da igualdade por κ :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} &= \sum_i \left(\frac{m\omega_0^2 \sigma r_i^{*2}}{2\kappa} - \frac{\mu' \mu_i^*}{\kappa} \cdot \frac{B_0 \mathbf{B}}{\kappa} \right) + \\
 &+ \sum_{i < j = 1}^N \left[4 \left(\frac{\sigma}{\sigma r_{ij}^*} \right)^{12} + \frac{1}{4\pi\mu_0\kappa} \left(\frac{\mu'^2 \mu_i^* \cdot \mu_j^*}{\sigma^3 r_{ij}^{*3}} - \frac{3\mu'^2 \sigma^2 (\mu_i^* \cdot \mathbf{r}_{ij}^*) (\mu_j^* \cdot \mathbf{r}_{ij}^*)}{\sigma^5 r_{ij}^{*5}} \right) + \frac{\nu^2 \mathbf{Z}^2}{4\pi\epsilon\sigma r_{ij}^*} \right],
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Simplificando a equação, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \sum_i \left(\frac{m\omega_0^2 \sigma r_i^{*2}}{2\kappa} - \frac{\mu' B_0 \boldsymbol{\mu}_i^* \cdot \mathbf{B}}{\kappa} \right) + \\ & + \sum_{i<j=1}^N \left[4 \left(\frac{1}{r_{ij}^*} \right)^{12} + \frac{\mu'^2}{4\pi\mu_0\kappa\sigma^3} \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_i^* \cdot \boldsymbol{\mu}_j^*}{r_{ij}^{*3}} - \frac{3(\boldsymbol{\mu}_i^* \cdot \mathbf{r}_{ij}^*)(\boldsymbol{\mu}_j^* \cdot \mathbf{r}_{ij}^*)}{r_{ij}^{*5}} \right) + \frac{\nu^2 \mathbf{Z}^2}{4\pi\epsilon\sigma r_{ij}^*} \right], \end{aligned} \quad (3.4)$$

Fazendo

$$\alpha = \frac{m\omega_0^2 \sigma}{2\kappa} = 1 \quad (3.5)$$

$$\frac{\mu' B_0}{\kappa} = \frac{\mu'^2}{4\pi\mu_0\kappa\sigma^3} = \frac{\nu^2}{4\pi\epsilon\sigma} = 1, \quad (3.6)$$

de modo que energia, em unidades adimensionais é dada por:

$$\mathbf{H} = \sum_i (r_i^2 - \boldsymbol{\mu}_i^* \cdot \mathbf{B}) + \sum_{i<j=1}^N \left[4 \left(\frac{1}{r_{ij}^*} \right)^{12} + \frac{\boldsymbol{\mu}_i^* \cdot \boldsymbol{\mu}_j^*}{r_{ij}^{*3}} - \frac{3(\boldsymbol{\mu}_i^* \cdot \mathbf{r}_{ij}^*)(\boldsymbol{\mu}_j^* \cdot \mathbf{r}_{ij}^*)}{r_{ij}^{*5}} + \frac{\mathbf{Z}^2}{r_{ij}^*} \right],$$

No processo de adimensionalização de uma equação, os coeficientes das variáveis independentes são igualados a um, de modo que agora, todos os parâmetros do sistema têm a mesma ordem de grandeza. As unidades destes parâmetros são obtidos pela equação (3.6):

$$\mu' = (4\pi\mu_0\kappa\sigma^3)^{1/2} \quad (3.7)$$

$$B_0 = \frac{\kappa}{\mu'}, \quad (3.8)$$

Baseados ainda no artigo de Pileni *et al.* [37], utilizamos a expressão $\mu = \mu_0 M_d (\frac{\pi}{6}) \sigma^3$ para o cálculo de μ . Os parâmetros obtidos deste mesmo artigo são:

$$\kappa = 0.331 \cdot 10^{-20} J \quad (3.9)$$

$$M_d = 14 \cdot 10^5 A \cdot m^{-2} \quad (3.10)$$

$$\sigma = 8nm \quad (3.11)$$

A partir destes parâmetros, podemos calcular, utilizando as equações (3.7) e (3.8), μ'

e B_0 :

$$\mu' \sim 10^{-26} A \cdot m^{-2} \Rightarrow \mu^* \sim 10^1 \quad (3.12)$$

$$B_0 \sim 10^{-5} A \cdot m^{-1} \sim 10^{-1} T \quad (3.13)$$

Para a análise da carga, consideramos a seguinte idéia:

É conhecido, em plasmas complexos [38], que para partículas de diâmetro micrométrico a quantidade de carga contida na superfície dessas partículas é da ordem de $10^4 e$, ou seja, 10.000 vezes a carga elementar. Sabendo disto, consideramos a densidade superficial de carga constante e, então, estimamos a quantidade de carga na superfície das partículas do nosso interesse.

Sendo assim, seja ξ a densidade superficial de carga. Então:

$$\xi = \frac{Q}{A} \quad (3.14)$$

onde Q e A são a carga e área da superfície. Para os valores contidos no trabalho [38]:

$$\xi = \frac{Q}{A} = \frac{10^4 e}{4\pi(10^{-6}m)^2} \sim 10^{15} e \cdot m^{-2} \quad (3.15)$$

No presente sistema o diâmetro da partícula magnética é da ordem de 10 nanômetros, então a carga em sua superfície é :

$$\xi \sim 10^{15} e \cdot m^{-2} \sim \frac{Q}{4\pi(10 \cdot 10^{-9}m)^2} \quad (3.16)$$

\Rightarrow

$$Q \sim 10^{15} e \cdot m^{-2} \cdot 10^{-15} m^2 \quad (3.17)$$

\Rightarrow

$$Q \sim 1e \quad (3.18)$$

Logo, a carga na superfície das partículas aqui consideradas é da ordem de 1 (uma) carga elementar.

4 *Resultados*

4.1 *Introdução*

Neste capítulo, são apresentados os resultados da simulação do sistema apresentado no capítulo anterior. Este trabalho foi realizado em duas etapas. Inicialmente, estudam-se as propriedades estruturais e dinâmicas do sistema em função da carga superficial de cada partícula, sendo o momento de dipolo magnético das mesmas constante. De modo geral, pode-se esperar alteração das configurações de equilíbrio do sistema em função da carga, visto que a modificação deste parâmetro implica diretamente na modificação da estabilidade do sistema, pois o potencial coulombiano acrescenta um termo positivo ao Hamiltoniano que descreve o problema, intensificando a interação de repulsão entre as partículas. Em seguida, estuda-se o comportamento do sistema em função do campo magnético externo aplicado, mantendo-se os valores da carga e do momento de dipolo magnético das partículas fixos. Este campo é aplicado paralelamente ao plano das partículas, na direção do eixo x . Faz-se esta análise para diferentes valores de carga. Este segundo caso é apresentado como o de maior relevância no trabalho, visto que experimentalmente é mais viável controlar o campo magnético externo aplicado a um dado sistema, ao invés de controlar a carga superficial de todas as partículas que compõem o mesmo. Nestes dois casos, analisam-se as propriedades estruturais através das configurações do estado fundamental ($T=0$), onde observam-se as diferentes estruturas dependentes da carga e do campo magnético.

As propriedades dinâmicas são estudadas a partir dos modos normais de vibração, através da análise do espectro de vibração, da mínima frequência não-nula (em alguns casos associados à estabilidade do sistema). Analisa-se também, no caso da dependência do campo magnético, a magnetização total e sua relação com as demais propriedades do sistema estudado.

Com o objetivo de estudar o comportamento do aglomerado em função da carga das partículas e da intensidade do campo magnético externo, consideramos aqui um aglom-

erado com $N = 19$ partículas para a apresentação da maioria dos resultados. Ao final, apresentamos também resultados para sistemas com maior número de partículas.

4.2 Dependência da Carga

O sistema dependente da carga Z é estudado em dois casos: O primeiro sem campo magnético ($B=0$), e o segundo, para campo magnético não-nulo, mais especificamente, $B=5$. Apresentam-se, inicialmente, os resultados para $B=0$, e em seguida, os resultados do mesmo sistema no qual se aplica o campo magnético $B=5$.

4.2.1 Carga Variando: $B=0$

Propriedades Estruturais

Consideramos para os nossos estudos um sistema de $N=19$ partículas, cada uma com momento de dipolo magnético $\mu^* = 2$. Resultados obtidos em um sistema puramente magnético, em função do momento de dipolo magnético, podem ser encontrados em [39]. Estudamos as propriedades estruturais para diferentes valores da carga Z de cada partícula ($0 \leq Z \leq 6$). Para valores $Z > 6$, não há mudança significativa das propriedades do sistema. Nesta seção, o campo magnético é escolhido com valor $B=0$. Analisam-se inicialmente as diferentes estruturas de mínima energia, e as transições estruturais que ocorrem em função da variação da carga.

Em geral, e como resultado da competição entre as interações elétrica e magnética, diferentes estruturas são encontradas em função da carga. Exemplos dessas estruturas são mostrados na Figura 8. Uma estrutura de anéis concêntricos, com dipolos orientados ao longo de cada anel é observada para $Z < 1.9$ e $Z \geq 4.0$. Para valores intermediários de Z , estruturas não-triviais e assimétricas são observadas, apesar da simetria circular do potencial de confinamento. Na Figura 9(a) apresentamos a distância radial de cada partícula em relação ao centro do potencial de confinamento. Nesta mesma Figura, definimos diferentes regiões, associadas às diversas estruturas observadas (ver Figura 8). Na região I [Figura 8(a)], a configuração de menor energia consiste em dois anéis concêntricos, com os momentos de dipolo alinhados em cada um deles. Este alinhamento ocorre de modo tal que o polo norte de uma partícula direciona-se ao polo sul da partícula vizinha. Em todo o perímetro dos anéis, as partículas quase se tocam, enquanto que entre os anéis há um espaçamento resultante da repulsão entre anéis (tanto da interação coulombiana

quanto da interação dipolar magnética). Nestas condições, as interações dipolo-dipolo são dominantes, implicando na configuração anteriormente descrita. O aumento da carga elétrica das partículas está associado a um potencial repulsivo entre as mesmas, que passa a competir com o potencial dipolar, que é atrativo para dipolos alinhados ao longo dos anéis concêntricos. Por isso, é de se esperar um aumento das distâncias inter-partículas. A primeira transição, para a região II, ocorre em $Z \sim 1.36$, como pode ser observado na figura 9(a). O aumento do potencial repulsivo diminui a estabilidade do anel interno da configuração, reduzindo o número de partículas que o compõem. O sistema agora, passa a se arranjar na estrutura (5,14), ou seja, um anel interno composto por cinco partículas, e uma camada externa com 14 partículas, com momentos de dipolo igualmente alinhados, como pode ser observado na Figura 8(c). O contínuo aumento da carga tem como consequência outras transições estruturais para as regiões III e IV da Figura 9(a), onde observa-se que o número de partículas do anel interno da configuração diminui gradualmente, ao passo de uma partícula por transição, como pode ser observado nas Figuras 8(d) e 8(e). Até então, embora o potencial repulsivo resultante da interação coulombiana tenda a afastar as partículas uma das outras, observou-se apenas uma alteração estrutural consequente desta repulsão. Entretanto, o sistema sofre alterações significativas na escala destas configurações de equilíbrio, que podem ser observadas na Figura 9(a). Em $Z \sim 1.98$ há uma transição, na qual o anel interno passa a se configurar como uma cadeia simples, de três partículas, interna a um anel interno. Conforme comentado anteriormente neste tipo de configuração, a simetria circular imposta pelo potencial de confinamento é superada, como pode ser visto na Figura 8(e). O número de partículas internas continua a diminuir com o aumento da carga, resultando nas configurações da Figura 8(f), em $Z \sim 2.45$ e da Figura 8(g), em $Z \sim 3.25$. Em $Z \sim 3.35$ ocorre um efeito reentrante, onde a configuração de menor energia volta a ser a de um anel externo com os dipolos alinhados como nas configurações anteriores e duas partículas internas, assim como na configuração da Figura 8(f). Pode-se observar nas Figuras 9(a),(c), que a região VI apresenta um grande número de transições estruturais, representando uma região de transição entre a dominância do potencial dipolar magnético e o potencial coulombiano, sobre o sistema. Este efeito pode ser melhor observado na Figura 9(e), na qual pode-se observar que, nesta região de carga, o valor da energia associada à interação dipolo-dipolo magnético se aproxima de zero, variando em cinco unidades de energia a partir de valores de carga Z próximos a 4. A energia eletrostática não sofre grandes alterações, o que é associado ao aumento da distância entre as partículas, consequência da diminuição acentuada da interação dipolar, compensando o aumento da carga. Nesta região, as transições ocorrem através da formação de cadeias

e pequenos aglomerados. Uma destas estruturas, observada em $Z \sim 3.80$, na Figura 8(j) apresenta três linhas aproximadamente paralelas, com dipolos alinhados de modo tal que as duas linhas externas têm sentido oposto e tendendo a se ligar com a linha interna. Este tipo de estrutura, a menos da orientação dos dipolos é encontrado por Munarin *et al* [39], em semelhante sistema para $Z = 0$, mas com campo magnético aplicado paralelo ao plano de confinamento. Em $Z \approx 4$, outro efeito reentrante é observado, no qual o sistema volta a se configurar como dois anéis concêntricos, tal qual a configuração para $Z = 0$, com a diferença da grande distância inter-partículas presente, resultante do efeito dominante do potencial coulombiano. Outro efeito associado a este potencial é evidenciado na Figura 9(b), onde pode-se observar claramente um estrangulamento das frequências do sistema em torno de $Z \approx 4$. A última transição observada ocorre em $Z \approx 4.70$, onde o sistema apresenta-se como dois hexágonos concêntricos, com uma partícula central, apresentando, assim, uma configuração com número mágico (1,6,12) observado em estudos anteriores utilizando partículas carregadas [35][40].

Propriedades Vibracionais

Analisamos nesta seção as propriedades vibracionais do sistema, a partir da determinação dos modos normais de vibração. Ou seja, estudamos o comportamento das frequências e das amplitudes das oscilações das partículas em torno de suas respectivas posições de equilíbrio. Os modos normais de vibração do presente sistema possuem duas componentes, a saber: translacional e rotacional. As vibrações de translação estão associadas às coordenadas cartesianas x e y , enquanto que as vibrações de rotação estão associadas com a coordenadas θ , relacionada à orientação dos dipolos magnéticos.

As frequências dos modos normais de vibração, bem como as amplitudes e a polarização das oscilações, foram calculadas através da aproximação harmônica, método este descrito em detalhes na seção 2.3. Um exemplo dos resultados obtidos está na Figura 9(b), onde as frequências dos modos normais do aglomerado de $N=19$ partículas são apresentadas, para diferentes valores de carga das partículas. O campo magnético é nulo neste caso. As frequências são extremamente sensíveis à configuração do sistema e ao valor da carga de cada partícula. No caso de transições estruturais de primeira ordem, observa-se saltos abruptos no espectro de frequências. Conforme comentado anteriormente, e como pode ser observado na Figura 9(b), as frequências dos modos normais sofrem um estrangulamento para valores de carga $Z \geq 4$. De acordo com a Figura 9(e), este fato pode ser associado com uma diminuição da contribuição da interação magnética dipolar. Observa-

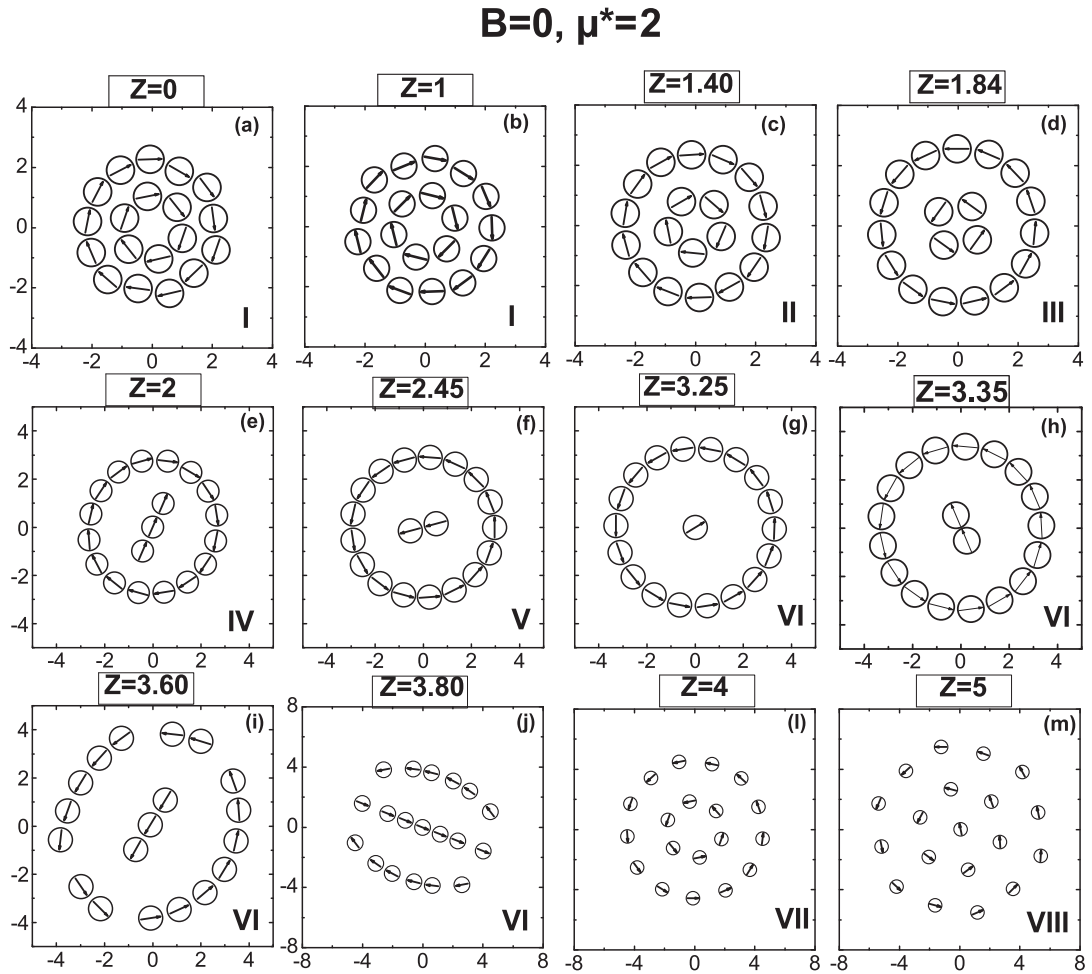


Figura 8: As figuras (a) a (l) apresentam as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=19$ partículas com campo magnético $B=0$, para vários valores de carga Z .

se também que a amplitude das oscilações de translação dos modos normais sofre grande decréscimo, mas somente para carga $Z \geq 5$, após a última transição estrutural do sistema, para a configuração (1,6,12), mostrada na Figura 8(m). A Configuração neste caso é bastante “empacotada”, não permitindo oscilações de translação com grande amplitude. Na Figura 11(a)-(l) apresentam-se os modos normais de vibração translacional associados à menor frequência não-nula, apresentada nas Figuras 11(m),(n). Pode-se observar nas Figuras 11(a),(b) a possibilidade de existência de dois modos de vibração em uma mesma estrutura de equilíbrio. Na Figura 11(c) o sistema vibra em uma frequência associada ao movimento do centro de massa do sistema, de valor $\sqrt{2}$. Outro caso especial é apresentado na Figura 11(i), na qual o sistema oscila como dois vórtices adjacentes, em sentidos contrários (par vórtice/anti-vórtice). O modo de vibração da região VII da Figura 11(m) é representada pela Figura 11(l), o qual corresponde a uma rotação entre camadas. Como observado no caso de sistema coulombiano [41], devido aos números não comensuráveis

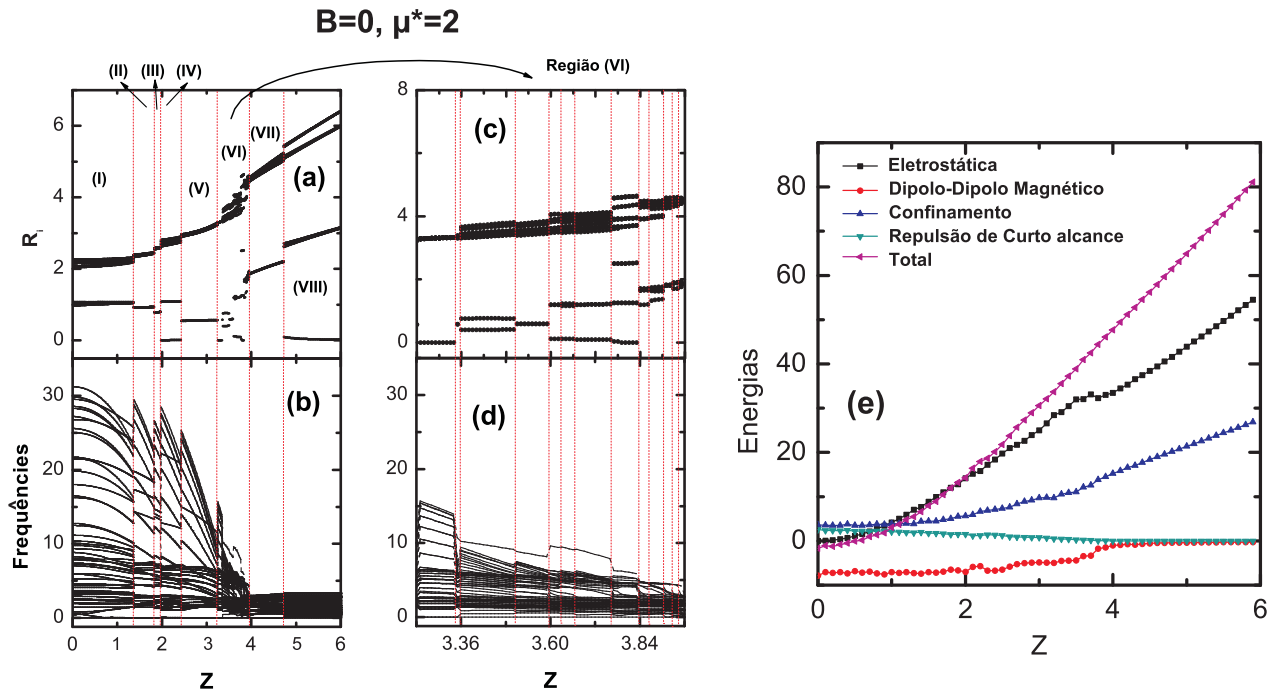


Figura 9: As figuras (a) e (b) apresentam, respectivamente, as distâncias radiais de cada partícula ao centro do potencial confinante, e o espectro de frequências dos modos normais do sistema de $N=19$ partículas no caso $B=0$, para vários valores de carga Z . Em (c) e (d) são apresentados uma ampliação na região VI das figuras (a) e (b), respectivamente. Em (e), apresenta-se a contribuição para a energia por partícula de cada termo de interação e do potencial de confinamento em função de Z .

de partículas nas camadas, os valores de frequência são extremamente baixos. Na Figura 12(a)-(m), são apresentados os modos de rotação, associados à vibração do sistema na coordenada θ . Cada configuração tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas. A configuração que apresenta maior intervalo é a correspondente a $Z = 5$ (Figura 12(m)), com amplitude de ± 0.665 radiano, ou $\pm 38,2$ graus, aproximadamente. A configuração de menor intervalo é a correspondente a $Z = 3.25$ (Figura 12(h)), com amplitude de ± 0.214 radiano, ou $\pm 12,3$ graus, aproximadamente. A configuração da Figura 12(c) apresenta frequência de rotação zero, pois apresenta apenas vibração translacional. As cores tendem ao vermelho, ou ao azul, a medida que as frequências de rotação das partículas tendem aos valores limites. Deste modo, o verde representa valores de frequência de rotação próximas a zero. Associados aos modos de vibração de translação e rotação, a Figura 10(a),(b) apresenta as amplitudes destas oscilações, dependendo da carga Z de cada partícula. É importante notar desta Figura a semelhança de comportamento das amplitudes para os dois modos de vibração até a região VII do gráfico. Na região VIII, deve-se notar um condensamento de amplitudes em torno de valores próximos a um, na Figura 10, associada à translação.

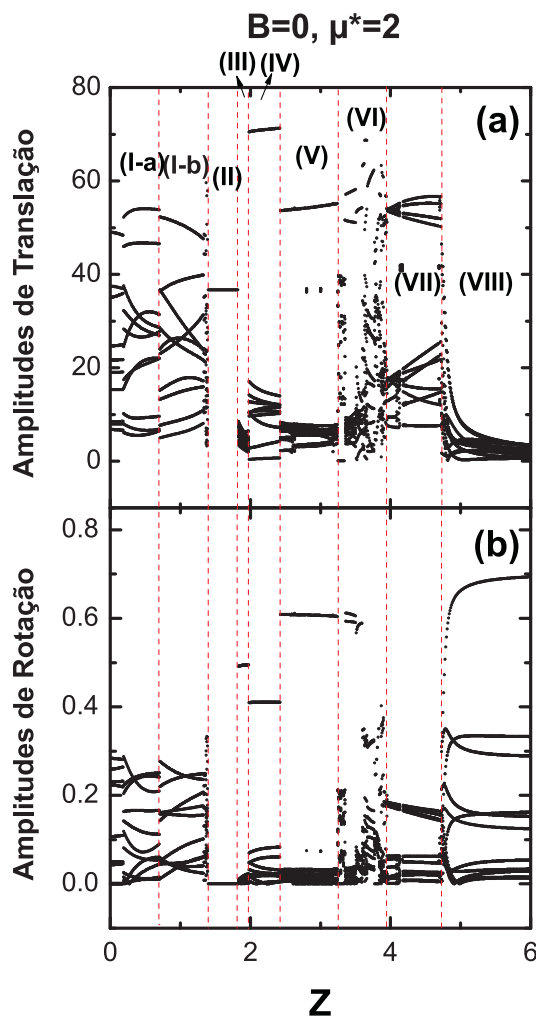


Figura 10: Nas figuras (a) e (b) apresentam-se as amplitudes das componentes de translação (a) e rotação (b) dos modos normais de vibração de um sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=0$, para diferentes valores de carga Z .

4.2.2 Carga Variando: $B=5$

Apresentaremos agora os resultados para o mesmo aglomerado com $N=19$ partículas em função da carga, mas desta vez um campo magnético, de intensidade $B = 5$, é aplicado ao longo da direção x , paralelo ao plano dos dipolos. A apresentação destes resultados será feita como na subseção anterior, considerando-se inicialmente as propriedades estruturais para, em seguida, serem apresentadas as propriedades vibracionais. Além disto, comparações entre as propriedades do sistema nas situações de $B = 0$ e $B = 5$ também serão descritas.

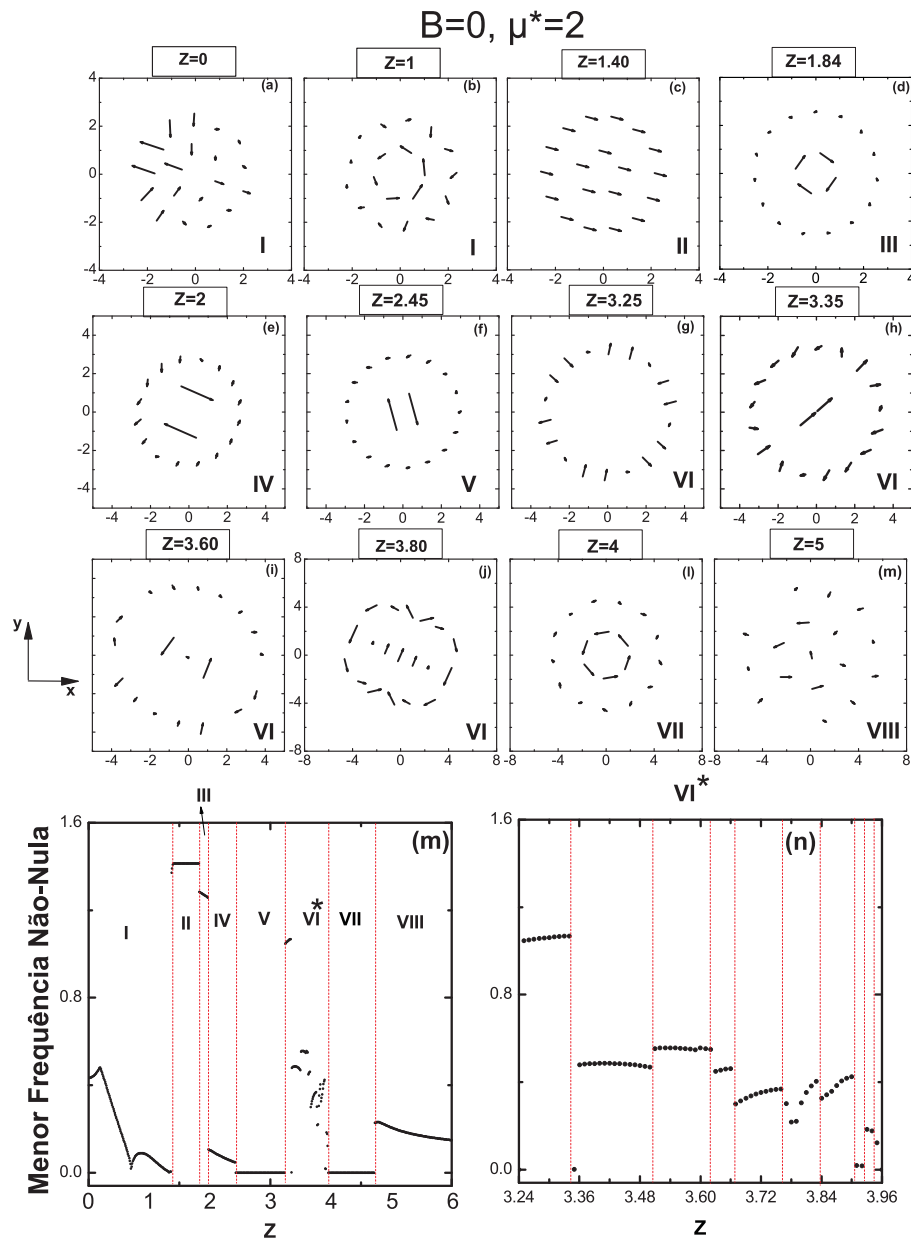


Figura 11: Nas figuras (a)-(l) apresentam-se os modos normais de vibração do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=0$, para vários valores de carga Z . Os gráficos (m) e (n) apresentam a menor frequência não-nula (m), e uma ampliação da região VI da figura (m).

Propriedades Estruturais

O campo magnético introduz uma direção preferencial no sistema, quebrando a simetria circular do potencial de confinamento. Para o valor ($B = 5$) aqui considerado, todos os dipolos encontram-se orientados na direção do campo magnético. Em geral, e diferentemente do caso $B = 0$, o sistema se auto-organiza numa estrutura de cadeias paralelas à direção do campo externo. O número de cadeias, bem como sua estrutura interna, é função da carga das partículas e do campo magnético. Apenas para valores $Z \geq 5$, a estru-

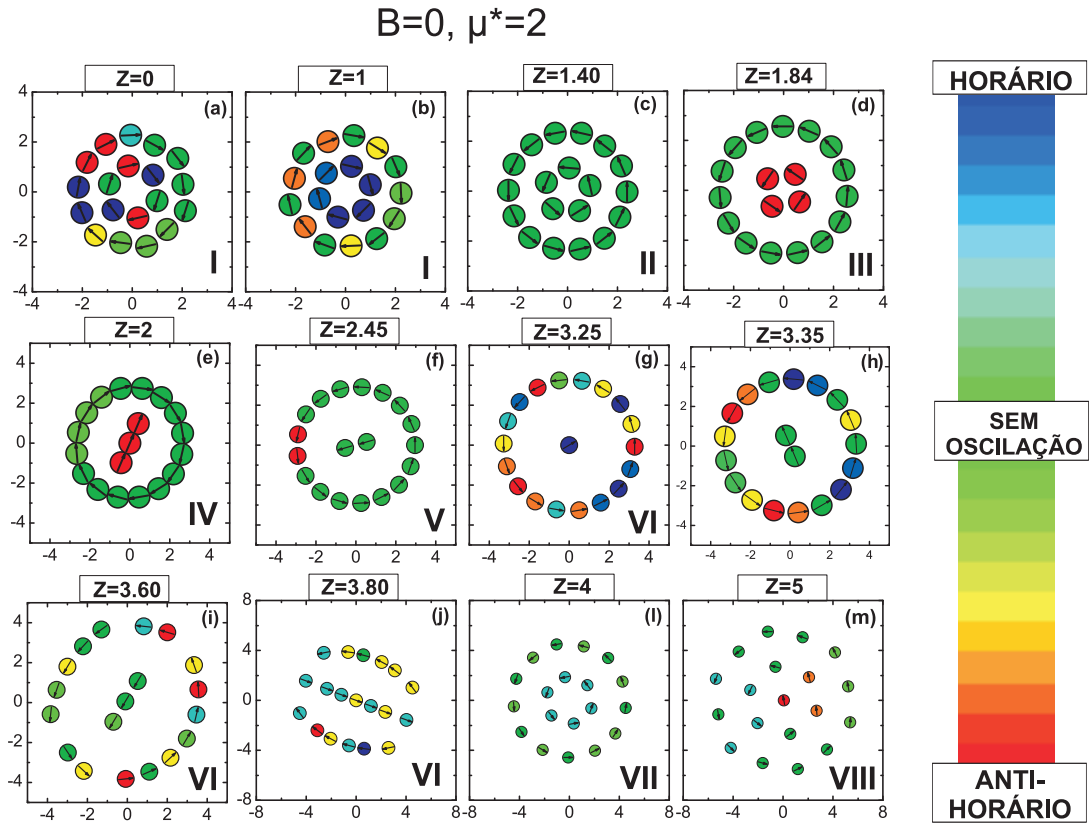


Figura 12: Nas figuras de (a)-(l) apresentam-se os modos normais de rotação do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=0$, para vários valores de carga Z . As cores indicam o sentido de rotação das partículas (horário ou anti-horário). Cada configuração tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas.

tura hexagonal típica de sistemas 2D arranjados é observada. Ainda assim, encontramos, por exemplo, que no caso $Z = 6$ a estrutura hexagonal pode também ser percebida como um arranjo de 5 cadeias paralelas a B .

Exemplos de configurações de mínima energia para diferentes valores de carga das partículas são mostrados na Figura 13. Como pode ser observado, não há estrutura circular para pequenos valores de Z , como ocorre no caso $B = 0$. Conforme comentado, a interação do campo magnético com os dipolos se superpõe à simetria circular do potencial de confinamento, gerando a estrutura de cadeias mostrada (Figura 13). O aumento da carga das partículas gera um maior espaçamento entre as mesmas, como consequência da repulsão eletrostática. Para pequenos valores de Z , a interação dipolar atrativa gera estruturas contínuas. As partículas, nas cadeias, estão muito próximas umas das outras. Para valores intermediários, a configuração é caracterizada por um conjunto de pequenos aglomerados. Para $Z > 4$, aproximadamente, as partículas encontram-se completamente separadas umas das outras.

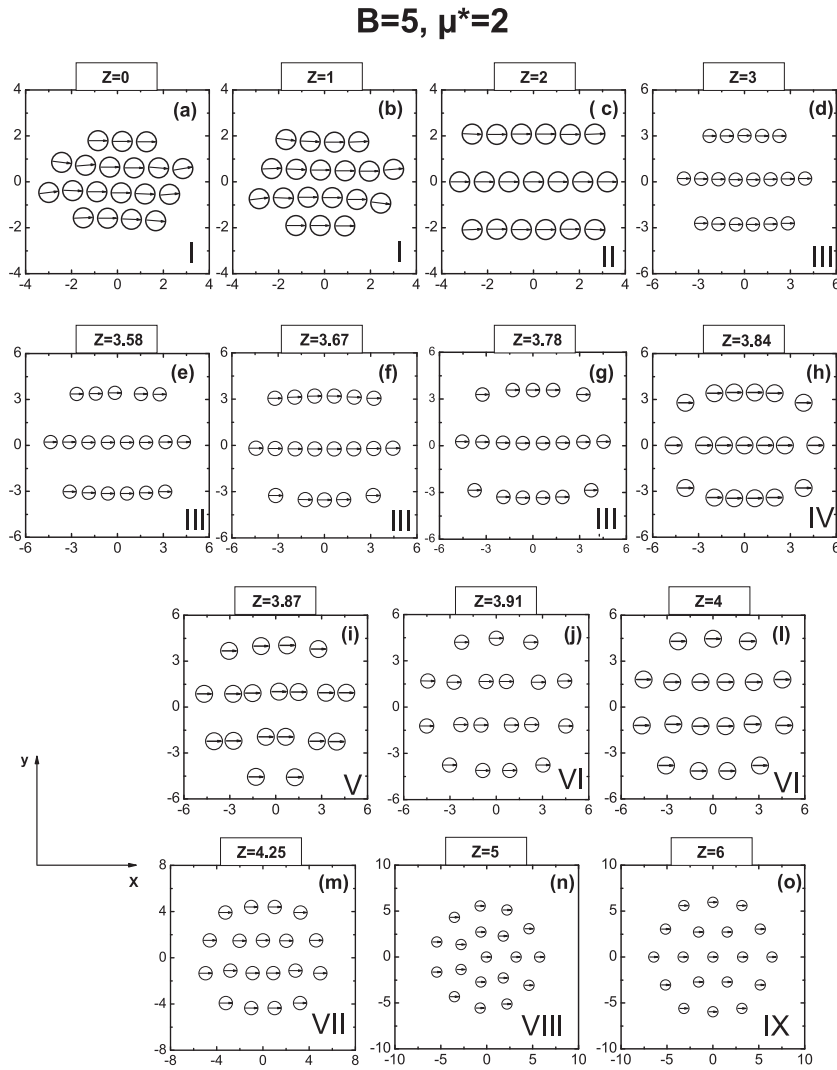


Figura 13: Nas figuras (a) a (o) apresentam-se as configurações do estado fundamental do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z .

Para determinados valores de Z , o sistema apresenta mudanças na estrutura, caracterizando uma transição estrutural de primeira ordem. Este fato pode ser observado na Figura 14(a), onde a coordenada Y das partículas em relação ao eixo x é mostrada em função de Z . Na Figura 14(a), diversas regiões (I, II, ..., IX) são definidas de acordo com a configuração do sistema. As configurações apresentadas na Figura 13 são identificadas com a região correspondente na Figura 14.

Na Figura 13(a), o sistema apresenta-se organizado em quatro colunas, duas mais ao centro, em torno de $Y = 0$, com mesmo número de partículas (6), e duas mais externas. Pode-se observar, através da pequena distância entre as quatro estruturas o domínio da interação dipolar. Na Figura 13(c) ($Z \sim 1.2$) observa-se o primeiro efeito da interação entre cargas no sistema. O sistema passa a apresentar-se agora em três colunas, com

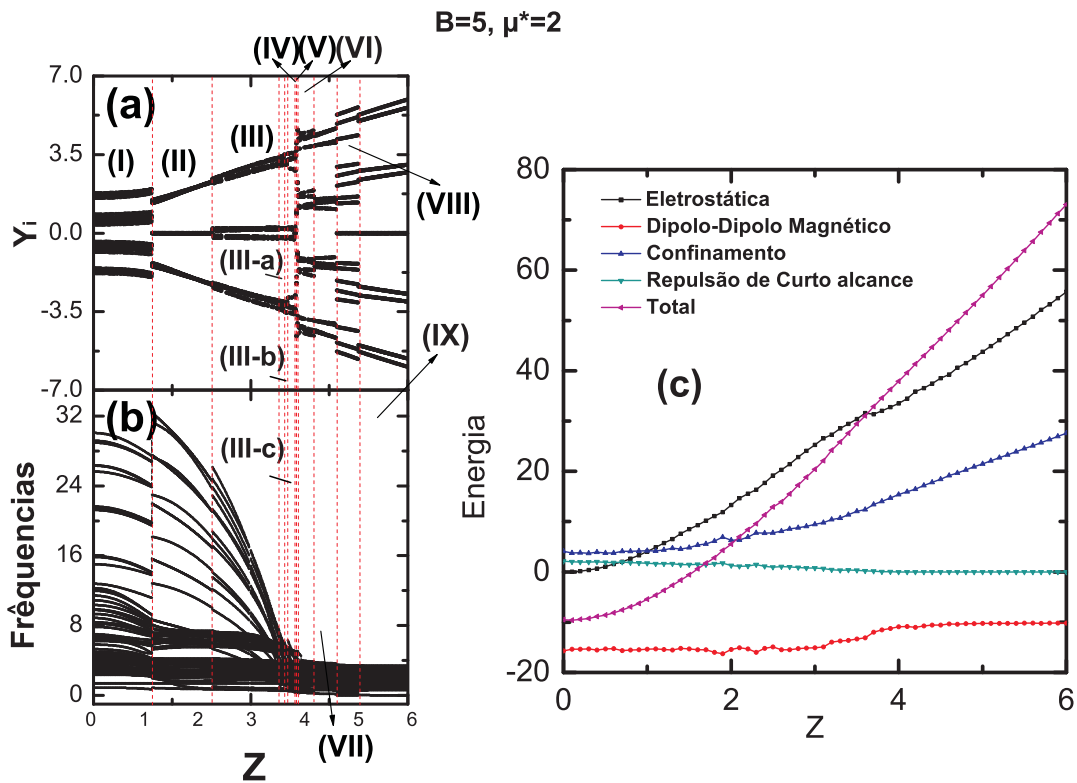


Figura 14: Nas figuras (a) e (b) apresentam-se, respectivamente, as coordenadas Y de cada partícula (a), e o espectro de frequências dos modos normais do sistema de $N=19$ partículas para campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z . Em (c), apresenta-se a contribuição para a energia por partícula de cada termo de interação e do potencial de confinamento do sistema.

espaçamento entre elas da ordem, aproximadamente, do diâmetro de uma partícula, com a coluna central com 7 componentes, em $Y = 0$, e as outras colunas com igual número de partículas (seis). Esta transição pode ser observada na Figura 14(b), da região I para a região II, e a configuração pode ser observada na Figura 13(c). Em $Z \sim 2.22$, ocorre uma sensível alteração na configuração do sistema, como pode ser observado na Figura 13(d). Uma partícula de uma das colunas externas passa a compor a coluna central. Embora seja uma pequena alteração, a transição é bem definida, como pode ser observado nas Figuras 14(a) e (b). A quebra da simetria do número de partículas nas colunas externas da estrutura pode ser observada também na Figura 14(a), pelas seis linhas que podem ser vistas na região III. A próxima transição ocorre em $Z \sim 3.58$. Conforme comentado anteriormente, com o aumento de Z , e conseqüentemente o aumento da repulsão entre as partículas, o sistema começa a se configurar em pequenos aglomerados e linhas de tamanhos variados [Figuras 13(e)-(l)]. Assim como no caso $B = 0$, esta região de valores de carga representa o intervalo de transição de domínio entre os potenciais coulombiano e dipolar magnético. Embora, devido à presença do campo magnético, a

energia da interação dipolo-dipolo magnético não se aproxime de zero, como no caso de $B = 0$, pode-se observar na Figura 14 (c) a mesma variação de aproximadamente cinco unidades de energia desta interação, e aproximadamente o mesmo valor de energia eletrostática desta região de transição no caso $B = 0$. Apesar de todas estas alterações, os dipolos permanecem alinhados com o campo externo aplicado, e a organização em colunas sofre pequenas alterações, até $Z \sim 3.87$. Neste valor, como pode ser visto na Figura 13(i), o sistema volta a se arranjar em quatro colunas, embora com números de partículas distintos. Na próxima transição, há uma suave alteração, na qual a linha externa menor recebe uma partícula a mais, configurado-se então com 3 partículas (ver Figura 13(j)). Outro efeito que deve ser observado desde a transição em $Z \sim 3.87$, e continua até $Z \sim 4$, é a extinção das linhas e a gradativa diminuição do número de pequenos aglomerados, até a completa eliminação, como mostrado na Figura 13(l). O que ocorreu nesta região de transição foi a segmentação gradual dos aglomerados, formando inicialmente linhas, posteriormente linhas+pequenos aglomerados, findando nesta última estrutura, para em seguida as partículas se arranjam de modo que há sempre uma distância considerável entre elas. Neste momento a interação coulombiana tornou-se dominante sobre a dipolar. Finalmente, observa-se apenas mais três transições estruturais. A primeira, pode ser observada na Figura 13(m). Na penúltima, em $Z \sim 4.7$, o sistema passa a arranjar-se em dois anéis concêntricos, com uma partícula central, como pode ser observado na Figura 13(n). Na última, o sistema permanece com uma partícula ao centro do potencial de confinamento, mas agora, os dois anéis passam a se arranjar em dois hexágonos concêntricos, um com seis e outro com 12 partículas (ver Figura 13(o)).

Propriedades Vibracionais

Assim como na subseção anterior, as propriedades vibracionais do sistema são analisadas através das frequências de vibração translacional e rotacional, e das amplitudes de vibração associadas a estes dois casos. Primeiramente, o componente de translação dos modos normais é apresentado nas Figuras 15(a)-(o), juntamente com a menor frequência não-nula, mostrada na Figura 15(p). Na Figura 16(a)-(o), o componente rotacional é apresentado. Assim como no caso anterior, cada configuração tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas. As cores tendem ao vermelho, ou ao azul, a medida que as frequências de rotação das partículas tendem aos valores limites. Deste modo, o verde representa valores de frequência de rotação próximas a zero. A configuração que apresenta maior intervalo é a correspondente a $Z = 1$ (Figura 16(b)), com amplitude de $\pm 0,0815$ radiano, ou $\pm 4,7$ graus, aproximada-

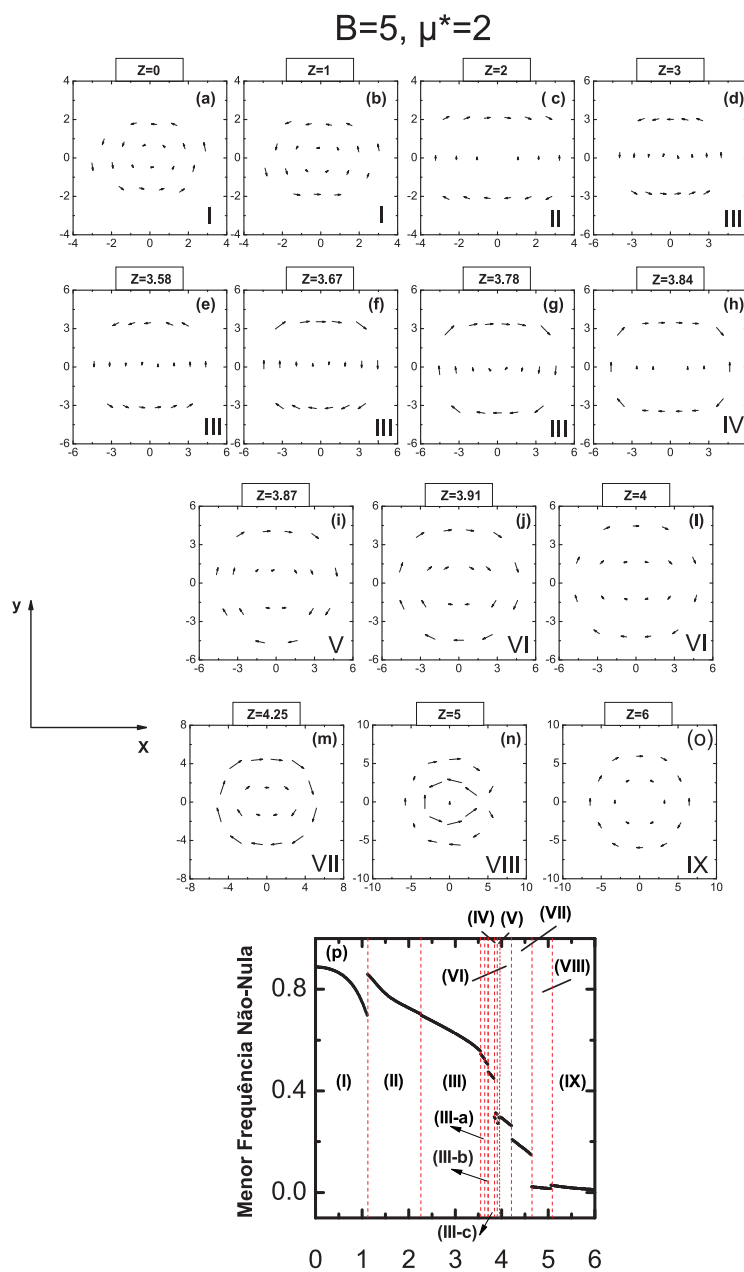


Figura 15: Nas figuras (a)-(o) apresentam-se os modos normais de vibração do sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z . O gráfico (p) apresenta a menor frequência não-nula em função de Z .

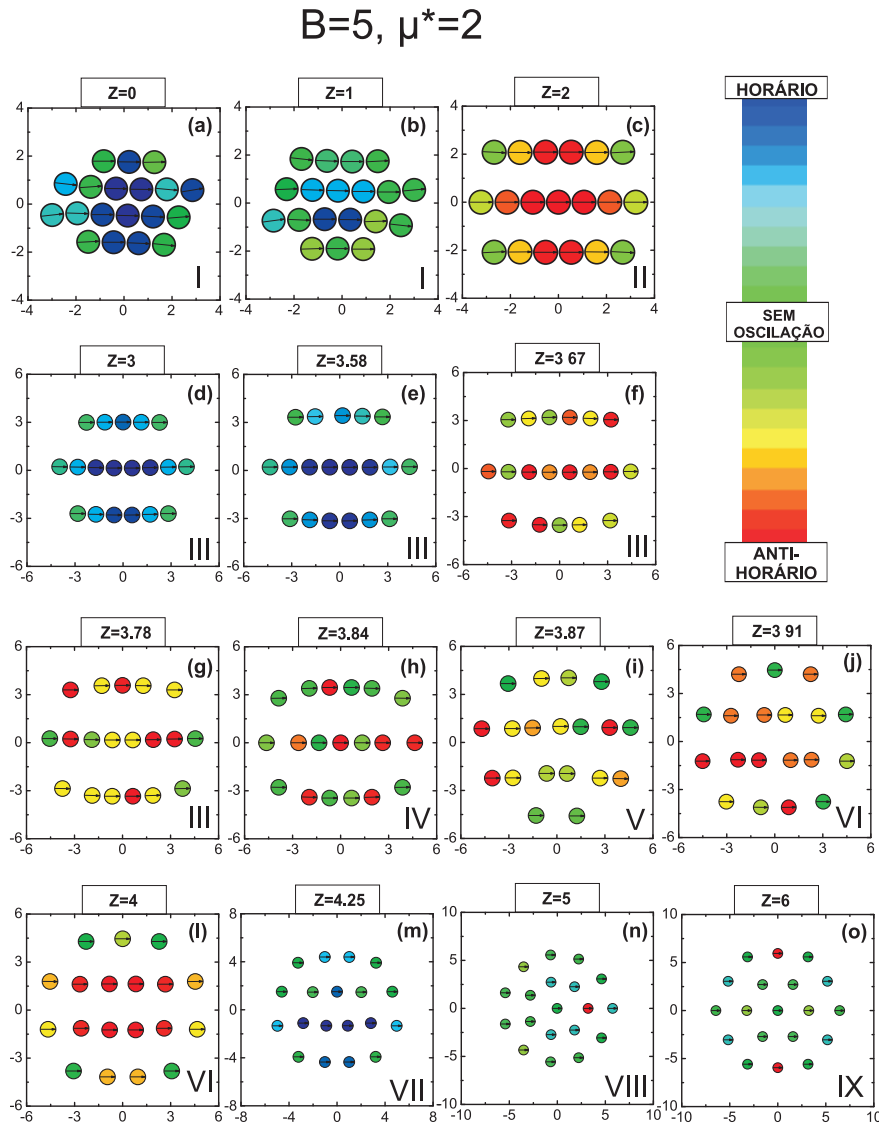


Figura 16: Nas figuras (a)-(o) apresentam-se os modos normais de vibração do sistema de $N=19$ partícula sem campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z . As cores representam o sentido da componente de rotação dos modos normais de cada partícula. Cada configuração tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas.

mente. A configuração de menor intervalo é a correspondente a $Z = 6$ (Figura 16(o)), com amplitude de $\pm 0,0013$ radiano, ou $\pm 0,07$ graus, aproximadamente. Finalmente, mostra-se na Figura 17 as amplitudes de vibração dos componentes translacional de rotacional dos modos normais. A Figura 17(a) mostra as amplitudes associadas à vibração translacional, enquanto que na Figura 17(b) são apresentadas aquelas associadas às vibrações rotacionais. Assim como no caso de $B = 0$, há um comportamento que deve ser destacado. A região IX da Figura 17 apresenta um condensamento das amplitudes para valores próximos a zero. É importante notar que este comportamento, embora semelhante, é o

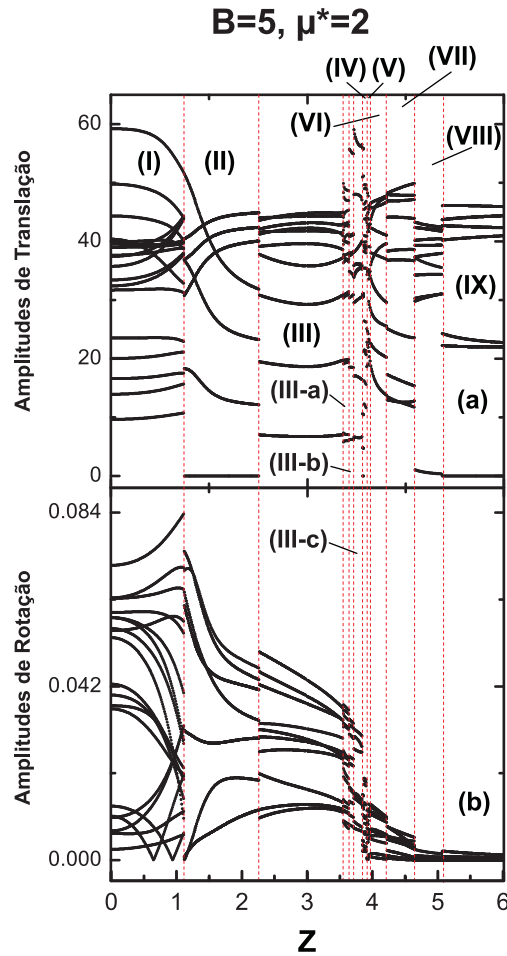


Figura 17: Nas figuras (a) e (b) apresentam-se as amplitudes das componentes de translação (a) e rotação (b) associadas à vibração de um sistema de $N=19$ partículas em campo magnético $B=5$, para vários valores de carga Z .

oposto do que ocorre no caso de $B = 0$, e se deve à aplicação do campo magnético, o qual tende a alinhar os dipolos das partículas na direção do campo, dificultando, a medida que se aumenta a intensidade do campo, a oscilação de rotação. A região de carga Z em que este efeito começa a ser observado na Figura 17 é a mesma na qual observa-se a quebra de simetria circular do potencial de confinamento, no caso anterior ($B = 0$).

4.3 Dependência do Campo Magnético B

Nesta seção apresentamos os resultados do mesmo sistema de $N=19$ partículas, com momento de dipolo $\mu^* = 2$ cada uma, mas para valores particulares de carga, visto que a dependência do campo magnético externo aplicado é estudado. O campo é aplicado paralelo ao plano de confinamento, na direção do eixo x . Os valores de carga escolhidos são: $Z = 3$, $Z = 4$ e $Z = 5$, $Z = 6$. A importância no estudo realizado nesta seção está

na maior viabilidade de se realizar um experimento baseado neste sistema, visto que a intensidade do campo magnético externo aplicado é mais facilmente controlável do que, como apresentado na seção anterior, a carga superficial de cada partícula. Os resultados a serem apresentados limitam-se a um intervalo pequeno de valores de B (campo magnético).

Propriedades Estruturais

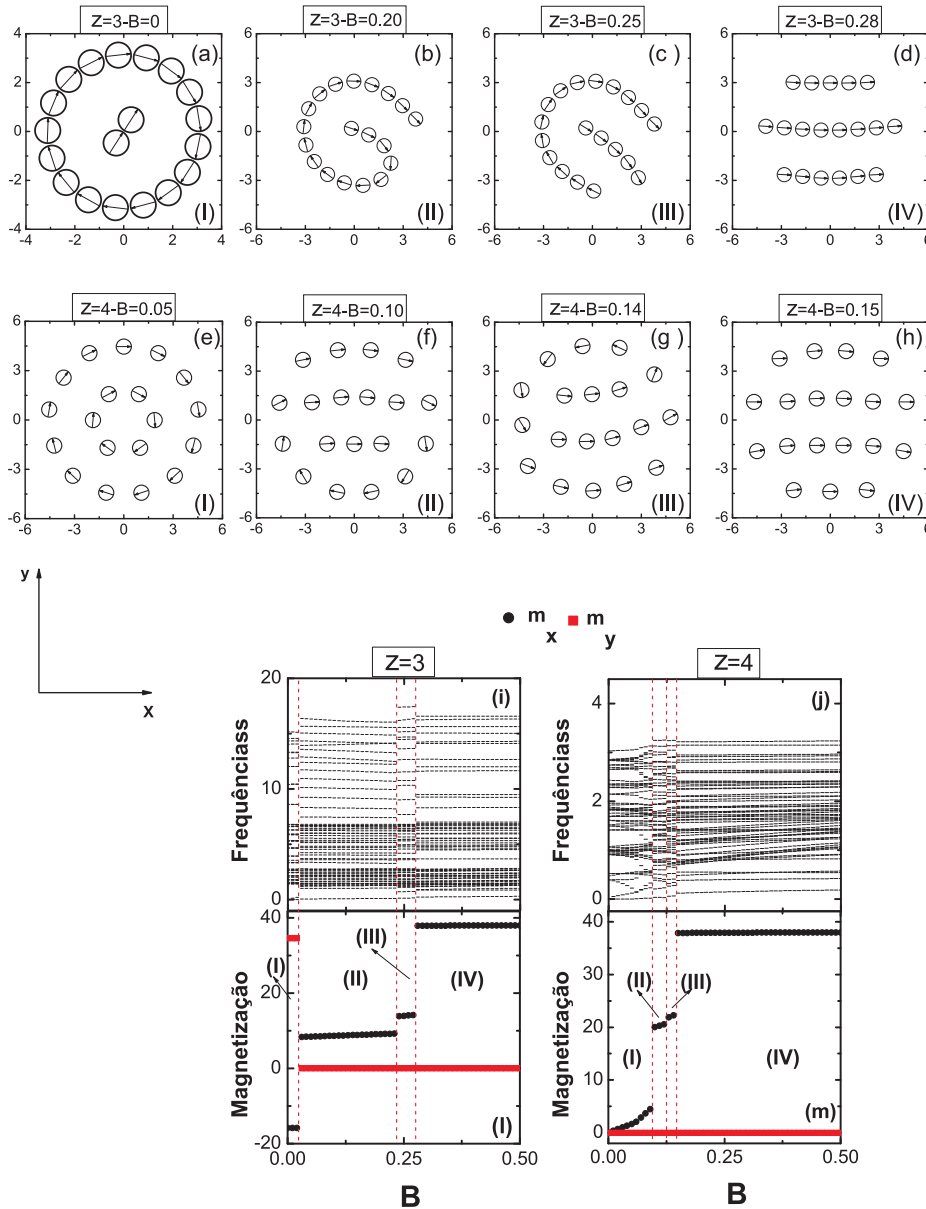


Figura 18: Nas figuras de (a) a (h) apresentam-se as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=19$ partículas em função do campo magnético externo aplicado, para valores de carga $Z=3$ [(a)-(d)], e $Z=4$ [(e)-(h)]. Em (i) e (j) são apresentados o espectro de frequências dos modos normais e a magnetização do sistema para os casos $Z = 3$ [(i)-(l)], e $Z = 4$ [(j)-(m)].

As propriedades estruturais são apresentadas nas Figuras 18 e 19, nas quais são ap-

resentadas as configurações do estado fundamental para os casos de carga $Z = 3$ e $Z = 4$, na Figura 18(a)-(h), e $Z = 5$ e $Z = 6$ na Figura 19(a)-(h). Apresenta-se também a magnetização e as espectro de frequência dos modos normais do sistema para ambos os casos ($Z = 3, Z = 4$ e $Z = 5, Z = 6$), como pode ser visto nas Figuras 18(i),(l) e 19(j),(m), respectivamente. Esta magnetização do sistema é calculada separadamente para cada componente x e y , somando-se a contribuição de cada dipolo magnético nestas direções. Deste modo, é de se esperar que, a medida que a intensidade do campo magnético aumenta, a magnetização do sistema se concentre na direção do campo magnético, no caso no eixo x . Uma característica importante deste sistema é a capacidade do campo magnético alterar drasticamente a estrutura do sistema, como pode ser observado no caso de $Z = 3$.

Na Figura 18(a),(e) apresenta-se casos em que o campo magnético não interfere significativamente no sistema. Estes resultados já foram obtidos e apresentados na seção anterior. Analisando-se primeiramente o caso $Z = 3$, nota-se que, diferentemente dos casos $B = 0$ e $B = 5$ do sistema dependente da carga Z , não há formação de pequenos aglomerados nas transições apresentadas, nem estruturas nas quais há espaçamento entre as partículas, como pode ser observado nas figuras 18(a)-(d). Isto pode ser explicado pela dominância das interações dipolo-dipolo entre as partículas. Observa-se também nestas mesmas Figuras que o campo magnético tende a organizar o sistema em cadeias, passando de uma cadeia (Figura 18(b)), para duas, na Figura 18(c), para finalmente organizar-se em três cadeias paralelas ao campo, com todos os dipolos orientados na mesma direção (ver Figura 18(d)). É interessante observar também na Figura 18(i) a relação das transições ocorridas no sistema com as alterações na magnetização do mesmo. Como já foi comentado na seção anterior, para ambos os casos de campo magnético aplicado, a região de carga $3 < Z < 4$ apresentava estruturas que caracterizavam uma competição entre os dois potenciais de interação, o dipolar e o coulombiano.

A partir de valores próximos a $Z = 4$, a interação entre cargas torna-se dominante no sistema. Este mesmo efeito é exemplificado nas Figuras 18(d)-(h), nas quais há ausência dos pequenos aglomerados. Neste valor de carga, diferentemente do caso $Z = 3$, não há formação de cadeias. Observa-se, a partir de $B = 0.1$ [Figura18(f)] o alinhamento parcial das partículas. Em $B = 0.15$ [Figura18(h)] finalmente, observa-se o alinhamento total do sistema com o campo magnético. É interessante notar na Figura 18(m), que há dois saltos abruptos da magnetização no eixo x . O primeiro ocorre quando há uma quebra de simetria do sistema, saindo da configuração de dois anéis concêntricos [Figura 18(e)], para cadeias parcialmente alinhadas (Figura 18(f)). O outro, ocorre entre duas estruturas semelhantes, mas com variações aproximadamente iguais no valor de magnetização (~ 20). Para os

casos $Z = 5$ e $Z = 6$ observa-se um maior espaçamento entre as partículas, resultante da forte interação coulombiana. Quanto maiores os valores de carga, mais influente so-

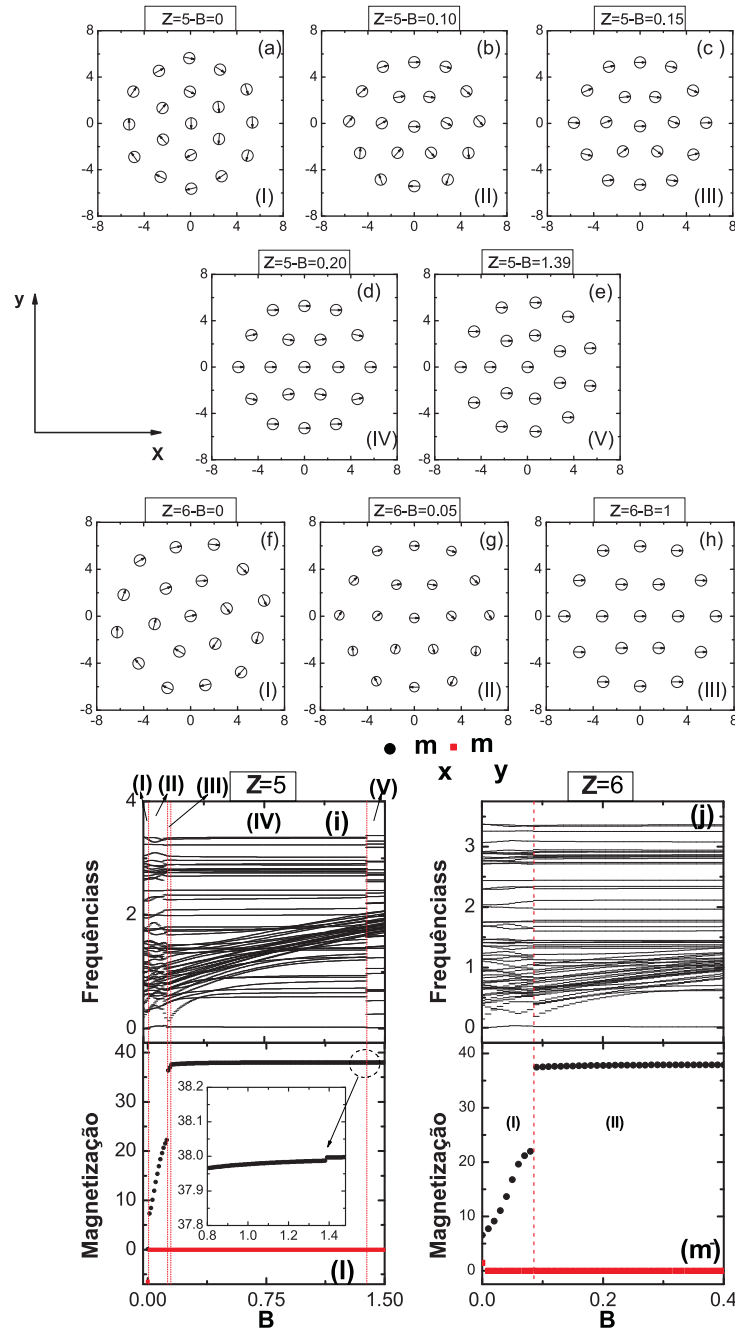


Figura 19: Nas figuras de (a) a (h) apresentam-se as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=19$ partículas em função do campo magnético, nos casos em que $Z=5$ [(a)-(e)], e $Z=6$ [(f)-(h)]. Em (i) e (m) são apresentadas o espectro de frequências dos modos normais e a magnetização do sistema para os casos $Z = 5$ [(i) e (l)], e $Z = 6$ [(j) e (m)].

bre o sistema se torna a interação, em comparação com a interação dipolo-dipolo. Por isto, nas transições apresentadas [Figuras 19(a)-(h)] não há mudanças bruscas de estruturas. Entretanto, tais transições não deixam de apresentar características interessantes.

Na Figura 19(a) observa-se dois hexágonos concêntricos com uma partícula central, com dipolos orientados, assim como na seção anterior. A maior linha de partículas, com cinco componentes, orienta-se verticalmente, paralela ao eixo y . A primeira mudança propiciada pelo campo magnético pode ser vista na Figura 19(b). A estrutura agora é a mesma, mas com uma das linhas de cinco partículas orientada paralela ao eixo x . Neste caso, a intensidade do campo ainda não é suficiente para que todos os dipolos magnéticos orientem-se na mesma direção. A transição da região I para II ocorre para $Z \sim 0.01$, indicando uma sensibilidade elevada do sistema em relação ao campo magnético. Nesta configuração, ocorre apenas uma orientação parcial dos dipolos, à medida que a intensidade do campo aumenta, fato este caracterizado pelo contínuo crescimento da magnetização em 19(i), região II. Em $Z \sim 0.12$, ocorre a segunda transição, apenas de orientação como pode ser visto nas Figuras 19(c) e (d), e também na Figura 19(i), onde pode-se observar o segundo salto no valor da magnetização no eixo x . Estas transições resultantes da mudança de orientação dos momentos de dipolo magnético são interessantes pois, embora não apresentem alterações significativas da estrutura, estão diretamente ligadas a grandes saltos de valores da magnetização do sistema. Por último, em $Z \sim 1.38$ acontece a última, e única transição estrutural. O sistema passa de duas estruturas concêntricas com uma partícula central, ou seja (1,6,12), para outra semelhante, da forma (1,7,11), como pode ser visto na Figura 19(e). Por fim, no caso $Z = 6$ não ocorre transições estruturais, mas apenas orientacionais. Todas as estruturas neste caso correspondem a dois hexágonos concêntricos com uma partícula central, como pode ser visto nas Figuras 19(f), (g) e (h). Na região I, a estrutura hexagonal alinha-se com o campo magnético, e em seguida os dipolos orientam-se parcialmente. A segunda região apresenta total alinhamento dos dipolos magnéticos com o campo aplicado (Figura [19(h)]).

Propriedades Vibracionais

Por fim, as propriedades vibracionais do sistema serão agora apresentados. A Figura 20 apresenta os modos normais de vibração translacional ((a)-(d), para o caso de $Z = 3$, e (e)-(h) para o caso $Z = 4$), os modos de rotação ((i)-(m), para o caso de $Z = 3$, e (n)-(q) para o caso $Z = 4$), além da menor frequência não nula na Figura 20(r), para o caso do $Z = 3$, e Figura 20(s), para o caso $Z = 4$. Assim como no caso dependente da carga Z , cada configuração dos modos de rotação (de todos os casos: $Z = 3$, $Z = 4$, $Z = 5$ e $Z = 6$) tem um intervalo simétrico de ângulo ao qual as cores indicadoras do sentido de rotação estão associadas. As cores tendem ao vermelho, ou ao azul, a medida que as frequências de rotação das partículas tendem aos valores limites. Deste modo, o verde

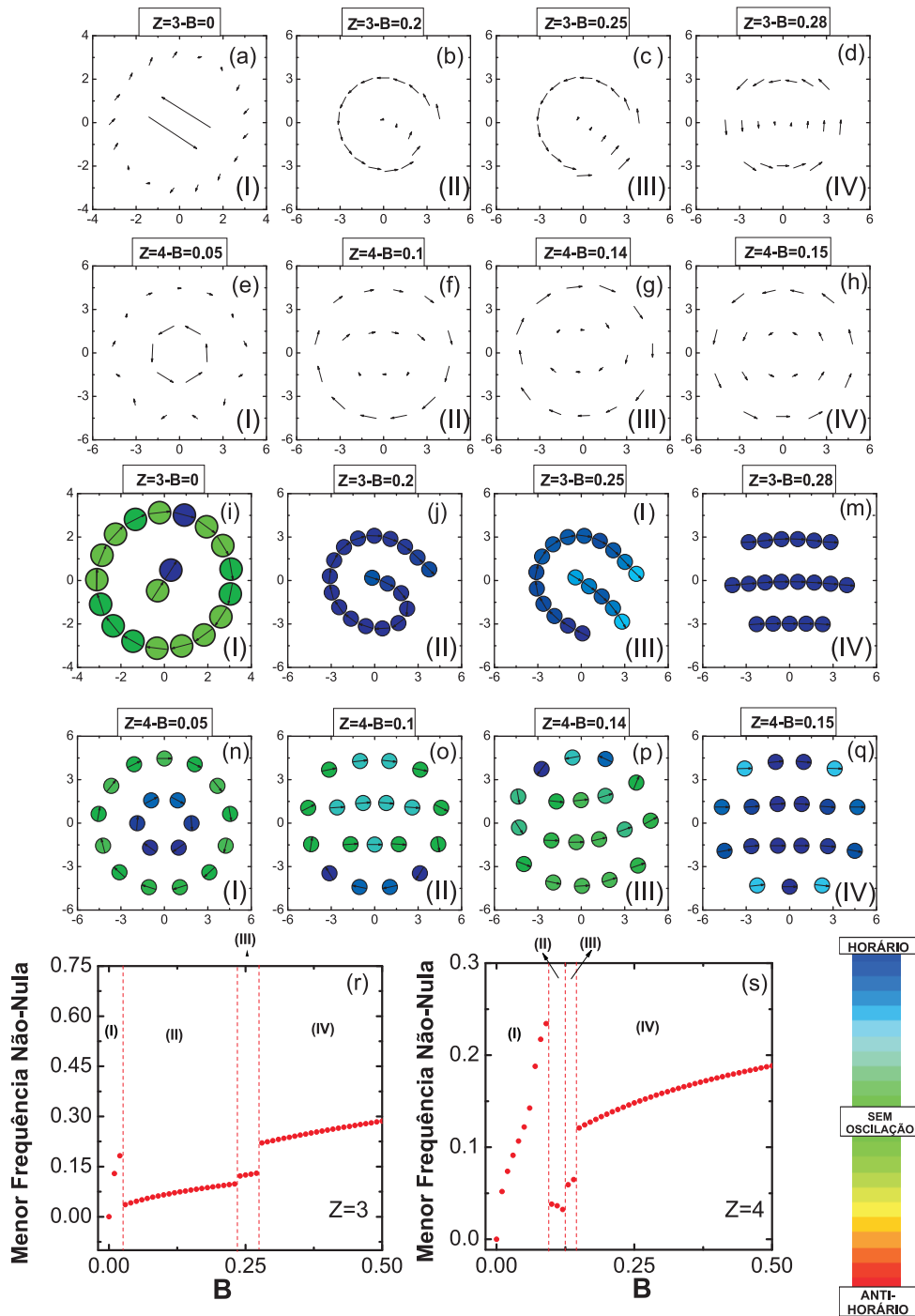


Figura 20: Nas figuras (a)-(h) apresentam-se os modos normais de vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos de carga $Z=3$ [(a)-(d)], e $Z=4$ [(e)-(h)]. As figuras (i)-(q) apresentam os modos de rotação do mesmo sistema para os casos de carga $Z=3$ [(i)-(m)], e $Z=4$ [(n)-(q)]. Em (r) e (s) é mostrada a menor frequência não-nula em função do campo magnético aplicado ao sistema.

representa valores de frequência de rotação próximas a zero. Com exceção dos casos das Figuras 20(a),(e), pode-se notar em todos os modos de translação que as maiores intensidades de vibração ocorrem nas partículas mais distantes do centro do potencial

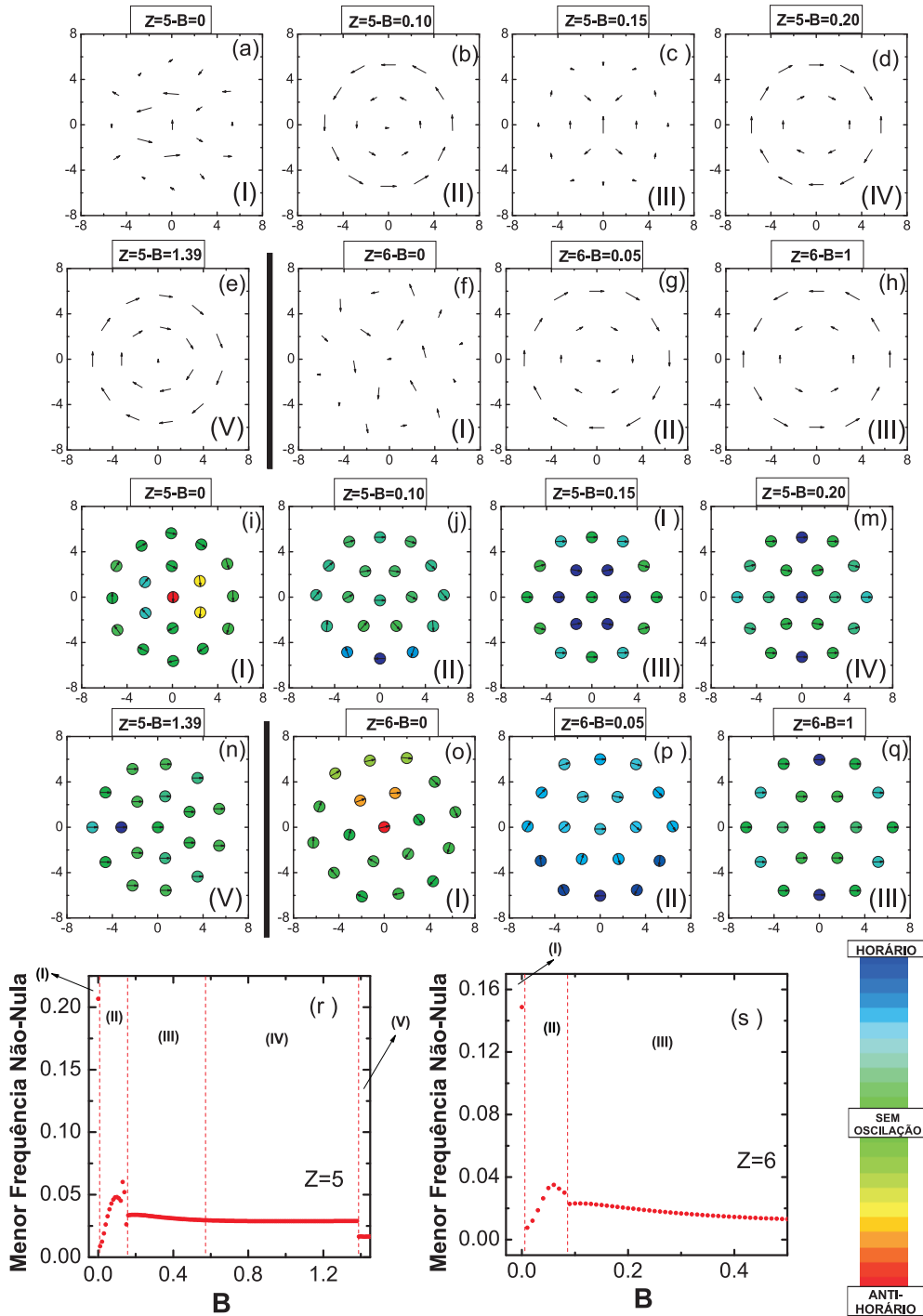


Figura 21: Nas figuras (a)-(h) apresentam-se os modos normais de vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos de carga $Z=5$ [(a)-(e)], e $Z=6$ [(f)-(h)]. As figuras de (i) a (q) apresentam os modos de rotação do mesmo sistema para os casos de carga $Z=5$ (i)-(n), e $Z=6$ (o)-(q). Em (r) e (s) é mostrada a mínima frequência não-nula em função do campo magnético aplicado ao sistema.

de confinamento. No caso dos modos de rotação, é interessante notar o efeito do campo magnético, tanto no caso de $Z = 3$, quanto no caso $Z = 4$, observando que a medida que a intensidade do campo aumenta, as rotações tendem a ocorrer todas no mesmo sentido, ou

seja, em fase. A partir da última transição, quando não há mais alteração configuracional das estruturas, o aumento da intensidade do campo provoca um aumento também na frequência associada, como pode ser observado tanto na Figura 20(r), quanto na Figura 20(s). As propriedades vibracionais dos casos $Z = 5$ e $Z = 6$ são mostradas na Figura 21, que apresenta os modos de translação [(a)-(e), para o caso de $Z = 5$, e (f)-(h) para o caso $Z = 6$], os modos de rotação ((i)-(n), para o caso de $Z = 5$, e (o)-(q) para o caso $Z = 6$), menor frequência não-nula em (r), para o caso do $Z = 5$, e (s), para o caso $Z = 6$. Diferentemente do que ocorre para os dois valores de carga menores, a frequência associada aos modos de vibração após a última transição cai, tanto para $Z = 5$ quanto $Z = 6$, como pode ser observado na Figura 21(r),(s). As amplitudes destas vibrações são apresentadas nas Figuras 22, para os casos $Z = 3$ e $Z = 4$, e 23, para os casos $Z = 5$ e $Z = 6$.

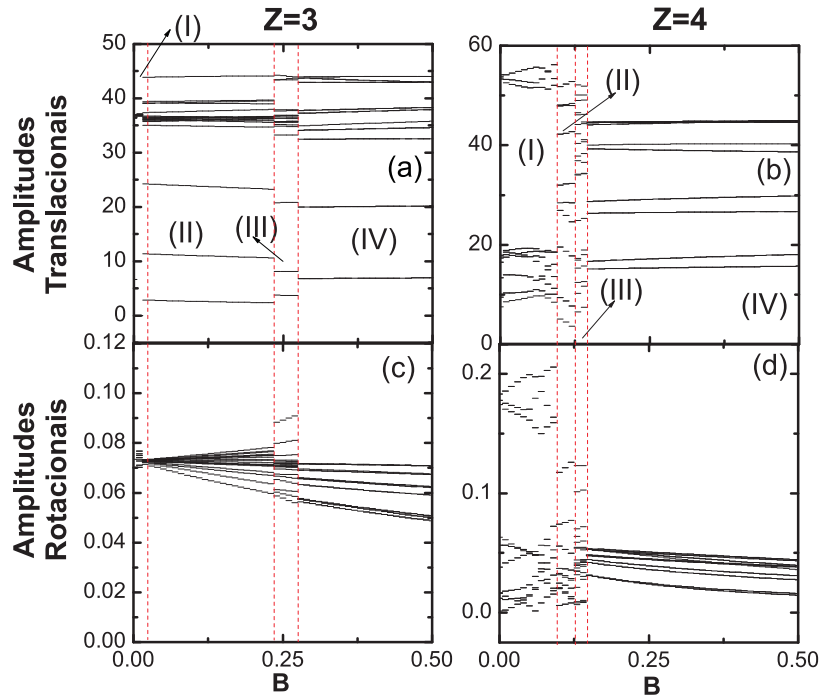


Figura 22: Nas figuras(a)-(d) apresentam-se as amplitudes de translação [(a),(b)] e rotação [(c),(d)] associadas à vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos $Z=3$ [(a),(c)], e $Z=4$ [(b),(d)], analisando-se agora a dependência do sistema com o campo magnético B .

Na Figura 24 apresenta-se as configurações do estado fundamental para um sistema de $N=50$ partículas, em função do campo magnético externo, além da magnetização do sistema. É interessante notar que tanto para sistemas com $N=19$ quanto para o sistema de $N=50$, o intervalo de valores de campo magnético que apresenta um grande número de configurações é pequeno (neste caso, esta região é $0 \leq B \leq 0.5$). Outra característica

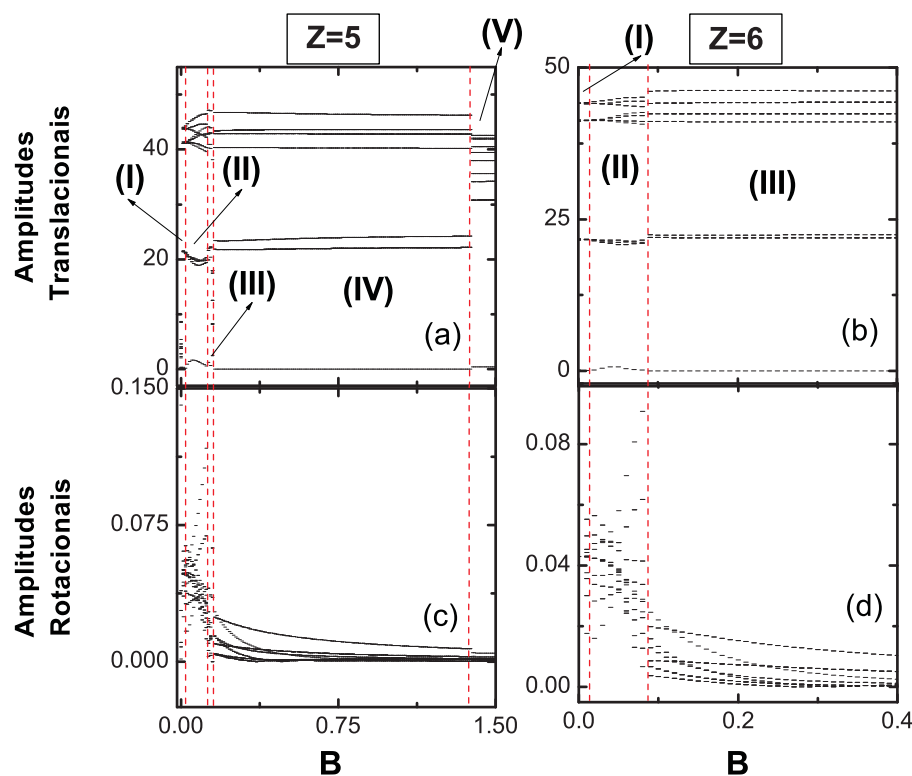


Figura 23: Nas figuras (a)-(d) as amplitudes de translação [(a),(b)] e rotação [(c),(d)] associadas à vibração de um sistema de $N=19$ partículas para os casos $Z=5$ [(a),(c)], e $Z=6$ [(b),(d)], analisando-se agora a dependência do sistema com o campo magnético B .

importante é o alinhamento dos dipolos magnéticos das partículas com o campo magnético externo. Pode-se também notar que na Figura 24 (g), a magnetização do sistema sofre variações abruptas elevadas, como pode ser visto na transição da região I para a região II, onde a magnetização do sistema torna-se quase três vezes maior, e da região II para a região III, onde há um aumento do valor da magnetização em aproximadamente quarenta por cento.

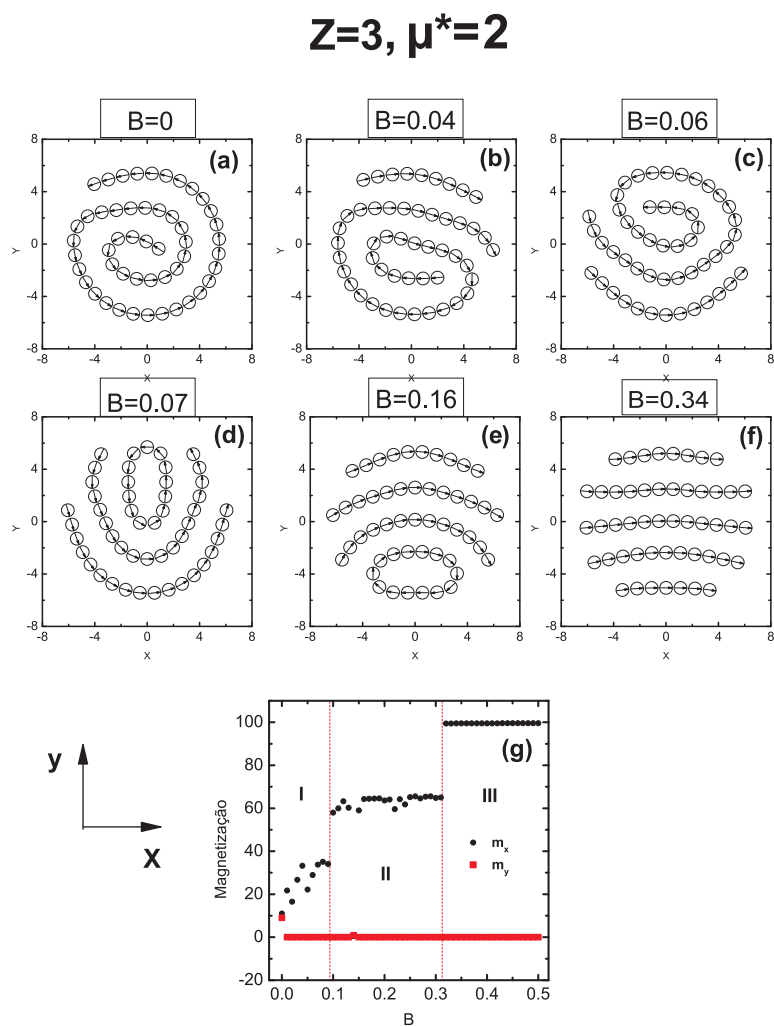


Figura 24: Nas figuras (a)-(f) apresentam-se as configurações do estado fundamental de um sistema de $N=50$ partículas em função do campo magnético externo aplicado, para carga $Z=3$. Em (g) apresentam-se as componentes da magnetização do sistema nas coordenadas x e y .

5 *Conclusões e perspectivas*

Neste trabalho abordou-se um sistema de partículas com momento de dipolo magnético intrínseco, confinadas por um potencial parabólico. Considerou-se os dipolos paralelos ao plano de confinamento, e a superfície de cada partícula carregada com carga de mesmo módulo e sinal. O número de partículas do aglomerado considerado foi escolhido como $N=19$. A análise dimensional do sistema e a referência a trabalhos experimentais apresentados no capítulo 3 são informações importantes sobre a viabilidade física do problema abordado. Sobre esta viabilidade, entende-se como a adequação dos valores obtidos em um estudo teórico às limitações laboratoriais, como equipamentos de observação, métodos de produção do material e condições físicas externas ao sistema. No problema em questão, visto que o material cobalto(Co) é encontrado na literatura em trabalhos sobre nanopartículas magnéticas [37], e a eletrização de partículas é possível [38], necessitou-se o conhecimento das unidades do campo magnético a ser aplicado ao sistema e da carga superficial de cada partícula. Os valores encontrados são aceitáveis, visto que a carga é da ordem da carga elementar do elétron, e que os campos magnéticos da ordem de 1 Tesla são laboratorialmente viáveis e mais ainda, como foi observado nos resultados do caso dependente do campo magnético, os valores de campo para os quais o sistema apresenta alterações são da ordem de 10^{-1} Tesla. Tais valores mostram que a reprodução experimental deste trabalho é possível, visto que não se baseia em parâmetros fisicamente impossíveis.

As configurações do estado fundamental, os modos normais, as amplitudes e as frequências de vibração estão diretamente ligados ao aumento do valor da carga superficial das partículas no caso da dependência da carga, e fortemente ligados à magnetização do sistema, no caso da dependência do campo magnético. No primeiro caso, as partículas quase sempre organizam-se em estruturas circulares, com partículas internas a esta estrutura, devido ao potencial confinante e à interação dipolo-dipolo. Entretanto, o aumento da carga torna a presença das partículas internas instável, alterando o tipo de estrutura do estado fundamental, embora deva-se notar que estas alterações não ocorrem de forma

brusca. A aplicação do campo magnético provoca a quebra da simetria circular do sistema, mas também apresenta transições estruturais sem grandes alterações até valores de carga $Z = 4$. Para cargas maiores do que este valor, a interação coulombiana é dominante, observando-se que, tanto na ausência como na presença do campo magnético, o sistema arranja-se como dois hexágonos concêntricos. Outro resultado que deve ser destacado é o estrangulamento das frequências que ocorre a partir de valores de carga próximos a $Z = 4$. As amplitudes de vibração apresentam um comportamento bastante interessante e que merece destaque. Há uma inversão no comportamento das amplitudes de rotação e translação entre os casos de $B = 0$ e $B = 5$, para valores de carga $Z \geq 5$. Isto ocorre devido à restrição de vibração rotacional, imposta pelo campo magnético, ocasionando oscilações translacionais entre cadeias de partículas, no caso do campo magnético aplicado.

No segundo caso, há uma forte dependência do sistema em relação ao campo magnético, mostrado no gráfico de magnetização. Embora esta forte dependência seja bastante visível também nas estruturas apenas para o caso $Z = 3$, nos demais casos pode-se observar esta dependência na menor frequência não nula do sistema. Outro dado que deve ser destacado é que a dependência do campo ocorre para intervalos muito pequenos deste parâmetro. Nestes pequenos intervalos pode-se notar que as amplitudes de translação e rotação apresentam comportamentos interessantes, principalmente as rotacionais, visto que há uma queda bastante acentuada dos valores máximos de amplitude a partir de certos valores de campo magnético.

Além de apresentar informações sobre o estudo de aglomerações de partículas magnéticas carregadas em um potencial parabólico, o presente trabalho permite o aprofundamento dos estudos sobre sistemas auto-organizáveis finitos e sua dependência do número de partículas dos aglomerados considerados, assim como serve de fundamento para o estudo de outros sistemas auto-organizáveis.

Referências Bibliográficas

- [1] NOBELPRIZE.ORG *http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1956/*
- [2] NOBELPRIZE.ORG *http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2000/illpres/kilby.ht*
- [3] NOBELPRIZE.ORG *http://nobelprize.org/educational_games/physics/transistor/history/*
- [4] INTEL CORPORATION *http://www.intel.com/technology/mooreslaw/index.htm*
- [5] MANDALL, D.; BOLANDER, M. E.; MUKHOPADHYAY, D.; SARKAR, G.; MUKHERJEE, P. *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 69, 485-492, 2006
- [6] WIGNER, E. *Physical Review* 46, 1001-1011, 1934
- [7] GRIMES, C. C.; ADAMS, C. *Phys. Rev. Lett.* 42, 795-798, 1979
- [8] CHUN, J. H.; I, L. *Phys. Rev. Lett.* 72, p. 4009, 1994
- [9] COUPIER, G.; GUTHMANN, C.; NOAT, Y.; MICHEL, S. J. *Phys. Rev. E* 71, 46105-1-46105-12, 2005
- [10] T. PRADEEP *NANO: The Essentials. Understanding Nanoscience and Nanotechnology*, Tata Mcgraw-Hill Publishing Company Limited, New Delhi (2007).
- [11] ROSS, C. A. ; SMITH, H. I. ; SAVAS, T. ; FARTHOUD, HWANG, M. ; WALSH, M. ; ABRAHAM, M. C. ; RAM, R. J. *J. Vac. Sci. Technol. B* 17(6) 1999
- [12] WHITESIDES, G. M. *Science* 295, 2418, 2002
- [13] PUNTES, V. F. *Science* 291, 2115 (2001)
- [14] KLOKKENBURG, M.;VONK, C.; CLAESSON, E. M.;MEELDIJK, J. D.; ERNE, B. H.; AND PHILIPSE, A. P. *J. Am. Chem. Soc.* 126, 16706-16707, 2004
- [15] GERMAIN, V.; RICHARDI, J.; INGERT, D.; PILENI, M. P. *J. Phys. Chem. B*, 109, 5541-5547, 2005
- [16] LISIECKI, I.; TURNER, S.; BALS, S.; PILENI, M.P.; VAN TENDELOO, G. *Chem. Mater.*, Vol. 21, No. 12, 2009
- [17] PILENI, M.P. *Nanocrystals Forming Mesoscopic Structures* (Edited by Pileni, M.P.), WILEY-VCH-Verlag, Weinheim, Germany (2005).
- [18] SCHERER, C.; NETO, A. M. F. *Braz. J. Phys.* vol.35 no.3a São Paulo Sept. 2005
- [19] BARABAN, L. ; MAKAROV, D. ; ALBRECHT, M. ; RIVIER, N. ; LEIDERER, P. ; ERBEI, A. *Phys. Rev. E* 77, 031407,

- [20] CHEN, W. ; TAN, S. ; HUANG, Z. ; NG, T. ; FORD, W. T. ; TONG, P. *Phys. Rev. E* 74, 021406, 2006
- [21] FERREIRA, W. P. ; MUNARIN, F. F. ; NELISSEN, K. ; FILHO, R. N. C. ; PEETERS, F. M. ; FARIAS, G. A. *Phys. Rev. E* 72, 021406, 2005
- [22] FERREIRA, W. P. ; MUNARIN, F. F. ; FARIAS, G. A. ; PEETERS, F. M. *J. Phys. condens. Matter* 18, 9385-9401
- [23] MORFILL, G. E.; ANNARATONE, B. M.; BRYANT, P.; IVLEV, A. V.; THOMAS, H. M.; ZUZIC, M.; FORTOV, V. E. *Plasma Phys. Control. Fusion* 44, B263-B277, 2002
- [24] DINEGA, D. P. *PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, (2001)*
- [25] RUSSIER, V. ; PETIT, C. ; LEGRAND, J. ; PILENI, M. P. *Appl. surf. science* 164, 293, 2000
- [26] ROSENSWEIG, R. E. *Ferrohydrodynamics*, Dover Publications, New York, USA, 1985.
- [27] BAO, Y.; BEERMAN, M.; KRISHNAN, K. M. *J. Magn. Magn. Mater.*, 272-276, 2004
- [28] ALLEN, M.P.; TILDESLEY, D. J. *Computer simulation of liquids*. Clarendon Press, Oxford (1992).
- [29] RAPAPORT, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. [2nd Edition]: Cambridge University Press, 2004.
- [30] GREINER, W.; NEISE, L. ; STÖCKER, H. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag Nova York, EUA, 1995.
- [31] HUANG, K. *Statistical Mechanics*. John Wiley Sons: Nova Iorque, EUA, 1987.
- [32] HEERMANN, D. *Computer Simulation Methods* (2nd Edition); Springer-Verlag: Berlin, (1990).
- [33] METROPOLIS, N.; ULAM, S.; *J. Amer. Stat. Ass.*, v. 44, p. 339, (1949).
- [34] METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; TELLER, A. H.; TELLER, E. *J. Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087, 1953.
- [35] SCHWEIGERT, V. A.; PEETERS, F. M. *Phy. Rev. B*, v. 51, p. 7700, 1995.
- [36] <http://mathworld.wolfram.com/BuffonsNeedleProblem.html>
- [37] PILENI, J.; PILENI, M. P. *Phy. Rev. E*, v. 77, p. 061510, 2008.
- [38] MORFILL, G. E.; ANNARATONE, B. M.; BRYANT, P.; IVLEV, A. V.; THOMAS, H. M.; ZUZIC, M.; FORTOV, V. E. *Plasma Phys. Control. Fusion* 44, B263-B277, 2002.
- [39] MUNARIN, F. F.; FERREIRA, W. P.; PEETERS, F. M. *Phy. Rev. E*, v. 78, p. 031405, 2008.

- [40] BEDANOV, V.M.; PEETERS, F.M. *Phys. Rev. B*, v. 49, p. 2667, 1994
- [41] MELZER, A. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 016411, 2003