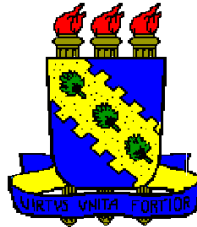


UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos

Petrucio Barrozo da Silva

Orientador: José Soares de Andrade Júnior

Co-orientador: André Auto Moreira

25 de março de 2009

Petrucio Barrozo da Silva

Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos

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

Orientador:

José Soares Andrade Júnior

Co-orientador:

André Auto Moreira

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARA - DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Fortaleza

25 de março de 2009

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

- S582t Silva, Petrucio Barrozo da.
Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos / Petrucio Barrozo da Silva. – 2009.
140 f. : il. color.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2009.
Orientação: Prof. Dr. José Soares Andrade Júnior.
Coorientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.
1. Sistemas dinâmicos. 2. Vórtices. 3. Colóides. 4. Pedestres. 5. Dinâmica molecular. I. Título.
CDD 530
-

Petrucio Barrozo da Silva

Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos

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

Aprovada em 25 de março de 2009

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. André Auto Moreira
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. José Albino Oliveira de Aguiar
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade
Universidade Federal da Bahia

*Aos Meus Pais e à
Minha Esposa*

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. José Soares, pela orientação e dedicação fundamentais para a realização deste trabalho.

Ao Prof. André Moreira pela co-orientação.

Ao Prof. Hans Herrmann pelo suporte durante a minha estadia no ETH Zürich.

Ao Prof. J. Albino Aguiar pela amizade, compreensão e ensinamentos.

Aos amigos e professores Clecio Clemente, Erivaldo Montarroyos e Leonardo Cabral.

Ao Prof. Ascânio e todos os Prof. do Departamento de Física da UFC que colaboraram direta ou indiretamente para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos do grupo de fluido dinâmica da UFC.

Aos amigos do ETH Zürich, pelo apoio e suporte dado durante minha estadia na Suíça.

Ao Prof. Jasom Gallas, Prof. Eudenilson e ao Prof. Roberto Andrade pela companhia durante as refeições no ETH Zürich.

A todos os integrantes do Departamento de Física da UFC.

À minha esposa, Adna, pela companhia e compreensão fundamental para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus pais Elzanira e Valter.

Às agências de fomento CNPq e CAPES.

Resumo

Neste trabalho, estudamos as propriedades do transporte de partículas em sistemas mesoscópicos. Na primeira parte, usamos o modelo proposto anteriormente por Zapperi *et al.* (Phys. Rev. Lett. **86**, 3622 (2001)) para descrever o transporte de partículas superamortecidas e interagentes no estado estacionário, na presença de um obstáculo para o fluxo, e confinadas em um canal com largura da ordem do comprimento característico do sistema. Com este modelo, obtivemos uma equação diferencial de primeira ordem não-linear, cuja solução em 1D é capaz de descrever a densidade ao longo de um canal 2D para diferentes sistemas de partículas (e.g., vórtices em supercondutores, colóides e pedestres, todos simulados por dinâmica molecular) e diferentes tipos de obstáculos (e.g., uma barreira de energia, um canal com uma constricção e uma rede de pinos no centro do canal). Observamos que este modelo pode ser usado para descrever o escoamento de qualquer sistema de partículas superamortecido, desde que as interações entre elas possam alcançar distâncias maiores que os primeiros vizinhos.

Na segunda parte deste trabalho, estudamos o escoamento de partículas interagentes (não necessariamente superamortecidas) confinadas por paredes assimétricas. Aqui o objetivo é descrever a dinâmica de pedestres e a dinâmica de vórtices em supercondutores. Em ambos os sistemas, as paredes assimétricas são responsáveis pela introdução de um sentido preferencial para o fluxo. No caso da dinâmica de pedestres, estudamos as propriedades do sistema quando os pedestres andam em sentidos opostos. Verificamos que este confinamento induz uma ordem responsável pela maximização do escoamento. Esta ordem pode ser destruída quando variamos a densidade, a velocidade, a razão entre a largura do canal e a sua rugosidade, o ruído externo e a assimetria do canal. Verificamos também que as transições de ordem-desordem neste sistema são acompanhadas de metaestabilidades e ciclos de histerese. No caso de vórtices em supercondutores, verificamos que, para pequenos campos de comensurabilidade entre o número de “catracas” e o número de vórtices, o sistema apresenta múltiplas transições de depinamento.

Abstract

In this work we investigate the transport properties of particles in mesoscopic systems. In the first part, we use the model originally proposed by Zapperi *et al.* (Phys. Rev. Lett. **86**, 3622 (2001)) to describe the steady-state transport of overdamped particles in the presence of an obstacle and confined to a channel with width of the order of the characteristic size of the system. With this model, we obtain a non-linear first-order differential equation, whose solution in 1D is capable to describe the behavior of the particle density along a 2D channel for different particle systems (e.g., superconducting vortices, colloids and pedestrians, all simulated with molecular dynamics) and obstacle types (e.g, one energy barrier, a channel constriction and a network of pinning centers). We observe that such a model can be used to represent the flow of any system of overdamped particles, as long as the interactions between them can reach a distance greater than only the first neighbors.

In the second part of this work, we investigate the flow of interacting particles (not necessarily overdamped) confined to a channel of asymmetrical walls. Here the main objective is to describe through molecular dynamics techniques both the flow of pedestrians as well as the transport of superconducting vortices through irregular channels. In both cases, we observe that the asymmetry of the confining walls can induce a preferential direction to the flow. In the case of pedestrians, our results indicate that, when two groups of people move in opposite directions in a ratcheted type of corridor, this induced order is also responsible for flow maximization. This order can be destroyed, however, when we change the total number of particles in the system, their target speed, the amplitude of the external added noise or the degree of the asymmetry of the channel. We also observe that the order-disorder transitions in this system are usually followed by metastability and hysteresis cycles. In the case of superconducting vortices, multiple depinning transitions are observed when there is a small comensurability field between the number of ratchets in the channel and the number of particles (vortices) in the system.

Sumário

Lista de Figuras

INTRODUÇÃO	p. 24
1 CONCEITOS GERAIS	p. 27
1.1 Sistemas mesoscópicos	p. 27
1.2 Vórtices em supercondutores	p. 29
1.2.1 Propriedades da rede de vórtices	p. 30
1.3 Colóides	p. 34
1.4 Pedestres	p. 40
1.5 Efeito catraca “Ratchet effect”	p. 48
2 TRANSPORTE DE PARTÍCULAS EM MEIOS SUPERAMORTE- CIDOS	p. 55
2.1 Transporte de vórtices em supercondutores	p. 56
2.1.1 Modelo	p. 56
2.1.2 Propriedades macroscópicas do sistema	p. 57
2.1.3 Equação macroscópica para o transporte	p. 58
2.1.4 Propriedades estáticas (sistema fechado)	p. 62
2.1.5 Propriedades dinâmicas	p. 66
2.1.5.1 Barreira de energia	p. 66
2.1.5.2 Transporte de vórtices através de um canal com uma construção	p. 69

2.1.5.3	Rede de pinos	p. 71
2.1.5.4	Rede de pinos com potencial infinito	p. 72
2.1.5.5	Rede de pinos com potencial finito	p. 75
2.2	Colóides	p. 78
2.2.1	Modelo	p. 78
2.2.2	Sistema fechado	p. 79
2.2.3	Barreira de energia	p. 82
2.2.4	Constricção	p. 83
2.3	Movimento de pedestres na presença de obstáculos	p. 86
2.3.1	Modelo	p. 86
2.3.2	Sistema fechado	p. 87
2.3.3	Constricção	p. 89
3	TRANSPORTE DE PARTÍCULAS CONFINADAS POR PAREDES ASSIMÉTRICAS	p. 91
3.1	Movimento de pedestres	p. 91
3.2	Transporte de vórtices	p. 98
3.2.1	Modelo	p. 98
3.2.2	Paredes assimétricas	p. 100
3.2.3	Substrato assimétrico	p. 103
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	p. 104
	Apêndice A – Um Breve Histórico da supercondutividade	p. 106
	Apêndice B – Teorias para o estado supercondutor	p. 112
B.1	Teorias fenomenológicas	p. 112
B.1.1	Teoria de London	p. 112
B.1.2	Teoria de Ginzburg-Landau	p. 114

B.1.3	Comprimentos característicos	p. 117
B.2	Teoria de vórtices em supercondutores	p. 120
B.2.1	Supercondutores do tipo II	p. 120
B.2.2	Energia numa interface normal-supercondutor	p. 120
B.2.3	A quantização do fluxo magnético	p. 121
B.2.4	Campos críticos H_{c1} e H_{c2}	p. 123
B.2.5	Campo magnético de um vórtice isolado	p. 124
B.2.6	Energia de um vórtice isolado	p. 126
B.2.7	Energia de interação vórtice-vórtice	p. 127
B.2.8	Equação de movimento dos vórtices	p. 127
 Apêndice C – Principais propriedades mesoscópicas no transporte de elétrons		p. 129
C.0.8.1	Localização fraca	p. 129
C.0.8.2	Efeito Ahanorov-Bohm	p. 131
C.0.8.3	Flutuações universais da condutância	p. 132
C.0.8.4	Quantização da condutância	p. 132
 Referências		p. 135

Lista de Figuras

- 1 Diferentes regimes para o transporte de elétrons em estruturas mesoscópicas. Estes regimes de transporte são descritos pelos comprimentos característicos do sistema. Os efeitos mesoscópicos podem ser verificados quando um dos comprimentos do sistema (L) é menor que o comprimento de coerência de fase eletrônico L_{Φ} p. 28
- 2 Visualização da rede de vórtices obtida por U. Essmann e H. Trauble publicado na *Physics Letters*, **24A** 526 (1967). Esta visualização foi obtida pela técnica de decoração magnética, comprovando que os vórtices formam uma rede triangular na ausência de forças externas e de defeitos no material. p. 30
- 3 Diagrama de fase obtido numericamente por A. E. Koshelev and V. M. Vinokur publicado em *PRL*, **73** 3580 (1994). Neste trabalho foi prevista uma transição de fase dinâmica, onde uma “cristalização” pode ser obtida para valores da corrente externa maior que zero. p. 31
- 4 (a) Diagrama de fase experimental obtido por S. Bhattacharya e M. J. Higgins publicado em *PRL*, **70** 2617 (1993), mostrando as fases da rede de vórtices. Como podemos ver há três fases distintas para a rede de vórtice: vórtices pinados (fase estática), escoamento plástico e escoamento elástico. (b) Diagrama de fase experimental obtido por M. C. Hellerqvist *et al.*, publicado em *PRL*, **76** 4022 (1996). Este diagrama de fase possibilitou uma comparação direta com os resultados numéricos obtidos por A. E. Koshelev and V. M. Vinokur. p. 32

- 5 Gráficos obtidos por Zapperi *et al.* publicados em PRL **86**, 3622 (2001). (a) Posição média da frente de penetração em função do tempo. O *inset* deste gráfico mostra o colapso das curvas obtidas para diferentes valores da força externa. (b) Perfil de densidade em função da posição para diferentes forças externas. No *inset* é mostrado o colapso destas curvas. Os gráficos mostrados em (a) e (b) foram obtidos por simulações de dinâmica molecular p. 33
- 6 Gráficos obtidos por Zapperi *et al.* publicados em PRL **86**, 3622 (2001). O *inset* desta figura mostra a densidade obtida por integração numérica da equação contínua. O gráfico principal mostra a contagem do número de caixas ocupadas em função do tamanho da caixa. A dimensão fractal medida para este sistema foi $D_f = 4/3$ (linha sólida). A mudança de comportamento para dimensão fractal $D_f = 1$ é obtida para grandes escalas de comprimento. p. 34
- 7 Configuração final para uma mistura binária de partículas suspensas em um sistema bi-dimensional movimentando em sentidos opostos, figura obtida por J. Dzubiella *et al.* (15). (a) Sistema no estado desordenado, configuração obtida para um campo externo nulo. (b) Sistema ainda no estado desordenado, mas agora com um campo externo aplicado próximo do campo crítico $f_1 \simeq f_c$. (c) O sistema no estado ordenado, formando fileiras. Esta configuração foi obtida para um campo externo $f_2 > f_1$. Nesta situação, o parâmetro de ordem obtido é ($\phi \simeq 0.99$). Como podemos ver o sistema apresenta uma transição de ordem-desordem dependendo do campo “força” externa. Esta transição de fase é conhecida como transição de ordenamento dinâmico. Maiores detalhes sobre esses resultados podem ser encontrados em (15). p. 35

- 8 Parâmetro de ordem em função do campo externo, para diferentes valores do diâmetro das partículas σ e do inverso do alcance do potencial κ . Estes resultados foram obtidos através de simulações de dinâmica Browniana por J. Dzubiella *et al.* (15). O parâmetro de ordem mede o grau de organização do sistema. a) Parâmetro de ordem obtido para as partículas inicialmente distribuídas aleatoriamente e com a força externa sendo aumentada. (b) Parâmetro de ordem para as partículas inicialmente organizadas em duas fileiras e com a força externa sendo diminuída gradualmente. Estes resultados mostram a existência de uma metaestabilidade, verificada através de ciclos de histerese, indicando que esta transição é uma transição de fase de primeira ordem. Maiores detalhes sobre estes resultados podem ser encontrados em (15). p. 36
- 9 Diagrama de fase de não-equilíbrio obtido por M. Rex *et al.* (67) para uma mistura binária de colóides carregados, movimentando-se em sentido contrário devido à ação de um campo elétrico externo. Os resultados foram obtidos por simulações de dinâmica Browniana. κ é o alcance do potencial e ϕ é a fração volumétrica das partículas. Maiores detalhes deste gráfico podem ser obtidos em (67). p. 37
- 10 Gráfico obtido por M. Köppl *et al.* (45) mostrando o perfil de densidade ao longo de um canal estreito quando as partículas estão escoando devido a um gradiente de concentração. p. 38
- 11 Perfil de densidade obtido por G. Piacent *et al.* (61) para um sistema de partículas interagindo com o potencial de Yukawa para diferentes valores da força externa. p. 38
- 12 Gráficos obtidos por C. Marquet *et al.* (53) mostrando a retificação de partículas micrométricas escoando através de um canal assimétrico como mostrado em (a), as partículas são submetidas a um campo elétrico ac de baixa frequência e com média zero. (a) Design do canal assimétrico usado para retificar o movimento de partículas confinadas em um canal usado por C. Marquet *et al.* (53). (b) Resultados encontrados por C. Marquet *et al.* (53), mostrando a dependência da velocidade de transporte com frequência da força alternada ac aplicada e com a intensidade do campo elétrico externo. p. 39

- 13 Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* publicado na PRL **84**, 1240 (2000). As simulações foram feitas para um sistema com 20 partículas movendo-se da esquerda para direita (bolas pretas) interagindo com 20 partículas movendo-se da direita para esquerda (bolas brancas) com condições de contorno periódicas na direção x e confinadas na direção y para diferentes valores do ruído externo. (a) Para pequenos ruídos $\theta = 1$ formação de fileiras com movimento uniforme pode ser obtido. (b) Estado intermediário entre a cristalização “*obstrução*” do canal e a formação de fileiras com transporte uniforme. (c) Estado cristalizado obtido para grandes intensidades do ruído ($\theta = 1000$). p. 42
- 14 Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* publicado na PRL **84**, 1240 (2000), mostrando a transição de ordenamento dinâmico, chamada “*freezing by heating*”, para diferentes valores do tamanho do sistema mantendo a razão $L_x/L_y = 4 : 1$ constante. No *inset* é mostrada a média da energia potencial, cinética e total. p. 43
- 15 Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* publicado na Nature **407**, 487 (2000). Este resultado mostra o tempo que 200 pedestres gastam para sair de uma sala sob condições normais (sem pânico). O tempo que os pedestres levam para sair da sala, diminui com o aumento da velocidade desejada v_0 . No entanto, quando a velocidade cresce acima de um valor crítico $v_0 \geq 1.5ms^{-1}$ o tempo de saída volta a crescer novamente até que, em velocidades mais elevadas acima de $5.0ms^{-1}$, o número de pessoas feridas começa a crescer de forma aproximadamente linear. p. 44
- 16 Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* (Nature **407**, 487 (2000)). Simulação para pedestres movimentando-se em uma rota de fuga com uma cavidade. (a) Posição dos pedestres obtida num corredor de $3m$ de largura e $15m$ de comprimento como rota de fuga, com os pedestres saindo com uma velocidade alvo de $v^0 = 2ms^{-1}$. A cavidade tem a forma de um triângulo isósceles com base de $6m$. (b) Eficiência para a saída como função do ângulo ϕ para a estrutura mostrada em (a), a linha tracejada representa a eficiência para uma cavidade irregular. A eficiência cai nos dois casos, sendo um pouco mais pronunciada quando o corredor possui uma cavidade irregular. p. 45

- 17 Gráfico obtido por O. Biham *et al.* (9), mostrando a transição de ordem-desordem em função da concentração para sistemas de diferentes tamanhos. p. 46
- 18 Gráfico obtido por W. G. Weng (82), (a) Velocidade média em função do tempo para diferentes densidades no sistema com condições de contorno abertas. (b) Configuração final para o sistema com $P_0 = 0.2$ e um *time step* de 800 para um sistema com condição de contorno aberta. p. 47
- 19 Diagrama de fase obtido por T. Nagatani (Physica A **300**, 558 (2001)), mostrando os diferentes regimes de escoamento dos pedestres em um corredor com uma constrição. p. 48
- 20 Dispositivo tipo catraca idealizado por Feymann na tentativa de violar a segunda lei da termodinâmica. Este dispositivo consiste de duas caixas de gás mantidas à temperatura $T_1 = T_2 = T$. Numa caixa temos uma roda com paletas e na outra temos um dispositivo tipo catraca, ligados por um eixo que possui uma polia ligada a um peso. A questão proposta por Feymann era se este dispositivo poderia realizar um trabalho mecânico capaz de levantar o peso preso à polia. Segundo a hipótese de Carnot isto seria impossível. No entanto, à primeira vista vemos que isto é possível, mas se olharmos mais de perto podemos ver uma série de complicações, (para maiores detalhes consultar Lecture of Feymann Vol 1, capítulo 46.) p. 49
- 21 Diagrama ilustrando o mecanismo do efeito catraca reverso tirado de C. C. S. Silva *et al.* (Nature **440**, 651 (2006)). (a) Diagrama da configuração de equilíbrio para $n = 1 - 4$ (n é o número de vórtice por potencial tipo catraca). Podemos ver a alternância entre os mínimos de energia quando n é par ou ímpar. (b) Esquema demonstrando o mecanismo catraca quando a rede de vórtices é submetida a uma força *ac*. As setas vermelhas indicam a direção da força, os quadros com cor de fundo indicam onde ocorre o movimento macroscópico das partículas “vórtices”. p. 50
- 22 Diagrama de fase experimental obtido por C. C. S. Silva *et al.* (Nature **440**, 651 (2006)) mostrando as fases dinâmicas da rede de vórtice, bem como as regiões onde o fluxo da rede de vórtices é direto (verde) ou reverso (vermelho). Podemos notar que o efeito catraca ocorre próximo da transição supercondutora, região onde há uma grande flutuação da energia, condição necessária para que possamos observar o efeito catraca. p. 51

- 23 Figura obtida de S. Matthias *et al.* (Nature 424, 54 (2003)) mostrando (a) membranas de silicone capazes de atuar como filtros para partículas massivas com diferentes tamanhos. O processo de transporte nesses sistema depende muito da razão entre o tamanho da abertura e o tamanho da partícula. Ajustando o tamanho da abertura, este sistema pode ser usado na separação de partículas de diferentes tamanhos. (b) Foto obtida por microscopia eletrônica de varredura dos poros assimétricos em uma amostra de silicone.(c) Microscopia eletrônica de varredura obtida em um poro da amostra em (b). p. 52
- 24 Figura obtida de S. Matthias *et al.* (Nature 424, 54 (2003)), mostrando a dependência da corrente *dc* obtida por aplicar uma pressão *ac* no sistema da Fig. 23. Este gráfico mostra uma clara reversão do efeito catraca nestes sistemas. p. 52
- 25 Figura obtida por I. Derényi (Appl. Phys. A **75**, 217 (2002)), mostrando (a) o potencial que um átomo sente ao difundir por uma superfície irregular como mostrado em (b). p. 53
- 26 Figura obtida originalmente por P. J. Pablo (Surf. Interface Anal. **30**, 278 (2000)) e adquirida de I. Denényi (Appl. Phys. A **75**,217 (2002)), mostrando a evolução da superfície de uma fita de ouro.(a) Uma estrutura claramente granular pode ser observada em grãos com tamanho de aproximadamente 25 *nm*, (b) superfície da fita de ouro após 40*h* submetida a uma densidade de corrente *dc* com $1.6 \times 10^{11} A m^{-2}$ com 25 *mA*, os grãos tiveram um crescimento de aproximadamente 100 *nm*, (c) a superfície da fita de ouro após 24 *h* de corrente *ac* sob os mesmo valores de (b), neste caso pode se observar o crescimento dos grãos, formando terraços como marcado por círculos brancos na amostra. p. 54

- 27 (a) Perfil de densidade para uma rede de vórtices em um canal fechado em todas as direções, submetida a uma força externa F contra a parede em $x = 0$. Este resultado foi obtido por simulações de dinâmica molecular após o sistema atingir o estado de equilíbrio mecânico. Os resultados mostrados nesta figura são para uma rede com $N = 576$ vórtices em um canal com largura $L = 4.0 \lambda$, submetidos a uma força externa $F = 1.0 f_0$ contra a parede em x_0 . (b) Perfil de densidade ao longo do canal para diferentes valores da força externa e diferentes número de vórtices. Podemos notar que os perfis de densidade colapsam em uma mesma curva, mostrando que o parâmetro a é invariante para um grande intervalo de valores da densidade e da força externa. p.63
- 28 Parâmetro a em função da largura do canal para diferentes valores da densidade e da força externa. A linha preta contínua descreve o ajuste das curvas obtidas através de simulações de dinâmica molecular por uma função contínua. Os parâmetros do ajuste são $A = 2.74$ $B = 0.19$. A linha preta tracejada representa o valor obtido por Zapperi *et al.* para um sistema aberto. p.64
- 29 Configuração final para uma rede com $N = 216$ de vórtices, confinados em todas as direções, em um canal de largura $L = 4\lambda$ sofrendo a ação de uma força externa $F = 1.0 f_0$. Podemos notar que existem dois diferentes comportamentos para a configuração dos vórtices neste sistema: um para o interior da amostra, onde o mecanismo de redução de camadas pode ser verificado, e outro para as borda do material, onde há um gradiente da concentração de vórtices na direção x p.65
- 30 (a) Modelo usado para estudar o comportamento dinâmico da rede de vórtices escoando por um canal com uma barreira de energia como obstáculo para o fluxo. A força devido ao obstáculo F^S só atua sobre os vórtices numa pequena faixa de comprimento localizada em x_1 e x_2 . (b) Densidade ao longo do canal é mostrada em código de cores. p.66
- 31 Comparação dos resultados obtidos por dinâmica molecular, para um canal com uma barreira de energia como obstáculo para o fluxo, com os resultados obtidos por integração numérica da Eq. (2.31). Para diferentes valores da energia da barreira ΔU e diferentes números de vórtices N p.67

32	Ajuste das curvas obtidas por dinâmica molecular (preta) com a solução analítica do nosso modelo dada pela Eq. (2.32) (vermelha).	p. 68
33	Modelo do canal com uma constrição, usada como obstáculo para o fluxo.	p. 69
34	(a) Ajuste das curvas obtidas por dinâmica molecular com a solução analítica de nosso modelo, em um canal com uma constrição para duas forças diferente. Os círculos representam os resultados obtidos por simulações de dinâmica molecular e as linhas tracejadas representam os ajustes analíticos feitos com a Eq. (2.32). Os resultados aqui mostrados são para um canal com $N = 1333$ e com seção transversal $y_1 = 8.0$ e $y_2 = 5.5$. (b) Curvas obtidas para a seção transversal efetiva do canal para duas forças diferentes e com o perfil de densidade mostrado na Fig. 34(a). A seção transversal efetiva encontrada foi $y_1 = 9.76$ e $y_2 = 7.41$ para $F = 1.0$ e $y_1 = 9.82$ e $y_2 = 7.40$ para $F = 0.10$. Os valores encontrados são maiores que a seção transversal do canal $y_1 = 8.0$ e $y_2 = 5.5$.	p. 70
35	Modelo de um canal com uma rede de pinos como obstáculo para o fluxo. Consideramos o potencial de interação entre os pinos e os vórtices como sendo: 1) um potencial de atração infinito, 2) um potencial de atração finito.	p. 72
36	Gráficos obtidos para uma rede de vórtices escoando através de um canal com uma rede de pinos com potencial de interação infinito. As curvas são obtidas para um canal com largura $L = 8.7\lambda$ com $N = 300$ vórtices em movimento e 210 vórtices pinados. (a) Perfil de densidade para uma rede de vórtices para diferentes valores da força externa. (b) Fluxo para uma rede de vórtices para diferentes valores da força externa. (c) Ajuste do perfil de densidade obtido para uma rede de vórtices. Os círculos pretos representam os valores obtidos por simulação de dinâmica molecular para um canal de largura $L = 8.7\lambda$ com uma força externa de $F = 1.0f_0$. A linha vermelha contínua é o perfil de densidade obtido pela solução analítica do nosso modelo. Os parâmetros usados no ajuste concordam até a segunda casa decimal com os valores obtidos por dinâmica molecular.	p. 73

- 37 Perfil de densidade em código de cores para a rede de vórtices escoando através de um canal com uma rede de pinos com potencial de interação infinito para diferentes valores da força externa, a) $F = 0.05f_0$, b) $F = 0.10f_0$, c) $F = 0.50f_0$, d) $F = 1.0f_0$, e) $F = 5.00f_0$ e f) $F = 10.00f_0$ p. 74
- 38 (a) Fluxo da rede de vórtices através de um canal com uma rede de pinos com potencial finito distribuídos periodicamente no centro do canal. Podemos ver que o fluxo é nulo quando a força externa é suficientemente pequena $F = 0.05f_0$. Os resultados mostrados são para um canal com $N = 510$ vórtices. O canal tem uma seção transversal de $y = 8.7\lambda$. (b) Perfil de densidade obtido para canal com uma rede de pinos com potencial finito distribuídos periodicamente no centro do canal. Os perfis de densidade aqui mostrados são equivalentes aos fluxos mostrados na Fig. 38(c). Podemos ver que o perfil de densidade é linear desde que $\Phi \rightarrow 0$. (c) Perfil de densidade para canal com uma rede de pinos, com potencial finito, distribuídos periodicamente no centro do canal. Podemos notar que para forças externas suficientemente grandes $F > 10f_0$ os obstáculos não podem produzir nenhum gradiente de concentração ao longo do canal, fazendo com que o perfil de densidade seja constante e dado pela razão J/F . (d) Comparação entre os resultados obtidos por dinâmica molecular com a solução analítica dada pela Eq. (2.32). Podemos ver boa concordância entre os resultados. Os parâmetros “corrente de vórtice e densidade inicial”, usados para fazer a curva analítica, concordam até segunda casa decimal com os valores obtidos por dinâmica molecular. p. 76
- 39 Perfil de densidade em código de cores para a rede de vórtices escoando através de um canal com uma rede de pinos com potencial de interação finito para diferentes valores da força externa, a) $F = 0.05f_0$, b) $F = 0.10f_0$, c) $F = 0.50f_0$, d) $F = 1.0f_0$, e) $F = 5.00f_0$ e f) $F = 10.00f_0$ p. 77

- 40 Força de interação entre as partículas para diferentes sistemas em função da distância r . Para vórtices em supercondutores a a força de interação é dada pela função de Bessel modificada de primeira ordem $F^{vv}(r) \propto K_1(r)$, para colóides a força é dada pelo potencial de Yukawa $F^{cc}(r) \propto (1 - \kappa) \exp(-\kappa r)/r^2$, onde $\kappa = 0.8$ é o inverso do alcance do potencial e para pedestres a força é dada por uma função exponencial segundo o modelo de D. Helbing (31, 32) $F^{pp}(r) = A \exp(d - r)$, onde $A = 10$ é uma constante e $d = 0.5$ é o diâmetro do pedestre. p. 78
- 41 (a) Perfil de densidade obtido para um sistema coloidal confinado em um canal em todas as direções. O perfil de densidade mostrado aqui é para um canal com $N = 630$ e largura $L = 3.0$ com uma força externa $F = 1.0$. (b) Perfis de densidade para diferentes valores do número de partículas e diferentes valores da força externa. p. 80
- 42 Parâmetro a em função da largura do canal para diferentes números de partículas e diferentes valores da força externa. A linha contínua preta representa o ajuste feito nas curvas obtidas por simulações de dinâmica molecular, Os parâmetros obtidos no ajuste foram $A = 0.78$, $B = 1.86$ e $C = 0.33$. A linha tracejada representa o valor do parâmetro a para um sistema aberto. p. 81
- 43 Configuração final para as partículas sendo forçadas contra a parede em $x = 0$ num canal fechado em todas as direções. p. 82
- 44 Perfil de densidade para partículas suspensas, escoando em um canal e na presença de uma barreira de energia com força $F_B = 1.0$ como obstáculo, para um sistema com $N = 600$ partículas confinadas em um canal de largura $L = 5.0$ sendo forçada por uma força $F = 4.0$. A linha contínua representa a curva de densidade obtida por integração numérica da Eq. (2.31). O parâmetro a usado nesta equação foi obtido através do ajuste feito na Fig. 42. p. 83
- 45 Perfil de densidade para partículas suspensas escoando em um canal com uma constricção. Os símbolos (círculos pretos) foram obtidos por simulações de dinâmica molecular, a linha contínua vermelha representa o perfil de densidade obtido pela Eq. 2.32, e as linhas contínuas em azul representam as regiões onde os perfis de densidade não foram ajustados. p. 84

- 46 Configuração final para um canal com partículas suspensas submetidas a uma força externa em um canal mesoscópico na presença de uma restrição. As setas indicam o sentido do fluxo. As simulações foram feitas para um sistema com $N = 1250$ partículas confinadas em um canal com uma restrição, cujas seções da parte larga e estreita são $y_1 = 10.0$ e $y_2 = 2.5$, respectivamente. As partículas são forçadas por uma força $F = 1.0$. . . p. 85
- 47 (a) Perfil de densidade obtido para pedestres em um canal confinado em todas as direções. Os símbolos (círculos) representam os resultados obtidos por simulações de dinâmica molecular, e a linha tracejada representa o ajuste linear desta curva, usando a Eq. (2.33). (b) Colapso das curvas de densidade obtidas para diferentes valores do número de partículas e da força externa. mostrando que o valor do parâmetro a é invariante para uma grande faixa de valores do número de partículas e da força externa. p. 88
- 48 Valor do parâmetro a em função da largura do canal L , obtido para pedestres confinados em um corredor estreito, com tendência a se movimentarem em direção à parede em $x = 0$. As diferentes curvas foram obtidas para diferentes valores da razão N/A e da força externa. A linha contínua vermelha representa o ajuste feito nas curvas obtidas por simulações de dinâmica molecular, Os parâmetros obtidos no ajuste foram $A = 6.08$, $B = 4.06$ e $C = 0.20$ p. 89
- 49 Perfil de densidade para N pedestres escoando através de um canal de largura $L = 10m$ e com uma restrição de largura $h = 2.5m$. A curva contínua descreve o ajuste da curva obtida por simulação de dinâmica molecular com a Eq. 2.32. p. 90
- 50 Geometria de um corredor responsável por induzir uma direção preferencial para o escoamento. Os parâmetros usados nesta figura são: $L = 10.0$, $b = -3.0$, $w = 4.0$, $v = 3.0$, $\rho = 0.6$, $\xi = 0.0$ and $H = 1.0$ p. 92
- 51 Parâmetro de ordem como função do parâmetro b . Vemos que o ordenamento preferencial do sistema ocorre apenas para altos valores de $|b|$. Os parâmetros usados nestas simulações foram: $w = 4.0$, $H = 1.0$, $L = 10.0$, $\rho = 0.6$, $\xi = 0.0$ e $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 20 diferentes realizações do sistema. p. 94

52	Parâmetro de ordem em função da densidade para $w = 4.0$, de $H = 1.0$, $L = 10.0$, $b = -4.0$, $\xi = 0.0$ and $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.	p. 95
53	Parâmetro de ordem como função do parâmetro H/w com $w = 4.0$, $L = 10.0$, $b = -4.0$, $\xi = 0.0$ and $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.	p. 96
54	Parâmetro de ordem como função do ruído externo ξ_i presente no sistema, para $w = 4.0$ com $H = 1.0$, $L = 10.0$, $b = -4.0$ e $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.	p. 97
55	Dependência do parâmetro de ordem com a velocidade, para $w = 4.0$ com $H = 1.0$, $L = 10.0$ e $b = -4.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.	p. 98
56	Design do canal usado para confinar as partículas. Este canal é responsável por introduzir um potencial tipo catraca, dando um sentido preferencial para o escoamento quando o sistema é submetido a uma força ac com média zero. L é o comprimento da catraca, $L1$ é o comprimento do eixo difícil da catraca, $L2$ é o comprimento do eixo fácil da catraca, H é a altura da catraca e d é o espaçamento entre as catracas.	p. 100
57	Velocidade média da rede de vórtices na direção x em função da força externa aplicada para diferentes valores da comensurabilidade entre o número de catraca e o número de vórtices. Estes resultados foram obtidos para uma catraca de comprimento $L = 12$, com $L1 = 3$ e $L2 = 9$, com altura $H = 3.0$ e espaçamento $d = 0.9$	p. 101
58	Velocidade média das partículas em função da força externa aplicada, para altos campos de comensurabilidade. Este gráfico mostra que, quando o campo de comensurabilidade é aumentado, as múltiplas transições plásticas que ocorrem em baixos campos de comensurabilidade desaparecem. Estes resultados foram obtidos para uma catraca de comprimento $L = 12$, com $L1 = 3$ e $L2 = 9$, com altura $H = 3.0$ e espaçamento $d = 0.9$	p. 102
59	Velocidade média das partículas em função da força externa para diferentes largura do canal. Os resultados aqui mostrados são para uma densidade $\rho = 0.22$	p. 103

- 60 Resistividade elétrica do mercúrio em função da temperatura absoluta. Curva original obtida por H. K. Onnes em 1911, esta curva marcou a descoberta da supercondutividade. Isto só foi possível porque em 1908 Onnes conseguiu liquefazer o hélio pela primeira vez, possibilitando alcançar temperaturas extremamente baixas jamais alcançada anteriormente (51). Posteriormente, Onnes verificou que este fenômeno também ocorria com outros elementos químicos da tabela periódica. p. 106
- 61 Comportamento de um supercondutor e de um metal normal quando submetidos as seqüências de medidas magnéticas ZFC(zero field cooled) e FC (field cooled). Podemos ver que a magnetização de um material supercondutor independe da história magnética do sistema, isto não ocorrer com um metal normal. p. 107
- 62 Este gráfico mostra os avanços nas pesquisas em busca de materiais com temperatura crítica cada vez mais elevada. podemos ver o aumento explosivo na temperatura crítica dos materiais supercondutores após a descoberta da supercondutividade no sistema La-Ba-Cu-O, este trabalho rendeu o prêmio nobel aos pesquisadores J. G. Bednorz e K. A. Muller em 1987 p. 110
- 63 Tabela mostrando os valores da temperatura crítica T_c , do comprimento de penetração λ , do comprimento de coerência ξ e do parâmetro de Ginzburg-Landau κ . Os valores de λ e ξ para o MgB_2 não foram encontrados na literatura. p. 114
- 64 (a) Perfis do campo, \mathbf{h} (azul), e do parâmetro de ordem supercondutor $|\psi|^2$ (vermelho). (b) Linhas de contorno da supercorrente (azul) em torno do núcleo do vórtice. Nesta figura temos $\lambda = 10\xi$. Figura obtida de L. E. Cabral. p. 118
- 65 Figura obtida de G. Bergmann publicado em *phys. rev.* **107**, 1 (1984). Este gráfico mostra uma medida de magneto-resistência em um filme fino de *Cu* com espessura de 80 com resistência $R = 98\Omega$ e um auto grau de desordem, o livre caminho médio nesta amostra é da ordem de 10. Neste gráfico podemos ver a supressão do efeito de localização fraca quando a amostra é exposta a um campo magnético vemos também que este efeito é fortemente dependente da temperatura. p. 130

- 66 Gráfico obtido de S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge Univ. Press. 1995. Estes resultados foram obtidos por experimentos numéricos para ambas as condutâncias, clássica e quântica. A condutância quântica é calculada por combinar matrizes de espalhamento para sucessivas seções, cada uma contendo uma impureza, assumindo coerência completa. A condutividade clássica é calculada combinando matrizes de probabilidade e assumindo incoerência completa. Os resultados são para um condutor com 30 modos e com 600 impurezas. p. 132
- 67 Gráfico obtido por B. J. van Wees (PRL, **60** 848 (1988)). Este gráfico mostra um esboço do sistema usado para fazer as medidas bem como o gráfico da resistência em função da tensão aplicada, esta curva é acompanhada de vários plateaus que são resultados da quantização da condutância. p. 133
- 68 Gráfico obtido por B. J. van Wees (PRL, **60** 848 (1988)). para a quantização da condutância equivalente a resistência mostradas na Fig. 67. . p. 134

INTRODUÇÃO

O estudo das propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos é de fundamental importância para o desenvolvimento de conceitos chave na Física Básica e para o desenvolvimento de novas tecnologias. Em geral, o mecanismo de transporte destes sistemas é muito complexo, sua compreensão pode ajudar a descrever as propriedades dinâmicas de sistemas fora do equilíbrio (11, 25, 26, 66, 76, 80).

Em meados de 1980 foram iniciados os estudos das propriedades de transporte em estruturas artificiais de metais e materiais semicondutores fabricados pelas técnicas hoje usadas na nanofabricação. Estes estudos revelaram que o transporte eletrônico nestes materiais são acompanhados de efeitos de localização fraca (7), efeitos de interferência “efeito Ahanarov-Bohm” (81), flutuações universais (49) e quantização da condutância (79). Hoje em dia as propriedades mesoscópicas tem sido observadas em outros sistemas com diferentes escalas de comprimentos, como no transporte de colóides, materiais granulares, fluidos e no movimento de pedestres (10, 25, 32).

Recentemente foi verificado que o transporte de partículas confinadas em um canal mesoscópico, movendo-se em sentidos opostos e interagindo entre si por um potencial repulsivo, exibe um novo estado de cristalização, obtido quando aumentamos o ruído externo ao sistema (32). Tal efeito foi denominado “*Freezing by Heating*”, tendo sido verificado pela primeira vez por D. Helbing *et al.* (32) no estudo da dinâmica de sistemas coloidais e no movimento de pedestres.

Nesta tese, estudamos as propriedades do escoamento de partículas interagentes e confinadas em sistemas mesoscópicos, com ênfase na descrição do comportamento de vórtices em supercondutores, sistemas coloidais, ondas de densidade de carga, canais iônicos, microfluidos, sistemas granulares e o movimento de pedestres. Por possuir um comportamento fortemente coletivo estes sistemas apresentam muitas características complexas que serão discutidas a seguir.

Em geral, as partículas dos sistemas estudados interagem através de um potencial repulsivo e descrevem uma dinâmica superamortecida. Nossos estudos estão focados na descrição da dinâmica de vórtices em supercondutores, sistemas coloidais e pedestres.

O modelo proposto anteriormente por Zapperi *et al.* (87) será utilizado para descrever tais sistemas. Como resultado, obtemos uma equação diferencial de primeira ordem não-linear também conhecida como equação diferencial de Abel de segundo tipo. Mostramos que a solução desta equação diferencial em uma dimensão (1D) é capaz de descrever o comportamento da densidade de partículas ao longo de um canal bi-dimensional (2D). Os obstáculos empregados em nossos estudos foram uma barreira de energia, uma constrição e uma rede de defeitos periódicos (empregada apenas no estudo do transporte de vórtices em supercondutores), ou seja, uma rede de pinos. Consideramos dois limites para a interação entre os vórtices e os pinos. No primeiro os pinos apresentam um potencial de atração infinito de forma que os vórtices pinados nunca entram em movimento. Neste caso, consideramos que os pinos se comportam como uma rede de vórtices fixos. No segundo limite, consideramos que a interação entre os vórtices e os pinos é dada por um potencial finito, ou seja, os vórtices podem ser depinados, dependendo apenas da concentração de vórtices e da força externa.

Na segunda parte deste trabalho, estudamos o transporte de partículas confinadas geometricamente por paredes assimétricas que introduzem um potencial tipo “catraca” responsável por induzir uma direção preferencial ao escoamento. Estudamos inicialmente o movimento de pedestres em sentidos opostos em um canal estreito, onde medimos o parâmetro de ordem em função da densidade, velocidade, assimetria, ruído externo e da razão entre a largura do canal e a profundidade da assimetria. Investigamos também as propriedades de escoamento da rede de vórtice confinada por paredes assimétricas. Neste caso todos os vórtices escoam no mesmo sentido. Calculamos a velocidade média do sistema em função da força externa aplicada nos dois sentidos de movimentos, ou seja, no sentido do eixo fácil e do eixo difícil da catraca.

Esta tese está organizada da seguinte forma. No Capítulo 1, apresentamos uma descrição geral dos sistemas mesoscópicos e descrevemos os sistemas aqui estudados. No Capítulo 2, mostramos os resultados obtidos para o transporte de partículas em meios superamortecidos, escoando em um canal mesoscópico na presença de um obstáculo para o fluxo. Os resultados mostrados nesse Capítulo foram obtidos por simulações de dinâmica molecular, integração numérica da equação diferencial responsável pela descrição do comportamento do sistema, bem como por cálculos analíticos. No Capítulo 3, descrevemos a dinâmica de partículas confinadas geometricamente por paredes assimétricas. Estes estudos são feitos para descrever a dinâmica de vórtices em supercondutores e o movimento de pedestres escoando em um canal, e confinados por paredes assimétricas no limite de baixa densidade. Os resultados deste Capítulo foram obtidos por simulações de dinâmica

molecular. Finalmente apresentamos nossas conclusões finais e perspectivas para futuros trabalhos.

1 CONCEITOS GERAIS

Neste Capítulo fazemos uma revisão bibliográfica dos problemas estudados nesta tese, mostrando os principais resultados já obtidos para sistemas mesoscópicos, vórtices em supercondutores e movimento de pedestres.

1.1 Sistemas mesoscópicos

Os estudos das propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos, ou seja, sistemas onde pelo menos uma de suas dimensões é da mesma ordem de grandeza de algum de seus comprimentos característicos, têm revelado novas propriedades físicas extremamente peculiares. Tais estudos tiveram início por volta de 1980 e proporcionaram inúmeros avanços tecnológicos, como a miniaturização de componentes eletrônicos, possibilitando o desenvolvimento de computadores e dispositivos eletrônicos mais eficientes.

Os primeiros resultados obtidos para estes sistemas mostraram que o transporte eletrônico é acompanhado por efeitos de localização fraca (7), interferência (81) também conhecido como *efeito Ahanorov-Bohm*, flutuações universais (81) e quantização da condutância (79).

No transporte de elétrons o principal comprimento característico, é o **comprimento de coerência de fase eletrônico** L_Φ , dado pela distância que um elétron pode percorrer sem perder sua fase “memória”, Este comprimento cresce com a diminuição da temperatura, chegando a dimensões da ordem de microns. Outros comprimentos característicos importantes na descrição de sistemas mesoscópicos são:

- **o comprimento de localização eletrônica** ξ : mede a extensão espacial da função de onda. Em condutores, este comprimento é do tamanho da amostra, enquanto que em isolantes ele decai exponencialmente, a partir dos chamados centros de localização.

- **o livre caminho médio elástico** L_e : mede a distância que os elétrons podem viajar sem sofrer colisões. Este comprimento depende fortemente do grau de impurezas das amostras, de defeitos cristalinos e da temperatura. Variando de alguns microns a alguns angströms.
- **o comprimento de onda de Fermi** λ_F , está relacionado com a energia do nível de Fermi do material dado por $\lambda_F = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon_F}}$. Em geral este comprimento é da ordem de angströms.

Estes comprimentos característicos são responsáveis por distinguir os diferentes regimes de transporte em sistemas mesoscópicos, usualmente identificados como: balístico, difusivo ou localizado. A Fig. 1 ilustra a relação entre os comprimentos característicos e os regimes de transporte.

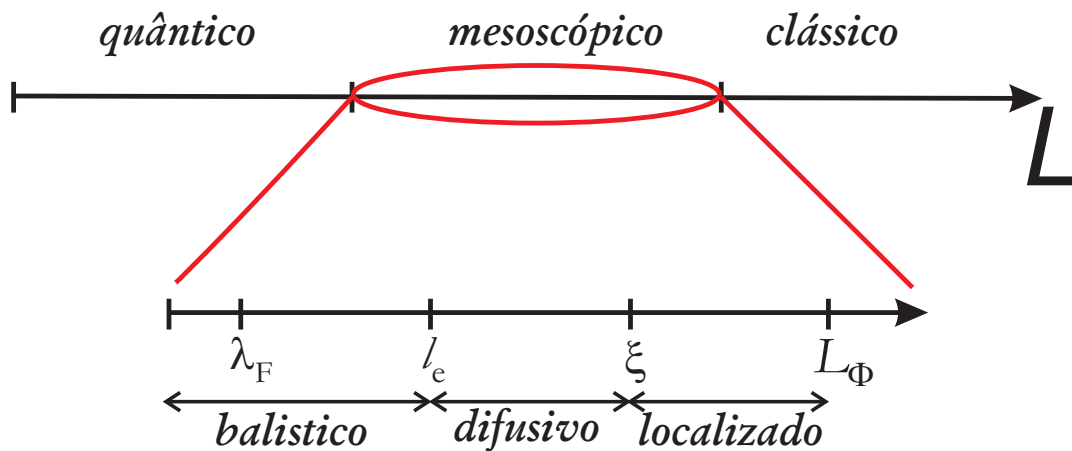


Figura 1: Diferentes regimes para o transporte de elétrons em estruturas mesoscópicas. Estes regimes de transporte são descritos pelos comprimentos característicos do sistema. Os efeitos mesoscópicos podem ser verificados quando um dos comprimentos do sistema (L) é menor que o comprimento de coerência de fase eletrônico L_Φ .

Podemos ver na Fig. 1 que, em sistemas eletrônicos, as propriedades mesoscópicas podem ser medidas em uma faixa de comprimento intermediária entre o macroscópico, onde o transporte é regido pelas leis da Física Clássica, e o nanoscópico, com o transporte regido pelas leis da Mecânica Quântica. Sendo L o menor comprimento do sistema estudado, para $L \gg L_\Phi$ as propriedades de transporte são puramente difusivas e podem ser descritas pela equação de Boltzmann. Quando $L \ll L_\Phi$ as propriedades dos sistemas são quantizadas e descritas pela equação de Schrödinger e pela equação de Liouville. Para comprimentos $L \leq L_\Phi$, os sistemas encontram-se no limite mesoscópico, sendo descritos pelas teorias da Física Clássica adaptadas com ingredientes Quânticos.

O termo mesoscópico não faz nenhuma referência ao tamanho do sistema, e sim à razão entre suas dimensões e seus comprimentos característicos, devendo portanto ser usado para descrever um regime de transporte e não uma escala de comprimento. As propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos são de grande importância para o desenvolvimento de novos dispositivos nanoestruturados,

Recentemente, as propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos têm sido verificadas em maiores escalas de comprimento, como no transporte de partículas em colóides e no movimento de pedestres. Dentre estas propriedades podemos citar o efeito “*Freezing by Heating*”, que consiste em uma cristalização induzida por um ruído externo no transporte de partículas confinadas movimentando-se em sentidos opostos (32). Vale citar também a presença de um comprimento característico induzido pela não-localidade do fluxo, efeito este que pode ser observado em materiais “vítreos” (*glassy materials*), em colóides e em sistemas granulares em geral (25).

1.2 Vórtices em supercondutores

A dinâmica de vórtices em supercondutores começou a ser estudada após A. A. Abrikosov (Nobel 2003) ter verificado que a supercondutividade pode coexistir com o magnetismo em alguns materiais (supercondutores do tipo-II). Em seu trabalho, Abrikosov (1) mostrou que o campo magnético aplicado pode penetrar na amostra supercondutora, na forma de linhas quantizadas de fluxo magnético chamadas de vórtices. Os vórtices apresentam um quantum de fluxo magnético dado por $\Phi_0 = h/2e$, onde h é a constante de Planck e e é a carga elementar do elétron. Eles possuem um núcleo com raio igual ao comprimento de coerência ξ , onde o campo magnético é máximo. O campo magnético do núcleo do vórtice, por sua vez, decai em um comprimento característico conhecido com “comprimento de penetração de London” λ . No Apêndice A apresentamos as principais teorias fenomenológicas usadas para descrever o estado supercondutor.

Os vórtices em supercondutores podem alcançar diferentes níveis de interação quando variamos o campo magnético externo. Isto faz com que este sistema seja ideal para o estudos das propriedades de sistemas coletivos. O estudo da dinâmica de vórtices tem mostrado nos últimos anos a existência de muitas formas complexas de movimento, como descrito na Seção 1.2.1.

O estudo da dinâmica de vórtices em materiais supercondutores foi intensificado após a descoberta dos supercondutores de alta temperatura (HTSC), pois estes materiais são

fortemente do tipo-II e permitem que a fase supercondutora e os vórtices coexistam em uma ampla faixa de campo magnético. Durante muito tempo estes estudos procuraram entender como os vórtices poderiam ser aprisionados, pois quando submetidos a forças externas os vórtices podem entrar em movimento, fazendo com que a energia seja dissipada neste sistema.

A compreensão da dinâmica de vórtices em supercondutores é fundamental para o desenvolvimento de conceitos físicos em outras áreas do conhecimento, *e.g.*, colóide e onda de densidade de carga, tendo também importância para o desenvolvimento de novos dispositivos. Os vórtices em supercondutores se comportam como uma rede cristalina - “*rede de Bragg*” também conhecida como rede de vórtices - que apresenta características típicas de uma fase termodinâmica, como fusão e calor específico.

1.2.1 Propriedades da rede de vórtices

A primeira propriedade observada nos vórtices em supercondutores foi a formação de uma rede periódica e triangular. Isto pode ser verificado desde que o material supercondutor esteja livre de impurezas e/ou defeitos e os vórtices não estejam confinados em estruturas mesoscópicas, esta rede é conhecida como rede de Abrikosov.

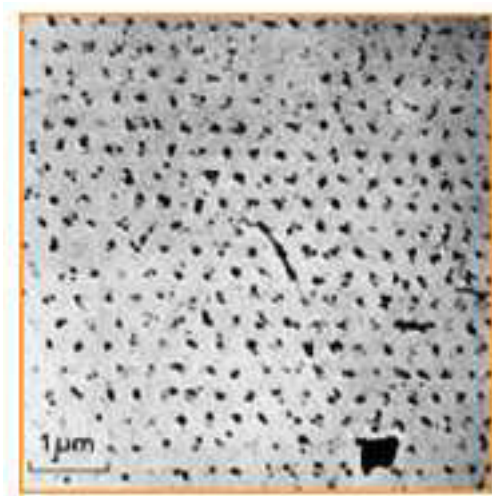


Figura 2: Visualização da rede de vórtices obtida por U. Essmann e H. Trauble publicado na *Physics Letters*, **24A** 526 (1967). Esta visualização foi obtida pela técnica de decoração magnética, comprovando que os vórtices formam uma rede triangular na ausência de forças externas e de defeitos no material.

As propriedades estáticas e dinâmicas da rede de vórtices são alteradas quando o sistema é confinado. O confinamento dos vórtices em regiões da ordem do comprimento de coerência ξ favorece a formação de vórtices gigantes, com mais de um quantum de

fluxo magnético. Quando os vórtices são confinados em regiões da mesma ordem do comprimento de penetração de London λ , as propriedades estáticas são alteradas fazendo com que a configuração triangular não seja a mais estável para a rede de vórtices (88). As propriedades dinâmicas também são alteradas como verificado em trabalhos anteriores e nesta tese.

Na presença de uma corrente externa, os vórtices podem entrar em movimento induzindo perdas de energia. Para que a corrente supercondutora flua sem que haja dissipação de energia, faz-se necessário aprisionar os vórtices. Isto pode ser feito usando as próprias não-homogeneidade e defeitos na estrutura cristalina do material ou através de estruturas artificiais, conhecidas como rede de pinos.

Uma das primeiras teorias sobre o movimento da rede de vórtices foi elaborada por Anderson e Kim (2). Esta teoria, conhecida também como teoria de *flux creep*, prevê a existência de pacotes de vórtices que se movem independentemente uns dos outros devido à variação local da densidade de pinos. Larkin e Ovchinnikov (47) demonstraram que a ordem cristalina de longo alcance da rede de vórtices é destruída na presença de centros de aprisionamento, não importando quão fracos eles sejam. Esta teoria é conhecida como teoria do *pinning coletivo*.

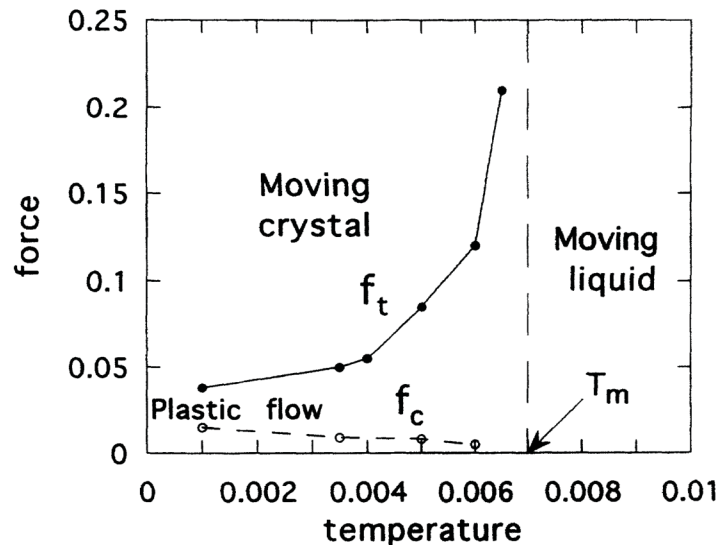


Figura 3: Diagrama de fase obtido numericamente por A. E. Koshelev and V. M. Vinokur publicado em PRL, **73** 3580 (1994). Neste trabalho foi prevista uma transição de fase dinâmica, onde uma “cristalização” pode ser obtida para valores da corrente externa maior que zero.

A rede de vórtices apresenta um diagrama de fase dinâmico muito complexo, com a presença de vários regimes. O diagrama de fase obtido numericamente por Koshelev e

Vinokur em 1994 (46) prevê o movimento de um cristal de vórtice “*moving crystal*” para forças maiores que f_t . Para forças menores que f_t e maiores que a força de *depinning* f_c (forças onde os vórtices começam a se movimentar) os vórtices se movimentam em um regime plástico. Abaixo de f_c , os vórtices estão pinados e apresentam uma configuração quase homogênea, mas sem ordem cristalina de longo alcance. Para temperaturas acima de T_m a rede de vórtices se comporta como um líquido, sendo T_m a temperatura de fusão da rede de vórtices.

As medidas de transporte em supercondutores na presença de um campo magnético deram início às investigações das fases dinâmicas da rede de vórtices. Bhattacharya e Higgins (8) estudaram a dependência da corrente de transição com o campo magnético separando o movimento dos vórtices em dois regimes, como mostrado na Fig. 4(a).

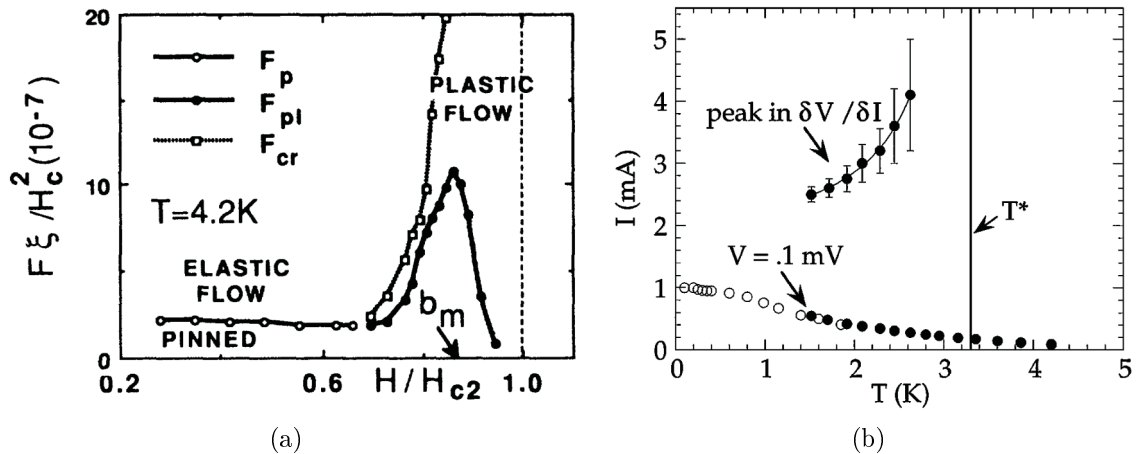


Figura 4: (a) Diagrama de fase experimental obtido por S. Bhattacharya e M. J. Higgins publicado em PRL, **70** 2617 (1993), mostrando as fases da rede de vórtices. Como podemos ver há três fases distintas para a rede de vórtice: vórtices pinados (fase estática), escoamento plástico e escoamento elástico. (b) Diagrama de fase experimental obtido por M. C. Hellerqvist *et al.*, publicado em PRL, **76** 4022 (1996). Este diagrama de fase possibilitou uma comparação direta com os resultados numéricos obtidos por A. E. Koshelev and V. M. Vinokur.

Hellerqvist *et al.* (33) fizeram outro trabalho experimental, medindo desta vez a corrente em função da temperatura para uma amostra bidimensional de $Mo_{77}Ge_{23}$. Estas medidas possibilitaram uma comparação direta com o trabalho de Koshelev e Vinokur (46). Hellerqvist *et al.* (33) observaram um aumento da correlação da rede de vórtices para correntes altas. Para baixas temperaturas, eles encontraram que os vórtices iniciam seu movimento muito abruptamente quando a corrente elétrica é aumentada e o movimento inicial da rede de vórtices exibe característica de um fluxo plástico. Os resultados obtidos por Hellerqvist são mostrados na Fig. 4(b).

Giamarchi e Le Doussal (21), usando técnicas de renormalização, mostraram que, ao contrário do previsto por Koshelev e Vinokur (46), alguns modos de desordem não são afetados pelo movimento, mesmo em altas velocidades. Sendo assim, a rede de vórtices se comporta como um vidro em movimento (*moving glass*) e não como um cristal perfeito. O *moving glass* possui as seguintes propriedades: (i) decaimento da ordem translacional de longo alcance, (ii) as partículas fluem através de canais estáticos, (iii) padrão de canais altamente correlacionado ao longo da direção transversa ao movimento, devido à compressão elástica, e (iv) existência de barreiras ao movimento transverso.

Zapperi *et al.* (87) mostraram numericamente que a frente de penetração do fluxo magnético “vórtice” e o perfil de densidade obedecem a uma lei de escala. Neste trabalho, uma equação de difusão não-linear é obtida através do *coarse graining* da equação de Fokker-Planck para um sistema de partículas superamortecidas em um meio desordenado. Estes autores observaram que tal equação é capaz de descrever a dinâmica de penetração de vórtice em supercondutores. Os resultados obtidos por Zapperi *et al.* (87) mostrando o colapso das curvas para frente de penetração e para o perfil de densidade são reproduzidos na Fig. 5.

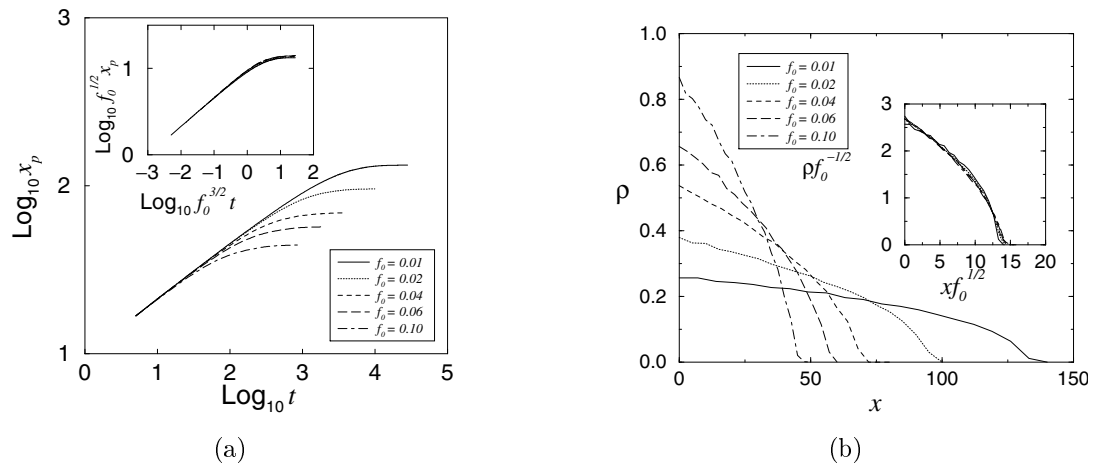


Figura 5: Gráficos obtidos por Zapperi *et al.* publicados em PRL **86**, 3622 (2001). (a) Posição média da frente de penetração em função do tempo. O *inset* deste gráfico mostra o colapso das curvas obtidas para diferentes valores da força externa. (b) Perfil de densidade em função da posição para diferentes forças externas. No *inset* é mostrado o colapso destas curvas. Os gráficos mostrados em (a) e (b) foram obtidos por simulações de dinâmica molecular

A integração numérica da equação de difusão não-linear mostrou que a frente de penetração do fluxo magnético tem uma estrutura fractal com dimensão que varia entre $D_f = 4/3$ e 1.0. Este valor da dimensão fractal indica que o processo de penetração de vórtices em supercondutores pode ser descrito pelo modelo de percolação gradiente (69)

(ver Fig. 6). A dimensão fractal é obtida usando o método da contagem de caixas. O sistema é dividido em caixas de tamanho b e contamos então o número de caixas ocupadas $N(b)$, que decai com b^{-D_f} , onde D_f é a dimensão fractal.

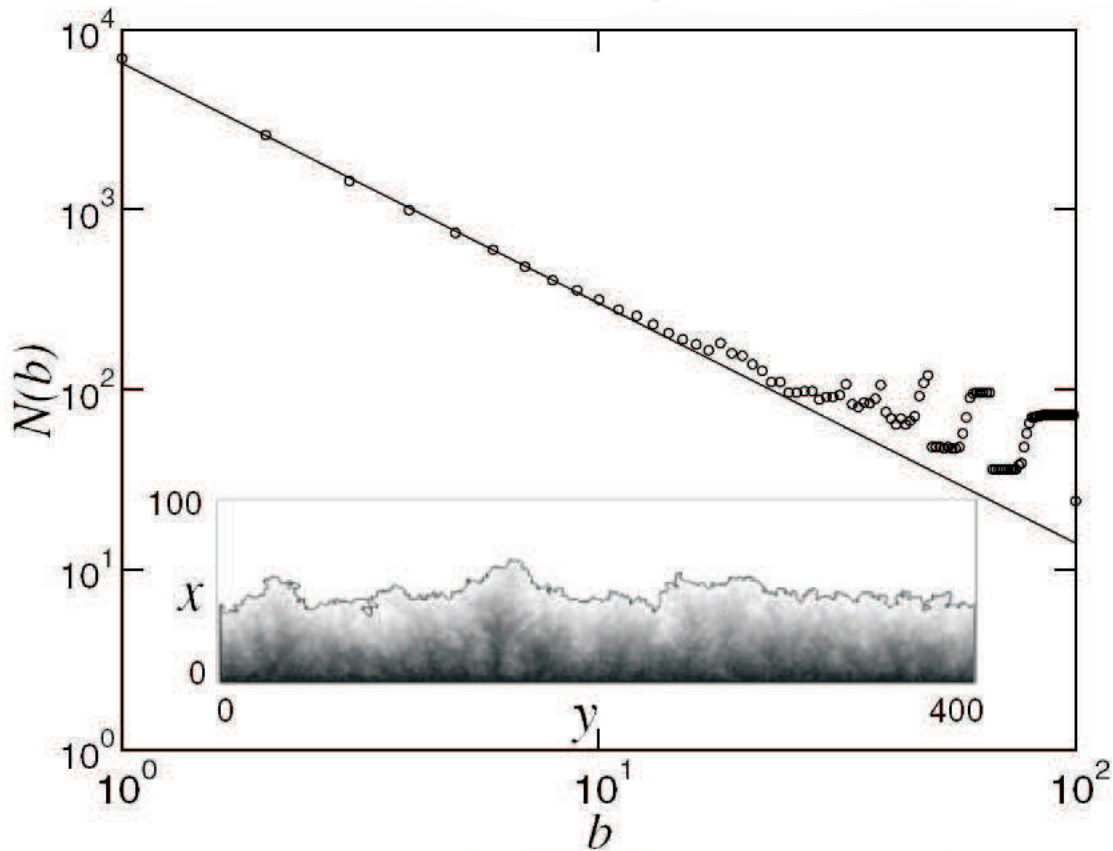


Figura 6: Gráficos obtidos por Zapperi *et al.* publicados em PRL **86**, 3622 (2001). O *inset* desta figura mostra a densidade obtida por integração numérica da equação contínua. O gráfico principal mostra a contagem do número de caixas ocupadas em função do tamanho da caixa. A dimensão fractal medida para este sistema foi $D_f = 4/3$ (linha sólida). A mudança de comportamento para dimensão fractal $D_f = 1$ é obtida para grandes escalas de comprimento.

Quando a rede de vórtices é exposta a algum tipo de assimetria espacial ou temporal, podemos observar uma direção preferencial para o escoamento quando aplicamos uma força externa alternada ac com média zero. Esta simetria é responsável por induzir um efeito de retificação conhecido como efeito “catraca” (48).

1.3 Colóides

Os estudos da dinâmica em sistemas coloidais na presença de uma força externa são de fundamental importância para o desenvolvimento de novos dispositivos como, por

exemplo, aqueles empregados no processo de migração de partículas sob a influência de um campo elétrico (eletroforese) e no processo de eletro-osmose (55). Dispositivos produzidos com estas técnicas são utilizados em grande escala na separação de proteínas e DNA.

A dinâmica de colóides carregados na presença de um campo elétrico externo ocorre através de processos de não-equilíbrio. Estes sistemas são ideais para se estudar as transições de fase. Estudos recentes (15), baseados em simulações de dinâmica de Langevin, mostraram que estes sistemas apresentam uma transição ordem-desordem (formação de fileira “lanes”) quando as partículas são submetidas a altos valores de campos externos e densidades. Esta transição parece ser de primeira ordem, apresentando uma metaestabilidade que pode ser verificada devido à presença de ciclos de histerese neste sistema (15). Nas Fig. 7 e Fig. 8 mostramos os resultados obtidos por Dzubiella *et al.* (15) através de simulações de dinâmica Browniana, para uma mistura coloidal submetida a uma força externa. Na Fig. 7 mostramos a configuração final das partículas para diferentes forças

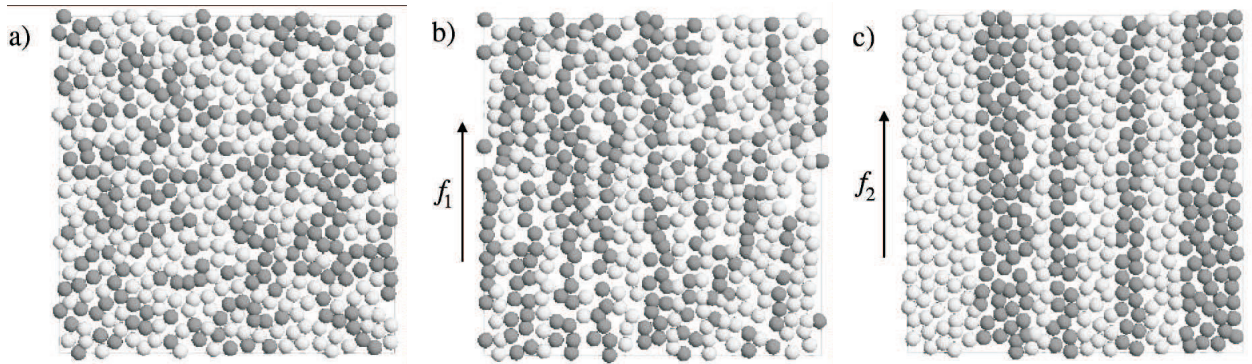


Figura 7: Configuração final para uma mistura binária de partículas suspensas em um sistema bi-dimensional movimentando em sentidos opostos, figura obtida por J. Dzubiella *et al.* (15). (a) Sistema no estado desordenado, configuração obtida para um campo externo nulo. (b) Sistema ainda no estado desordenado, mas agora com um campo externo aplicado próximo do campo crítico $f_1 \simeq f_c$. (c) O sistema no estado ordenado, formando fileiras. Esta configuração foi obtida para um campo externo $f_2 > f_1$. Nesta situação, o parâmetro de ordem obtido é $(\phi \simeq 0.99)$. Como podemos ver o sistema apresenta uma transição de ordem-desordem dependendo do campo “força” externa. Esta transição de fase é conhecida como transição de ordenamento dinâmico. Maiores detalhes sobre esses resultados podem ser encontrados em (15).

externas e na Fig. 8 mostramos a variação do parâmetro de ordem em função da força externa para diferentes valores de $\kappa\sigma$, onde σ é o diâmetro das partículas e κ é o inverso do alcance do potencial de interação entre as partículas. Em 8(a) as medidas são feitas aumentando-se a força externa, com as partículas inicialmente distribuídas aleatoriamente e em (8b) as medidas são feitas com as partículas inicialmente organizadas em duas fileiras e com a força externa sendo diminuída gradualmente. A dinâmica deste sistema pode rev-

elar muitos aspectos importantes, válidos na descrição do movimento de pedestres (41), de partículas granulares (12, 16) e da interface entre fluidos (84).

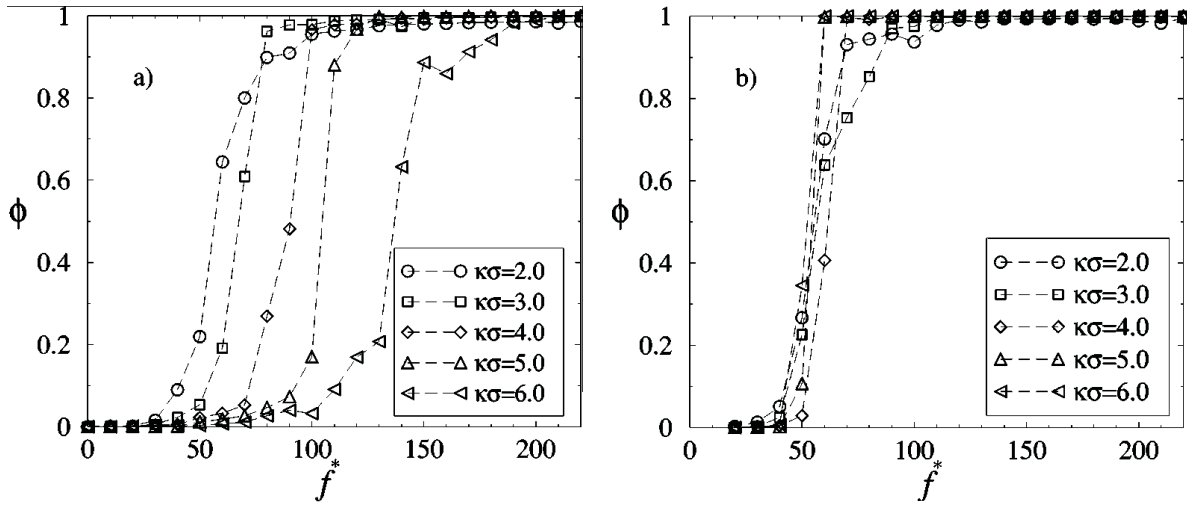


Figura 8: Parâmetro de ordem em função do campo externo, para diferentes valores do diâmetro das partículas σ e do inverso do alcance do potencial κ . Estes resultados foram obtidos através de simulações de dinâmica Browniana por J. Dzubiella *et al.* (15). O parâmetro de ordem mede o grau de organização do sistema. a) Parâmetro de ordem obtido para as partículas inicialmente distribuídas aleatoriamente e com a força externa sendo aumentada. (b) Parâmetro de ordem para as partículas inicialmente organizadas em duas fileiras e com a força externa sendo diminuída gradualmente. Estes resultados mostram a existência de uma metaestabilidade, verificada através de ciclos de histerese, indicando que esta transição é uma transição de fase de primeira ordem. Maiores detalhes sobre estes resultados podem ser encontrados em (15).

A formação de fileiras na dinâmica de misturas binárias de partículas carregadas em colóides, que se movimentam em direções opostas devido à aplicação de um campo elétrico, foi confirmada experimentalmente por meio de visualização da dinâmica através de microscópios confocais (50). Na ausência de campos elétricos externos, as partículas em suspensão formam um cristal binário (36). Quando o campo elétrico excede um campo crítico, a estrutura cristalina é destruída e as partículas formam fileiras paralelas ao campo aplicado. Para campos ainda maiores, as fileiras são destruídas e as partículas entram em um estado de transporte desordenado, que pode levar a uma obstrução do canal, impedindo o transporte.

Na Fig. 9, mostramos o diagrama de fase de não-equilíbrio, onde podemos classificar os diferentes estados estacionários da dinâmica de sistemas coloidais em função da densidade e do alcance do potencial de interação (67). A transição observada para altos campos externos e para altas concentrações de partículas parece ser de primeira ordem com a presença de histerese.

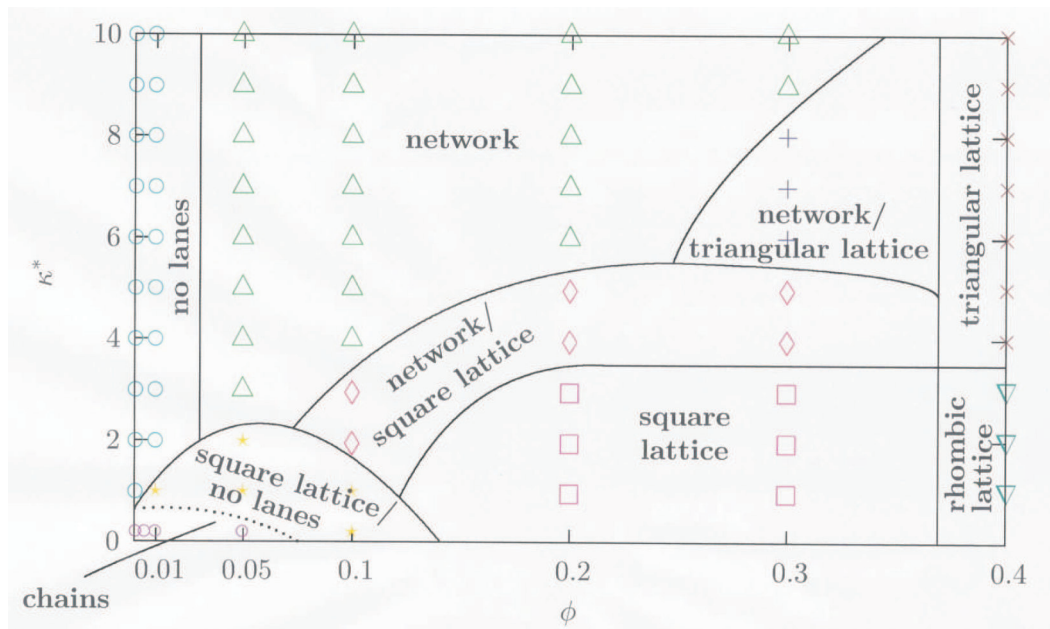


Figura 9: Diagrama de fase de não-equilíbrio obtido por M. Rex *et al.* (67) para uma mistura binária de colóides carregados, movimentando-se em sentido contrário devido à ação de um campo elétrico externo. Os resultados foram obtidos por simulações de dinâmica Browniana. κ é o alcance do potencial e ϕ é a fração volumétrica das partículas. Maiores detalhes deste gráfico podem ser obtidos em (67).

Estudos do transporte de colóides superparamagnéticos através de canais estreitos revelam que o gradiente de concentração está relacionado com o mecanismo de redução de camadas no canal (*layer reduction*) (45). Quando a força externa domina o escoamento, o mecanismo de redução de camadas não pode ser encontrado. No entanto, quando o transporte ocorrer devido a um gradiente de concentração, podemos verificar um mecanismo de redução de camadas e as partículas se organizando em uma rede hexagonal. O ordenamento hexagonal é atribuído à interação das partículas com vários vizinhos ao seu redor, sendo que o alcance da interação entre as partículas é determinado pelo campo magnético externo. Este sistema é ideal para estudarmos o comportamento de sistemas coletivos, pois variando o campo magnético externo mudamos o alcance da interação entre as partículas e, conseqüentemente, as propriedades estáticas e dinâmicas deste sistema. Estes estudos são de fundamental importância para a compreensão do mecanismo de transporte em sistemas biológicos, como em canais iônicos (68).

Na Fig.10 mostramos o perfil de densidade e os parâmetros da rede na direção x e na direção y , obtidos por Köppl *et al.* (45), para sistemas coloidais de partículas superparamagnéticas forçadas a escoar através de um canal estreito. Podemos ver que o parâmetro de rede na direção x cresce de forma aproximadamente linear e na direção y é aproximadamente constante, fazendo com que haja um gradiente de concentração linear

ao longo da direção x .

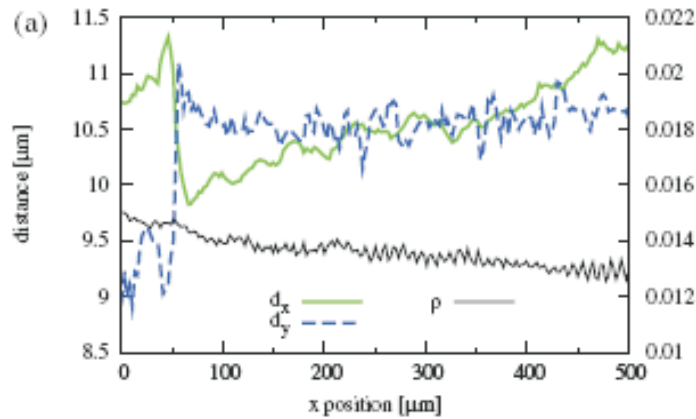


Figura 10: Gráfico obtido por M. Köppl *et al.* (45) mostrando o perfil de densidade ao longo de um canal estreito quando as partículas estão escoando devido a um gradiente de concentração.

O mecanismo de “*layer reduction*” foi observado inicialmente por Glasson *et al.* (23). A mudança do número de camadas nas proximidades de uma constrição foi prevista por simulações da dinâmica de Langevin para partículas interagindo com o potencial de Yukawa (61), como mostra a Fig. 11.

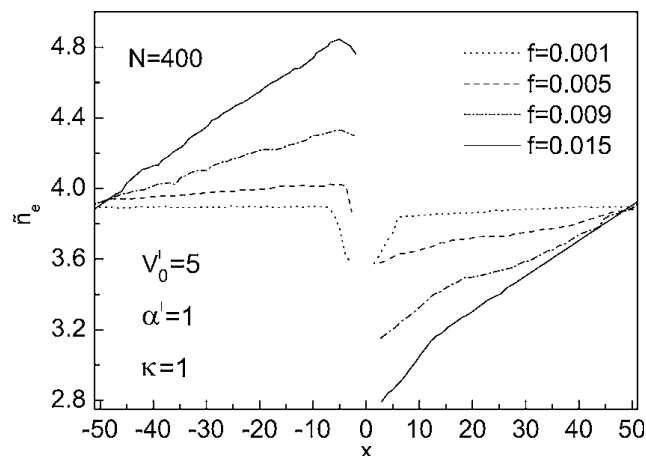


Figura 11: Perfil de densidade obtido por G. Piacent *et al.* (61) para um sistema de partículas interagindo com o potencial de Yukawa para diferentes valores da força externa.

Os estudos das propriedades de transporte em colóides em uma estrutura assimétrica indicam um mecanismo de retificação do movimento das partículas (efeito catraca) quando o movimento dela é induzido por uma força ac (53). O mecanismo de transporte neste sistema é fortemente dependente da abertura do canal e do tamanho das partículas (44). Foi verificado que a velocidade das partículas cresce linearmente com a frequência e com a amplitude dessa força ac , até um valor crítico, a partir do qual não há mais transporte, como mostra a Fig. 12.

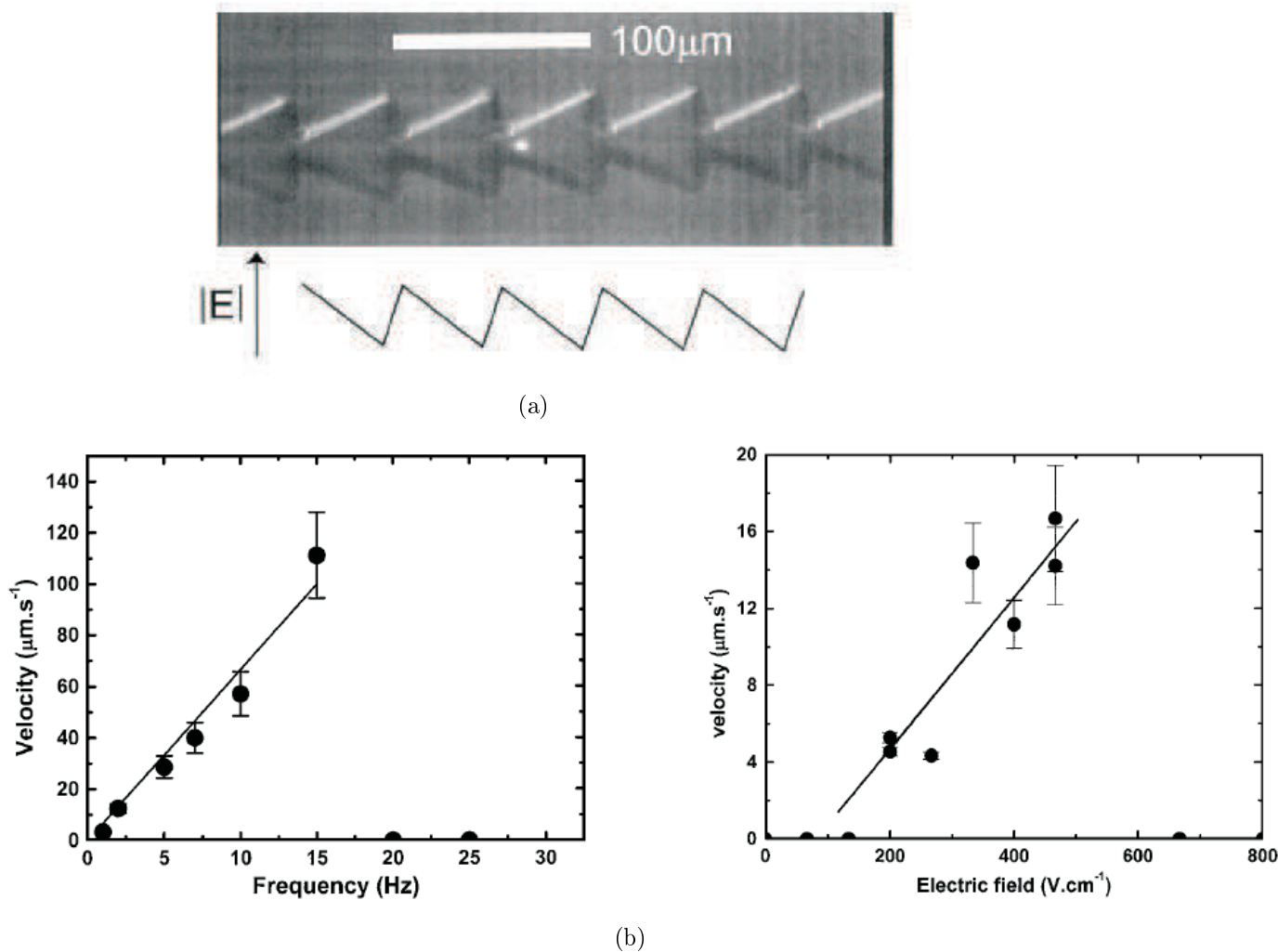


Figura 12: Gráficos obtidos por C. Marquet *et al.* (53) mostrando a retificação de partículas micrométricas escoando através de um canal assimétrico como mostrado em (a), as partículas são submetidas a um campo elétrico *ac* de baixa frequência e com média zero. (a) Design do canal assimétrico usado para retificar o movimento de partículas confinadas em um canal usado por C. Marquet *et al.* (53). (b) Resultados encontrados por C. Marquet *et al.* (53), mostrando a dependência da velocidade de transporte com frequência da força alternada *ac* aplicada e com a intensidade do campo elétrico externo.

1.4 Pedestres

Nos últimos anos, a dinâmica de pedestres tem despertado grande interesse na comunidade científica. O aumento da população nos grandes centros urbanos faz com que incidentes, como incêndios, possam se transformar em desastres se o local não puder ser evacuado em tempo hábil. Na tentativa de evitar estes desastres, muitos estudos têm sido feitos para viabilizar formas de evacuar regiões densas e fechadas em um intervalo de tempo mínimo. Estes estudos são realizados por meios de simulações numéricas, analiticamente e empiricamente ou experimentalmente por meio de análise de vídeos. Os modelos usados para estudar a dinâmica de pedestres podem ser divididos em duas classes: modelos contínuos e modelos discretos. O modelo contínuo é baseado no modelo de força social proposto por Helbing (32). O modelo discreto é baseado na dinâmica conhecida como autômato celular e suas variações: *floor field model* e *lattice gas model* (82, 86). Em geral, a dinâmica de pedestres é muito complexa e difícil de ser modelada numericamente, pois os pedestres estão sujeitos a um grande número de interações. Modelar estes sistemas representa um grande desafio para os pesquisadores desta área.

A modelagem da dinâmica de pedestres é um dos mais excitantes campos da ciência e da engenharia. Compreender como os pedestres se movimentam é de fundamental importância para podermos nos antecipar evitando desastres, e para melhorar o fluxo de pessoas em locais públicos como em estações de trens, auditórios, teatros, cinemas, *etc* (35). Foi observado que tais sistemas apresentam uma transição de fase induzida por uma quebra espontânea da simetria (85). Os efeitos coletivos nesses sistemas são responsáveis pelas seguintes fases (57, 82):

- **ordenada** - movimento na forma de camadas bem definidas “*lanes*”
- **desordenado** - movimento turbulento, altamente resistivo “*jamming*”
- **obstruída** - as partículas estão paradas “*clogging*”

As propriedades da dinâmica de pedestres, incluindo os fenômenos de auto-organização, têm sido observadas e reproduzidas por vários métodos físicos. É importante ressaltar que a evacuação de pedestres é na realidade muito mais complexa que os modelos usados para descrever esta dinâmica. As circunstâncias de perigo e pânico são muito difíceis de serem reproduzidas numericamente, sendo quase impossíveis de serem verificadas na vida real. Isto encoraja pesquisadores a estudar o comportamento de evacuação por vários modelos (35).

O modelo contínuo proposto por Helbing *et al.* (32), usado nesta tese para a descrição de pedestres que se movimentam em corredores mesoscópicos assimétricos, pode ser usado para descrever a dinâmica de qualquer sistema de partículas que se movimentem em direções opostas e interajam entre si através de um potencial repulsivo de curto alcance, *i.e.*, sistemas coloidais e sistemas granulares. Neste trabalho, a utilização de um modelo matemático para descrever o movimento de partículas em canais mesoscópicos mostrou que este sistema apresenta um estado de cristalização para altos valores da energia total. A transição responsável por levar o sistema ao estado de cristalização foi chamada de “*freezing by heating*”. O aumento da energia total foi obtido pela adição de um ruído externo.

Sendo a posição da partícula i dada por $\mathbf{x}_i(t)$ e a velocidade por $\mathbf{v}_i(t) = d\mathbf{x}_i(t)/dt$, a equação de movimento para a partícula i pode ser escrita como:

$$m \frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = m \frac{v_0 \mathbf{e}_i - \mathbf{v}_i(t)}{\tau} + \xi_i(t) + \sum_{j(\neq i)} \mathbf{f}_{ij}[\mathbf{x}_i(t), \mathbf{x}_j(t)] + \mathbf{f}_b[\mathbf{x}_i(t)]. \quad (1.1)$$

Nesta equação, m é a massa das partículas, v_0 é a velocidade com que a partícula tende a se mover na ausência de interações, τ é o tempo de relaxação e $\mathbf{e}_i \in \{(1, 0), (-1, 0)\}$ é a direção na qual a partícula i se movimenta. $\gamma = m/\tau$ pode ser interpretado como um coeficiente de atrito. $\mathbf{f}_{ij} = -\nabla A(d_{ij} - D)^{-B}$ representa a interação repulsiva entre as partículas i e j , \mathbf{f}_b é a interação com a parede de confinamento e ξ representa as flutuações do sistema. $d_{ij} = |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)| > D$ é a distância entre as partículas i e j , sendo que seu valor é sempre maior que o diâmetro D das partículas. A interação entre as partículas e a parede é dada de forma similar à interação entre as partículas. As flutuações do sistema $\xi_i(t)$ são não-correlacionadas e seguem uma distribuição normal truncada com média zero e variância finita θ .

Na Fig. 13 mostramos a configuração final para um sistema de partículas fortemente interagente, confinadas em um canal mesoscópico e se deslocando em sentidos opostos. Esta figura mostra que, dependendo do ruído externo ao sistema, as partículas podem se organizar na forma de fileiras maximizando o fluxo ou obstruir o canal. Mais precisamente, para pequenas amplitudes de θ , e para densidades suficientemente pequenas, as partículas se organizam na forma de fileiras. A forma como estas fileiras são distribuídas no canal depende apenas da condição inicial do sistema. Além disso, para um número de partículas relativamente grande, um estado de transporte altamente resistivo pode ser obtido. Para baixas densidades, mas com um alto valor do ruído externo, o sistema

mostra uma obstrução no transporte de partículas, levando-o a um estado de cristalização dinâmica. Na dinâmica de pedestres este ruído externo pode representar uma situação de pânico. Sendo assim, em corredores estreitos e em situações de pânico há uma forte tendência de obstrução do movimento.

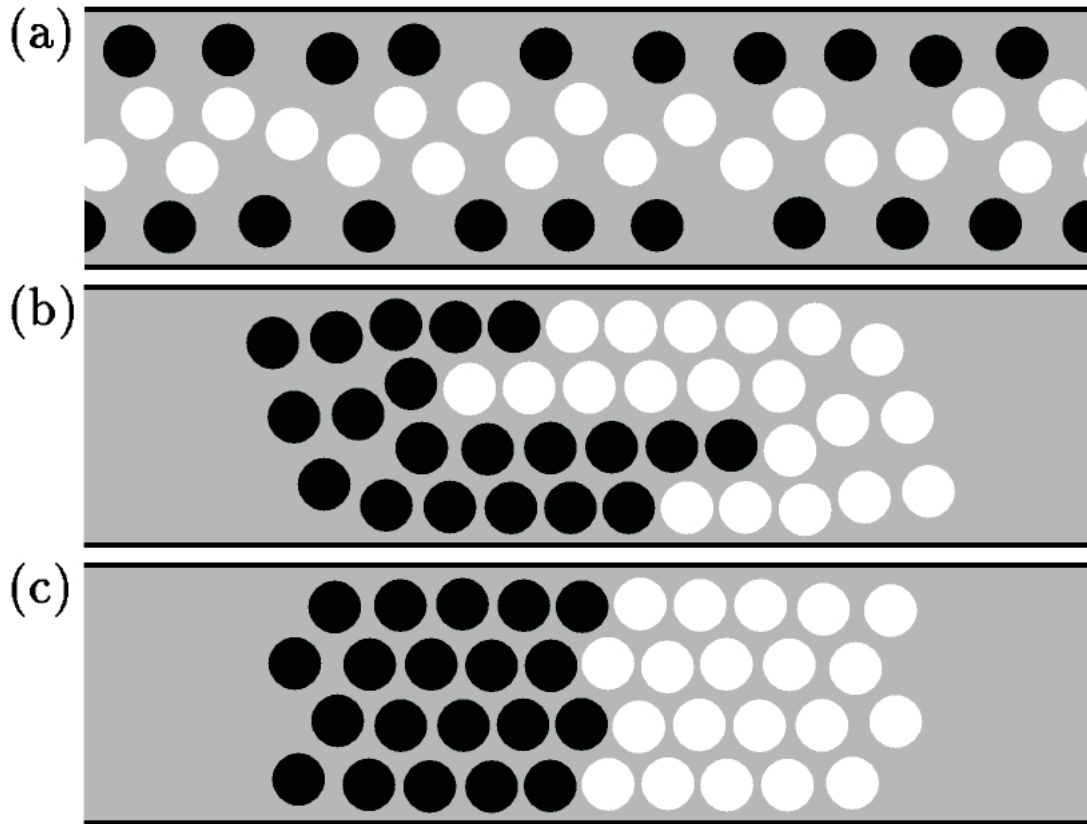


Figura 13: Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* publicado na PRL **84**, 1240 (2000). As simulações foram feitas para um sistema com 20 partículas movendo-se da esquerda para direita (bolas pretas) interagindo com 20 partículas movendo-se da direita para esquerda (bolas brancas) com condições de contorno periódicas na direção x e confinadas na direção y para diferentes valores do ruído externo. (a) Para pequenos ruídos $\theta = 1$ formação de fileiras com movimento uniforme pode ser obtido. (b) Estado intermediário entre a cristalização “obstrução” do canal e a formação de fileiras com transporte uniforme. (c) Estado cristalizado obtido para grandes intensidades do ruído ($\theta = 1000$).

O valor da eficiência do sistema foi calculado por D. Helbing *et al.* (32) como sendo,

$$E = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{e}_i}{v_0}. \quad (1.2)$$

Foi possível mostrar que a transição de um estado ordenado onde $E \rightarrow 1$ (fileiras), para um estado cristalizado, onde $E \rightarrow 0$ (obstrução do transporte), apresenta uma histerese. O estado cristalizado obtido com o aumento do ruído externo permanece quando

a amplitude do ruído é diminuída novamente. Ainda não há relatos de como destruir este estado cristalizado, mas baseado nos resultados encontrados neste trabalho, acreditamos que isto possa ser obtido com a adição de uma energia ao sistema, devido ao trabalho realizado por uma força alternada ou transversal “ao sentido de movimento do sistema”.

Na Fig. 14, mostramos o resultado obtido por Helbing *et al.* (32) para a eficiência média do transporte em função do ruído θ . Este trabalho relata que a cristalização é mais pronunciada quando o tempo de relaxação τ (Ver Fig. 1.1) e o comprimento do canal L_x são grandes. A formação de fileiras é favorecida quando o tempo de relaxação e a largura do canal são grandes, porém a transição “*freezing by heating*” pode ser verificada até no movimento superamortecido onde $\tau \rightarrow 0$.

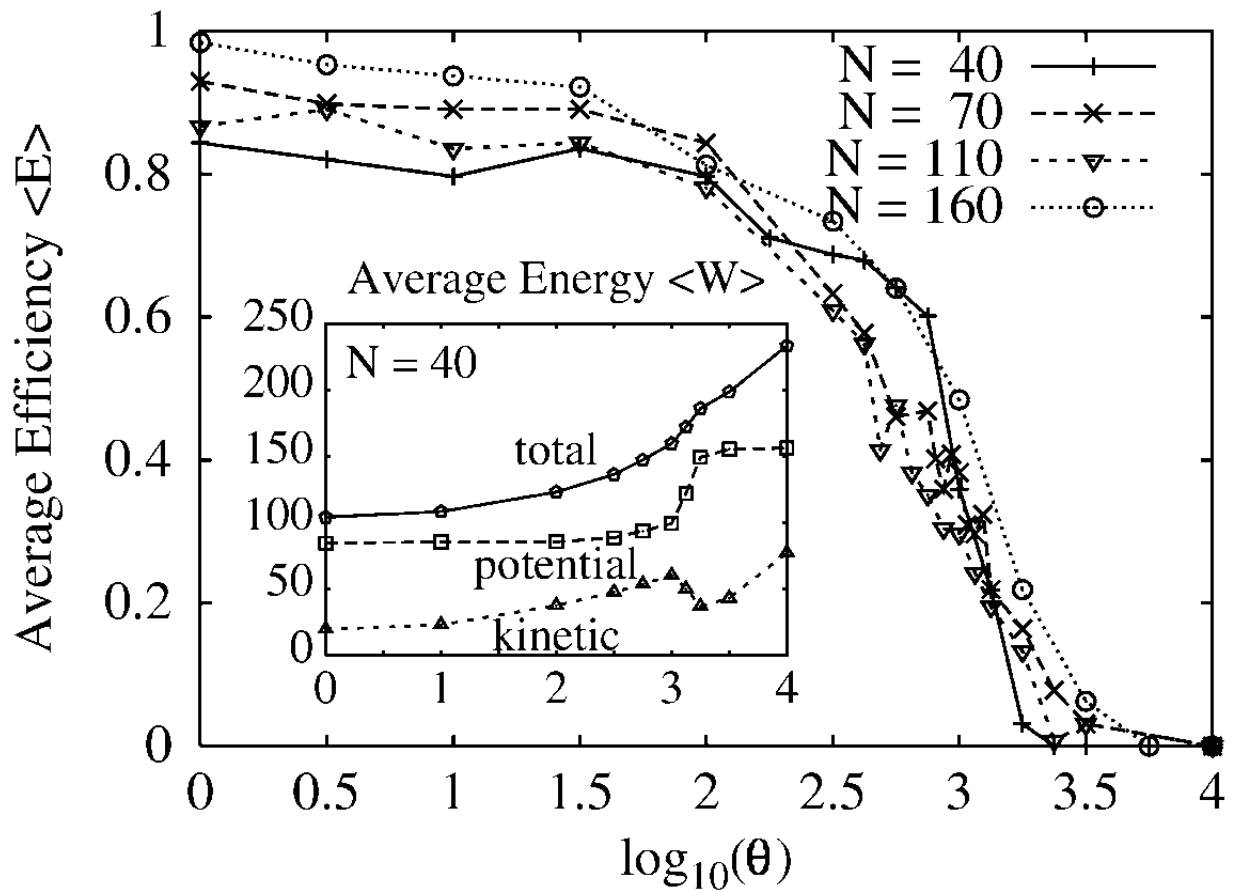


Figura 14: Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* publicado na PRL **84**, 1240 (2000), mostrando a transição de ordenamento dinâmico, chamada “*freezing by heating*”, para diferentes valores do tamanho do sistema mantendo a razão $L_x/L_y = 4 : 1$ constante. No *inset* é mostrada a média da energia potencial, cinética e total.

Helbing *et al.* (32), usando o modelo contínuo proposto anteriormente, estudaram as propriedades da evacuação de pedestres em situações de pânico (31). Este estudo foi um dos pioneiros na área e mostrou que a evacuação é afetada pela velocidade dos pedestres,

como mostra a Fig. 15. Podemos verificar um mínimo na curva do tempo de evacuação em função da velocidade desejada dos pedestres. Para velocidades muito baixas o tempo de evacuação diverge, e para altas velocidades o tempo de evacuação satura e o número de pedestres feridos cresce de forma aproximadamente linear com a velocidade.

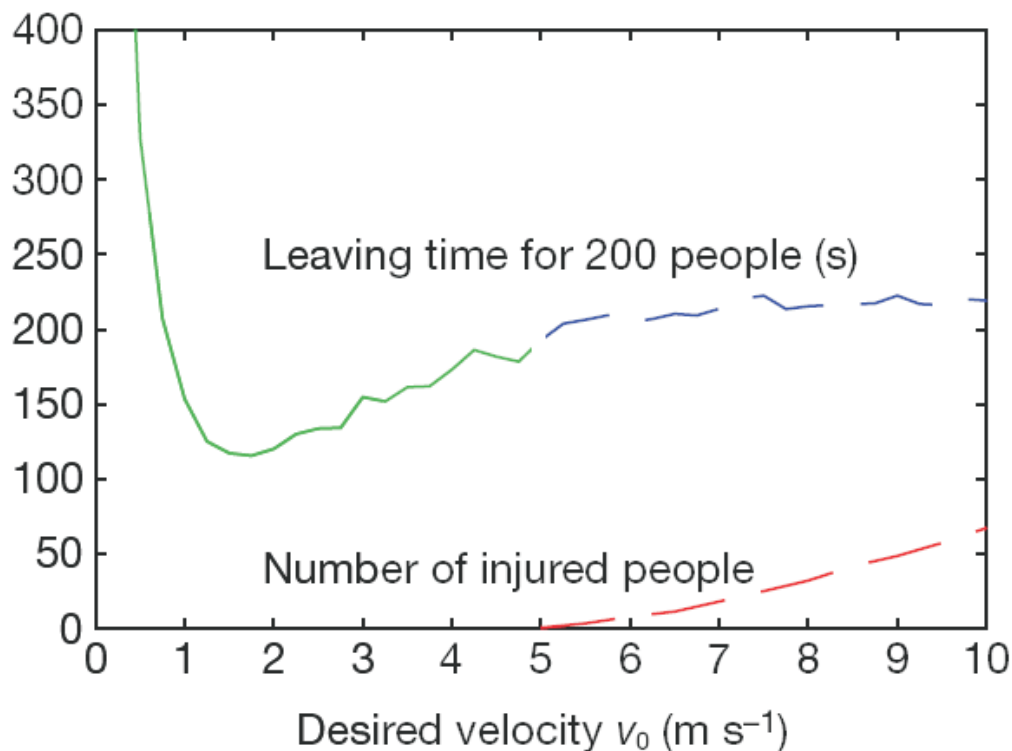
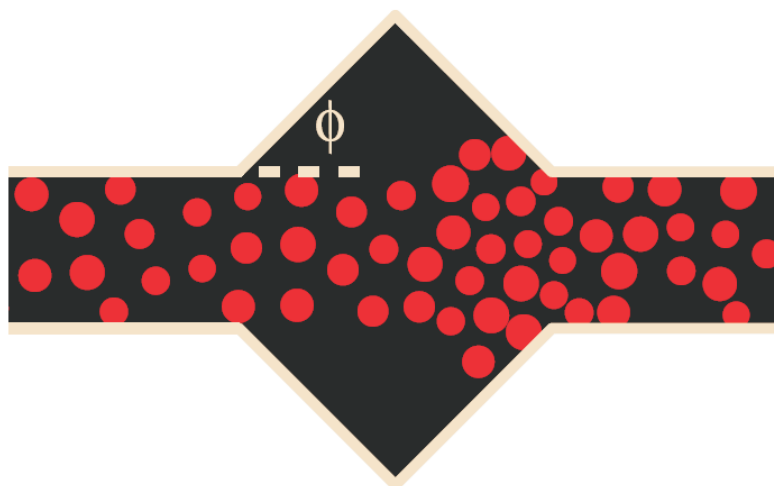


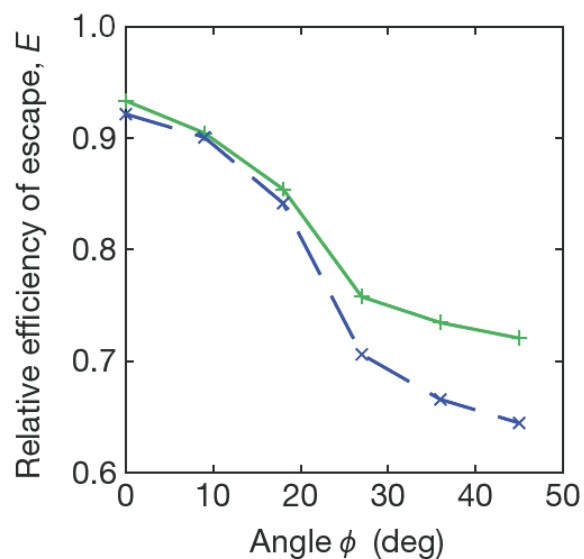
Figura 15: Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* publicado na Nature **407**, 487 (2000). Este resultado mostra o tempo que 200 pedestres gastam para sair de uma sala sob condições normais (sem pânico). O tempo que os pedestres levam para sair da sala, diminui com o aumento da velocidade desejada v_0 . No entanto, quando a velocidade cresce acima de um valor crítico $v_0 \geq 1.5 m s^{-1}$ o tempo de saída volta a crescer novamente até que, em velocidades mais elevadas acima de $5.0 m s^{-1}$, o número de pessoas feridas começa a crescer de forma aproximadamente linear.

A eficiência do processo de evacuação é verificada para um canal com uma cavidade simétrica no meio do corredor. Este estudo mostra que a eficiência diminui quando o valor do ângulo de abertura da cavidade ϕ é aumentado. É importante notar que o aumento do ângulo ϕ faz com que a profundidade da cavidade cresça. Estes resultados nos indicam que a construção de cavidades em rotas de fuga pode aumentar consideravelmente as chances de ocorrer desastres e deve ser evitada em locais onde haja iminente probabilidade de ocorrer acidentes. Por outro lado, o uso desse tipo de arquitetura pode ser favorável em algumas situações, *e.i.* em shopping centers e em centros comerciais, onde se deseja que as pessoas fiquem olhando as vitrines pelo maior tempo possível. Os resultados obtidos

por Helbing *et al.* (31) são apresentados na Fig. 16.



(a)



(b)

Figura 16: Gráfico obtido por D. Helbing *et al.* (Nature **407**, 487 (2000)). Simulação para pedestres movimentando-se em uma rota de fuga com uma cavidade. (a) Posição dos pedestres obtida num corredor de 3m de largura e 15m de comprimento como rota de fuga, com os pedestres saindo com uma velocidade alvo de $v^0 = 2\text{m s}^{-1}$. A cavidade tem a forma de um triângulo isósceles com base de 6m. (b) Eficiência para a saída como função do ângulo ϕ para a estrutura mostrada em (a), a linha tracejada representa a eficiência para uma cavidade irregular. A eficiência cai nos dois casos, sendo um pouco mais pronunciada quando o corredor possui uma cavidade irregular.

Usando um modelo de autômato celular para uma rede quadrada, com dois tipos de partículas que se movimentam de baixo para cima e da direita para esquerda, Biham *et*

al. (9) verificaram uma transição de primeira ordem do estado livre com $v \rightarrow 1.0$ para o estado congestionado com $v \rightarrow 0$. Os autores deste trabalho consideraram condições de contorno periódicas em todas as direções. Os resultados obtidos neste trabalho são mostrados na Fig. 17.

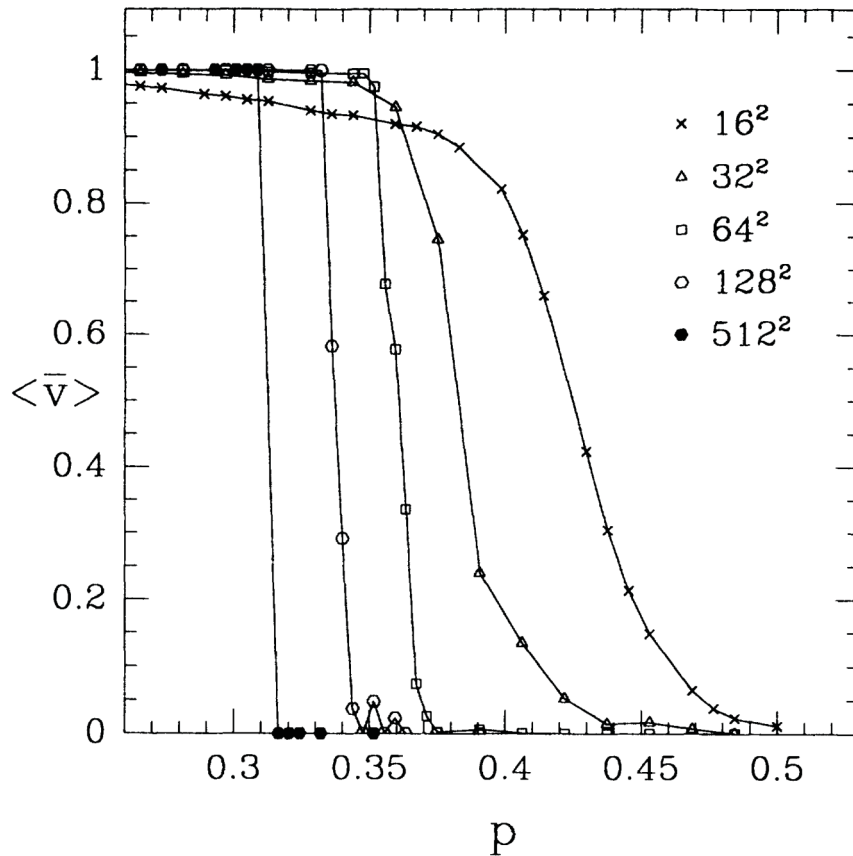


Figura 17: Gráfico obtido por O. Biham *et al.* (9), mostrando a transição de ordem-desordem em função da concentração para sistemas de diferentes tamanhos.

Estudos numéricos da dinâmica de pedestres para descrever a evacuação de salas com obstáculos e múltiplas saídas, mostram que o tempo de evacuação é muito sensível aos locais onde as saídas são colocadas. Em situações onde os pedestres não conhecem os locais de saída, o uso de várias portas para evacuar o local pode causar um efeito negativo e aumentar o tempo de evacuação. Os pedestres têm uma dinâmica fortemente coletiva e tendem a seguir uns aos outros andando sempre em grupos. Quando as portas não são uniformemente distribuídas, o uso de múltiplas saídas ajuda na evacuação apenas nos casos onde os pedestres são familiarizados com o local (35).

Quando os pedestres escoam em sentidos opostos com diferentes velocidades, Weng *et al.* (82) verificaram que, para um canal com condição de contorno periódica há três diferentes regimes para o escoamento. No primeiro regime, obtido no limite de baixas

densidades, as partículas interagem fracamente umas com as outras e apresentam um movimento livre. No segundo regime, obtido para densidades intermediárias, é observada a formação de fileiras. No terceiro regime, obtido em altas densidades, é observada a obstrução do fluxo. Quando supomos que o canal tem condições de contorno abertas, podemos observar duas fases para o estado estacionário. A primeira, obtida para densidades relativamente pequenas, apresenta uma metaestabilidade que pode eventualmente obstruir o transporte neste sistema. Na segunda fase, obtida no limite de altas densidades, podemos observar uma obstrução do fluxo.

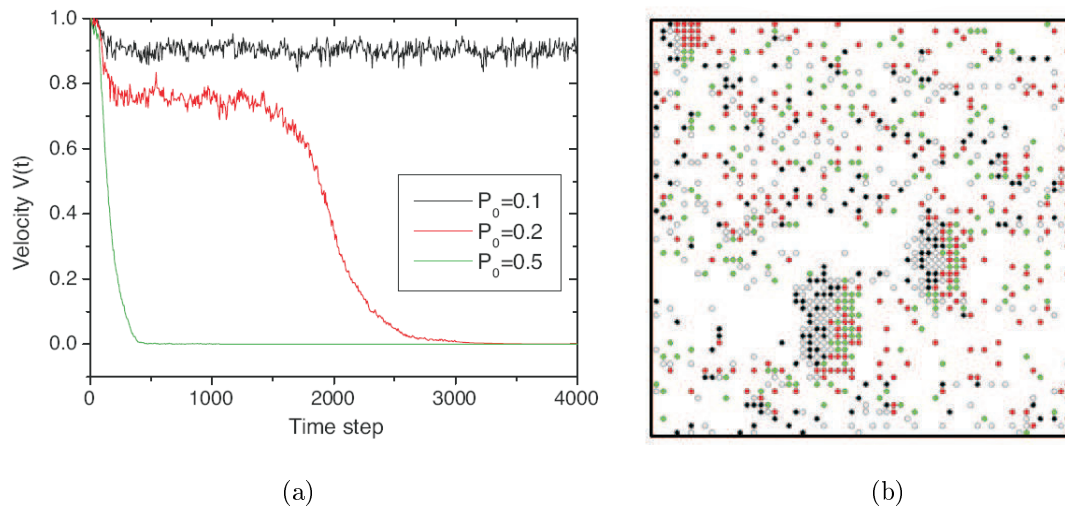


Figura 18: Gráfico obtido por W. G. Weng (82), (a) Velocidade média em função do tempo para diferentes densidades no sistema com condições de contorno abertas. (b) Configuração final para o sistema com $P_0 = 0.2$ e um *time step* de 800 para um sistema com condição de contorno aberta.

Na Fig. 18(a) mostramos a velocidade média para o sistema em função do tempo para diferentes valores da densidade do sistema. Este gráfico mostra uma fase onde a velocidade média apresenta um valor intermediário entre o estado livre $\langle v \rangle \rightarrow 1.0$ e o congestionamento total do sistema $\langle v \rangle \rightarrow 0$. Este estado intermediário é caracterizado por congestionamentos locais, como mostrado na Fig. 18(b).

A dinâmica de pedestres na presença de uma constrição foi estudada numericamente e analiticamente por Nagatani *et al.* (59). Os estudos numéricos foram realizados com um modelo *lattice gas*, onde as partículas interagem apenas com seus primeiros vizinhos. O cálculo analítico foi realizado usando o modelo de campo médio. Estes resultados produziram um diagrama de fase que revelam a transição do regime de fluxo livre para o regime de fluxo resistivo na presença de forte espalhamento. Podemos observar perfeita concordância entre os resultados obtidos por cálculos numéricos e pela teoria de campo

médio. Estes autores mostraram ainda que a solução para o modelo de campo médio em 1D pode descrever a dinâmica de pedestres em 2D.

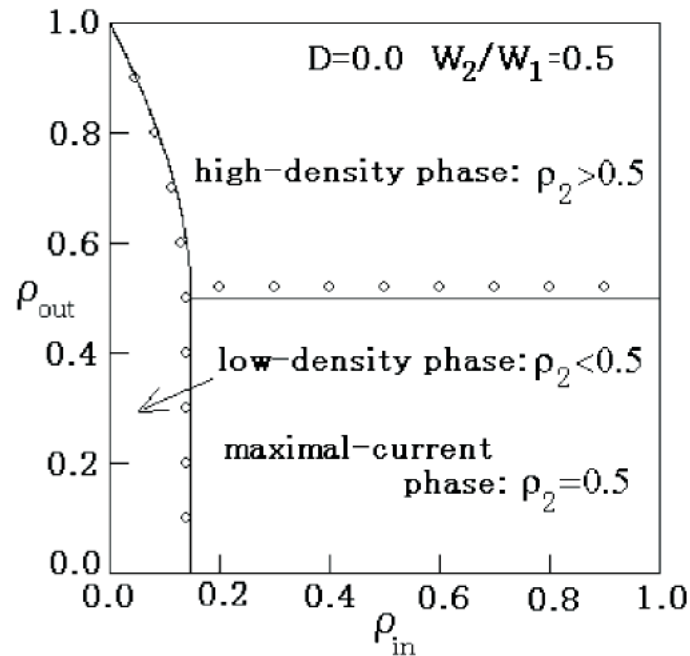


Figura 19: Diagrama de fase obtido por T. Nagatani (Physica A **300**, 558 (2001)), mostrando os diferentes regimes de escoamento dos pedestres em um corredor com uma constricção.

1.5 Efeito catraca “Ratchet effect”

Inicialmente, o efeito catraca foi proposto por Richard Feynman (19) na tentativa de construir uma máquina cujo rendimento fosse maior que o rendimento da máquina de Carnot. Isto implicaria na violação da segunda lei da termodinâmica.

Embora o dispositivo idealizado por Feymann não viole a segunda lei da termodinâmica, estudos recentes indicam que as propriedades do efeito catraca são relevantes na descrição de sistemas quando as flutuações térmicas são da mesma ordem da energia total do sistema. Isto pode ser conseguido naturalmente em dispositivos nanoestruturados e em motores moleculares. Com o avanço das ciências experimentais, o uso destes dispositivos tem se tornado cada vez mais freqüente. A compreensão destes sistemas se faz necessária para que possamos desenvolver novos dispositivos e tornar este mecanismo cada vez mas comum.

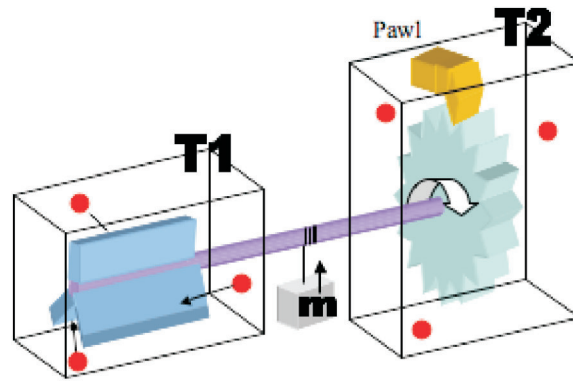


Figura 20: Dispositivo tipo catraca idealizado por Feynmann na tentativa de violar a segunda lei da termodinâmica. Este dispositivo consiste de duas caixas de gás mantidas à temperatura $T_1 = T_2 = T$. Numa caixa temos uma roda com paletas e na outra temos um dispositivo tipo catraca, ligados por um eixo que possui uma polia ligada a um peso. A questão proposta por Feynmann era se este dispositivo poderia realizar um trabalho mecânico capaz de levantar o peso preso à polia. Segundo a hipótese de Carnot isto seria impossível. No entanto, à primeira vista vemos que isto é possível, mas se olharmos mais de perto podemos ver uma série de complicações, (para maiores detalhes consultar Lecture of Feynmann Vol 1, capítulo 46.)

A eficiência destes dispositivos é maior nos processos de filtragem e seleção de partículas. A principal característica do efeito catraca é induzir uma direção preferencial para o escoamento do sistema, sendo condições básicas para que isso ocorra:

- O sistema esteja fora do equilíbrio.
- Exista uma quebra de simetria espacial ou temporal.

Quando um sistema de partículas interagente sofre a ação de um potencial assimétrico e é submetido a uma força externa oscilante com média zero, um fluxo de partículas *dc* no regime estacionário pode ser observado numa direção preferencial. Este efeito ocorre devido à quebra de simetria espacial ou temporal. A quebra de simetria espacial pode ser obtida por meio de um substrato assimétrico, por obstáculos assimétricos ou por geometrias de confinamento assimétricas. A quebra de simetria temporal pode ser obtida através da quebra de simetria do período ou da amplitude da força externa *ac*.

O efeito catraca tem sido usado para manipular o movimento de partículas em diversos sistemas, dentre os quais podemos destacar: vórtices em supercondutores, colóides, motores moleculares e canais iônicos. Estudos recentes têm mostrado que em materiais supercondutores o efeito catraca pode apresentar múltiplas reversões de movimento (74). O mecanismo responsável por estas múltiplas reversões do efeito catraca na dinâmica de vórtices em supercondutores foi estudado por Gillijns *et al.* (22). Estes estudos mostraram

que tais reversões dependem não só da interação vórtice-vórtice, mas também da razão entre os comprimentos característicos deste sistema, que são o “comprimento de penetração de London” λ e o período do potencial assimétrico d . A condição *sine qua non* para que as múltiplas reversões do efeito catraca sejam observadas é dada pela relação $d/\lambda < 1$ (22).

Silva *et al.* (74) mostraram que o efeito catraca reverso em materiais supercondutores pode ser controlado através do campo de comensurabilidade entre os vórtices e a rede de pinos. Foi mostrado que, para múltiplos ímpares do campo de comensurabilidade, as partículas se movimentam no sentido do eixo fácil da catraca. Porém, para múltiplos pares deste campo de comensurabilidade, as partículas se movimentam no sentido contrário, ou seja, no sentido do eixo difícil da catraca. Estes resultados foram verificados experimentalmente e modelados numericamente por simulações de dinâmica molecular em 1D. O mecanismo responsável por estas múltiplas reversões está relacionado à mudança do mínimo local de energia do potencial responsável pelo efeito catraca nesse sistema. Esta mudança ocorre devido ao aprisionamento de vórtices nos pinos. Na Fig. 21 apresentamos modelo usado para explicar os resultados obtidos neste trabalho.

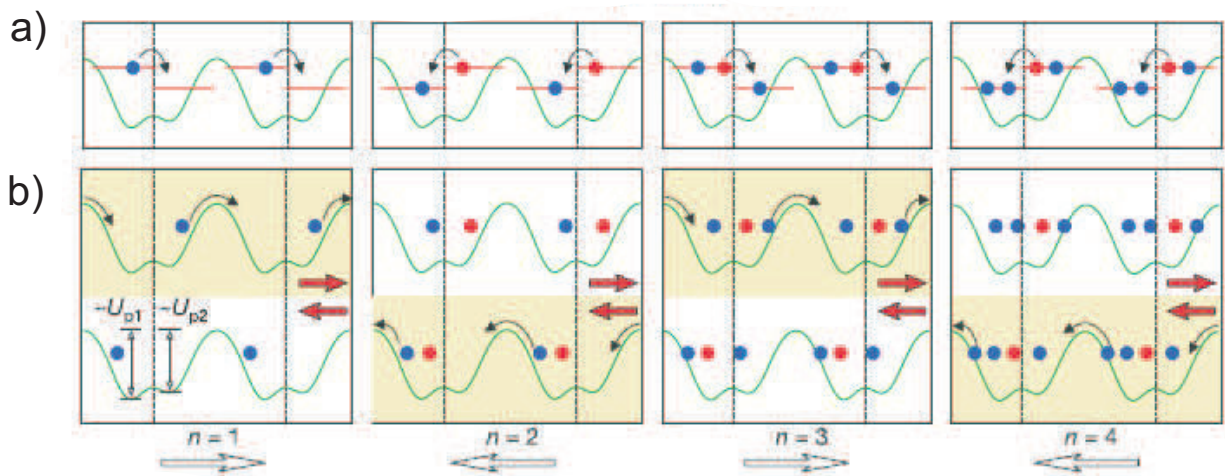


Figura 21: Diagrama ilustrando o mecanismo do efeito catraca reverso tirado de C. C. S. Silva *et al.* (Nature **440**, 651 (2006)). (a) Diagrama da configuração de equilíbrio para $n = 1 - 4$ (n é o número de vórtice por potencial tipo catraca). Podemos ver a alternância entre os mínimos de energia quando n é par ou ímpar. (b) Esquema demonstrando o mecanismo catraca quando a rede de vórtices é submetida a uma força ac . As setas vermelhas indicam a direção da força, os quadros com cor de fundo indicam onde ocorre o movimento macroscópico das partículas “vórtices”.

O uso do efeito catraca na dinâmica de vórtices em supercondutores também tem sido apontado como uma poderosa ferramenta para a remoção de vórtices do interior

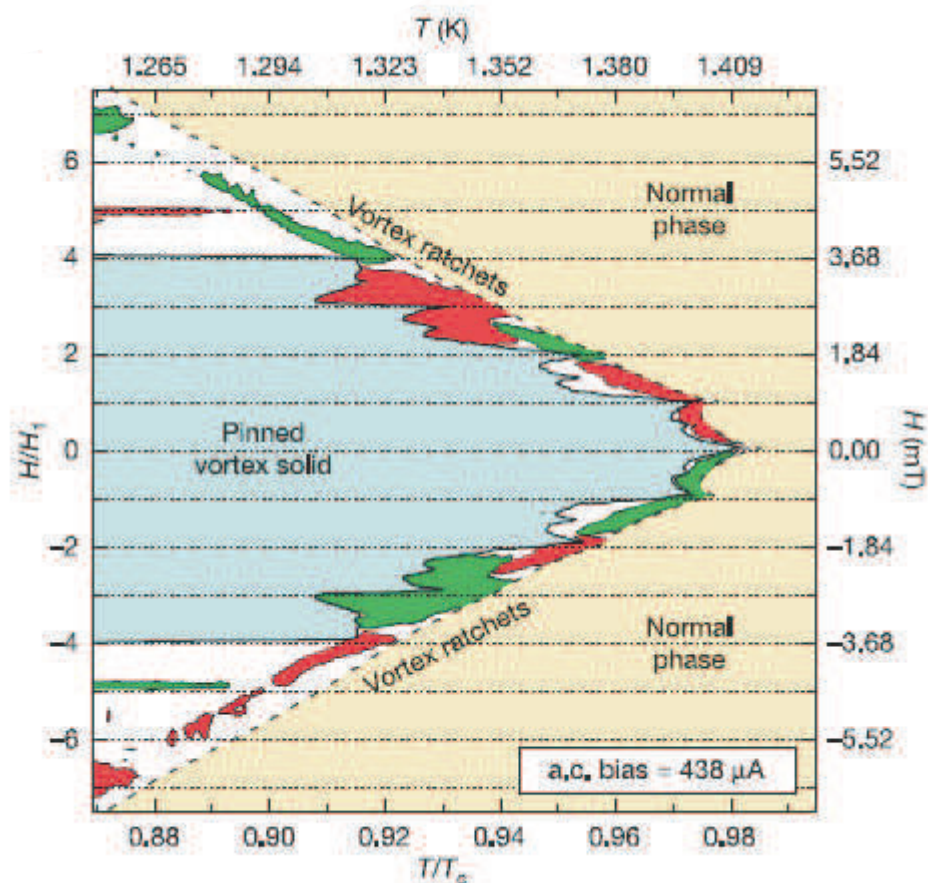


Figura 22: Diagrama de fase experimental obtido por C. C. S. Silva *et al.* (Nature **440**, 651 (2006)) mostrando as fases dinâmicas da rede de vórtice, bem como as regiões onde o fluxo da rede de vórtices é direto (verde) ou reverso (vermelho). Podemos notar que o efeito catraca ocorre próximo da transição supercondutora, região onde há uma grande flutuação da energia, condição necessária para que possamos observar o efeito catraca.

de amostras supercondutoras (48). Além de gerar dissipação de energia, a presença de vórtices no interior de amostras supercondutoras induz ruídos nestes sistemas, limitando ainda mais as aplicações destes materiais.

Matthias *et al.* (54) mostraram que um dispositivo tipo catraca pode ser usado para retificar o movimento de partículas massivas e mesoscópicas (ver Fig. 23), empregando poros assimétricos feitos em membranas de silicone. Mais precisamente, Matthias *et al.* (54) mostraram experimentalmente, e por meio de simulação de dinâmica de Langevin, que este dispositivo (poros unidimensionais de um sistema poroso em uma membrana de silicone) pode ser empregado na separação de partículas de acordo com o seu tamanho. Aplicando uma pressão periódica com média zero esta membrana induz um fluxo periódico ao fluido e às partículas suspensas nestes poros, resultando em um movimento *dc* das partículas em uma direção preferencial. Foi verificado que o transporte de partículas

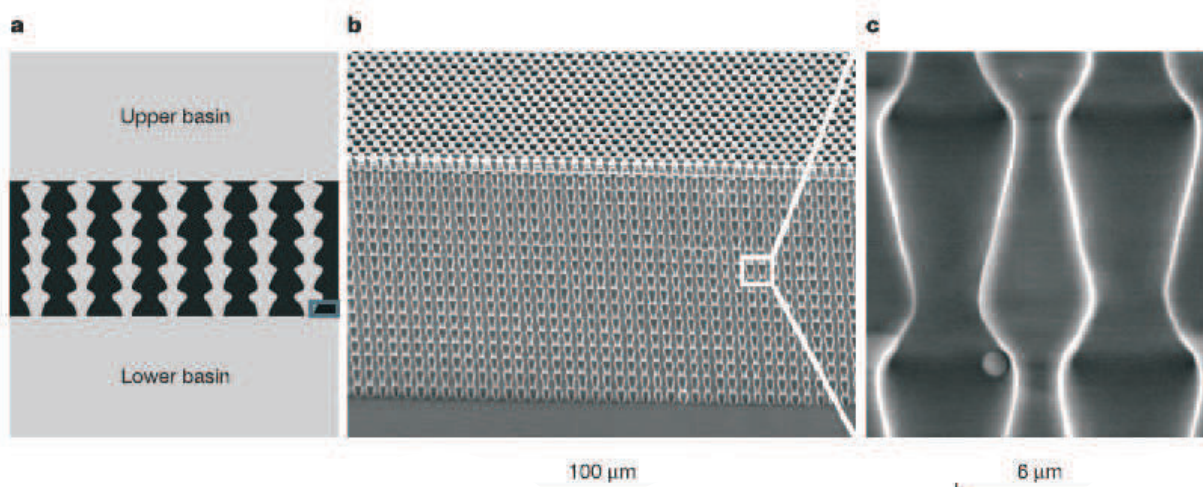


Figura 23: Figura obtida de S. Matthias *et al.* (Nature 424, 54 (2003)) mostrando (a) membranas de silicone capazes de atuar como filtros para partículas massivas com diferentes tamanhos. O processo de transporte nesse sistema depende muito da razão entre o tamanho da abertura e o tamanho da partícula. Ajustando o tamanho da abertura, este sistema pode ser usado na separação de partículas de diferentes tamanhos. (b) Foto obtida por microscopia eletrônica de varredura dos poros assimétricos em uma amostra de silicone. (c) Microscopia eletrônica de varredura obtida em um poro da amostra em (b).

depende da pressão, e que esta dependência pode resultar numa inversão do movimento, como mostrado na Fig. 24.

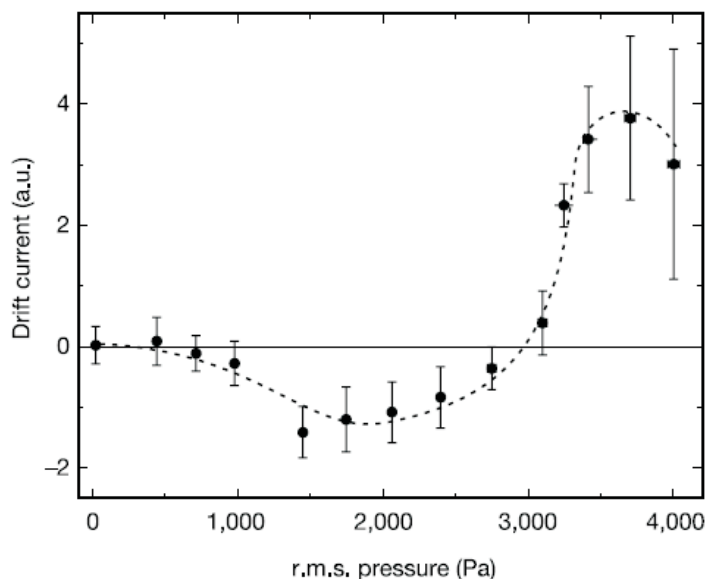


Figura 24: Figura obtida de S. Matthias *et al.* (Nature 424, 54 (2003)), mostrando a dependência da corrente dc obtida por aplicar uma pressão ac no sistema da Fig. 23. Este gráfico mostra uma clara reversão do efeito catraca nestes sistemas.

O efeito catraca também pode ser usado no processo de eletromigração para a obtenção de superfícies mais regulares. Derényi *et al.* (14) mostraram que as superfícies que apresentam uma barreira de Schwoebel, quando submetidas a um campo elétrico alternado *ac* paralelo à superfície, induzem uma corrente devido a eletromigração. Um esquema ilustrando a formação de camadas irregulares no processo de deposição de filmes finos é mostrado na Fig. 25.

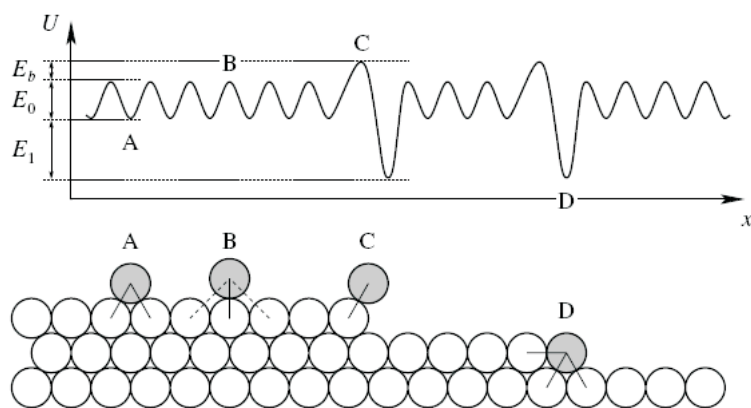


Figura 25: Figura obtida por I. Derényi (Appl. Phys. A **75**, 217 (2002)), mostrando (a) o potencial que um átomo sente ao difundir por uma superfície irregular como mostrado em (b).

Posteriormente, Pablo *et al.* (13) mostraram experimentalmente que esta técnica pode ser empregada na obtenção de filmes finos de ouro com superfícies menos rugosas. Os autores deste trabalho verificaram também que o tamanho do grão cresce gradualmente devido ao aumento da difusão causado pelo aquecimento Joule.

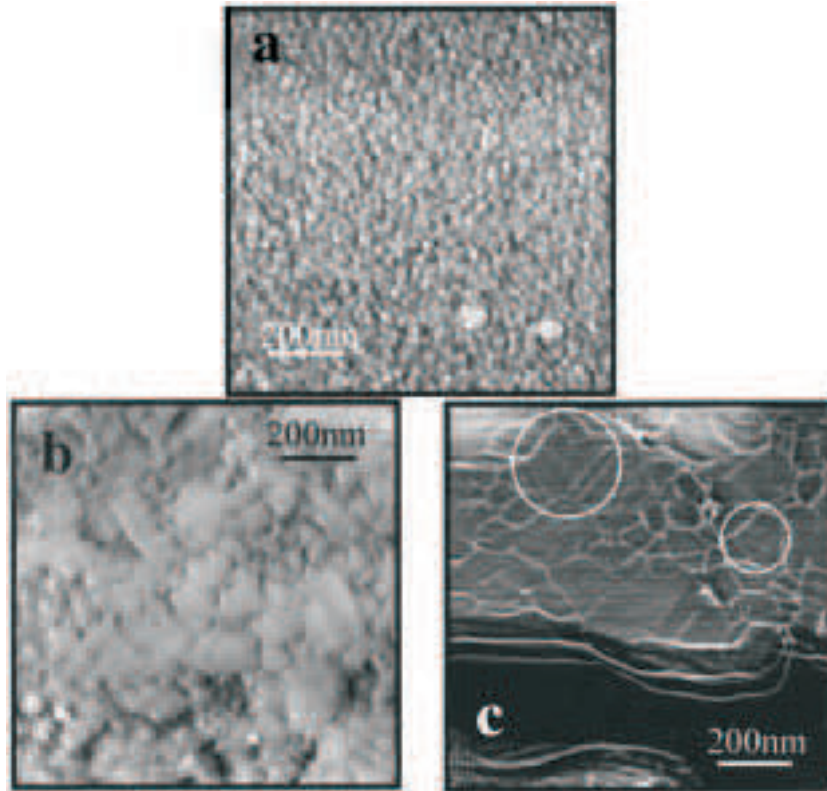


Figura 26: Figura obtida originalmente por P. J. Pablo (Surf. Interface Anal. **30**, 278 (2000)) e adquirida de I. Denényi (Appl. Phys. A **75**,217 (2002)), mostrando a evolução da superfície de uma fita de ouro.(a) Uma estrutura claramente granular pode ser observada em grãos com tamanho de aproximadamente 25 nm , (b) superfície da fita de ouro após $40h$ submetida a uma densidade de corrente dc com $1.6 \times 10^{11}\text{ A m}^{-2}$ com 25 mA , os grãos tiveram um crescimento de aproximadamente 100 nm , (c) a superfície da fita de ouro após 24 h de corrente ac sob os mesmo valores de (b), neste caso pode se observar o crescimento dos grãos, formando terraços como marcado por círculos brancos na amostra.

2 TRANSPORTE DE PARTÍCULAS EM MEIOS SUPERAMORTECIDOS

Neste Capítulo descrevemos a dinâmica de partículas confinadas, interagentes e em movimento superamortecido na presença de um obstáculo contra o fluxo. Modelamos numericamente a dinâmica de vórtices em supercondutores, a dinâmica de sistemas coloidais e o movimento de pedestres. Os obstáculos empregados são uma barreira de energia, uma constricção e uma rede de defeitos (pinos) periódicos. Estudamos o escoamento de partículas em um canal com largura da ordem do comprimento característico do sistema. Usamos o modelo proposto por Zapperi *et al.* (87) para encontrar uma equação diferencial não-linear de primeira ordem capaz de descrever o fenômeno de transportes nestes sistemas no estado estacionário. A solução desta equação diferencial nos dá o comportamento da densidade ao longo do canal.

O modelo proposto em (87) é baseado em um *coarse-graining* da equação de movimento do sistema, baseado na equação de Fokker-Planck. Isto faz com que deixemos de tratar as partículas como objetos discretos e passemos a usar a concentração média das partículas como a única variável relevante do sistema. Em seguida, usamos simulações de dinâmica molecular para testar o nosso modelo e determinar o seu limite de validade. Observamos que mesmo quando temos poucas camadas de partículas interagindo, a aproximação contínua pode ser usada para calcular o perfil de densidade ao longo do sistema, desde que façamos pequenas correções no modelo proposto em (87). Nossa equação diferencial também é integrada numericamente por métodos convencionais de diferenças finitas. Verificamos que a natureza discreta das partículas desempenha um papel fundamental para a resposta desse sistema.

2.1 Transporte de vórtices em supercondutores

2.1.1 Modelo

Modelamos nosso sistema com intuito de descrever a dinâmica dos vórtices em um filme fino supercondutor. Nesse sistema os vórtices podem ser tratados como um sistema bidimensional de partículas em movimento superamortecido (73). A equação de movimento para um vórtice i pode ser escrita como,

$$\eta \mathbf{v}_i = \mathbf{F}_i^{vv} + \mathbf{F}_i^{vp} + \mathbf{F}_i^{ext} + \mathbf{F}_i^T, \quad (2.1)$$

onde $\eta = \Phi_0^2 d / 2\pi \xi^2 \rho_N$ é a viscosidade efetiva, d é a espessura do filme fino, ξ é o comprimento de coerência, ρ_N é a resistividade no estado normal e $\Phi_0 = h/2e$ é o quantum de fluxo magnético. Os termos do lado direito da equação representam a interação partícula-partícula \mathbf{F}_i^{vv} , a interação partícula-parede \mathbf{F}_i^{vp} , a força externa \mathbf{F}_i^{ext} e a força térmica \mathbf{F}_i^T . Para um vórtice i a força vórtice-vórtice é dada, segundo o modelo de London, por,

$$\mathbf{F}_i^{vv} = \sum_{j \neq i}^{N_v} f_0 K_1 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda} \right) \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (2.2)$$

onde $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ são as distâncias entre os vórtices e o vetor unitário que liga os vórtices $i(j)$, respectivamente. $r_{i(j)}$ é a posição do vórtice $i(j)$, $K_1(r_{ij}/\lambda)$ é a função de Bessel modificada de primeira ordem, λ é o comprimento de penetração de London e f_0 é uma constante que depende apenas das propriedades do material. Para uma melhor eficiência computacional (65), a força vórtice-vórtice é calculada apenas quando $r_{ij} < 6\lambda$, sendo que para distâncias maiores a força entre os vórtices pode ser desprezada. Usamos diferentes formas da força \mathbf{F}_i^{vp} para confinar os vórtices em nosso sistema e verificamos que as propriedades medidas independem da forma da força de confinamento. As paredes dos canais responsáveis pelo confinamento são tratadas como barreiras de energia infinita e como partículas pontuais repulsivas, de maneira que a principal característica desta força é a sua natureza de curto alcance. Em geral, a força de confinamento tem um alcance muito menor que a largura dos canais estudados. Considerando a parede como sendo constituída por partículas pontuais, a força de interação partícula-parede pode ser escrita como,

$$\mathbf{F}_i^{vp} = \sum_{j=1}^{N_p} A R_{ij}^3 (R_{ij}^2 - r_r^2)^4 / F_{max}, \quad (2.3)$$

onde r_r é o raio de interação da parede, N_p é o número de partículas repulsivas na parede, R_{ij} é a distância entre os vórtices e as partículas da parede. Por questão de eficiência computacional, consideramos que F_i^{vp} é diferente de zero apenas para $R_{ij} < r_r$. Consideramos ainda que as partículas da parede são separadas por uma distância $d_p = 0.1\lambda$, F_{max} é o fator de normalização e A é a amplitude da força. Nas nossas simulações supomos que a força externa \mathbf{F}^{ext} é constante sobre todas as partículas. Finalmente, a força \mathbf{F}^T devido aos ruídos térmicos é implementada usando o algoritmo de Box-Muller que nos fornece uma distribuição normal com média zero e variância unitária,

$$\langle F_i^T \rangle = 0 \quad (2.4)$$

$$\langle F_i^T(t) F_j^T(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (2.5)$$

A força térmica é usada apenas para obtermos a configuração inicial do sistema, posto que supomos posteriormente que esta força é nula. A força é medida em unidades de $f_0 = \Phi_0^2 d / 2\pi\mu_0\lambda^3$, o campo magnético é medido em unidades de Φ_0/λ^2 e o comprimento é medido em unidades do comprimento de penetração de London λ . A temperatura adimensional é dada por $T = k_B T_{real} / \lambda f_0$.

2.1.2 Propriedades macroscópicas do sistema

Para calcular as propriedades durante as simulações, dividimos nosso sistema em células de comprimento dx e dy onde são feitas as médias das grandezas macroscópicas. São estas a densidade $\rho(x)$, o fluxo de campo magnético $\phi(x)$ e a seção transversal $\sigma(x)$. As propriedades macroscópicas foram medidas usando médias não-paramétricas (27), sendo a densidade local vista com uma grandeza contínua. O *kernel* de nossa média não-paramétrica para um sistema de vórtices em supercondutores é dado pela função de Bessel de ordem zero $K_0(x)$ que nos fornece a densidade de energia magnética do sistema. Neste contexto, o fluxo do sistema é calculado como sendo a média temporal da taxa com que a energia magnética atravessa um plano da seção transversal do nosso sistema,

$$\phi(x) = \frac{dy}{N_T} \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{j=1}^{y_m} \sum_{i=1}^{N_v} K_0\left(\frac{r_{ij}}{\lambda}\right) \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}, \quad (2.6)$$

onde N_T é o número total de passos de tempo, y_m é o número de células ao longo da largura do canal, N_v é o número de vórtices do sistema e $K_0(r_{ij}/\lambda)$ é a função de Bessel modificada de ordem zero. A densidade de fluxo magnético do sistema é calculada como sendo a média temporal da média da densidade de energia magnética do sistema ao

longo da seção transversal e é dada por,

$$\rho(x) = \frac{dy}{N_T} \frac{\sum_{k=1}^{y_m} \left[\sum_{j=1}^{N_T} \sum_{i=1}^{N_v} K_0 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda} \right) \right]^2}{\rho(x)\sigma(x)}. \quad (2.7)$$

Na Eq. (2.7), $\sigma(x)$ é a seção transversal, e o produto $\rho(x)\sigma(x)$, é calculado como sendo,

$$\rho(x)\sigma(x) = \frac{dy}{N_T} \sum_{k=1}^{y_m} \sum_{j=1}^{N_T} \sum_{i=1}^{N_v} K_0 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda} \right). \quad (2.8)$$

Desta forma, a seção transversal pode ser calculada como sendo,

$$\sigma(x) = \frac{dy}{N_T} \frac{\sum_{k=1}^{y_m} \sum_{j=1}^{N_T} \sum_{i=1}^{N_v} K_0 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda} \right)}{\sum_{k=1}^{y_m} \left[\sum_{j=1}^{N_T} \sum_{i=1}^{N_v} K_0 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda} \right) \right]^2}. \quad (2.9)$$

2.1.3 Equação macroscópica para o transporte

A equação macroscópica para o transporte de fluxo magnético obtida anteriormente por Zapperi *et al.* (87) foi explorada nesse trabalho e resolvida analiticamente para o escoamento no estado estacionário da rede de vórtice. Para construir esta equação contínua capaz de descrever a evolução temporal da densidade do sistema $\rho(r, t)$, Definimos a função $P(r_1, r_2, \dots, r_n)$ como a probabilidade de que os vórtices encontrem-se nas posições $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$ em um tempo t . Podemos então escrever a equação de Fokker-Planck para a evolução temporal da distribuição P ,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_i \nabla_i \cdot [-\mathbf{v}_i P + k_B T \nabla_i P], \quad (2.10)$$

onde v_i é a velocidade da partícula i , dada pela equação de movimento. O termo $k_B T \nabla P$ é introduzido para dar conta dos efeitos térmicos. A distribuição P descreve o estado do sistema no espaço das configurações de $2N$ dimensões. Nosso objetivo é determinara evolução da densidade de vórtices $\rho(r, t)$. definida no espaço bidimensional das linhas de fluxo. A densidade média é encontrada somando as contribuições de todas as configurações, onde a função P determina a probabilidade de cada configuração,

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int d^{2N} r' P \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.11)$$

A evolução temporal de $\rho(\mathbf{r}, t)$ pode, então, ser relacionada com a derivada temporal da distribuição P ,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int d^{2N} r' \frac{\partial P}{\partial t} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.12)$$

Substituindo a Eq. (2.10), obtém-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \int d^{2N} r' \sum_i \nabla'_i \cdot (-\mathbf{v}'_i P + k_B T \nabla'_i P) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.13)$$

Operando com a delta de Dirac nas derivadas espaciais, podemos reescrever essa equação na forma,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \sum_i \int d^{2N} r' \mathbf{v}'_i P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) + k_B T \nabla_i^2 \int d^{2N} r' P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.14)$$

e substituindo a definição de $\rho(x, t)$ dada pela Eq. (2.23), obtemos,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \sum_i \int d^{2N} r' \mathbf{v}'_i P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) + k_B T \nabla_i^2 \rho. \quad (2.15)$$

onde fica evidente a forma difusiva da contribuição térmica.

A velocidade v_i é definida pela equação de movimento superamortecida Eq. (2.1), tomando apenas os termos que contribuem para o escoamento podemos escrever,

$$\eta \mathbf{v}_i = \frac{\mu_0 \Phi_0^2}{2\pi \lambda^3} \sum_{j \neq i} K_1 \left(\frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\lambda} \right) \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \mathbf{F}_i^{ext}. \quad (2.16)$$

Neste ponto, a Eq. (2.15) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{j}_v + \mathbf{j}_e) + k_B T \nabla_i^2 \rho. \quad (2.17)$$

onde \mathbf{j}_v e \mathbf{j}_e são, respectivamente, as contribuições devido a ação dos vórtices e da força externa à corrente de escoamento do fluxo magnético.

Para a parcela referente a força externa temos que,

$$\mathbf{j}_e = \frac{1}{\eta} \rho \mathbf{F}^{ext}. \quad (2.18)$$

De forma semelhante a contribuição da interação entre os vórtices para a corrente de escoamento do fluxo magnético é dada por,

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \sum_i \int d^{2N} r' \sum_{j \neq i} \mathbf{F}(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j) P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (2.19)$$

onde a função $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 \Phi_0^2}{2\pi \lambda^3} \sum_{j \neq i} K_1 \left(\frac{|\mathbf{r}|}{\lambda} \right) \hat{\mathbf{r}}$ é a interação entre os vórtices. Atuando com uma delta de Dirac no argumento da função F , obtemos

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \sum_i \int d^{2N} r' \sum_{j \neq i} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j) P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.20)$$

Substituindo o termo r'_i dentro da integral pela forma equivalente,

$$\mathbf{r}'_j = \int d^{2N} r'' \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'_j), \quad (2.21)$$

chegamos a

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \int d^{2N} r'' \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \int d^{2N} r' \sum_i \sum_{j \neq i} P \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_j) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.22)$$

Definindo agora a função densidade de dois vórtices,

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t) = \int d^{2N} r' \sum_i \sum_{j \neq i} P \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_j) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (2.23)$$

podemos escrever a contribuição dos vórtices na forma,

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \int d^{2N} r'' \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t). \quad (2.24)$$

Fazendo agora uma aproximação de campo médio para a densidade de dois vórtices, ou seja, $\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t) = \rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}'', t)$, podemos escrever,

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \rho(\mathbf{r}, t) \int d^{2N} r'' \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \rho(\mathbf{r}'', t). \quad (2.25)$$

Sabemos que a interação $\mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')$ entre os vórtices é de curto alcance, indo rapidamente a zero quando se toma distâncias maiores que o comprimento de London, λ . Não se espera que a densidade de fluxo varie consideravelmente na região do espaço que contribui para a integral (4.21). Podemos, então, supondo que a função $\rho(\mathbf{r})$ varie lentamente, expandir em torno de \mathbf{r} é tomar apenas os termos até primeira ordem.

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \rho(\mathbf{r}, t) \int d^{2N} l \mathbf{F}(\mathbf{l}) [\rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \rho(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{l}], \quad (2.26)$$

onde $\mathbf{l} = \mathbf{r}'' - \mathbf{r}$. Devido a simetria axial da função \mathbf{F} , o termo de ordem zero se anula. Quanto ao termo de primeira ordem, as contribuições perpendiculares a $\nabla \rho$ se anulam, restando apenas as contribuições na direção do gradiente. Temos, então,

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} \rho \nabla \rho \left(\frac{1}{2} \int d^{2N} l \mathbf{F}(\mathbf{l}) \cdot \mathbf{l} \right), \quad (2.27)$$

ou ainda,

$$\mathbf{j}_v = \frac{1}{\eta} a \rho \nabla \rho, \quad (2.28)$$

onde $a = \frac{1}{2} \int d^{2N} l \mathbf{F}(\mathbf{l}) \cdot \mathbf{l} = \Phi_0^2 / \mu_0$.

Incorporando as contribuições dos vórtices Eq. (2.28) e da força externa Eq. (2.18) à corrente de fluxo magnético, podemos, determinar a evolução temporal da densidade de

vórtices,

$$\eta \frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot [(\rho(a\nabla\rho - \mathbf{F}^{ext}))] + k_B T \nabla_i^2 \rho. \quad (2.29)$$

onde F^{ext} é a força externa sobre os vórtices.

Esta equação pode ser interpretada como um equação de difusão-convecção

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} + k_B T \nabla_i^2 \rho. \quad (2.30)$$

onde a corrente de fluxo magnético é identificada como $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$, e \mathbf{v} é a velocidade local de escoamento de campo. A velocidade é determinada pela força aplicada a um vórtice nesta região do supercondutor. Observamos que, na descrição macroscópica, a força devida aos demais vórtices pode ser determinada pelo gradiente local de concentração de vórtices, $-\nabla\rho$.

Para construir a equação contínua, precisamos fazer algumas considerações com relação ao nosso sistema. Nossa descrição não pode descrever variações na densidade que tenham comprimento característico menor que a distância entre as partículas r_{ij} . O comprimento de interação é suficientemente grande, $\lambda > r_{ij}$, de forma que cada vórtice pode interagir com vários vórtices ao seu redor.

Para o estado estacionário, $\partial\rho/\partial t = 0$, em temperatura nula $T = 0$ e considerando $\eta = 1$ a Eq. (2.29) pode ser escrita como,

$$\rho(a\nabla\rho - F) = J. \quad (2.31)$$

A conservação do número de vórtices impõe que a corrente de vórtice J no estado estacionário seja constante. A Eq.(2.31) é conhecida como uma equação diferencial de Abel de segundo tipo (62). Para resolver esta equação analiticamente levamos em consideração que a variação da velocidade na direção perpendicular ao movimento (na direção y) quase não é alterada no estado estacionário, exceto nas proximidades da constricção, quando houver. Sendo assim, podemos aproximar a Eq. (2.31) para descrever o movimento em 1D. Cálculos unidimensionais em outros sistemas, como no movimento de pedestres, podem ser usados para descrever sistemas 2D (59). Resolvendo a Eq. (2.31) neste limite, podemos escrever a solução para a densidade ao longo do canal como,

$$\rho(x) = \frac{J}{F} \left[1 + W \left[\exp \left(-1 + \frac{\rho_0 F}{J} + \frac{F^2}{aJ} x \right) \left(\frac{\rho_0 F}{J} - 1 \right) \right] \right], \quad (2.32)$$

onde ρ_0 é o valor da densidade de fluxo magnético no início do canal distante do obstáculo,

J é a corrente de vórtice e F é o módulo da força externa. $W(x)$ é a função W-Lambert, que é dada pela solução principal para W na equação $x = We^W$.

Os obstáculos podem ser usados para aprisionar o fluxo da rede de vórtices desde que a força externa seja suficientemente pequena. Nesta situação, $J = 0$, e a solução da Eq.(2.31) pode ser escrita como,

$$\rho(x) = \frac{F}{a}(x - x_0) , \quad (2.33)$$

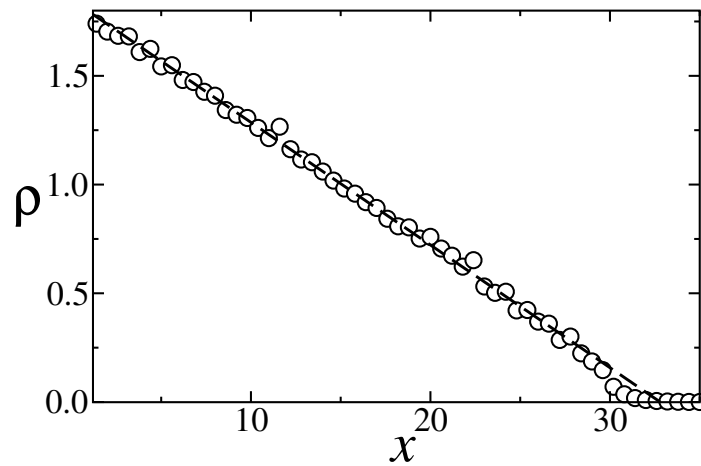
onde x_0 é o valor de x no qual a densidade vai a zero. Quando a força imposta pelo obstáculo é muito menor que a força externa, os vórtices escoam quase sem sentir os obstáculos. Experimentalmente (8) foi verificado que quando os vórtices escoam em uma amostra com uma rede de pinos periódica, este sistema apresenta uma transição de fase dinâmica para altos valores da corrente (força externa). Nesta fase, conhecida como “*moving glass*”, os vórtices não sentem a presença dos centros de pinos e escoam numa estrutura “vítrea” desordenada. Neste limite, os obstáculos impostos para o transporte de vórtices não podem produzir nenhuma variação na densidade local. Desta forma, podemos supor que o gradiente de concentração é nulo ($\nabla\rho \rightarrow 0$). Sendo assim, a solução da Eq. (2.31) pode ser escrita como,

$$\rho(x) = \frac{J}{F} . \quad (2.34)$$

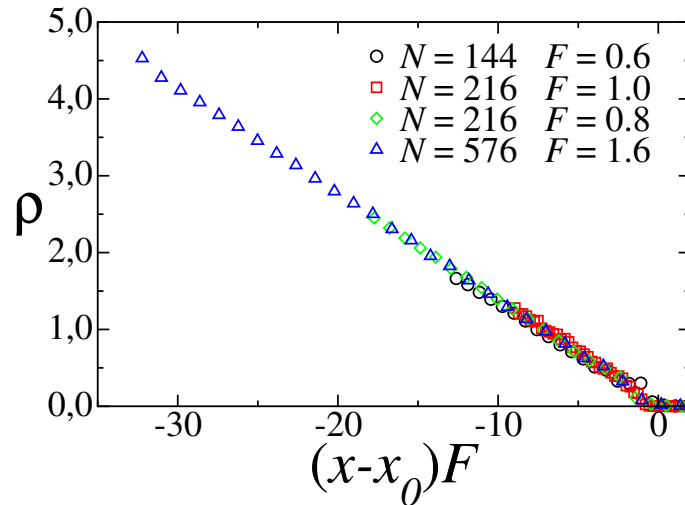
2.1.4 Propriedades estáticas (sistema fechado)

Iniciamos nossos estudos analisando o comportamento da rede de vórtices num canal fechado em todas as direções, submetida a uma força externa F contra a parede em $x = 0$. Inicialmente os vórtices são distribuídos aleatoriamente dentro do canal. Em seguida, aplicamos uma força externa e deixamos o sistema evoluir no tempo através de simulações de dinâmica molecular até alcançar o estado de equilíbrio mecânico, quando é medido o perfil de densidade. No estado de equilíbrio mecânico, o fluxo Φ e consequentemente a corrente de vórtice J são nulos. Quando $J = 0$, a solução da equação que descreve a dinâmica de nosso sistema no estado estacionário Eq. (2.31) é dada pela Eq. (2.33). Esta solução nos fornece um perfil de densidade linear com um coeficiente angular F/a , onde F é a força externa e a é o parâmetro do nosso modelo, cujo valor é dado pela Eq. (??). Para um sistema aberto com condição de contorno periódica em todas as direções, Zapperi *et al.* (87) mostraram que $a = 2\pi f_0 \lambda^3 / \Phi_0$.

Realizamos um grande número de simulações neste sistema variando o número de



(a) Perfil de densidade



(b) Perfil de densidade normalizado

Figura 27: (a) Perfil de densidade para uma rede de vórtices em um canal fechado em todas as direções, submetida a uma força externa F contra a parede em $x = 0$. Este resultado foi obtido por simulações de dinâmica molecular após o sistema atingir o estado de equilíbrio mecânico. Os resultados mostrados nesta figura são para uma rede com $N = 576$ vórtices em um canal com largura $L = 4.0 \lambda$, submetidos a uma força externa $F = 1.0 f_0$ contra a parede em x_0 . (b) Perfil de densidade ao longo do canal para diferentes valores da força externa e diferentes número de vórtices. Podemos notar que os perfis de densidade colapsam em uma mesma curva, mostrando que o parâmetro a é invariante para um grande intervalo de valores da densidade e da força externa.

vórtices N , a força externa F e a largura do canal L . Para todos os casos, obtivemos um perfil de densidade linear como mostrado na Fig. 27(a). Fazendo o ajuste linear deste perfil de densidade, podemos calcular o parâmetro a e o parâmetro x_0 que nos fornecem o valor de x no qual a densidade vai a zero. Nossos resultados mostram que o parâmetro a é invariante para um grande intervalo de valores da densidade e da força externa. Na Fig. 27(b) fizemos uma renormalização das curvas obtidas por simulações de dinâmica molecular usando os valores de x_0 e da força externa F . Com isso, mostramos que todos os perfis de densidade colapsam numa mesma curva. Os valores de a obtidos para canais com larguras da ordem de λ não concordam com o valor previsto por Zapperi *et al.* (87) para um sistema aberto com condição de contorno periódica em todas as direções. Atribuímos este desvio à influência da energia de superfície introduzida pelo confinamento. Quando pelo menos uma dimensão do sistema é da mesma ordem de algum comprimento característico, condição necessária para um sistemas mesoscópico, a energia de superfície passa a desempenhar um papel importante, tornando-se até mesmo dominante nas propriedades destes sistemas.

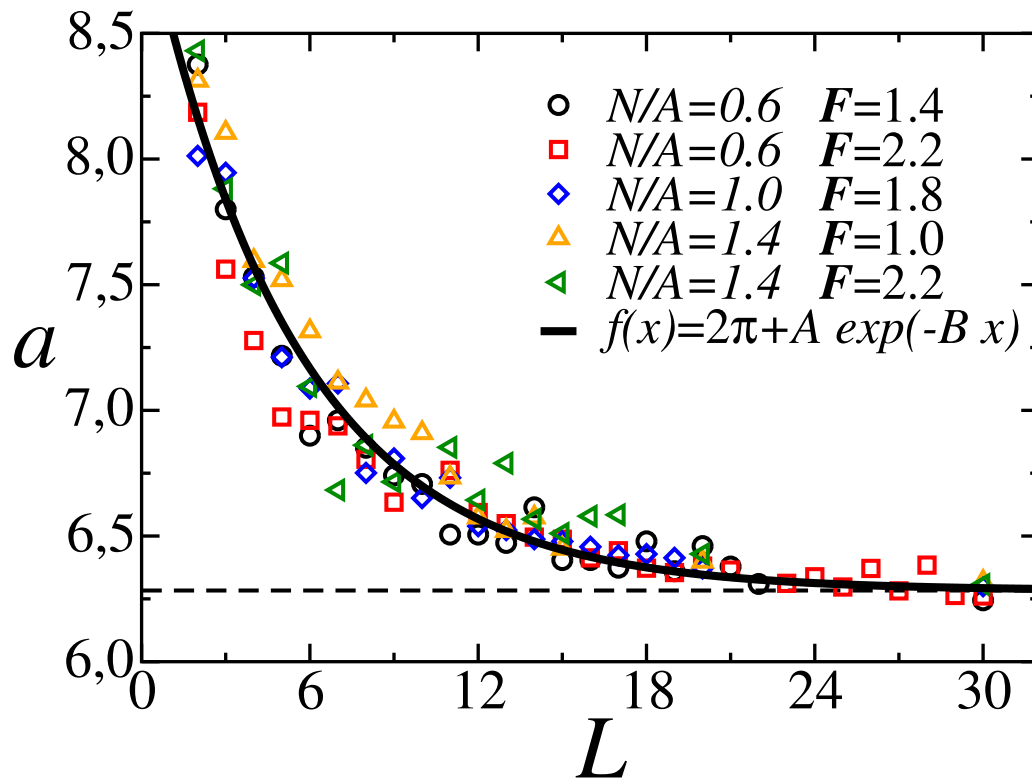


Figura 28: Parâmetro a em função da largura do canal para diferentes valores da densidade e da força externa. A linha preta contínua descreve o ajuste das curvas obtidas através de simulações de dinâmica molecular por uma função contínua. Os parâmetros do ajuste são $A = 2.74$ $B = 0.19$. A linha preta tracejada representa o valor obtido por Zapperi *et al.* para um sistema aberto.

O comportamento do parâmetro a com a largura do canal é mostrado na Fig. 28, onde os resultados são obtidos mantendo a razão entre o número de vórtices e a área do canal fixa ($N/A = \text{const.}$) quando variamos a largura do canal. Podemos notar que o valor de a se aproxima do valor previsto por Zapperi *et al.* (87) para canais com larguras maiores que 30λ . As curvas do parâmetro a em função do comprimento apresentada na Fig. 28 foram ajustadas por uma função contínua $f(x) = 2\pi + A \exp(-Bx)$, possibilitando que conheçamos o valor de a para canais de quaisquer larguras. Neste caso, os valores dos parâmetros obtidos no ajuste são $A = 2.74$ e $B = 0.19$. Observamos ainda que a configuração dos vórtices após encontrarem o estado de equilíbrio mecânico é governada por dois diferentes mecanismos: um para o interior da amostra (*Bulk*) e outro para as bordas. No interior do sistema observamos que os vórtices são distribuídos segundo uma configuração na qual o número de camadas decresce gradualmente ao longo da direção x . Este mecanismo foi observado em outros sistemas, como em colóides (45) e em cristais de Wigner (61). Além disso, devido à forte repulsão entre os vórtices e à natureza mesoscópica do canal, observamos que os vórtices nas bordas apresentam um gradiente de concentração ao longo da direção x . Esta configuração faz com que a energia seja mínima neste sistema.

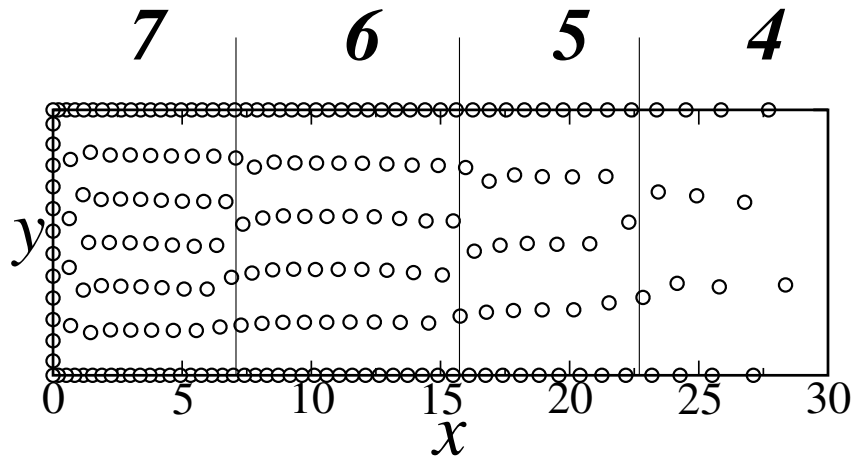


Figura 29: Configuração final para uma rede com $N = 216$ de vórtices, confinados em todas as direções, em um canal de largura $L = 4\lambda$ sofrendo a ação de uma força externa $F = 1.0 f_0$. Podemos notar que existem dois diferentes comportamentos para a configuração dos vórtices neste sistema: um para o interior da amostra, onde o mecanismo de redução de camadas pode ser verificado, e outro para as borda do material, onde há um gradiente da concentração de vórtices na direção x .

2.1.5 Propriedades dinâmicas

Nesta Seção, estendemos o modelo usado na seção anterior para descrever o comportamento dinâmico da rede de vórtices, $J \neq 0$. Para isto, consideramos uma rede na qual os vórtices são forçados a se movimentar através de um canal com algum obstáculo para o escoamento. Precisamente, os obstáculos aqui considerados são de natureza geométrica na forma de uma constricção, ou produzidos artificialmente, como barreiras de energia ou centros de pinos. A produção destes obstáculos torna-se factível em laboratórios usando técnicas de litografia por feixe de elétrons e técnicas de crescimento de filmes finos como *sputtering*.

2.1.5.1 Barreira de energia

O primeiro obstáculo que estudamos foi uma barreira de energia. Experimentalmente esta barreira de energia pode ser obtida através de interfaces entre filmes finos supercondutores do mesmo material com diferentes espessuras ou pela interface entre filmes finos de materiais supercondutores diferentes. Na Fig. 30 mostramos tanto o modelo usado para estudar numericamente este caso, como também a densidade do canal em código de cores. Em nossas simulações, medimos uma seção transversal efetiva que é maior que a

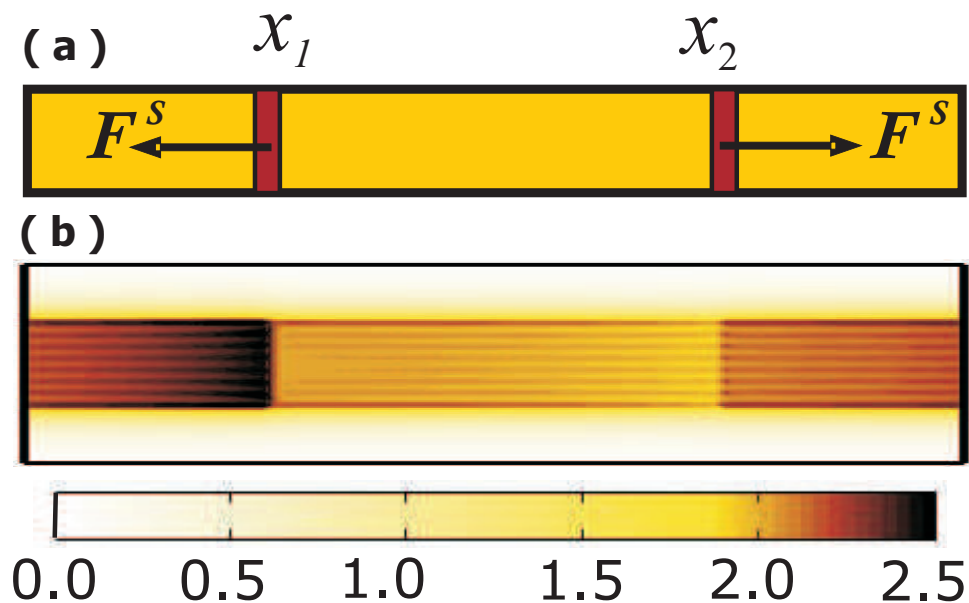


Figura 30: (a) Modelo usado para estudar o comportamento dinâmico da rede de vórtices escoando por um canal com uma barreira de energia como obstáculo para o fluxo. A força devido ao obstáculo F^S só atua sobre os vórtices numa pequena faixa de comprimento localizada em x_1 e x_2 . (b) Densidade ao longo do canal é mostrada em código de cores.

seção transversal do canal. Experimentalmente, P. Kes *et al.* (63) mostraram que quando os vórtices estão escoando através de um canal mesoscópico, o fluxo da rede de vórtices tem lugar através de um canal de largura efetiva maior que a largura real do canal.

Nosso objetivo nesta Seção é verificar se o valor do parâmetro a obtido no caso estático pode ser usado para descrever a densidade em sistemas confinados com $J \neq 0$. Os obstáculos são usados para induzir uma variação local da densidade. Por simplicidade, consideramos condições de contorno periódicas na direção do fluxo (direção x). Os perfis de densidade foram medidos após o sistema alcançar o estado estacionário. Na Fig. 31 apresentamos os perfis de densidade por meio de simulações de dinâmica molecular para uma rede de vórtices escoando através de um canal mesoscópico com uma barreira de energia ΔU contra o fluxo. As linhas tracejadas (vermelhas) representam os resultados obtidos por integração numérica da Eq. (2.31).

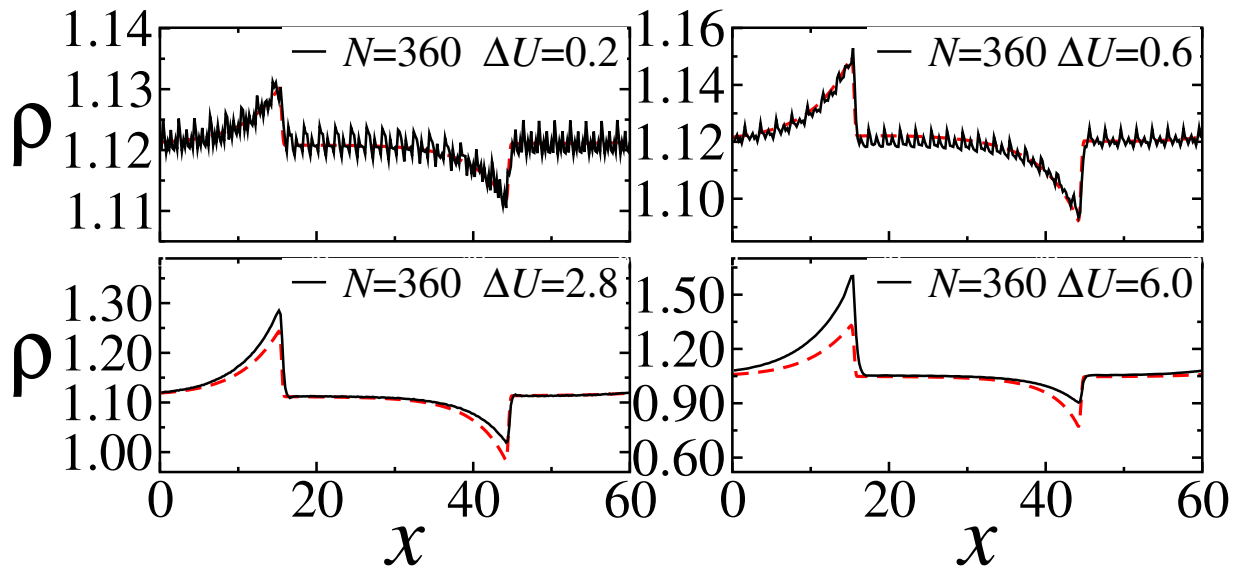


Figura 31: Comparação dos resultados obtidos por dinâmica molecular, para um canal com uma barreira de energia como obstáculo para o fluxo, com os resultados obtidos por integração numérica da Eq. (2.31). Para diferentes valores da energia da barreira ΔU e diferentes números de vórtices N .

A integração numérica de nossa equação diferencial (Eq. 2.31) foi feita por métodos convencionais de diferenças finitas, supondo que a força que atua sobre os vórtices é dada pela expressão $F + \Delta U\delta(x - x_1) - \Delta U\delta(x - x_2)$, onde F é a força externa e os outros dois termos são as forças do substrato, responsáveis por introduzir os efeitos da barreira de energia ΔU . Os perfis de densidade obtidos para este sistema dependem da força externa F , da interação vórtice-vórtice e da força do substrato responsável pela barreira de energia atuando apenas nos pontos x_1 e x_2 (ver Fig. 30).

Os resultados obtidos por integração numérica e por dinâmica molecular concordam perfeitamente quando a barreira de energia imposta pelo obstáculo ΔU é suficientemente pequena. No entanto, à medida que a energia da barreira cresce, os resultados obtidos por integração numérica e por dinâmica molecular começam a divergir. Isto pode ser atribuído ao fato de que a força do substrato na interface varia muito mais rápido que a distância entre os vórtices. Sendo assim, fica claro que a natureza discreta dos vórtices desempenha papel fundamental na descrição do perfil de densidade desses sistemas.

Na Fig. 32 mostramos o ajuste das curvas obtidas por dinâmica molecular através da solução analítica do modelo contínuo, Eq. (2.32). Ajustamos cada seção do canal separadamente, antes e depois do obstáculo. Os efeitos provenientes da inserção do obstáculo foram incluídos nas condições de contorno. A força externa F é constante em cada seção do canal, ao contrário dos parâmetros ρ_0 e J , que precisam ser determinados separadamente. Assim, os parâmetros ρ_0 e J são os parâmetros de ajuste. É importante notar que os parâmetros ρ_0 e J não estão totalmente livres em cada seção, pois a conservação do número de vórtices implica que a corrente de vórtice J seja a mesma em cada seção do canal. As condições de contorno periódicas do sistema também impõem que o número de vórtices seja constante $N = L \int \rho(x) dx$. Isto nos fornece uma relação entre os valores de ρ_0 em cada seção, fazendo com que o ajuste do perfil de densidade tenha apenas dois parâmetros livres.

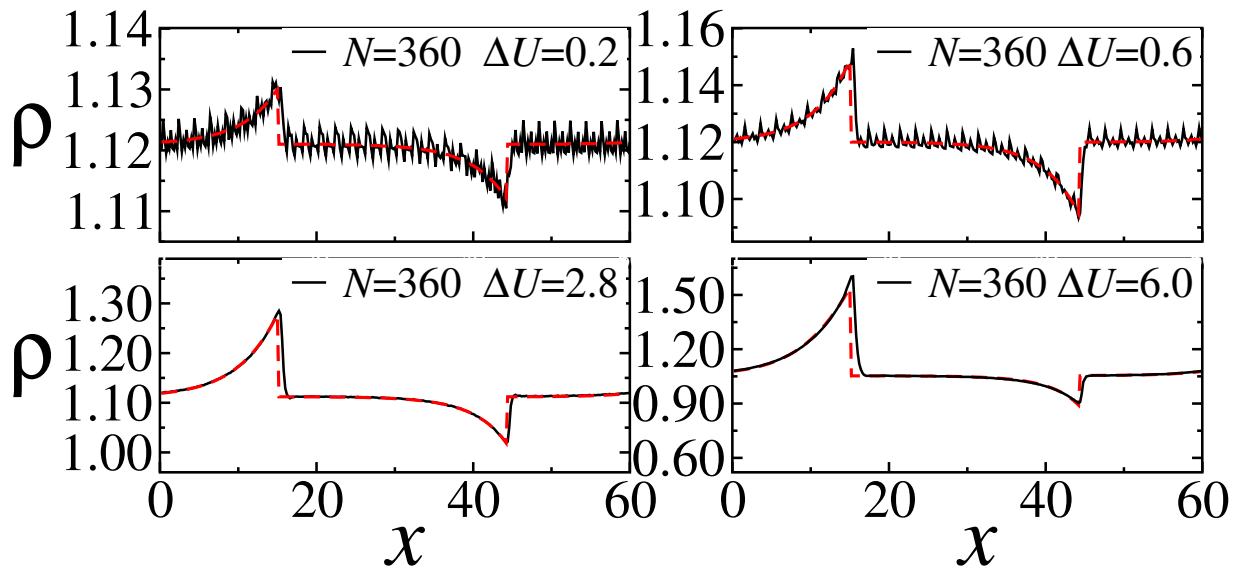


Figura 32: Ajuste das curvas obtidas por dinâmica molecular (preta) com a solução analítica do nosso modelo dada pela Eq. (2.32) (vermelha).

Podemos ver que as curvas obtidas por simulações de dinâmica molecular podem ser

perfeitamente ajustadas pela solução analítica de nosso modelo, mesmo no caso onde as soluções numéricas divergem. Os valores de J obtidos através dos ajustes usando a Eq. (2.32), e por simulações de dinâmica molecular, estão em concordância até a segunda casa decimal, como mostra a Tabela 1.

	J (DM)	J (Ajuste)
$N = 24 \quad \Delta U = 0.6$	0.14196735	0.14200000
$N = 120 \quad \Delta U = 0.6$	0.71920997	0.71800000
$N = 360 \quad \Delta U = 0.6$	2.24040036	2.23991036
$N = 360 \quad \Delta U = 0.2$	2.24212194	2.24197210
$N = 360 \quad \Delta U = 2.8$	2.22573083	2.22344230
$N = 360 \quad \Delta U = 6.0$	2.10952776	2.10864600

Tabela 1: Tabela com os valores da corrente de vórtice J obtidas pelas simulações de dinâmica molecular e pelos ajustes das curvas de dinâmica molecular com a Eq. (2.32).

2.1.5.2 Transporte de vórtices através de um canal com uma constrição

Para verificar se o parâmetro a obtido no caso estático pode ser usado para ajustar os perfis de densidade obtidos por diferentes obstáculos, estudamos a dinâmica de vórtices em um canal mesoscópico com uma constrição como obstáculo para o escoamento. Neste caso, teremos diferentes valores de a , de acordo com a seção transversal do canal. A Fig. 33 mostra esquematicamente o canal com uma constrição utilizado nesta Seção,

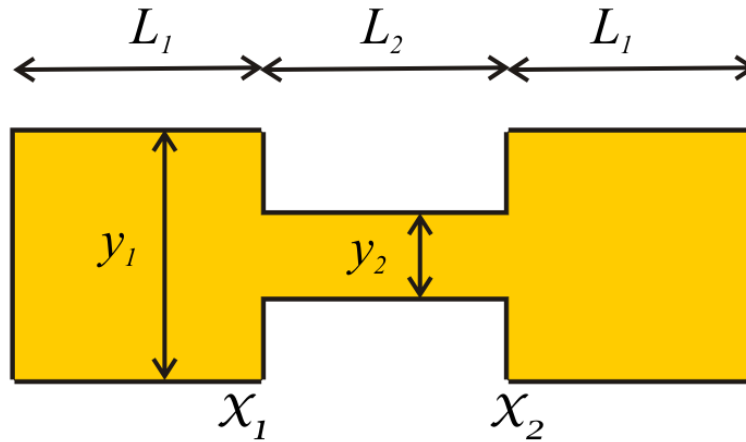


Figura 33: Modelo do canal com uma constrição, usada como obstáculo para o fluxo.

Para vincular os parâmetros de cada seção transversal do canal, levamos em conta que no estado estacionário o fluxo de vórtices é constante e, como não há fontes ou sorvedouros

no sistema, o número de vórtices também deve ser conservado. Sendo assim, os vínculos do sistema nos dão as relações,

$$J_1 y_1 = J_2 y_2, \quad (2.35)$$

$$L_1 \int \rho_1(x) dx + L_2 \int \rho_2(x) dx = N. \quad (2.36)$$

O valor de a para cada seção do canal é obtido usando a função que ajusta os valores de a para um canal fechado, como mostrado na Fig. 28. Nas equações de vínculos anteriores, os índices 1 e 2 indicam as propriedades do canal largo e da constricção, respectivamente. O perfil de densidade obtido por simulações de dinâmica molecular, bem como o ajuste desta curva pela Eq. (2.32), são mostrados na Fig. 34(a).

É importante notar que a solução do nosso modelo dada pela Eq. (2.32), obtida para um sistema unidimensional, é capaz de descrever a dinâmica em sistemas bidimensionais mesmo com as seções transversais variando. Os resultados obtidos para o perfil de densidade e para a seção transversal do canal com uma constricção são apresentados na Fig. 34.

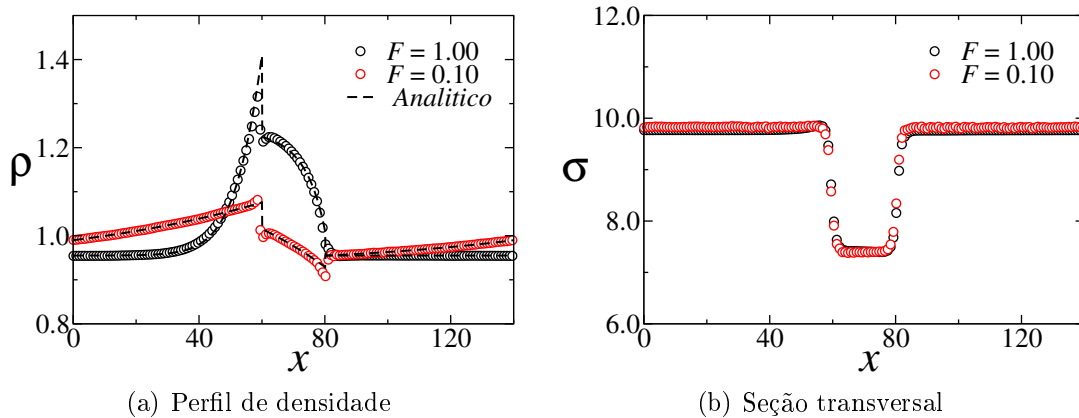


Figura 34: (a) Ajuste das curvas obtidas por dinâmica molecular com a solução analítica de nosso modelo, em um canal com uma constricção para duas forças diferente. Os círculos representam os resultados obtidos por simulações de dinâmica molecular e as linhas tracejadas representam os ajustes analíticos feitos com a Eq. (2.32). Os resultados aqui mostrados são para um canal com $N = 1333$ e com seção transversal $y_1 = 8.0$ e $y_2 = 5.5$. (b) Curvas obtidas para a seção transversal efetiva do canal para duas forças diferentes e com o perfil de densidade mostrado na Fig. 34(a). A seção transversal efetiva encontrada foi $y_1 = 9.76$ e $y_2 = 7.41$ para $F = 1.0$ e $y_1 = 9.82$ e $y_2 = 7.40$ para $F = 0.10$. Os valores encontrados são maiores que a seção transversal do canal $y_1 = 8.0$ e $y_2 = 5.5$.

Podemos observar que, para forças externas suficientemente baixas, o perfil de den-

sidade é aproximadamente linear. Neste limite, o perfil também pode ser dado pela Eq. (2.33, obtida no limite $J \rightarrow 0$). A Fig. 34(b) mostra que a seção transversal efetiva, por onde passa o fluxo magnético, é maior que a seção transversal do canal. Este fato também foi observado por Kes *et al.* (63) para vórtices escoando em um canal mesoscópico. Canais com uma constrição têm sido sugeridos como um dispositivo para o aprisionamento de partículas interagentes, *i.e.*, vórtices em supercondutores, cristais de Wigner, *etc.* Esta geometria é conhecida por apresentar um mecanismo de fraco aprisionamento (61). Aplicando um arranjo de campos cruzados nas proximidade da constrição, acreditamos ser possível controlar a densidade de campo magnético, bem como o fluxo de vórtices neste sistema.

2.1.5.3 Rede de pinos

Apesar dos materiais supercondutores já terem possibilitado alguns avanços tecnológicos importantes, como na construção de equipamentos de ressonância nuclear magnética (RMN), no desenvolvimento de equipamentos aeroespaciais, no transporte de energia e na construção de trens de levitação magnética, o uso destes materiais em aplicações de grandes escala, acessíveis à maior parte da população, ainda é muito limitado. Isto ocorre, primeiramente, devido ao uso de temperaturas extremamente baixas, fazendo com que os custos destes sistemas sejam extremamente altos. Além disso, a maioria dos materiais supercondutores usados para desenvolver as aplicações são do tipo II, permitindo que a fase supercondutora e os vórtices coexistam numa ampla faixa de campo magnético. Quando submetidos a uma corrente externa, os vórtices são susceptíveis a uma força de Lorentz, que faz com que eles se movimentem dissipando energia e introduzindo ruído neste sistema. Muitos estudos nestes materiais foram feitos tentando melhorar as suas propriedades. Em geral, estes estudos visavam aprisionar a rede de vórtices empregando centros de pinos artificiais. Neste contexto foi mostrado que a corrente crítica cresce com a introdução destes centros de pinos, possibilitando a obtenção de campos magnéticos mais elevados.

Nos últimos anos, a dinâmica de vórtices em supercondutores na presença de centros de pinos tem sido explorada na tentativa de desenvolver novos dispositivos eletrônicos. Vários comportamentos interessantes foram observados, especialmente quando o sistema é colocado na presença de arranjos de campos eletromagnéticos cruzados, e na presença de diferentes configurações da rede de pinos. Dentre as propriedades observadas, podemos destacar o uso destes sistemas para a retificação da corrente de vórtices (diodo).

Nas próximas Seções mostraremos os resultados obtidos para o transporte de vórtices confinados em um canal e na presença de uma rede de pinos espaçados periodicamente no centro do canal, como mostrado na Fig. 35. Inicialmente, trataremos os centros de pinos

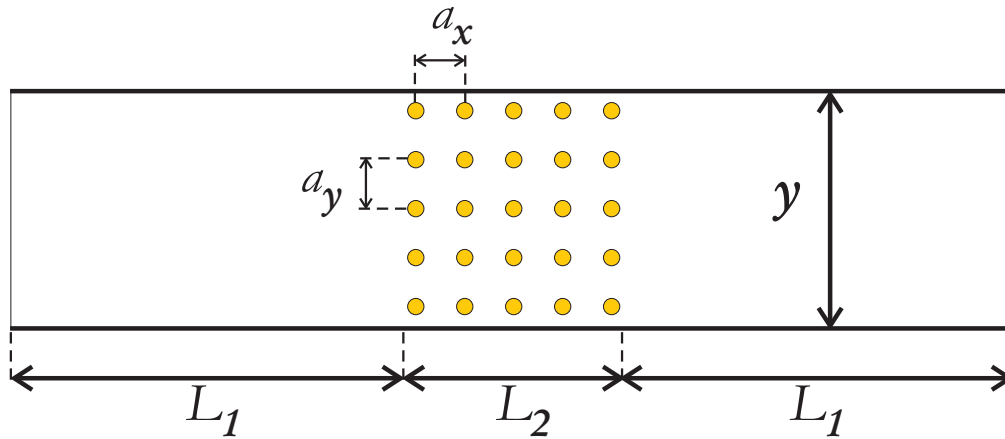


Figura 35: Modelo de um canal com uma rede de pinos como obstáculo para o fluxo. Consideramos o potencial de interação entre os pinos e os vórtices como sendo: 1) um potencial de atração infinito, 2) um potencial de atração finito.

como centros de ancoragem com potencial infinito. Consideraremos que cada centro de ancoragem tem a capacidade de aprisionar somente um vórtice e que a interação entre os centros de ancoragem (vórtices pinados) e os vórtices em movimento é sempre repulsiva. Por simplicidade, supomos que a interação entre os vórtices e os centros de ancoragem é dada pela interação vórtice-vórtice. Finalmente, os pinos são centros de ancoragem com força de aprisionamento finita e com a interação entre os vórtices e os pinos dada por:

$$\mathbf{F}_i^{vp} = \sum_{j=1}^{N_p} AR_{ij}^3 (R_{ij}^2 - r_r^2)^4 / F_{max}, \quad (2.37)$$

onde N_p é o número de partículas que compõem a parede, A é a amplitude máxima da força, R_{ij} é a distância entre os vórtices e as partículas da parede, r_r é a distância máxima em que os vórtices interagem com as partículas da parede, e F_{max} é o fator de normalização desta força. Para distâncias maiores que r_r assumimos que esta força é nula. Neste caso, os pinos atuam como armadilhas para os vórtices, atraindo-os com uma força finita. Dependendo da concentração de vórtices e da força externa os vórtices aprisionados podem escapar dos pinos e entrar em movimento.

2.1.5.4 Rede de pinos com potencial infinito

Aqui estudamos as propriedades de transporte da rede de vórtices em um canal mesoscópico, contendo uma rede de pinos com potencial de aprisionamento infinito, como

descrito na Seção anterior. Verificamos também o comportamento deste sistema para diferentes valores da força externa.

A Fig. 36(a) mostra os perfis de densidade para diferentes valores da força externa. Observamos que, para valores da força externa suficientemente pequenos, o perfil de densidade é linear. Neste caso, a rede de vórtices está aprisionada e apresenta um fluxo nulo, como mostrado na Fig. 36(b). Usando os valores do parâmetro a obtidos anteriormente para o caso estático, fazemos o ajuste do perfil de densidade usando a Eq. (2.32), como mostrado na Fig. 36(c).

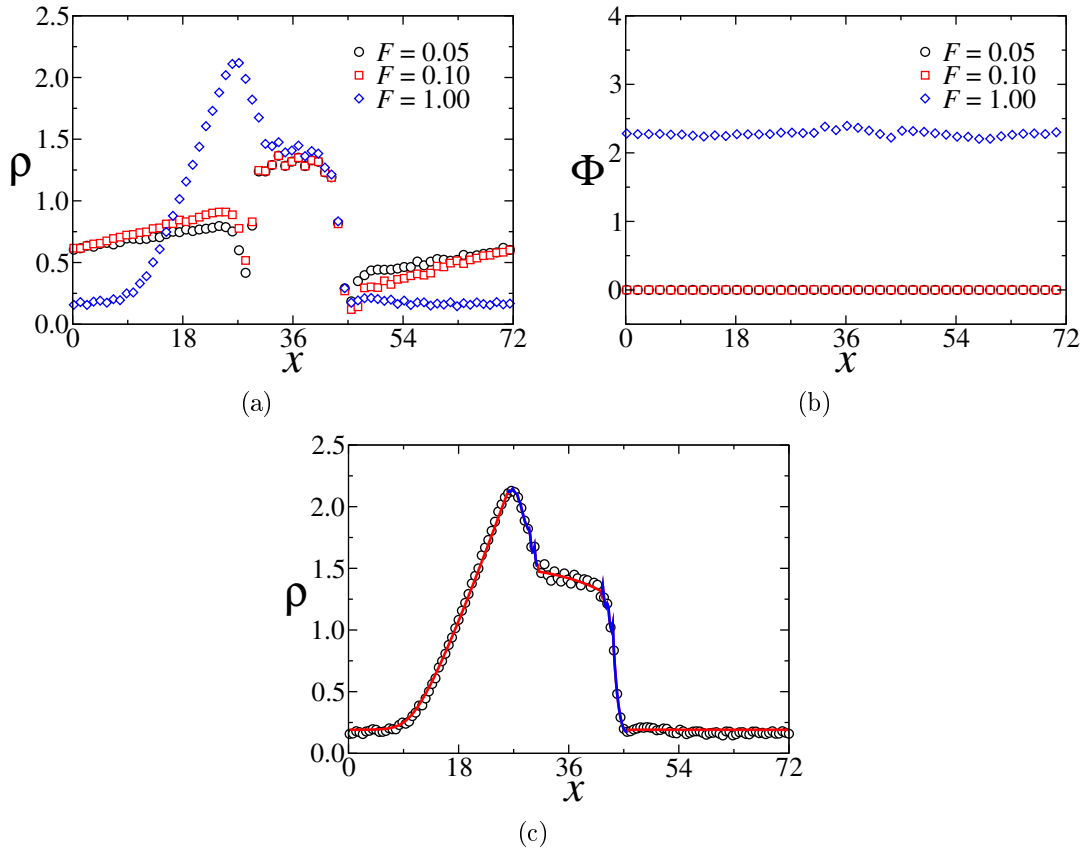


Figura 36: Gráficos obtidos para uma rede de vórtices escoando através de um canal com uma rede de pinos com potencial de interação infinito. As curvas são obtidas para um canal com largura $L = 8.7\lambda$ com $N = 300$ vórtices em movimento e 210 vórtices pinados. (a) Perfil de densidade para uma rede de vórtices para diferentes valores da força externa. (b) Fluxo para uma rede de vórtices para diferentes valores da força externa. (c) Ajuste do perfil de densidade obtido para uma rede de vórtices. Os círculos pretos representam os valores obtidos por simulação de dinâmica molecular para um canal de largura $L = 8.7\lambda$ com uma força externa de $F = 1.0f_0$. A linha vermelha contínua é o perfil de densidade obtido pela solução analítica do nosso modelo. Os parâmetros usados no ajuste concordam até a segunda casa decimal com os valores obtidos por dinâmica molecular.

Podemos observar que, quando a força externa é suficientemente pequena, os vórtices não conseguem superar a barreira de energia imposta pela rede de pinos. Isto faz com que

o fluxo e conseqüentemente a corrente de vórtices nestes materiais sejam nulos ($J \rightarrow 0$). Nesta situação, como mostrado anteriormente, o perfil de densidade cresce de forma linear através do canal e pode ser descrito pela Eq. (2.33). Quando a força cresce, a rede de vórtices supera a barreira de energia e entra em movimento. Nesta situação, $J > 0$, e o perfil de densidade é descrito pela Eq. (2.32). Na Fig. 37 mostramos a densidade deste sistema em código de cores.

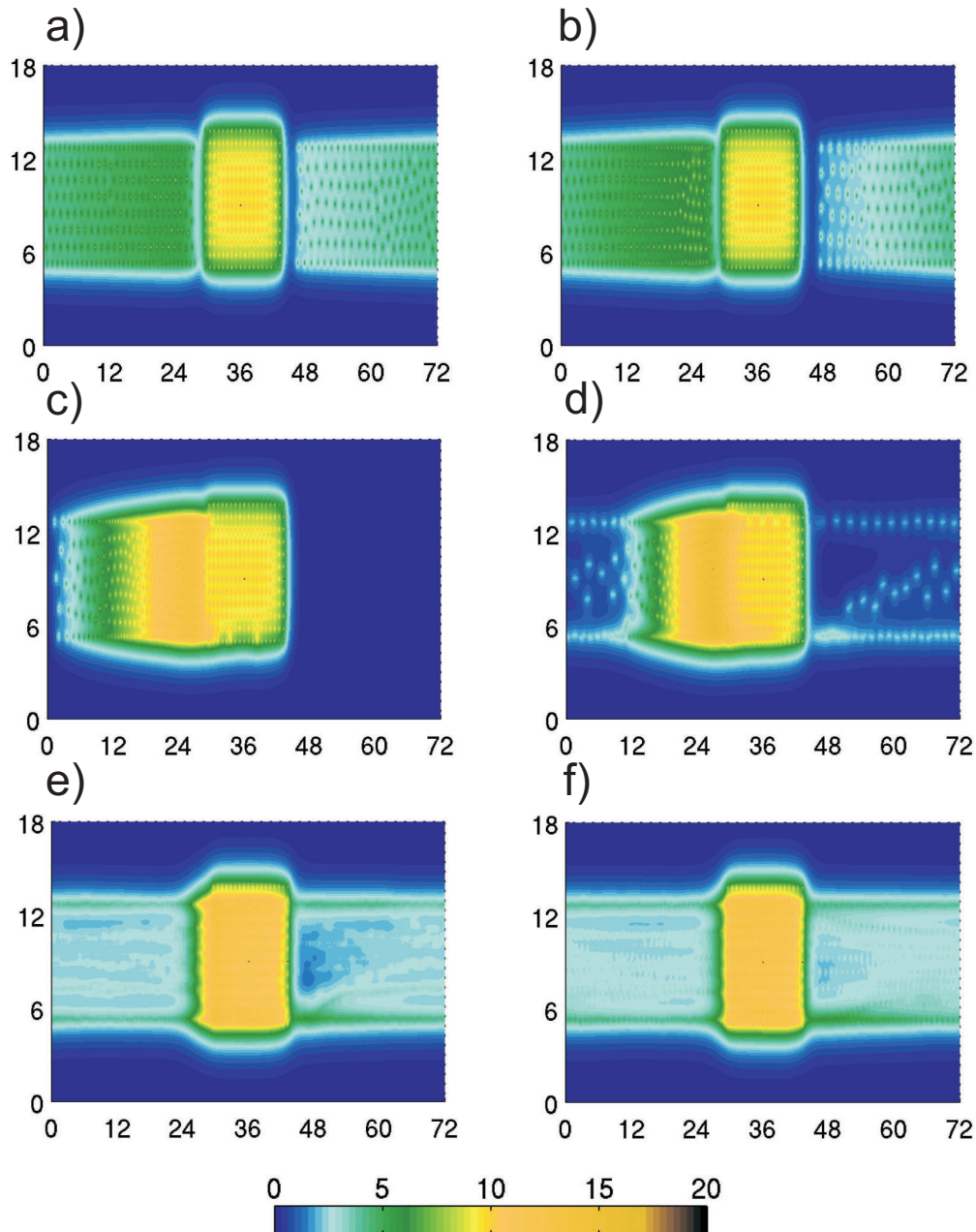


Figura 37: Perfil de densidade em código de cores para a rede de vórtices escoando através de um canal com uma rede de pinos com potencial de interação infinito para diferentes valores da força externa, a) $F = 0.05f_0$, b) $F = 0.10f_0$, c) $F = 0.50f_0$, d) $F = 1.0f_0$, e) $F = 5.00f_0$ e f) $F = 10.00f_0$.

Podemos observar nas Figs. 37(a) e 37(b) que, como na Fig. 36, para forças externas pequenas o perfil de densidade cresce linearmente ao longo do canal e o fluxo é nulo, ou seja, a rede de vórtices se encontra pinada. Isto é refletido nestas figuras onde observamos que a densidade local é discretizada, sendo máxima no núcleo dos vórtices. Pode-se ver também que os vórtices se comportam como uma rede cristalina no estado sólido. À medida que a força externa cresce, como podemos ver em 37(c), apesar de os vórtices ainda estarem pinados, eles não mais se comportam como uma rede cristalina. Devido à força externa, ocorre uma “fusão” local da rede de vórtices, eliminando a ordem de longo alcance nas proximidades do obstáculo. Para forças um pouco maiores, como em 37(d), os vórtices começam a se movimentar em um regime plástico. Quando aumentamos ainda mais a força, os vórtices se movimentam em uma fase vítrea.

2.1.5.5 Rede de pinos com potencial finito

Consideramos agora que os pinos apresentam um potencial de atração finito, ou seja, os vórtices pinados agora podem entrar em movimento. Isto depende apenas da magnitude da força externa e da concentração de vórtices nas proximidades dos pinos. Neste sistema além de verificar as fases mostradas anteriormente, para forças externas pequenas onde o perfil de densidade cresce linearmente e para forças intermediárias onde o perfil de densidade é dado pela Eq. (2.32), observamos um terceiro regime, obtido quando a força externa é muito mais alta que a força imposta pela barreira de energia criada pelos pinos. O perfil de densidade obtido para este sistema deve ser uma constante dada pela razão entre a corrente de vórtices e a força externa $\rho = J/F$ (Eq. 2.34).

Nas Figs. 38(a) e 38(b) mostramos o perfil de densidade deste sistema para forças externas baixas e altas, respectivamente. Observamos que, para forças externas suficientemente pequenas, o perfil de densidade é aproximadamente linear e a corrente de vórtices tende a zero, $J \rightarrow 0$. Para valores intermediários da força externa o perfil de densidade passa a ser descrito pela Eq. 2.32. Quando a força externa é muito alta, o perfil de densidade pode ser simplificado, tornando-se uma constante. Na Fig. 38(d) fazemos um ajuste do perfil de densidade obtido por simulações de dinâmica molecular com a Eq. (2.32) e verificamos que o valor do parâmetro a pode ser usado para ajustar o perfil de densidade adquirido neste sistema.

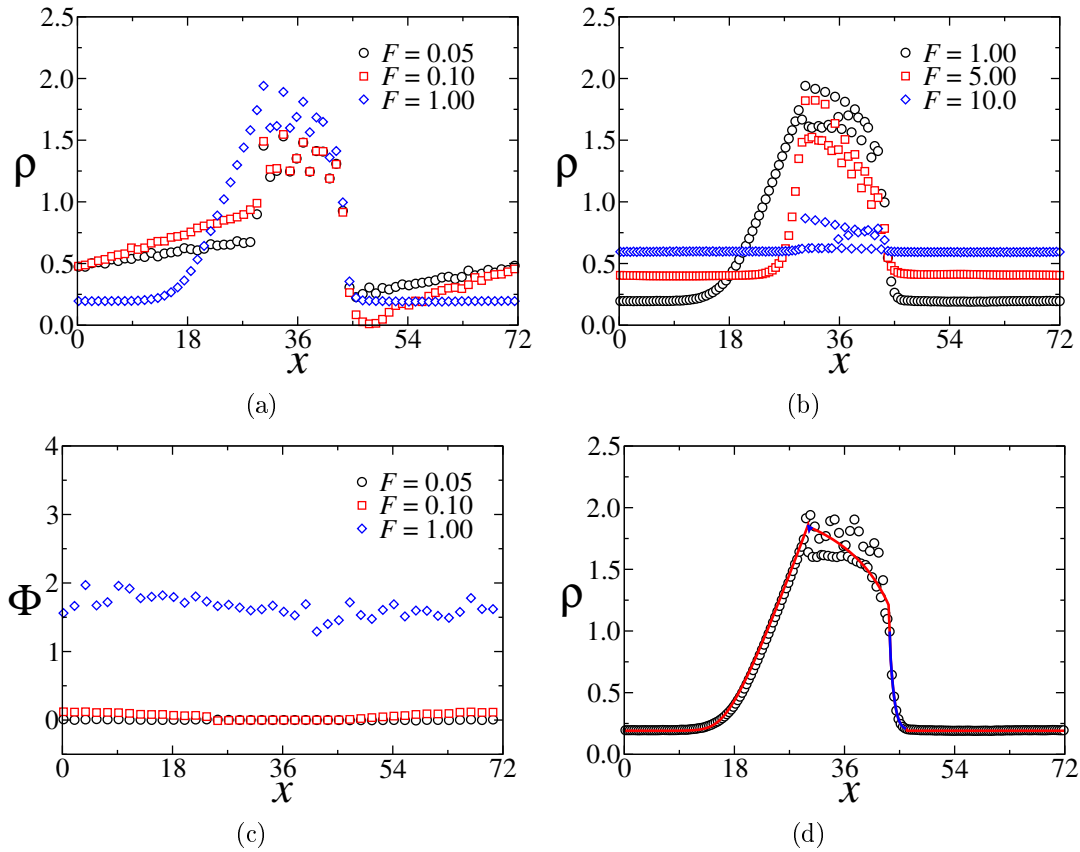


Figura 38: (a) Fluxo da rede de vórtices através de um canal com uma rede de pinos com potencial finito distribuídos periodicamente no centro do canal. Podemos ver que o fluxo é nulo quando a força externa é suficientemente pequena $F = 0.05f_0$. Os resultados mostrados são para um canal com $N = 510$ vórtices. O canal tem uma seção transversal de $y = 8.7\lambda$. (b) Perfil de densidade obtido para canal com uma rede de pinos com potencial finito distribuídos periodicamente no centro do canal. Os perfis de densidade aqui mostrados são equivalentes aos fluxos mostrados na Fig. 38(c). Podemos ver que o perfil de densidade é linear desde que $\Phi \rightarrow 0$. (c) Perfil de densidade para canal com uma rede de pinos, com potencial finito, distribuídos periodicamente no centro do canal. Podemos notar que para forças externas suficientemente grandes $F > 10f_0$ os obstáculos não podem produzir nenhum gradiente de concentração ao longo do canal, fazendo com que o perfil de densidade seja constante e dado pela razão J/F . (d) Comparação entre os resultados obtidos por dinâmica molecular com a solução analítica dada pela Eq. (2.32). Podemos ver boa concordância entre os resultados. Os parâmetros “corrente de vórtice e densidade inicial”, usados para fazer a curva analítica, concordam até segunda casa decimal com os valores obtidos por dinâmica molecular.

Na Fig. 39 mostramos o perfil de densidade em código de cores ao longo do canal com uma rede de pinos com potencial finito. Novamente, podemos observar que para forças

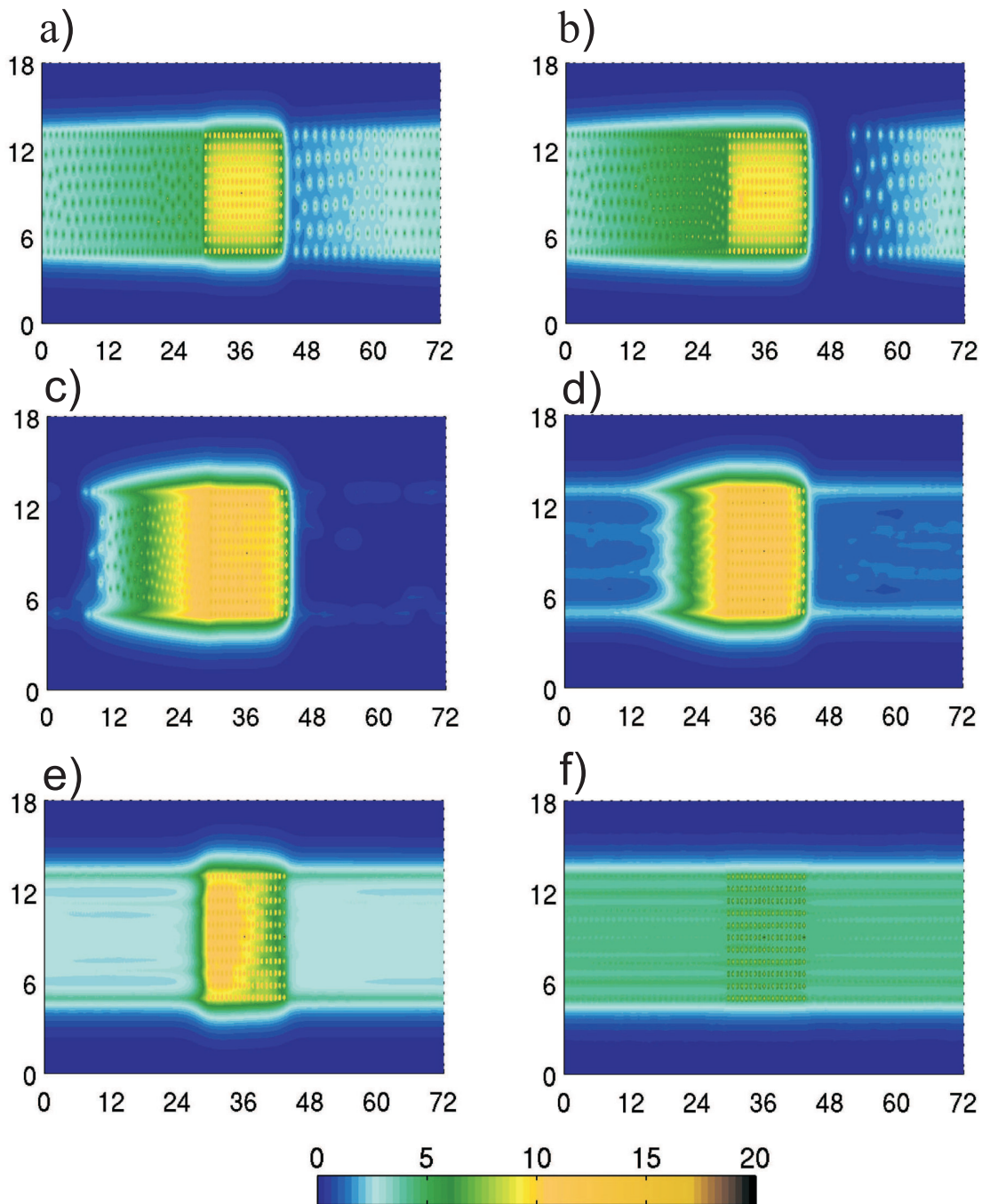


Figura 39: Perfil de densidade em código de cores para a rede de vórtices escoando através de um canal com uma rede de pinos com potencial de interação finito para diferentes valores da força externa, a) $F = 0.05f_0$, b) $F = 0.10f_0$, c) $F = 0.50f_0$, d) $F = 1.0f_0$, e) $F = 5.00f_0$ e f) $F = 10.00f_0$.

externas suficientemente pequenas, a rede de vórtices está pinada e podemos encontrar uma rede discreta onde a densidade é máxima no núcleo dos vórtices. Quando aumentamos

a força externa, a rede de vórtices começa a se desprender dos pinos até escoar livremente, pois os pinos não são mais capazes de produzir nenhuma variação na densidade do sistema. Como na Seção 2.1.5.4, podemos verificar que a densidade é constante (Ver Fig. ao longo do sistema 38(b)) e que esta constante é dada por $\rho = J/F$.

2.2 Colóides

2.2.1 Modelo

Explorando a abrangência do modelo usado anteriormente para descrever o escoamento de partículas através de um canal com um obstáculo, estudamos agora dinâmica em sistemas coloidais confinados e na presença de um obstáculo, Como será mostrado posteriormente, este sistema também pode ser descrito pela Eq (2.31). A única ressalva é que o parâmetro a precisa ser recalculado, pois seu valor será diferente para a nova forma da força de interação entre as partículas. Na Fig. 40 comparamos as forças entre os sistemas estudados - vórtices, colóides e pedestres - com nosso modelo contínuo, podemos ver que todas as forças tendem a zero para grandes distâncias,

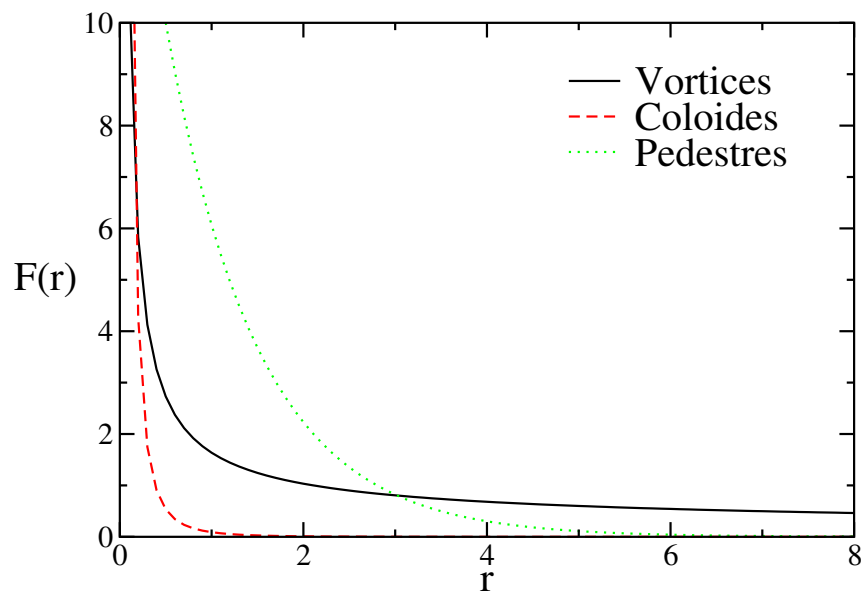


Figura 40: Força de interação entre as partículas para diferentes sistemas em função da distância r . Para vórtices em supercondutores a força de interação é dada pela função de Bessel modificada de primeira ordem $F^{vv}(r) \propto K_1(r)$, para colóides a força é dada pelo potencial de Yukawa $F^{cc}(r) \propto (1 - \kappa) \exp(-\kappa r)/r^2$, onde $\kappa = 0.8$ é o inverso do alcance do potencial e para pedestres a força é dada por uma função exponencial segundo o modelo de D. Helbing (31, 32) $F^{pp}(r) = A \exp(d - r)$, onde $A = 10$ é uma constante e $d = 0.5$ é o diâmetro do pedestre.

Para um sistema coloidal, a força sobre a partícula i é dada por,

$$\mathbf{F}_i^{pp} = \sum_{j \neq i}^{N_p} q_i q_j (1 - \kappa) \frac{\exp(-\kappa r_{ij})}{r_{ij}^2} \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (2.38)$$

onde $q_{i(j)}$ são as cargas das partículas i e j respectivamente, $1/\kappa$ representa o alcance do potencial, $r_{ij} = |r_i - r_j|$ é a distância entre as partículas i e j e $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ é o vetor unitário que une o centro de massa das duas partículas. Em nossas simulações supomos que todas as partículas têm a mesma carga $q_{i(j)} = 1$ e que $\kappa = 0.8$.

Consideramos também que as partículas movem-se de maneira superamortecida. Consequentemente, a equação de movimento para este sistema pode ser escrita como,

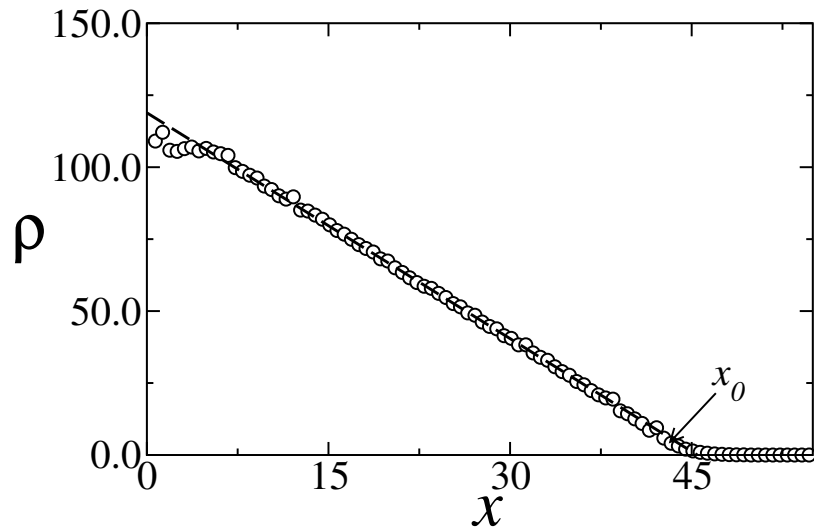
$$\eta \mathbf{v}_i = \mathbf{F}_i^{pp} + \mathbf{F}_i^{wp} + \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_i^T, \quad (2.39)$$

onde \mathbf{F}_i^{wp} é a força entre as partículas e a parede, \mathbf{F}_i é a força externa e \mathbf{F}_i^T é a força térmica, cujas expressões matemáticas são as mesmas empregadas na seção anterior. Analogamente, as propriedades macroscópicas desse sistema são calculadas da mesma forma como no caso dos vórtices, sendo que o *kernel* da função é dado pelo potencial de interação entre as partículas $U^{pp} = q_i q_j \exp(-\kappa r_{ij})/r_{ij}$.

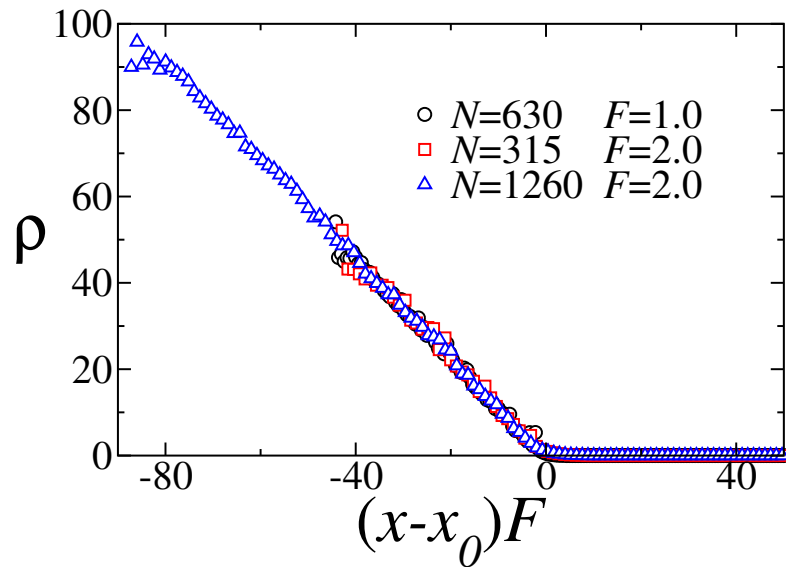
2.2.2 Sistema fechado

Para calcular o parâmetro a medimos o perfil de densidade para um canal confinado em todas as direções. Nesta situação temos que a corrente de partículas é nula, $J = 0$, quando o sistema alcança o equilíbrio mecânico. Iniciamos nossas simulações com as partículas distribuídas aleatoriamente dentro do canal. Em seguida, aplicamos uma força externa F e deixamos o sistema evoluir por meios de simulações de dinâmica molecular até que o estado de equilíbrio mecânico seja atingido, quando medimos o perfil de densidade. Os perfis de densidade obtidos para um sistema coloidal “empurrado” contra uma parede em $x = 0$, confinado a um canal mesoscópico fechado em todas as direções, é mostrado na Fig. 41(a),

Para todos os casos estudados, observamos a presença de um perfil de densidade linear. Fazendo o ajuste destes perfis de densidade, podemos calcular o valor do parâmetro a , bem como o valor de x_0 . Na Fig. 41(b) mostramos que os perfis de densidade obtidos para diferentes valores do número de partículas N e da força externa colapsam numa mesma curva. Isto nos mostra que o valor de a é invariante para um grande intervalo de valores da densidade e da força externa.



(a) Perfil de densidade



(b) Colapso curvas de densidade

Figura 41: (a) Perfil de densidade obtido para um sistema coloidal confinado em um canal em todas as direções. O perfil de densidade mostrado aqui é para um canal com $N = 630$ e largura $L = 3.0$ com uma força externa $F = 1.0$. (b) Perfis de densidade para diferentes valores do número de partículas e diferentes valores da força externa.

Medimos o valor do parâmetro a variando a largura do canal, e observamos que o confinamento do sistema faz com que este parâmetro seja alterado quando esta largura é da mesma ordem do comprimento de interação entre as partículas. Recentemente, foi verificado que o confinamento de sistemas vítreos em canais mesoscópicos faz com que as partículas tenham um comportamento não-local, apresentando um comprimento de cooperatividade característico (25). Os valores de a em função da largura do canal L para diferentes valores da densidade e da força externa são mostrados na Fig. 42.

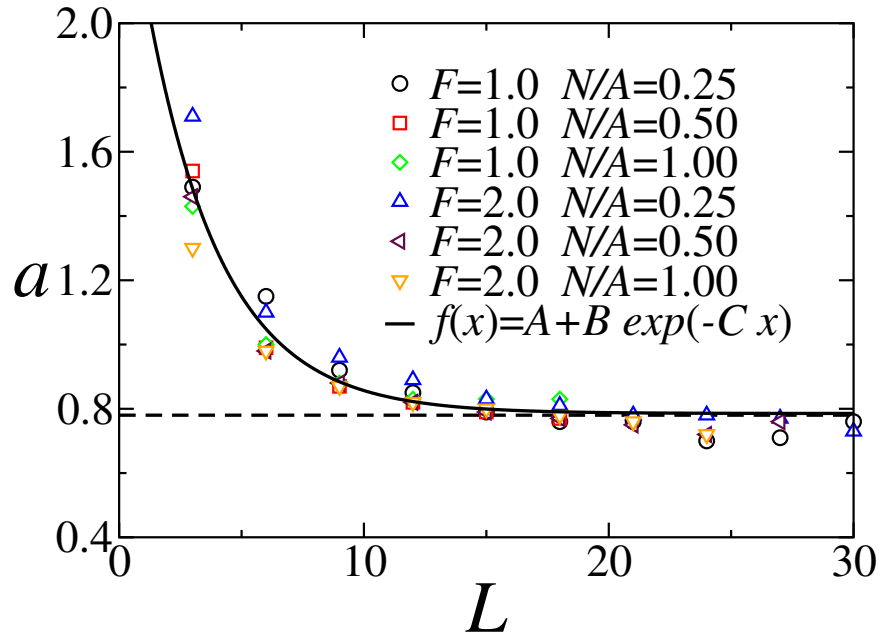


Figura 42: Parâmetro a em função da largura do canal para diferentes números de partículas e diferentes valores da força externa. A linha contínua preta representa o ajuste feito nas curvas obtidas por simulações de dinâmica molecular, Os parâmetros obtidos no ajuste foram $A = 0.78$, $B = 1.86$ e $C = 0.33$. A linha tracejada representa o valor do parâmetro a para um sistema aberto.

Para canais estreitos, o parâmetro a , em sistemas coloidais, apresenta um comportamento muito parecido com o obtido para vórtices em supercondutores. Porém, o seu valor numérico é substancialmente diferente. Podemos observar na Eq. (??) que este parâmetro depende exclusivamente da interação entre as partículas, isto é, da forma e do alcance desta interação. Para um sistema coloidal não confinado “aberto”, o valor deste parâmetro pode ser facilmente calculado. Empregando a Eq. (??) obtemos que $a = 2\pi(1/\kappa - 1)$, para $\kappa = 0.8$, ou seja, para $\kappa = 0.8$ encontramos $a = 0.78$, em concordância com os resultados apresentados na Fig. 42.

Analisamos também a configuração final das partículas quando são forçadas contra a parede em um canal fechado. Verificamos que o número de camadas ao longo do canal decresce gradualmente ao longo deste, este mecanismo tem sido apontado como responsá-

vel pela mudança de densidade ao longo do sistema. Observamos que nas bordas há um comportamento diferente do interior da amostra, onde um gradiente de concentração de partículas ao longo da direção x pode ser encontrado. Este resultado é mostrado na Fig. 43.

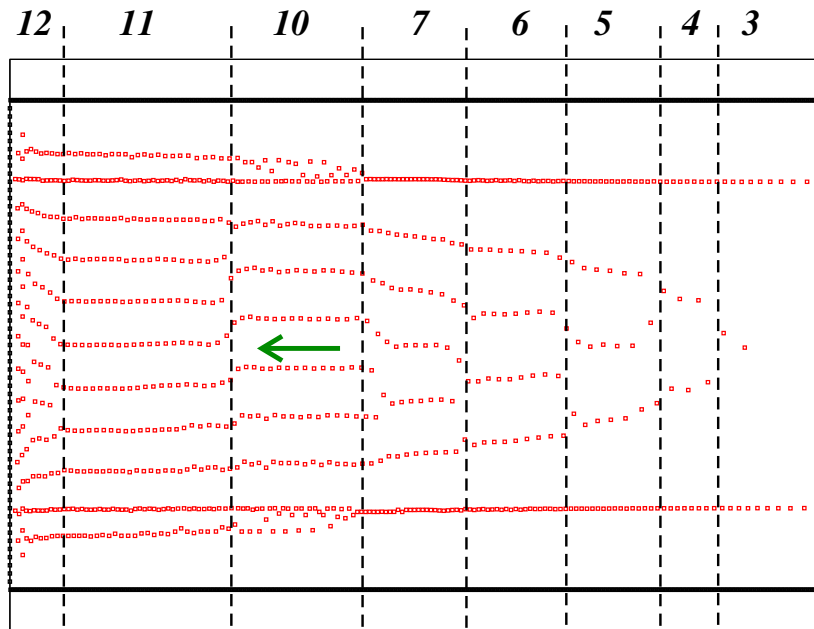


Figura 43: Configuração final para as partículas sendo forçadas contra a parede em $x = 0$ num canal fechado em todas as direções.

Como enfatizado, os resultados obtidos nesta Seção são muito semelhantes aos obtidos para a dinâmica de vórtices em supercondutores. O tipo de interação entre as partículas, no entanto, altera os valores numéricos do parâmetro a . Isto nos fornece um indicativo de que o nosso modelo e sua respectiva solução analítica podem ser usados para descrever outros sistemas de partículas interagentes.

2.2.3 Barreira de energia

Para verificar se o valor do parâmetro a obtido no caso estático para a dinâmica de sistemas coloidais pode ser usado no caso dinâmico, estudamos as propriedades de transporte de sistemas coloidais em um canal mesoscópico na presença de uma barreira de energia como obstáculo. Os perfis de densidade, bem como a solução numérica da Eq. (2.31), são mostrados na Fig. 44. Iniciamos nossas simulações com as partículas distribuídas aleatoriamente dentro do canal. Em seguida, aplicamos uma força F com o objetivo de movimentar as partículas, superando o obstáculo. O perfil de densidade é medido tomando uma média temporal do sistema após este estado estacionário.

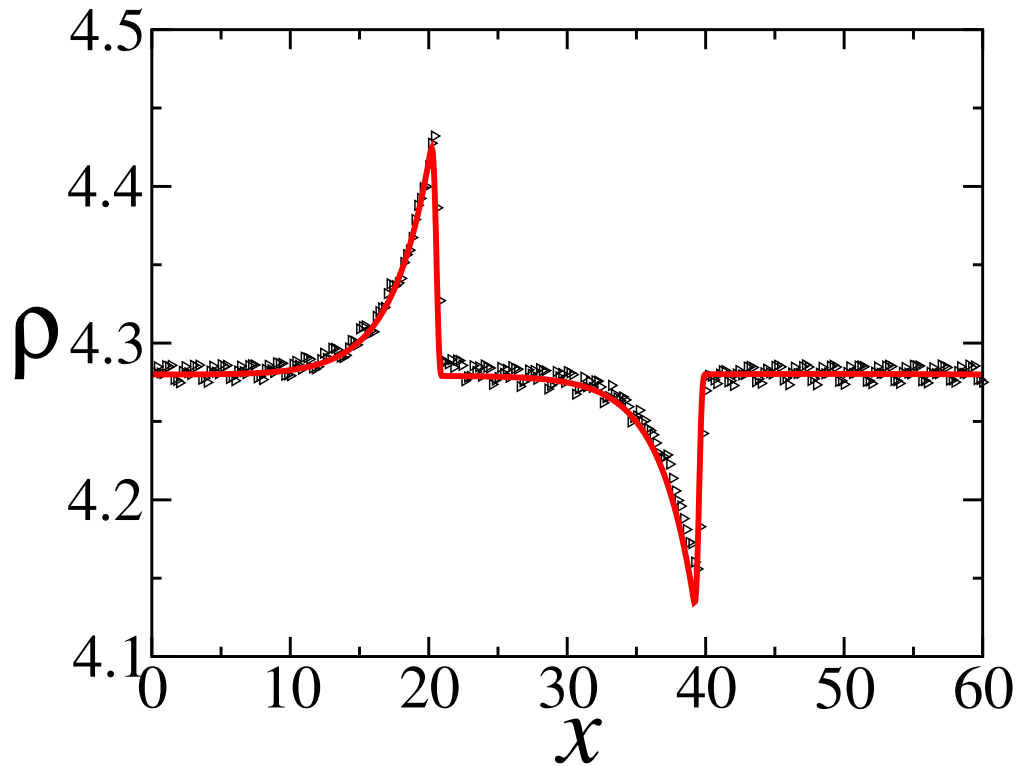


Figura 44: Perfil de densidade para partículas suspensas, escoando em um canal e na presença de uma barreira de energia com força $F_B = 1.0$ como obstáculo, para um sistema com $N = 600$ partículas confinadas em um canal de largura $L = 5.0$ sendo forçada por uma força $F = 4.0$. A linha contínua representa a curva de densidade obtida por integração numérica da Eq. (2.31). O parâmetro a usado nesta equação foi obtido através do ajuste feito na Fig. 42.

Podemos ver que os resultados obtidos por dinâmica molecular estão em perfeita concordância com a integração numérica da equação obtida a partir do *coarse-graining* da equação de Fokker-Planck, para um sistema de partículas em movimento superamortecido, no estado estacionário e na presença de desordem. Aqui a desordem é introduzida através de uma barreira de energia que atua como um obstáculo para o transporte de partículas no sistema.

Os resultados obtidos nesta Seção confirmam que o nosso modelo pode ser estendido para outros sistemas de partículas interagentes. A única restrição é que as partículas devem interagir com muitas partículas em suas vizinhanças, com as interações indo além dos primeiros vizinhos.

2.2.4 Constrição

Para confirmar que a equação macroscópica 2.31 é capaz de descrever o transporte de partículas através de qualquer tipo de obstáculo, estudamos a dinâmica de sistemas

coloidais na presença de uma constricção. Como na Seção anterior, iniciamos nossas simulações com as partículas distribuídas aleatoriamente dentro do canal e em seguida aplicamos uma força $F = 2.0$ no sistema. O perfil de densidade obtido para um sistema coloidal percorrendo um canal com uma constricção, após alcançar o estado estacionário, é mostrado na Fig. 45.

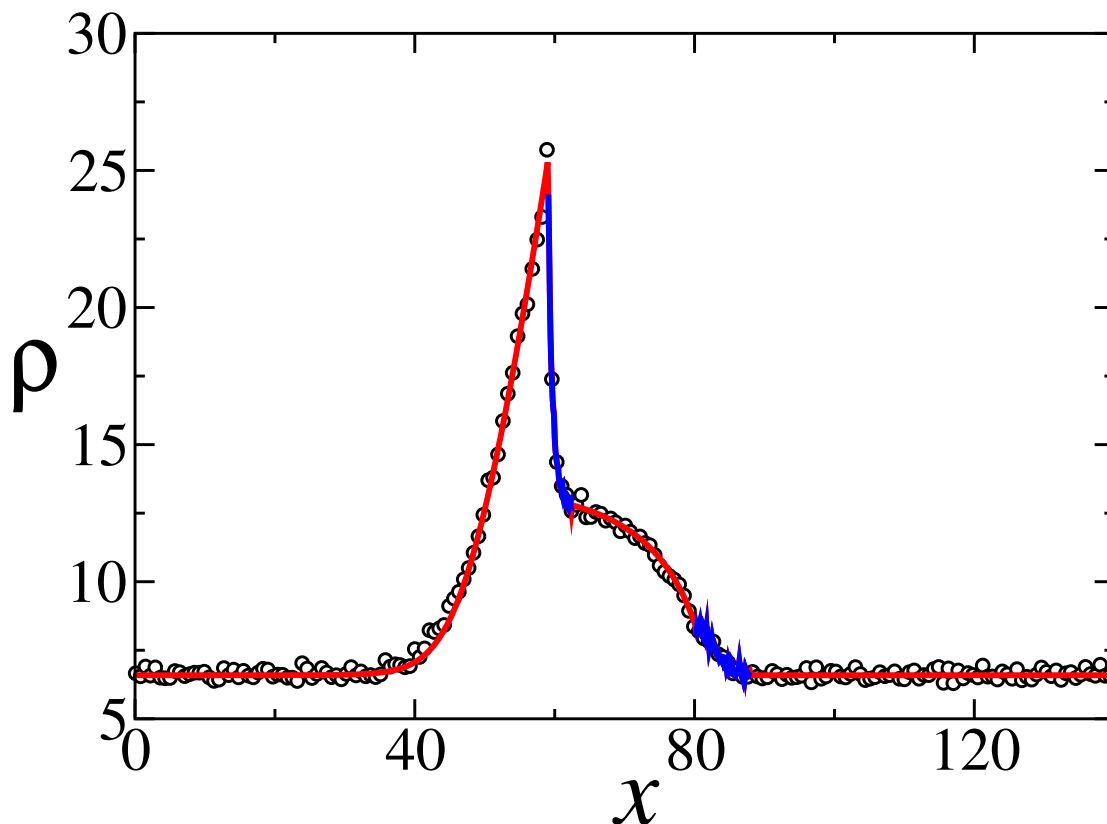


Figura 45: Perfil de densidade para partículas suspensas escoando em um canal com uma constricção. Os símbolos (círculos pretos) foram obtidos por simulações de dinâmica molecular, a linha contínua vermelha representa o perfil de densidade obtido pela Eq. 2.32, e as linhas contínuas em azul representam as regiões onde os perfis de densidade não foram ajustados.

Nesta figura, os símbolos (círculos pretos) representam os resultados obtidos por simulações de dinâmica molecular e a linha contínua (vermelha) representa os ajustes feitos usando a solução analítica do nosso modelo, Eq. (2.32). A linha contínua (azul) representa as regiões nas proximidades da constricção, onde não fazemos o ajuste com a solução analítica.

Por último, obtemos a configuração final para as partículas escoando no estado estacionário em um canal com uma constricção. O mecanismo de “*layer reduction*” também pode ser identificado, porém este mecanismo não é tão claro como no caso de um canal fechado. Aparentemente há uma alternância entre os regimes plástico (partículas des-

organizadas) e elástico (rede hexagonal). Além do mecanismo de redução de camadas,

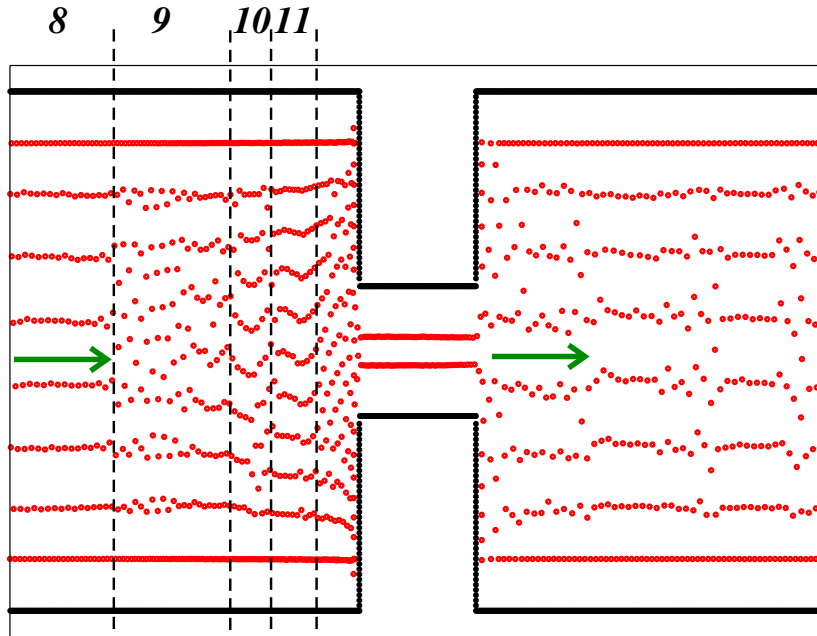


Figura 46: Configuração final para um canal com partículas suspensas submetidas a uma força externa em um canal mesoscópico na presença de uma constricção. As setas indicam o sentido do fluxo. As simulações foram feitas para um sistema com $N = 1250$ partículas confinadas em um canal com uma constricção, cujas seções da parte larga e estreita são $y_1 = 10.0$ e $y_2 = 2.5$, respectivamente. As partículas são forçadas por uma força $F = 1.0$.

observamos que, nas proximidades da parede de confinamento, as partículas apresentam um gradiente de concentração que compete com o mecanismo de redução de camadas para determinar o perfil de densidade neste sistema. Nas regiões mais estreitas (constricção), o mecanismo responsável pela variação da densidade parece ser exclusivamente relacionado ao gradiente de concentração.

2.3 Movimento de pedestres na presença de obstáculos

Estendemos nosso modelo para estudar a dinâmica de pedestres em movimento superamortecido. Este sistema tem sido muito estudado nos últimos anos na tentativa de evitar e/ou minimizar os desastres em situações de pânico. Surpreendentemente, verificamos que o modelo contínuo anteriormente empregado por nós para descrever o comportamento do fluxo e da densidade na dinâmica de vórtices em supercondutores, e na dinâmica de sistemas coloidais, pode descrever o movimento de pedestres.

2.3.1 Modelo

Usamos o modelo proposto por Helbing *et al.*(32) para simular a dinâmica de pedestres através de um obstáculo. Neste modelo, a equação de movimento das partículas pode ser escrita como,

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = m_i \frac{v_i^0(t)\mathbf{e}_i^0(t) - \mathbf{v}_i(t)}{\tau_i} + \sum_{j(\neq i)} \mathbf{f}_{ij} + \sum_W \mathbf{f}_{iW} + \xi_i. \quad (2.40)$$

Esta equação descreve o movimento de N pedestres de massa m que se movem com velocidade v^0 numa direção \mathbf{e} . Neste modelo, τ é o tempo característico que os pedestres têm para adequar sua velocidade desejada (força externa) à sua velocidade atual \mathbf{v} . Esta adequação da velocidade depende da distância entre os pedestres e da distância entre os pedestres e a parede.

Para adequar o movimento de pedestres ao modelo aqui estudado, supomos que a dinâmica de pedestres pode ser descrita por um movimento superamortecido. Isto é possível desde que consideremos que o tempo de relaxação τ seja muito pequeno (30), ou seja, que os pedestres ajustem sua velocidade instantaneamente. Sendo assim, a Eq. (2.40) pode ser escrita como,

$$\gamma \mathbf{v}_i = \mathbf{F} + \sum_{j(\neq i)} \mathbf{f}_{ij} + \sum_W \mathbf{f}_{iW} + \xi_i, \quad (2.41)$$

onde $\gamma = m/\tau$ é o coeficiente de atrito do sistema, $F = mv^0/\tau$ é a força externa, f_{ij} é a força de interação entre as partículas, f_{iW} é a força de interação entre as partículas e a parede e o termo ξ representa um ruído não-correlacionado com distribuição Gaussiana e desvio padrão θ . Na dinâmica de pedestres, este ruído está associado à indecisão, pânico ou a algum outro fator externo que influencie o seu movimento de forma aleatória. Em todos os casos aqui estudados supomos que o ruído externo é nulo.

As interações entre os pedestres são dadas por,

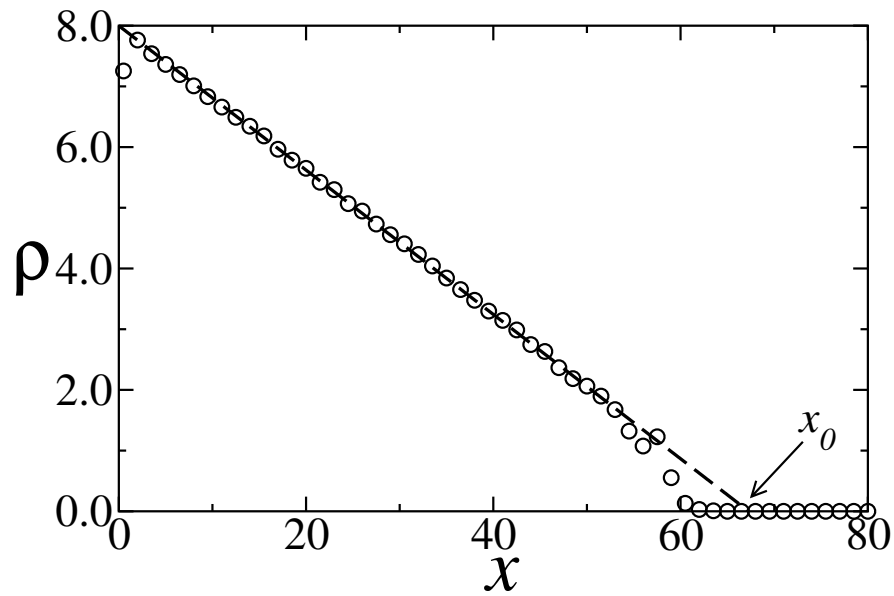
$$\mathbf{f}_{ij} = \{A_i \exp[(r_{ij} - d_{ij})/B_i] + kg(r_{ij} - d_{ij})\} \mathbf{n}_{ij} + \kappa g(r_{ij} - d_{ij}) \Delta v_{ij}^t \mathbf{t}_{ij}, \quad (2.42)$$

onde d_{ij} representa a distância entre as partículas e $r_{ij} = r_i + r_j$ é a soma dos raios das partículas que representam os pedestres. O primeiro termo do lado direito da equação representa a repulsão entre os pedestres e os outros dois termos são típicos na dinâmica de sistemas granulares, representando uma repulsão de “*hard core*” e uma força de atrito tangencial, respectivamente. Estas duas últimas forças só atuam no sistema quando as partículas estão em contato, sendo controladas pela função $g(x)$, que é zero quando $r_{ij} > 2d_{ij}$ e é igual ao seu argumento quando $r_{ij} \leq 2d_{ij}$. Os parâmetros usados nas simulações foram $A_i = 10 \text{ N}$, $B_i = 1 \text{ m}$, $r_{ij} = 0.50 \text{ m}$, $k = 1.2 \times 10^3 \text{ Kgs}^{-2}$, $\kappa = 2.4 \times 10^3 \text{ Kgm}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Aqui, os valores dos parâmetros A_i e B_i foram escolhidos de forma que os pedestres consigam perceber a presença de vários outros pedestres ao seu redor. Sendo assim, a aproximação $\tau \rightarrow 0$ é justificada na descrição do sistema.

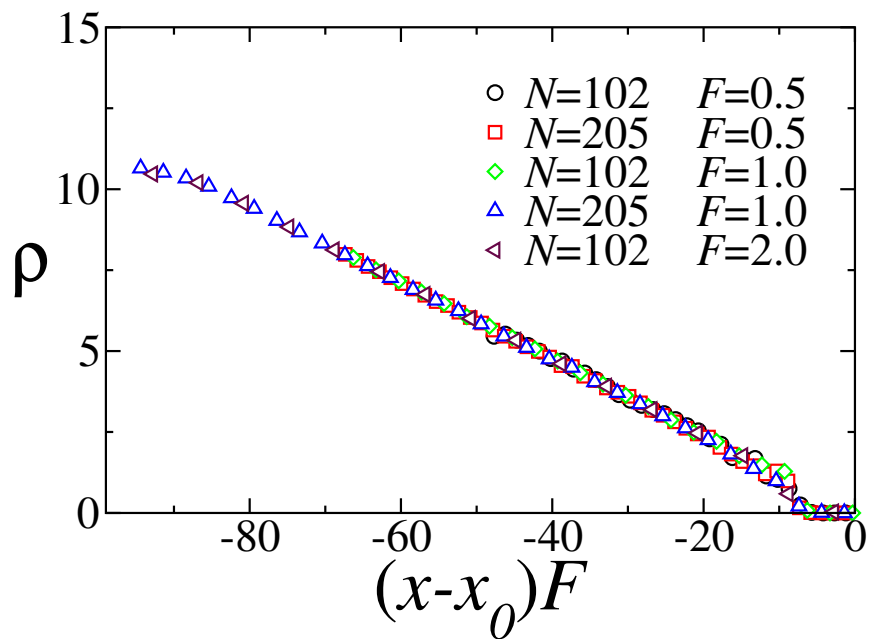
2.3.2 Sistema fechado

Como nos casos anteriores, na dinâmica de vórtices em supercondutores e na dinâmica de colóides, precisamos determinar o parâmetro a usado em nosso modelo. Para isso empregamos a Eq. (2.33) obtida no limite em que a corrente $J \rightarrow 0$. Para garantir esta situação, confinamos o sistema em todas as direções. Iniciamos nossas simulações com os pedestres distribuídos aleatoriamente dentro do canal (corredor) e aplicamos uma força externa ao sistema, equivalente aos pedestres desejarem se deslocar em um sentido preferencial. Os pedestres são todos confinados na parede em $x = 0$, e após cessar todo o movimento (o sistema alcançar o equilíbrio mecânico) medimos o perfil de densidade.

Na Fig. 47 apresentamos os perfis de densidade obtidos por simulações de dinâmica molecular para pedestres em movimento superamortecido, em corredores estreitos, e confinados em todas as direções. O ajuste deste perfil com a Eq. (2.33) nos permite calcular os parâmetros a e x_0 empregados para fazer o colapso dos perfis de densidade, como mostrado na Fig. 47(b). Podemos observar que o parâmetro a é invariante com a força externa e com a densidade. Realizamos um grande número de simulações nestes sistemas, com diferentes quantidades de pedestres, diferentes forças externas e larguras do canal. Estes resultados são mostrados na Fig. 48. Observamos que para canais estreitos o parâmetro a cresce, enquanto que para canais mais largos torna-se constante.



(a) Perfil de densidade



(b) Colapso dos perfis de densidade

Figura 47: (a) Perfil de densidade obtido para pedestres em um canal confinado em todas as direções. Os símbolos (círculos) representam os resultados obtidos por simulações de dinâmica molecular, e a linha tracejada representa o ajuste linear desta curva, usando a Eq. (2.33). (b) Colapso das curvas de densidade obtidas para diferentes valores do número de partículas e da força externa, mostrando que o valor do parâmetro a é invariante para uma grande faixa de valores do número de partículas e da força externa.

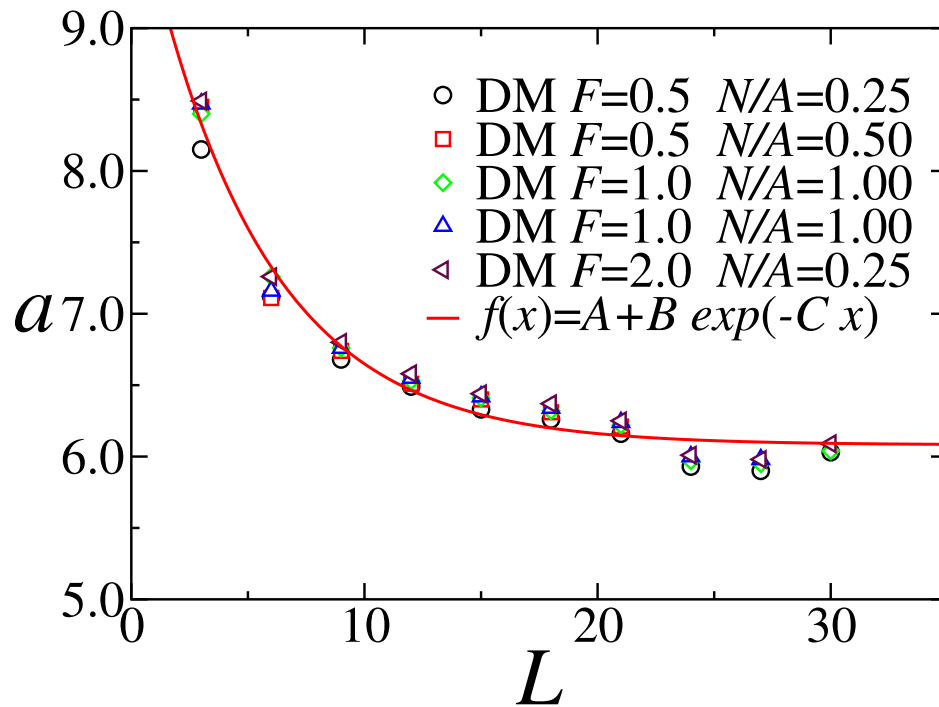


Figura 48: Valor do parâmetro a em função da largura do canal L , obtido para pedestres confinados em um corredor estreito, com tendência a se movimentarem em direção à parede em $x = 0$. As diferentes curvas foram obtidas para diferentes valores da razão N/A e da força externa. A linha contínua vermelha representa o ajuste feito nas curvas obtidas por simulações de dinâmica molecular. Os parâmetros obtidos no ajuste foram $A = 6.08$, $B = 4.06$ e $C = 0.20$

2.3.3 Construção

Como nos casos anteriores, é importante verificar se o modelo macroscópico dado pela Eq. (2.31) é capaz de descrever a dinâmica de pedestres sujeitos a diferentes tipos de obstáculos, com o objetivo de estudar pedestres em movimento superamortecido, confinados e na presença de uma construção. Na Fig. 49 mostramos o perfil de densidade obtido por simulações de dinâmica molecular (círculos pretos), bem como o ajuste deste perfil com a Eq. (2.32) (linha vermelha). Podemos observar que este perfil de densidade pode ser descrito pela solução de nossa equação de difusão não-linear Eq. (2.32). A linha contínua azul representa a região onde o ajuste analítico não é considerado. Com estas evidências, acreditamos que nosso modelo pode ser usado para dimensionar locais públicos, evitando que picos de densidades ocorram nas proximidades de saídas. O perfil de densidade de pedestre depende não só da abertura da construção, mas também do número de pedestres e da velocidade de movimento destes. Isto pode evitar que ocorram desastres quando um grande número de pessoas decidirem evacuar locais com grandes concentrações. O nosso modelo também pode ser utilizado para estimar o tempo de evacuação destes locais.

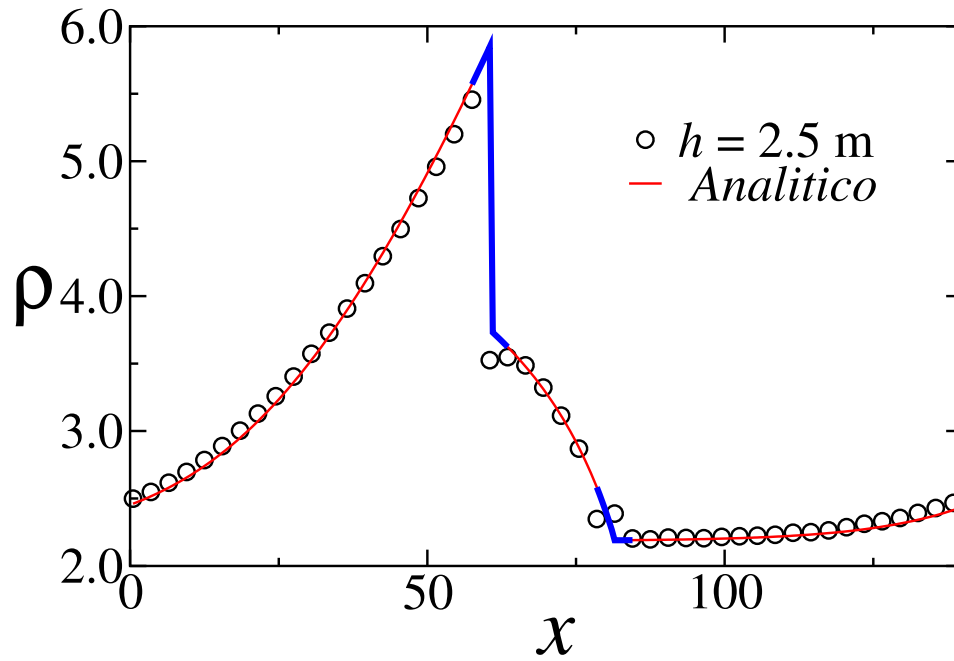


Figura 49: Perfil de densidade para N pedestres escoando através de um canal de largura $L = 10m$ e com uma constrição de largura $h = 2.5m$. A curva contínua descreve o ajuste da curva obtida por simulação de dinâmica molecular com a Eq. 2.32.

Acreditamos que os resultados obtidos neste Capítulo sejam válidos em outros sistemas, como em sistemas biológicos e na medicina. Acreditamos também que o comportamento da densidade e do fluxo sejam universais, dependendo apenas do alcance da interação entre as partículas. Seria interessante empregar o nosso modelo ou similar com o objetivo de calcular o fluxo de sangue através de vasos sanguíneos obstruídos, e assim medir a concentração de oxigênio enviada para o cérebro. Isto poderia auxiliar na determinação do limite onde danos irreversíveis ao cérebro possam ocorrer.

3 TRANSPORTE DE PARTÍCULAS CONFINADAS POR PAREDES ASSIMÉTRICAS

Neste Capítulo estudamos a dinâmicas de partículas interagentes, confinadas por paredes assimétrica em canais mesoscópicos. Na primeira parte, investigamos a dinâmica de pedestres e na segunda parte estudamos a dinâmica de vórtices. Em ambos os casos, um efeito tipo catraca pode ser observado.

Na dinâmica de pedestres, o confinamento por paredes assimétricas induz um ordenamento com sentido preferencial para o escoamento e faz com que o fluxo seja maximizado. Verificamos que há três fases diferentes para o movimento dos pedestres: o movimento livre, o movimento ordenado e o movimento desordenado. Estudamos os limites onde estes movimentos podem ser obtidos com a variação de parâmetros como o grau da assimetria, a profundidade da assimetria, o número total de pedestres, a velocidade alvo destes e o ruído externo.

Na segunda parte deste Capítulo, mostramos que a dinâmica de vórtices confinados por paredes assimétricas em estruturas mesoscópicas leva a uma condição de múltiplos “*depinning*”, que está relacionada com a plasticidade do sistema. Observamos também que o número de vórtices em movimento é igual a um múltiplo inteiro do número de obstáculos assimétricos (catracas) no canal.

3.1 Movimento de pedestres

Para facilitar o movimento de pedestres em corredores estreitos ou em túneis, é necessário criar uma estrutura ordenada na formas de filas em sentidos opostos, quando for o caso. Aqui estudamos um mecanismo para induzir esta organização no escoamento utilizando a geometria da parede responsável pelo confinamento. A essência de nossos estudos está no uso de uma geometria tipo catraca, ou seja, um zigzag assimétrico, como

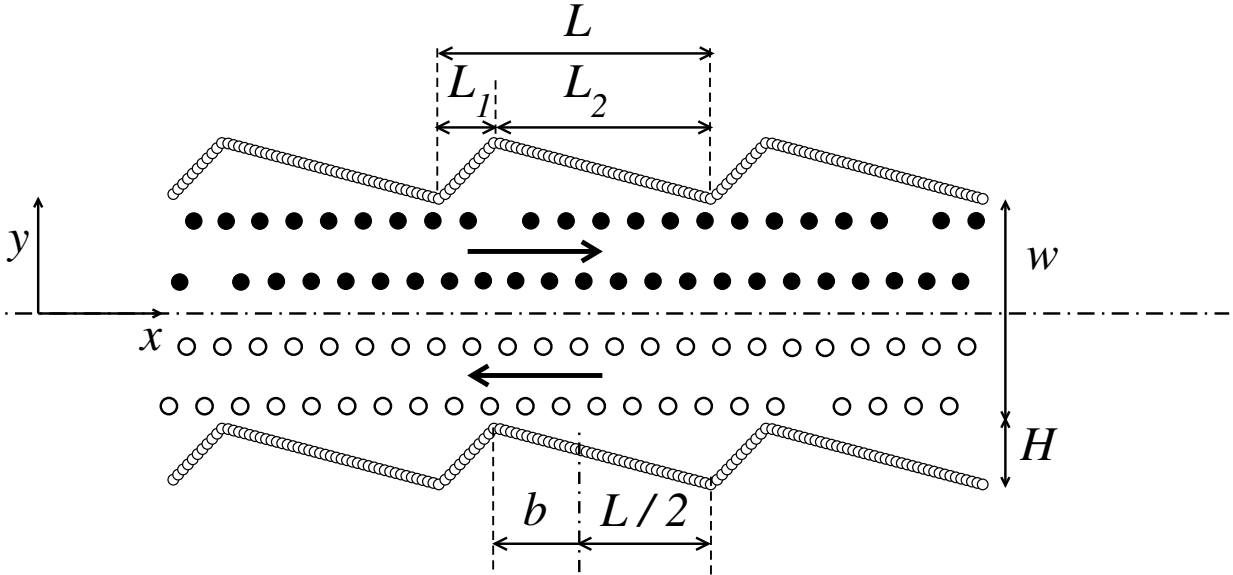


Figura 50: Geometria de um corredor responsável por induzir uma direção preferencial para o escoamento. Os parâmetros usados nesta figura são: $L = 10.0$, $b = -3.0$, $w = 4.0$, $v = 3.0$, $\rho = 0.6$, $\xi = 0.0$ and $H = 1.0$

mostrado na Fig. 50. Cada objeto tipo catraca (rugosidade assimétrica) possui comprimento L . O parâmetro de assimetria b é medido com relação ao centro da catraca, ou seja, ele é calculado como $b = L_1 - L/2$. O sistema de eixos coordenados é colocado no centro do canal, como mostrado na Fig. 50.

Para estudar os efeitos introduzidos pelo confinamento assimétrico sobre os pedestres, realizamos um grande número de simulações de dinâmica molecular empregando o modelo proposto por Helbing *et al.* (32). Neste modelo as interações entre os pedestres são dadas por uma forte repulsão, acompanhada de duas forças típicas de materiais granulares. Estas forças são a força de “hard core” e a força de atrito tangencial. Consideramos o movimento de N pedestres, modelados como discos de raios r_i e massa m_i , tentando se movimentar com uma velocidade v_0^i . Os pedestres são divididos em dois grupos iguais, movimentando-se em sentidos contrários, com $N/2$ pedestres movimentando-se para direita (direção $\mathbf{e}_i = \{(1, 0)\}$) e $N/2$ pedestres movimentando-se para esquerda (direção $\mathbf{e}_i = \{(-1, 0)\}$). Similar ao mecanismo de arraste de partículas em um fluido, a aceleração com que os pedestres se movimentam é ajustada a cada instante, em proporcionalidade à diferença entre a velocidade alvo e as suas velocidades instantâneas. A equação de movimento dos pedestres é dada por,

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = m_i \frac{v_i^0(t) \mathbf{e}_i^0(t) - \mathbf{v}_i(t)}{\tau} + \sum_{j(\neq i)} \mathbf{f}_{ij} + \sum_W \mathbf{f}_{iW} + \xi_i, \quad (3.1)$$

onde τ é o tempo característico. \mathbf{f}_{ij} é a força (repulsiva) de interação entre os pedestres,

\mathbf{f}_{iW} é a força (repulsiva) de interação entre os pedestres e a parede e ξ_i representa as flutuações da velocidade. Estas flutuações são não-correlacionadas e obedecem a uma distribuição normal com um desvio padrão θ . A força entre os pedestres é dada por,

$$\mathbf{f}_{ij} = \{A_i \exp[(r_{ij} - d_{ij})/B_i] + kg(r_{ij} - d_{ij})\} \mathbf{n}_{ij} + \kappa g(r_{ij} - d_{ij}) \Delta v_{ij}^t \mathbf{t}_{ij}, \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{n}_{ij} = (n_{ij}^1, n_{ij}^2) = (r_i - r_j)/d_{ij}$ é o vetor unitário que conecta os centros dos pedestres, $\mathbf{t}_{ij} = (-n_{ij}^2, n_{ij}^1)$ é o vetor unitário na direção tangencial e d_{ij} é a distância entre os centros de massa dos pedestres. A função $g(x)$ é zero se $d_{ij} > 2 r_i$, e é igual ao seu argumento em todos os outros casos. Quando a distância entre os pedestres é maior que um comprimento de corte, ($\lambda_P > 2.0 m$), a força entre eles é desprezada. A parede é descrita por partículas pontuais separadas por uma distância $d_w = 0.20 m$, menor que o raio dos pedestres r_i . A interação dos pedestres com a parede é dada de forma semelhante à Eq. (3.2),

$$\mathbf{f}_{iW} = \{A_{iW} \exp[(r_{iW} - d_{iW})/B_{iW}] + kg(r_{iW} - d_{iW})\} \mathbf{n}_{iW} + \kappa g(r_{iW} - d_{iW}) \Delta v_i^t \mathbf{t}_{iW}, \quad (3.3)$$

onde d_{iW} é a distância entre os pedestres e as partículas da parede. Se esta distância é maior que um raio de corte $\lambda_W > 1.0m$, supomos que esta força pode ser desprezada. Os pedestres se movem em um corredor na direção x e são confinados na direção y por paredes assimétricas na forma de zigzag, como mostrado na Fig. 50.

Por simplicidade, impomos condições de contorno periódicas na direção x . Usamos os seguintes parâmetros em nossas simulações: $m = 80$ kg, $A_i = 2000$ N, $B_i = 0.08$ m, $A_{iW} = 10000$ N, $B_{iW} = 0.02$ m, $k = 1200$ kg s⁻², $\kappa = 2400$ kg m⁻¹ s⁻¹ e $\tau = 0.50s$. Todos os resultados obtidos nesta Seção correspondem a 10 diferentes realizações deste sistema, com exceção daqueles obtidos para o parâmetro de ordem em função do grau de assimetria, como mostrado na Fig. 51, onde foram feitas 20 diferentes realizações.

Para medir a formação de fileiras, introduzimos o seguinte parâmetro de ordem:

$$\Phi = \sum_i \frac{v_x^i \cdot y_i}{|v_x^i \cdot y_i|}, \quad (3.4)$$

onde $v_x^i = \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}$ é a componente da velocidade na direção do fluxo e y_i é a seção transversal do canal. Este parâmetro é igual a ± 1.0 quando o sistema está ordenado com uma direção preferencial, sendo que, seu valor positivo ou negativo depende apenas da assimetria b .

A equação de movimento deste sistema é resolvida numericamente ao longo do tempo empregando-se Verlet (64) com um intervalo de tempo $dt = 10^{-3}s$. As propriedades macroscópicas do sistema, são calculadas somente após 3×10^8 passos de tempo, quando o

estado estacionário é alcançado. Em nossas simulações, variamos os seguintes parâmetros: a profundidade da assimetria na parede de confinamento (profundidade do zigzag) H , a assimetria do zigzag b , a velocidade dos pedestres v , a densidade $\rho = N/A$, onde a área é dada por $A = L_x \times (H + W)$, e o ruído externo ξ .

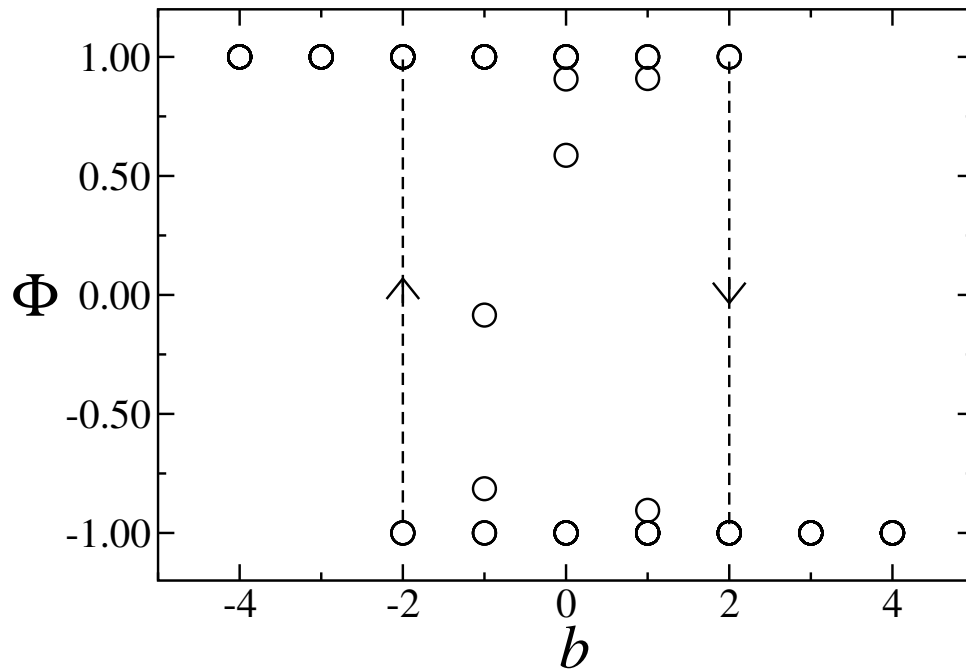


Figura 51: Parâmetro de ordem como função do parâmetro b . Vemos que o ordenamento preferencial do sistema ocorre apenas para altos valores de $|b|$. Os parâmetros usados nestas simulações foram: $w = 4.0$, $H = 1.0$, $L = 10.0$, $\rho = 0.6$, $\xi = 0.0$ e $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 20 diferentes realizações do sistema.

Na Fig. 51 mostramos como o parâmetro de assimetria b influencia na formação de fileiras com direção preferencial. Observamos a existência de duas fases distintas, uma com altos valores de $|b|$, onde temos um forte ordenamento com direção preferencial e outra para valores intermediários de b onde observamos um efeito de histerese. A presença deste efeito sugere que estes sistemas apresentam metaestabilidade típica de uma transição de fase de primeira ordem. Descrevendo os resultados mais detalhadamente, observamos que, para assimetria negativa, e grande o suficiente para garantir a existência de uma direção preferencial para o escoamento ($b < -2.0$), o parâmetro de ordem introduzido é igual a 1.0. Da mesma forma, quando a assimetria for positiva e o seu valor for suficientemente alto para induzir uma ordem preferencial ($b > 2.0$), o parâmetro de ordem é -1.0 . Para valores intermediários da assimetria ($-2.0 < b < 2.0$), o sistema não apresenta ordem preferencial, com o parâmetro de ordem podendo assumir valores no intervalo $-1.0 < \Phi < 1.0$. Este resultado é consequência da formação de fileiras intercaladas com sentidos contrários.

Na tentativa de verificar a existência de um ordenamento preferencial, realizamos si-

mulações com as partículas inicialmente ordenadas em duas fileiras, mas com direções opostas àquelas que seriam induzidas pela geometria do sistema. Neste caso, não observamos a inversão do ordenamento do sistema para o sentido induzido pela assimetria. Atribuímos isto ao fato de que no estado ordenado as partículas interagem fracamente com a geometria do sistema, não havendo portanto energia suficiente para escapar desta configuração, que corresponde a um mínimo local de energia. Foi possível verificar que, quando a densidade do sistema está próxima do valor crítico, as flutuações permitem que as partículas saiam deste mínimo local de energia e alcancem o mínimo global, onde o escoamento ocorre no sentido induzido pela assimetria.

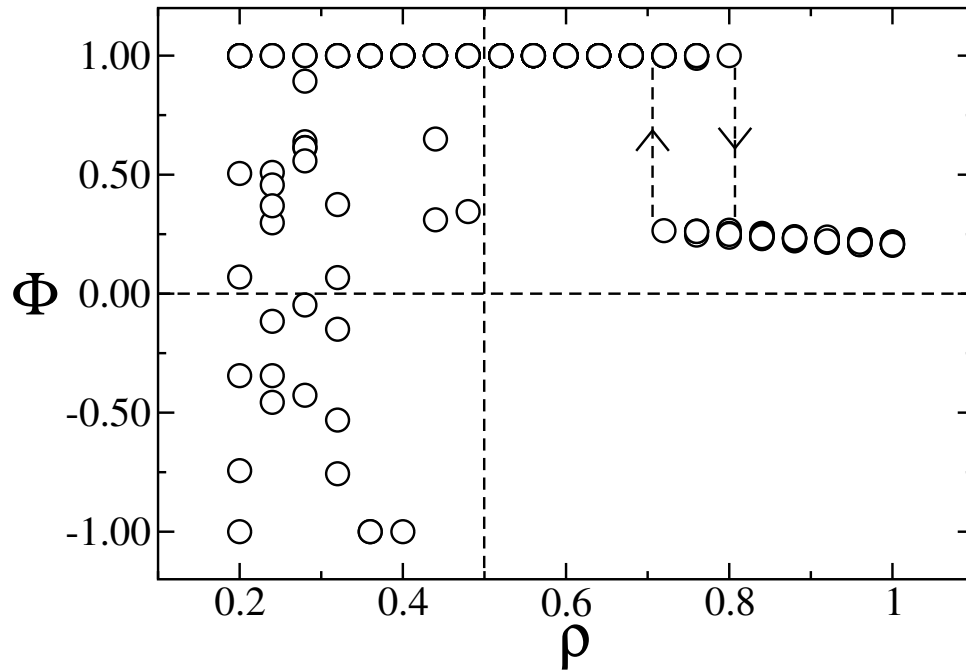


Figura 52: Parâmetro de ordem em função da densidade para $w = 4.0$, de $H = 1.0$, $L = 10.0$, $b = -4.0$, $\xi = 0.0$ and $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.

A densidade também tem uma forte influência sobre o ordenamento, como mostrado na Fig. 52. Observamos três fases distintas para o movimento dos pedestres quando variamos a densidade do sistema. Para baixos valores da densidade, os pedestres interagem fracamente com a parede. Isto favorece a formação de fileiras em posições aleatórias, permitindo que Φ assumam qualquer valor em seu intervalo de validade $[-1, 1]$, dependendo apenas da configuração inicial. Para valores da densidade suficientemente altos, os pedestres são sensíveis à influência da assimetria da parede, que leva o sistema a um forte ordenamento em fileiras com direção preferencial. Neste caso o parâmetro de ordem depende apenas do valor de b , ou seja, $|\Phi| = 1$. Quando o valor da densidade é aumentado ainda mais, o ordenamento é destruído e uma forte resistência ao fluxo é observada

fazendo com que $\Phi \approx 0$. A obstrução do canal somente acontece quando $w = 2.0$, posto que para $w > 4.0$ observamos este efeito.

Para confirmar a presença do ciclo de histerese observado na Fig. 52, realizamos simulações adicionais de dinâmica molecular. Para tanto, iniciamos o sistema com as partículas distribuídas aleatoriamente e esperamos um longo tempo para que a ordem preferencial seja obtida. A partir daí, aumentamos a densidade lentamente e esperamos um tempo suficiente para o sistema relaxar até uma configuração mais estável. Partículas são então acrescentadas em posições aleatórias nas extremidades do canal, tomando as devidas precauções para evitar a superposição.

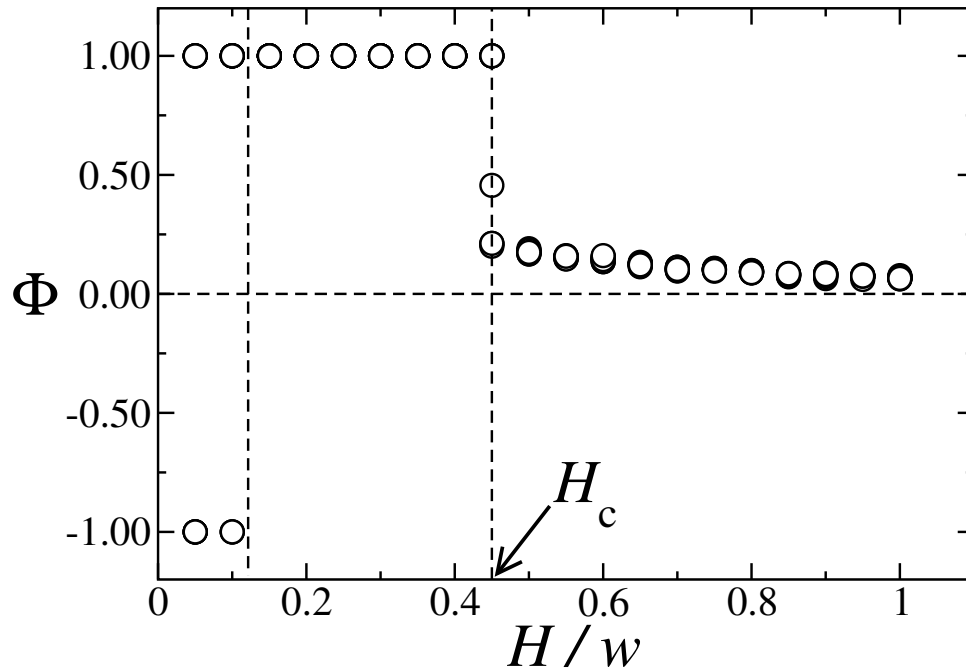


Figura 53: Parâmetro de ordem como função do parâmetro H/w com $w = 4.0$, $L = 10.0$, $b = -4.0$, $\xi = 0.0$ and $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.

Variando a profundidade H da assimetria da parede, também observamos três fases distintas, como mostrado na Fig. 53. Para pequenos valores de H , fileiras são criadas mas sem ordem preferencial. Apenas para grandes valores de H , a forma assimétrica da parede (zigzag) induz uma direção preferencial, fazendo com que $\Phi = \pm 1$, dependendo apenas do valor de b . Quando H assume valores acima de um valor crítico H_c , o fluxo passa a ser desordenado, levando a um aumento da resistência ao escoamento.

O efeito do ruído na dinâmica é mostrado na Fig. 54, onde podemos ver que o ordenamento é sistematicamente destruído. Não observamos o efeito “freezing by heating” com o aumento do ruído externo, como obtido anteriormente por Helbing *et al.* (32) para

o movimento de partículas confinadas em um canal com paredes lisas.

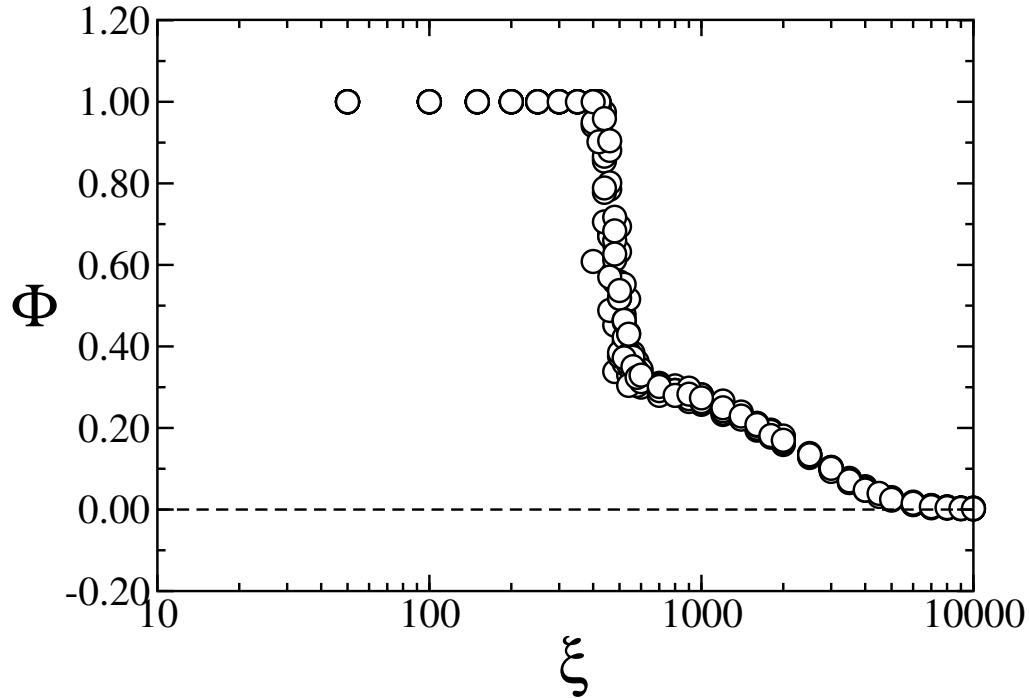


Figura 54: Parâmetro de ordem como função do ruído externo ξ_i presente no sistema, para $w = 4.0$ com $H = 1.0$, $L = 10.0$, $b = -4.0$ e $v = 3.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.

Podemos observar dois regimes diferentes nesta transição, ou seja, uma transição rápida que destrói o estado ordenado do sistema, levando-o a um estado de espalhamento resistivo caracterizado pelas inúmeras colisões entre os pedestres. O segundo regime desta transição está associado ao aumento do espalhamento das partículas com a parede. Este mecanismo de transição será melhor investigado em um trabalho futuro.

Finalmente, também estudamos a dependência do parâmetro de ordem Φ com a velocidade alvo dos pedestres v , como mostrado na Fig. 55. Para pequenos valores de v , o sistema é sempre desordenado. Neste caso, os valores intermediários de Φ indicam uma desordem e, eventualmente, um ordenamento sem direção preferencial. Para valores intermediários de v , o sistema permanece ordenado na direção preferencial induzida pela geometria da parede, até que acima de um valor crítico de v entra em uma nova fase desordenada. Esta última transição novamente mostra pronunciada metaestabilidade.

A metaestabilidade observada na Fig. 55 não pôde ser reproduzida percorrendo um ciclo normal de histerese, ou seja, aumentando e diminuindo a velocidade lentamente. Pelo mesmo motivo mencionado anteriormente, ao entrar no estado ordenado o sistema atinge um mínimo local de energia. A mudança da energia introduzida pela variação da velocidade não é suficiente para retirar o sistema desse mínimo local de energia.

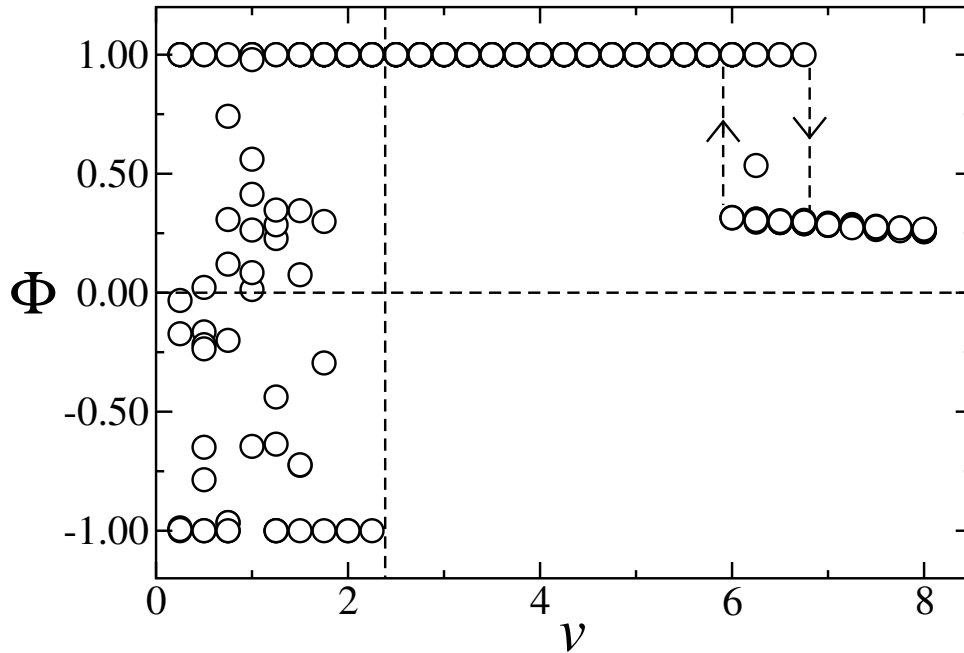


Figura 55: Dependência do parâmetro de ordem com a velocidade, para $w = 4.0$ com $H = 1.0$, $L = 10.0$ e $b = -4.0$. Os resultados obtidos aqui são para 10 diferentes realizações do sistema.

Concluindo, verificamos que uma parede assimétrica na forma de zigzag induz à formação de fileiras com direção preferencial para altos valores de assimetria. A formação destas fileiras também depende da profundidade da assimetria, da velocidade, da densidade e do ruído presente no sistema. O efeito “*freezing by heating*” (32) não foi observado nesta geometria, como mostrado na Fig. 54. A transição de ordem-desordem neste caso parece ser de primeira ordem, apresentando uma pronunciada metaestabilidade.

3.2 Transporte de vórtices

3.2.1 Modelo

Nesta seção estudamos o efeito catraca em um sistema de vórtices em supercondutores bidimensionais. O sistema é confinado na direção y e supomos condições de contorno periódicas na direção x . O potencial tipo catraca é introduzido por meio de uma quebra de simetria espacial no sistema. Tal efeito pode ser introduzido na parede de confinamento ou na forma de um substrato tipo “dente de serra”. Neste último caso, consideramos que o substrato possui uma força F_i^S . A equação de movimento para este sistema pode ser escrita como,

$$\eta \frac{dR_i}{dt} = F_i^{vv} + F_i^{VP} + F_i^S + F_i^{ext} + F_i^T. \quad (3.5)$$

A força do substrato é nula, $F_i^S = 0$, no primeiro caso onde a assimetria é introduzida na parede de confinamento. No segundo caso, esta força é dada por

$$\begin{aligned} F_i^S &= \frac{1}{2}A_p \quad \text{se} \quad 0 \leq \text{mod}(x_i, a) \leq l^+; \\ &= A_p \quad \text{se} \quad l^+ \leq \text{mod}(x_i, a) \leq a, \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde $A_p = 1.0f_0$, $x_i = \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{x}}$, $l^+ = (2/3)a$ é o comprimento ao longo do eixo fácil da catraca e $l^- = (1/3)a$ é o comprimento ao longo do eixo difícil da catraca. A configuração inicial do nosso sistema é obtida usando a técnica de *annealing*, na qual o sistema é iniciado a uma alta temperatura $T_{max} = 5.0$ que é subsequentemente lentamente reduzida até zero. Após reduzirmos a temperatura, aplicamos uma força dc , F_{dc} e medimos o valor da força de depinamento (força a partir da qual a rede de vórtice começa a se mover) para uma força dc positiva e depois para esta mesma força negativa. Por questões de eficiência computacional, desprezamos a força de interação vórtice-vórtice para distâncias maiores de 6λ . A densidade do sistema é medida como sendo,

$$\rho = \frac{N_v}{S}, \quad (3.7)$$

onde $S = L(H + d)$ é a área do canal. A velocidade média do sistema é medida como sendo,

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{j=1}^{N_t} \left(\frac{1}{N_v} \sum_{i=1}^{N_v} \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{x}} \right), \quad (3.8)$$

onde N_t é o número de passos de tempo utilizado, \mathbf{v}_i é a velocidade do vórtice e $\hat{\mathbf{x}}$ é o vetor unitário na direção do movimento. Ao submetermos este sistema a uma força externa, observamos pelo menos três regimes diferentes de movimento. O primeiro regime é obtido quando a força externa é menor que uma força crítica F_c . Neste caso, a rede de vórtices está pinada, $\langle v_x \rangle = 0$. Quando a força externa é maior que F_c , a rede de vórtices entra em movimento, encontrando-se no regime plástico. A principal característica desta fase é que o movimento ocorre sem que a vizinhança dos vórtices seja preservada. Quando a força externa é muito maior que a força crítica F_c , a rede de vórtices move-se sem sentir a presença da barreira de energia devido ao potencial tipo catraca. Este tipo de movimento é conhecido como regime elástico, sendo que nesta fase a vizinhança dos vórtices é preservada.

3.2.2 Paredes assimétricas

O primeiro caso aqui estudado foi à dinâmica de vórtices confinados em um canal de paredes assimétricas, cujo esquema é dado pela Fig. 56. A parede do canal responsável pela retificação do movimento é constituída de partículas repulsivas, onde a distância entre elas é muito pequena se comparada às dimensões do canal.

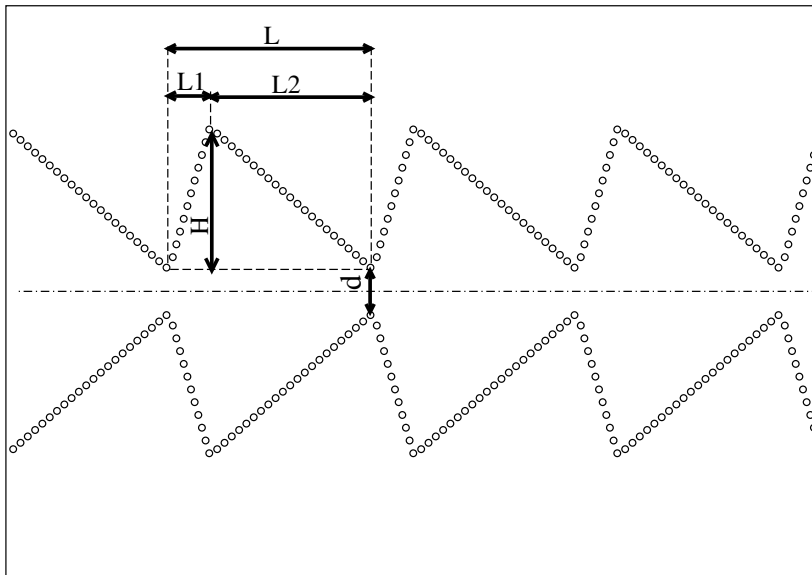


Figura 56: Design do canal usado para confinar as partículas. Este canal é responsável por introduzir um potencial tipo catraca, dando um sentido preferencial para o escoamento quando o sistema é submetido a uma força ac com média zero. L é o comprimento da catraca, $L1$ é o comprimento do eixo difícil da catraca, $L2$ é o comprimento do eixo fácil da catraca, H é a altura da catraca e d é o espaçamento entre as catracas.

Para verificar se este sistema induz uma direção preferencial ao movimento, ou seja, se este sistema é capaz de introduzir um efeito catraca quando submetido a uma força externa ac , estudamos o comportamento desse sistema quando submetido a uma força dc apontando no sentido do eixo fácil da catraca, e depois aplicamos esta mesma força dc no sentido do eixo difícil da catraca. Feito isto, calculamos a força de depinamento nos dois casos para diferentes valores da densidade. Variamos a densidade deixando comensurável o número de vórtices e o número de catracas do sistema. Observamos que, para baixos campos de comensurabilidade, a curva da velocidade média em função da força externa apresenta múltiplas transições plásticas e que o número dessas múltiplas transições depende apenas do campo de comensurabilidade. Tais transições ocorrem devido ao movimento plástico da rede de vórtices. No primeiro depinamento temos que, em média, apenas um vórtice por catraca entra em movimento; no segundo depinamento, dois vórtices por catraca entram em movimento, e assim por diante.

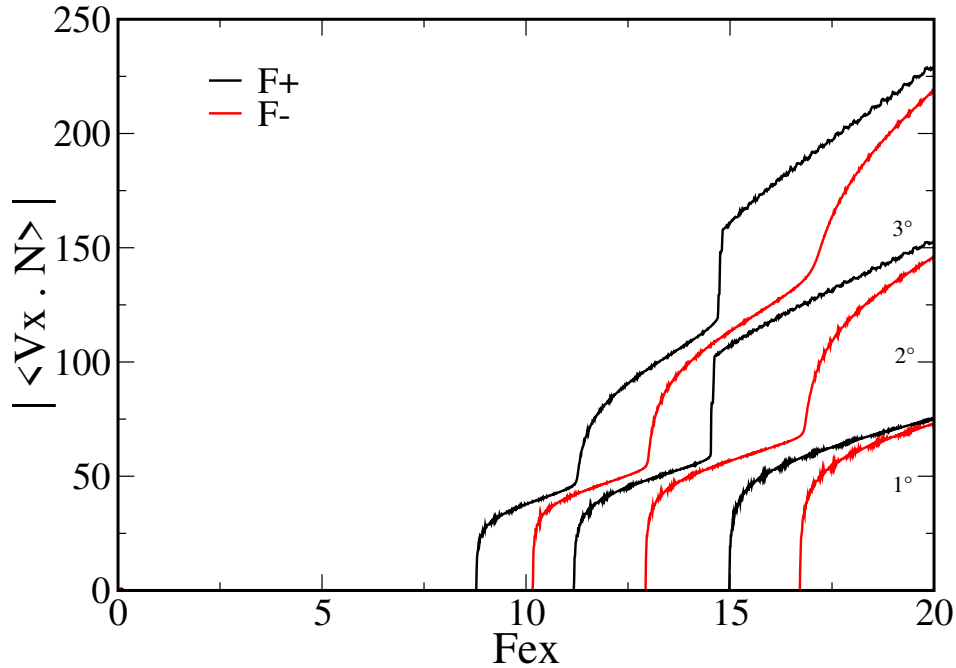


Figura 57: Velocidade média da rede de vórtices na direção x em função da força externa aplicada para diferentes valores da comensurabilidade entre o número de catraca e o número de vórtices. Estes resultados foram obtidos para uma catraca de comprimento $L = 12$, com $L1 = 3$ e $L2 = 9$, com altura $H = 3.0$ e espaçamento $d = 0.9$

Para forças externas suficientemente pequenas $F^{ext} < f_c$, a rede de vórtices encontra-se pinada. Neste caso, os vórtices não possuem energia suficiente para superar a barreira de energia imposta pelo potencial tipo catraca. Existem dois termos que contribuem para a energia dos vórtices: a energia de interação entre eles e a energia introduzida pelo trabalho da força externa sobre a rede de vórtices. Quando a força externa alcança o primeiro campo crítico de *depinning* f_{c1} , apenas um vórtice por catraca pode entrar em movimento. Quando o primeiro vórtice entra em movimento, a soma da energia de interação entre os demais vórtices da catraca com o trabalho da força externa não é suficiente para colocá-los em movimento. Portanto, eles permanecem pinados. O vórtice em movimento colide com os outros vórtices da catraca à frente e transfere momento, colocando um outro vórtice em movimento. Com o aumento da força externa, podemos alcançar os demais campos de depinamento, fazendo com que todos os vórtices do sistema entrem em movimento. Quando a força externa é muito maior que a força imposta pela barreira de energia $F^{ext} \gg F^b$, os vórtices apresentam um movimento elástico.

Para baixos campos de comensurabilidade, podemos notar que a diferença entre as curvas obtidas com a força no sentido do eixo fácil F^+ e no sentido do eixo difícil F^- é nula nas proximidades dos campos de depinamento, implicando em uma ausência de movimento quando o sistema for submetido a uma corrente *ac* para forças acima da força

do primeiro depinamento.

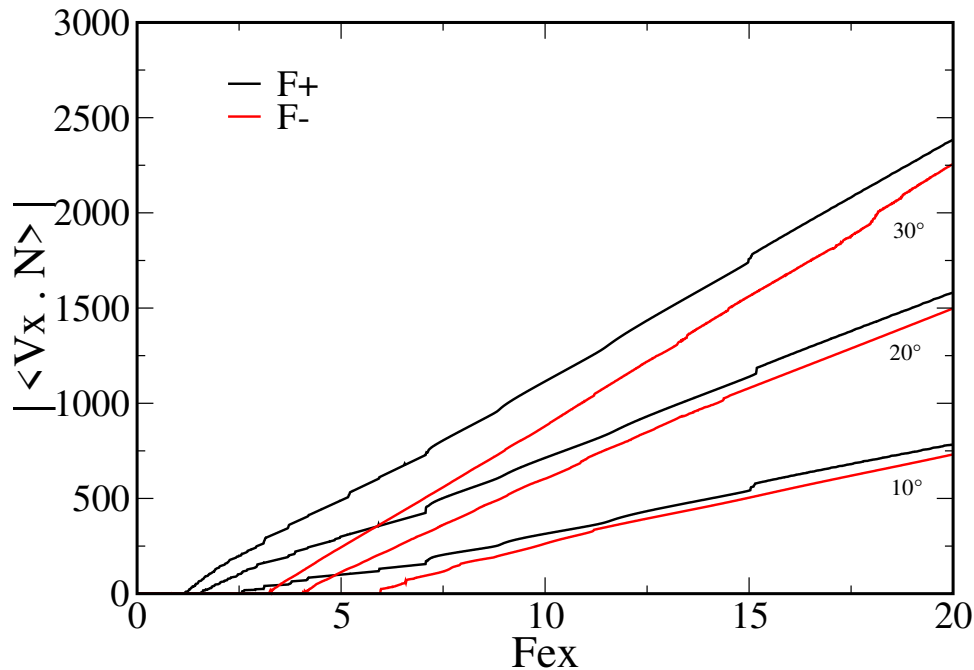


Figura 58: Velocidade média das partículas em função da força externa aplicada, para altos campos de comensurabilidade. Este gráfico mostra que, quando o campo de comensurabilidade é aumentado, as múltiplas transições plásticas que ocorrem em baixos campos de comensurabilidade desaparecem. Estes resultados foram obtidos para uma catraca de comprimento $L = 12$, com $L1 = 3$ e $L2 = 9$, com altura $H = 3.0$ e espaçamento $d = 0.9$.

As múltiplas transições plásticas desaparecem quando o campo de comensurabilidade é aumentado. Isto ocorre principalmente pelo fato de que, para altos campos de comensurabilidade, a força de interação entre os vórtices é significativamente aumentada, fazendo com que o incremento da força necessária para haver o *depinning* de um único vórtice seja muito pequeno, bem como a amplitude dos saltos torna-se significativamente reduzida. Para altos campos de comensurabilidade, o depinamento ocorre de forma coletiva, como mostrado na Fig. 58. Além da existência de um depinamento coletivo, observamos que a diferença entre as curvas com a força no sentido do eixo fácil F^+ e no sentido do eixo difícil F^- da catraca nunca é zero.

Finalmente, verificamos que os nossos resultados independem do comprimento do canal. O mecanismo de reversão do efeito catraca verificado em outras estruturas não foi obtido aqui.

3.2.3 Substrato assimétrico

No segundo caso, onde temos as paredes lisas, o efeito catraca é introduzido por um substrato na forma de um potencial assimétrico. Estudamos o comportamento do sistema variando a largura do canal, mas não verificamos nenhuma alteração das propriedades da rede de vórtices.

Iniciamos os estudos com um canal com condição de contorno periódica em todas as direções. Confinamos o sistema na direção y e diminuimos gradativamente a largura do sistema até dimensões da ordem do comprimento de penetração de London λ . Não observamos o mecanismo de múltiplas transições plásticas, como encontrado no caso onde a rede de vórtices é confinada por paredes assimétricas.

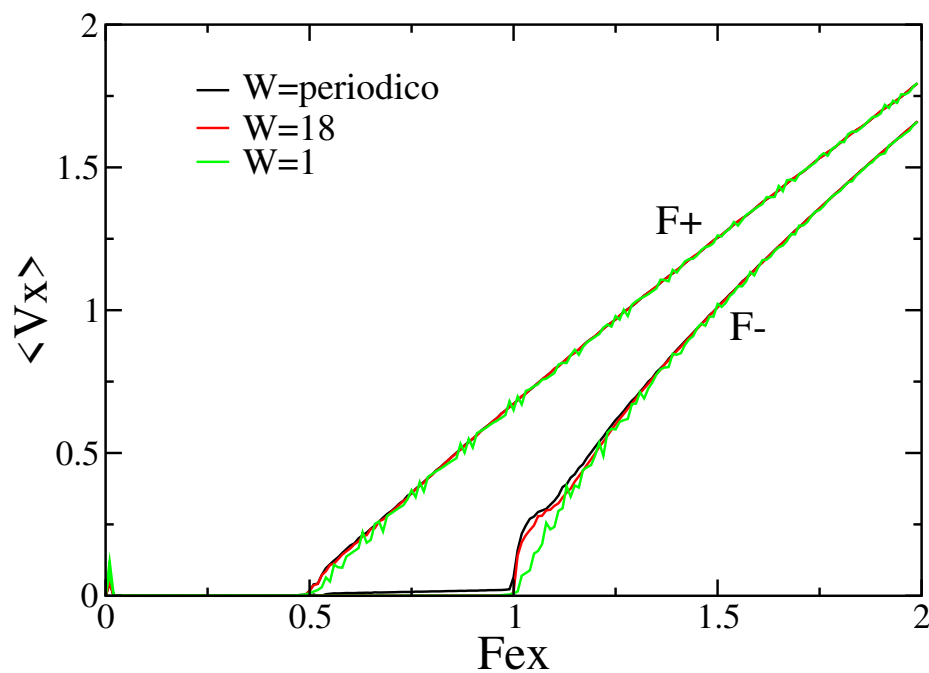


Figura 59: Velocidade média das partículas em função da força externa para diferentes largura do canal. Os resultados aqui mostrados são para uma densidade $\rho = 0.22$.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Como conclusão deste trabalho, mostramos no capítulo 2 que as propriedades dinâmicas de um sistema de partículas interagentes no estado estacionário e na presença de um obstáculo para o transporte pode ser descrita por uma equação diferencial obtida a partir do *coarse-graining* da equação de Fokker-Planck. A única restrição para a utilização desta equação é que a interação entre as partículas envolva partículas além dos primeiros vizinhos. Observa-se também que esta equação é capaz de descrever o fluxo no transporte de vórtices em supercondutores, sistemas coloidais e para o movimento de pedestres. Mais precisamente, mostramos que para canais mesoscópicos, o parâmetro a que aparece na Eq. (2.23), precisa ser corrigido devido à influência da energia de superfície na dinâmica do sistema. Este parâmetro depende da força de interação entre as partículas que pode mudar de acordo com o sistema estudado.

Mostramos que o modelo dado pela Eq. (2.23) é válido para diferentes tipos de obstáculos. Nos limites onde a força externa é muito alta ou muito baixa com relação à energia imposta pelo obstáculo, a solução da equação diferencial Eq. (2.23) que descreve o comportamento do sistema pode ser substancialmente simplificada.

No capítulo 3 mostramos que o confinamento, por paredes assimétricas de um sistema de partículas interagentes escoando em direções opostas, induz uma ordem preferencial no escoamento do sistema. Esta ordem faz com que o fluxo seja maximizado. Mostramos também que o ordenamento preferencial do sistema pode ser destruído pelas seguintes propriedades da parede de confinamento: grau de assimetria e a profundidade da assimetria; e por propriedades do sistema como densidade, velocidade e ruído externo ao sistema. Verificamos que as transições de ordem-desordem neste sistema são acompanhadas de metaestabilidade e apresentam ciclos de histerese, ou seja, propriedades características de uma transições de fase de primeira ordem.

Ainda no capítulo 3 Na dinâmica de partículas “pedestres” movimentando-se em direções opostas, verificamos três fases diferentes para o sistema: movimento livre, movimento ordenado (formação de fileiras) e movimento desordenado (transporte com alta resistência).

Finalmente, também no capítulo 3 observamos que a dinâmica de vórtices em estruturas assimétricas, calculada em baixos campos de comensurabilidade, leva ao aparecimento de múltiplos depinamento neste sistema. Estes múltiplos depinamento estão relacionados com os diferentes regimes de plasticidade do sistema e são intrínsecos às propriedades de confinamento assimétrico. Quando a assimetria é introduzida no substrato, esta propriedade não é observada.

Como perspectivas para trabalhos futuros, pretendemos fazer simulações com condições de contorno abertas em todos os sistemas estudados, objetivando verificar a influência do comprimento do canal na dinâmica destes sistemas.

No que se refere à dinâmica de pedestres pretendemos introduzir um potencial atrativo e/ou repulsivo nas paredes de confinamento do sistema e usar diferentes velocidades para os pedestres. Usaremos a solução analítica obtida nesta tese para a dinâmica de partículas superamortecidas na presença de um obstáculo com intuito de descrever a dinâmica de pedestres em sentidos contrários.

Pretendemos aprofundar nossos estudos para a dinâmica de vórtices na tentativa de compreender melhor o mecanismo de múltiplas transições plásticas nestes sistemas. Verificaremos como este comportamento é afetado pela inclusão de efeitos de temperatura. Acreditamos que este mecanismo pode ser usado para desenvolver novos dispositivos para a remoção de vórtices do interior de amostras supercondutoras. Tentaremos expandir o modelo aqui empregado para descrever um movimento mais geral não necessariamente superamortecido e resolver este sistema para o estado estacionário.

Esperamos comprovar os resultados obtidos nesta tese através de experimentos. Inicialmente tentaremos realizar experimentos com partículas magnéticas suspensas em solução aquosa, confinadas e na presença de um obstáculo para o fluxo. O fluxo e a densidade de partículas poderão ser medidos através de vídeos, por imagens de ressonância magnética, por medidas da resistência transversal no canal ou ainda por técnicas de microscopia Hall.

Tentaremos obter sistemas com partículas interagentes de maior diâmetro ou com maiores raios de ação na tentativa de poder usar estruturas da ordem de milímetros ou maiores. Isto poderá reduzir os custos com dos experimentos e tornar factível tais medidas.

APÊNDICE A – Um Breve Histórico da supercondutividade

Em 1911, H. K. Onnes verificou que a resistência elétrica do mercúrio cai abruptamente à zero quando este é submetido a uma temperatura extremamente baixa. Este fenômeno recebeu o nome de supercondutividade (75, 78).

Posteriormente, H. K. Onnes observou que esta propriedade pode ser destruída quando um campo magnético ou uma corrente elétrica suficientemente intensa fosse aplicado no material. Em 1916, Silsbee sugeriu pela primeira vez que o campo crítico magnético seria o campo necessário para criar uma corrente crítica (56).

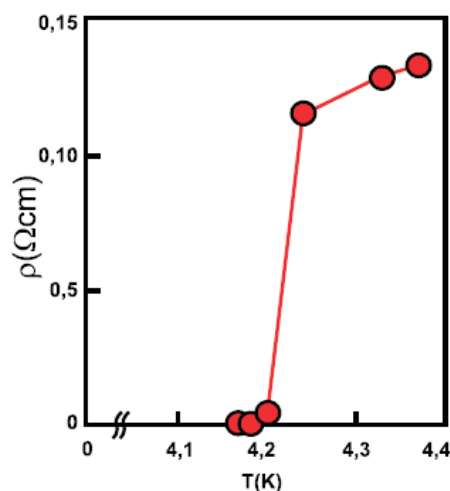


Figura 60: Resistividade elétrica do mercúrio em função da temperatura absoluta. Curva original obtida por H. K. Onnes em 1911, esta curva marcou a descoberta da supercondutividade. Isto só foi possível porque em 1908 Onnes conseguiu liquefazer o hélio pela primeira vez, possibilitando alcançar temperaturas extremamente baixas jamais alcançada anteriormente (51). Posteriormente, Onnes verificou que este fenômeno também ocorria com outros elementos químicos da tabela periódica.

Inicialmente imaginava-se que os supercondutores seriam apenas condutores perfeitos

com resistência elétrica nula abaixo de uma determinada temperatura. Em 1933 Meissner e Ochsenfeld mostraram que além de resistência elétrica nula os supercondutores são diamagnéticos perfeito, isto é, o campo magnético em seu interior, abaixo de uma temperatura crítica T_c , é nulo. Independente da história magnética do material. Posteriormente foi verificado que o estado supercondutor é um estado termodinâmico com uma transição de fase em $T = T_c$ (60). Este efeito é hoje conhecido como efeito Meissner, ele é responsável pela diferença entre um material supercondutor e um condutor perfeito como podemos ver na ilustração abaixo.

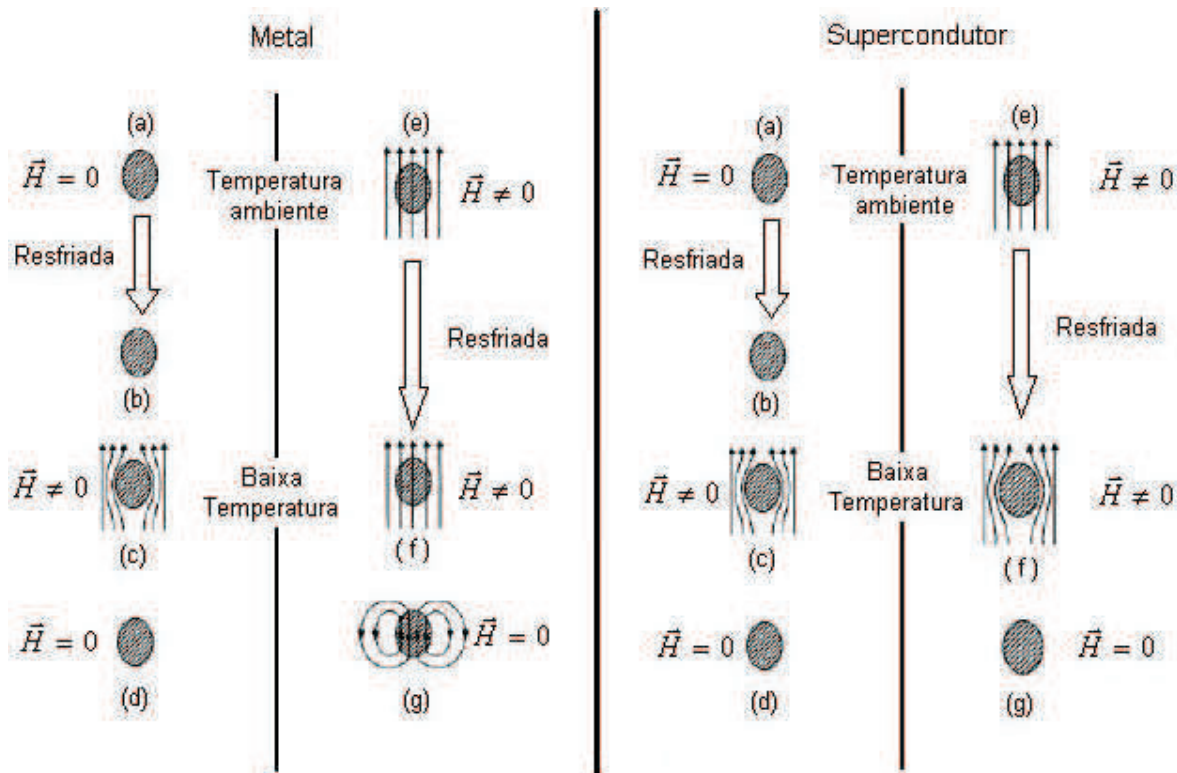


Figura 61: Comportamento de um supercondutor e de um metal normal quando submetidos as seqüências de medidas magnéticas ZFC(zero field cooled) e FC (field cooled). Podemos ver que a magnetização de um material supercondutor independe da história magnética do sistema, isto não ocorrer com um metal normal.

Na Fig.61, comparamos o comportamento de um metal normal e de um material supercondutor quando submetidos a seqüências de medidas magnéticas ZFC (do inglês Zero Field Cooled ou esfriada a campo zero) e FC (do inglês Field Cooled ou esfriada com campo). Nas medidas magnéticas ZFC o comportamento do metal normal e do material supercondutor são idênticos, no entanto, nas medidas magnéticas FC o material supercondutor apresenta uma magnetização nula no seu interior diferente do verificado num metal normal.

A supercondutividade ficou até a metade do século XX sem uma explicação teórica ca-

paz de descrever a sua origem satisfatoriamente. Antes disso, alguns modelos fenomenológicos, foram usados com sucesso para explicar as propriedades básicas dos supercondutores.

O primeiro modelo fenomenológico, usado para explicar as propriedades do estado supercondutor, foi proposto em 1935 pelos irmãos London. Este modelo introduz um comprimento característico conhecido como comprimento de penetração de London λ , que descreve quanto o campo magnético consegue penetrar em um material supercondutor. A teoria de London considera os vórtices como partículas pontuais e não leva em conta o tamanho nem a estrutura interna do vortex (78).

Em 1950, L. D. Ginzburg (nobel 2003) e V. L. Landau propuseram uma nova teoria fenomenológica (teoria de Ginzburg-Landau), capaz de explicar a maioria das propriedades macroscópicas dos supercondutores, A teoria de Ginzburg-Landau é baseada na existência de um parâmetro de ordem complexo, que descreve uma função de onda macroscópica, cujo módulo quadrado é a densidade de portadores de cargas da fase supercondutora. A teoria de Ginzburg-Landau introduz dois novos parâmetros úteis na descrição do estado supercondutor, o comprimento de coerência ξ que mede a distância entre os elétrons que formam os pares de Cooper e o parâmetro adimensional de Ginzburg-Landau $\kappa = \lambda/\xi$, dado pela razão entre os comprimentos de penetração de London e o comprimento de coerência. A teoria de London pode ser obtida a partir da teoria de Ginzburg-Landau no limite $\lambda \gg \xi$. A teoria de London tem sido usada com sucesso na descrição do estado de vórtices em supercondutores do tipo II no limite $\lambda \gg \xi$. Na descrição do estado de vórtices ξ pode ser interpretado como o diâmetro do núcleo do vórtice.

Em 1957, A. A. Abrikosov (Nobel 2003) estudou os limites da teoria de Ginzburg-Landau com $\kappa \gg 1$ e $\kappa \ll 1$. Ele observou que a supercondutividade podia coexistir com regiões normais quando $\kappa > \sqrt{1/2}$. Abrikosov mostrou que quando aplicamos um campo magnético suficientemente intenso (acima de H_{c1}) e $\kappa > \sqrt{1/2}$ o material supercondutor pode coexistir com regiões normais com $H \neq 0$ no seu interior. O campo magnético entra no material supercondutor na forma de linhas quantizadas chamadas de vórtices. Nestes materiais, as propriedades supercondutoras só são destruídas quando o valor do campo magnético externo ultrapassa o valor do campo crítico superior H_{c2} que pode ser muito maior que o campo crítico termodinâmico H_c . A partir daí os supercondutores foram divididos em duas classe: supercondutores do tipo I, com $\kappa < \sqrt{1/2}$, e de supercondutores do tipo II com $\kappa > \sqrt{1/2}$ (1).

Ainda em 1957 Bardeen, Cooper e Schriffer (3, 4) (Nobel 1972) propuseram uma teoria

microscópica (Teoria BCS) capaz de descrever as propriedades dos supercondutores uniformes (supercondutores do tipo I), essa teoria considera a formação de pares de elétrons (partícula bosônica) mediados por fônons, responsáveis pela propagação de corrente sem dissipar energia. A teoria BCS não menciona nada sobre a supercondutividade em materiais com propriedades de transporte anisotrópicas ou em materiais não homogêneos com o parâmetro de ordem variando no espaço.

Em 1959, L. P. Gor'kov (24) mostrou que a teoria de Ginzburg-Landau pode ser obtida a partir da teoria BCS no limite de temperaturas próximas da temperatura de transição.

Em 1962, B. D. Josephson (42) verificou que uma corrente supercondutora pode fluir através de uma junção supercondutor-isolante-supercondutor (SIS) sem nenhuma tensão através da barreira, desde que a camada isolante fosse suficientemente fina. Este efeito é chamado de efeito Josephson *dc* e foi posteriormente comprovado em laboratório e permitiu mostrar consequência da física quântica em escala macroscópica. O efeito Josephson foi usado para desenvolver dispositivos supercondutores capazes de fazer medidas magnéticas de alta precisão. Por essa descoberta, B.D. Josephson recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1973.

Em 1986, os cientistas J. G. Bednorz e K. A. Müller (6), pesquisadores da IBM, descobriram a supercondutividade em uma nova classe de materiais a base de $La-Ba-Cu-O$ com temperatura de transição de aproximadamente $30K$ revolucionando as pesquisas na área da supercondutividade. Vários grupos de pesquisa do mundo inteiro entraram numa corrida em busca de materiais com temperaturas de transição cada vez mais elevadas, surgindo então os chamados supercondutores de alta temperatura crítica (HTSC - do inglês High temperature superconductors).

Em 1987, os físicos americanos Paul Chu e Maw-Kuen Wu (34, 83, 89) descobriram a supercondutividade no composto por Y-Ba-Cu-O com temperatura crítica de $93 K$ o que possibilitou o uso de nitrogênio líquido criogênico para o estudo das propriedades supercondutoras. Posteriormente novos materiais foram encontrados: Bi-Ca-Sr-Cu-O com $T_c = 110K$ (52), Tl-Ca-Ba-Cu-O com $T_c = 125K$ (29, 71, 72), Hg-Ba-Ca-Cu-O com $T_c = 140K$ podendo chegar a $T_c = 160$ quando submetido a pressão (37, 70).

Na década de 1990 foi verificada a coexistência de supercondutividade com magnetismo. (17, 28). Os compostos que exibem este comportamento na classe dos HTSC são em geral à base de Ru com composição nominal $RuSr_2RECu_2O_8$ ($Ru - 1212$) e $RuSr_2(RE_{2-x}Ce_x)Cu_2O_{10-\delta}$ ($Ru - 1222$) com $RE = Gd, Eu$. (5, 18). Embora a temperatura de transição nesses materiais sejam inferiores a maioria dos (HTSC), eles tem

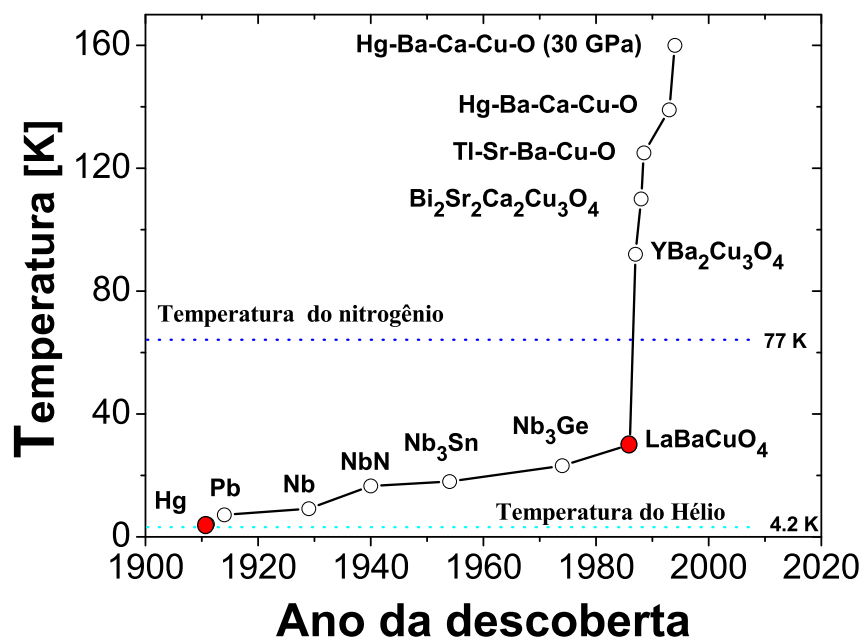


Figura 62: Este gráfico mostra os avanços nas pesquisas em busca de materiais com temperatura crítica cada vez mais elevada. podemos ver o aumento explosivo na temperatura crítica dos materiais supercondutores após a descoberta da supercondutividade no sistema La-Ba-Cu-O, este trabalho rendeu o prêmio nobel aos pesquisadores J. G. Bednorz e K. A. Muller em 1987

chamados bastante a atenção devido as suas propriedades.

Em 2001, foi descoberto a supercondutividade no composto MgB_2 com temperatura crítica $T_c = 39K$ (58). A descoberta da supercondutividade nesses materiais mostrou ser possível encontrar HTSC sem planos de $Cu - O$.¹

Recentemente, em 2008, uma nova classe de (HTSC) baseado na liga La-Fe-As-F-O (77), tem sido apontada como promissora para encontrar materiais supercondutores com temperatura crítica ainda mais elevada, com baixo custo de produção e com novas propriedades.

Ainda não há um consenso sobre o mecanismo responsável pela supercondutividade nos HTSC. A teoria BCS não é capaz de descrever completamente a supercondutividade nesses materiais, isto ocorre principalmente pelo fato dos HTSC apresentarem uma função de onda do tipo d e a teoria BCS só consegue explicar a supercondutividade em materiais homogêneo com função de onda do tipo s . Há várias especulações sobre o mecanismo responsável pela supercondutividade. Dentre eles se destacam os mecanismos: emparea-

¹o nome HTSC e designado a todos os materiais supercondutores que apresentam temperaturas criticas superiores a 26 K valor máximo da temperatura de transição estipulado por B. T. Mathias.

mento de ondas do tipo d, supercondutividade mediada por interação entre spins. (38–40)
dentre outros (20, 28, 43).

APÊNDICE B – Teorias para o estado supercondutor

B.1 Teorias fenomenológicas

B.1.1 Teoria de London

Em 1935, os irmãos H. London e F. London propuseram a primeira teoria fenomenológica capaz de explicar as propriedades básicas dos materiais supercondutores. A primeira consideração, desta teoria, é assumir que a segunda lei de Newton pode ser escrita como:

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e^* \mathbf{E} , \quad (\text{B.1})$$

onde m^* é a massa, e^* é a carga e \mathbf{v} é a velocidade dos portadores de carga, \mathbf{E} é o campo elétrico aplicado. Assumindo que a densidade de corrente supercondutora é dada por $\mathbf{j} = -n_s e^* \mathbf{v}$, onde n_s é a densidade de elétrons supercondutores, a Eq. (B.1) pode ser escrita como

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = \frac{n_s e^{*2}}{m^*} \mathbf{E} . \quad (\text{B.2})$$

A Eq. (B.2) representa a primeira equação de London, Usando a lei de Faraday $\nabla \times \mathbf{E} = -d\mathbf{h}/dt$ juntamente com esta equação obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\nabla \times \mathbf{j} + \frac{n_s e^{*2}}{m^*} \mathbf{h} \right] = 0 , \quad (\text{B.3})$$

esta equação é válida para todo condutor perfeito. Podemos ver que qualquer valor de j e do campo magnético \mathbf{h} constantes no tempo pode ser solução da Eq. B.3. Para que esta equação pudesse descrever o efeito Meissner os irmão London assumiram que só uma família restrita de soluções da Eq. B.3 pode descrever o estado supercondutor, estas soluções são dadas por:

$$\nabla \times \mathbf{j} + \frac{n_s e^{*2}}{m^*} \mathbf{h} = 0 , \quad (\text{B.4})$$

combinando a Eq. (B.4) com a lei de Amperé para o regime estacionário $\nabla \times \mathbf{h} = \mu_0 \mathbf{j}$, temos

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{h}) + \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{h} = 0, \quad (\text{B.5})$$

assumindo $\nabla \cdot \mathbf{h} = 0$ e usando a identidade $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{h}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{h}) - \nabla^2 \mathbf{h}$ podemos escrever

$$\nabla^2 \mathbf{h} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{h} \quad (\text{B.6})$$

A Eq. (B.6) é conhecida como a segunda equação de London, onde λ é o comprimento de penetração de London definido como

$$\lambda^2 = \frac{m^*}{n_s e^{*2}}. \quad (\text{B.7})$$

A energia livre de Helmholtz segundo a teoria de London para uma interface normal-supercondutor paralela ao plano xy na presença de um campo magnético externo \mathbf{h} aplicado na direção z pode ser escrita como,

$$F = \frac{A}{2\mu_0} \int dx (f_s + \mathbf{h}^2 + \lambda^2 |\nabla \times \mathbf{h}|^2), \quad (\text{B.8})$$

neste caso consideramos que o material supercondutor esta ocupando a região $x > 0$, Esta equação será usada posteriormente para calcular as propriedades do material supercondutor.

Usando a Eq. (B.6) podemos calcular o campo magnético no interior do material supercondutor no semi-espaco $x > 0$, a superfície do supercondutor coincide com o plano em $x = 0$. o supercondutor é submetido a um campo magnético externo $H = h_0 \mathbf{z}$ levando em conta a simetria do problema podemos escrever a equação B.6 como:

$$\frac{d^2 \mathbf{h}}{dx^2} - \lambda^{-2} \mathbf{h} = 0. \quad (\text{B.9})$$

As condições de contorno do problema são: $h(0) = h_0$, $h(\infty) = 0$, esta segunda condição de contorno é devido ao efeito Meissner. A solução da equação diferencial B.9 é

$$\mathbf{h} = h_0 e^{-x/\lambda}. \quad (\text{B.10})$$

O comprimento de penetração de London λ é um comprimento característico do sistema. Este comprimento varia muito entre os materiais supercondutores, em geral, o comprimento de penetração é da ordem de nanômetros em supercondutores do tipo I podendo chegar a micrômetros em supercondutores do tipo II, isto pode ser visto na tabela

abaixo.

	T_c (K)	λ (nm)	ξ (nm)	κ
Al	1.2	1600	16	0.01
Pb	7.2	83	37	0.45
Nb	9.2	38	39	1.02
YBCO	92	1460	2	730
MgB_2	39	--	--	26

Figura 63: Tabela mostrando os valores da temperatura crítica T_c , do comprimento de penetração λ , do comprimento de coerência ξ e do parâmetro de Ginzburg-Landau κ . Os valores de λ e ξ para o MgB_2 não foram encontrados na literatura.

A teoria de London tem provado ser útil na descrição do estado supercondutor e do estado de vórtice em supercondutores do tipo II, no limite $\lambda \gg \xi$. É importante lembrar que a maioria dos supercondutores são do tipo II e apresentam $\lambda \gg \xi$, neste limite os vórtices podem ser tratados como objetos pontuais. Para que possamos usar a teoria de London temos ainda que observar que:

- O campo magnético externo \mathbf{h} deve ser pequeno para que possa ser tratado como uma perturbação, isto é, $\mathbf{h} \ll \mathbf{h}_{c2}$
- A densidade de elétrons supercondutores $n_s(\mathbf{r})$ deve ser aproximadamente constante em todo material supercondutor. Esta condição é equivalente a assumir que a temperatura do sistema não varia localmente.

Embora a teoria de London não consiga descrever a estrutura dos vórtices ela pode ser usada para seu comportamento em escala macroscópica.

B.1.2 Teoria de Ginzburg-Landau

Embora a teoria de London descreva de forma prática as propriedades básicas dos supercondutores, ela é limitada a sistemas onde o campo magnético aplicado é constante e muito menor que o campo crítico da amostra. A teoria de London também não pode ser aplicada a sistemas onde a densidade de elétrons supercondutores varia consideravelmente. Nestes casos convém utilizar a teoria de Ginzburg-Landau (GL). A teoria de GL oferece uma descrição simples e compatível com a maioria dos resultados experimentais, permitindo inclusive estudar a dinâmica de vórtice em supercondutores, esta teoria é

baseada na teoria de transição de fase de segunda ordem de Landau, basicamente ela consiste em expandir a energia livre em potências do parâmetro de ordem, numa temperatura próxima da temperatura de transição.

A teoria de GL pode ser vista como uma generalização da teoria de London, esta teoria prever a existência de uma função de onda $\psi(\mathbf{r})$ que descreve o fluido quântico formado pelos elétrons supercondutores. Esta função de onda, introduzida por Ginzburg e Landau como um parâmetro de ordem complexo, é dada por:

$$\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|e^{i\varphi(\mathbf{r})}, \quad (\text{B.11})$$

desta forma a densidade local de super-elétrons n_s é dada por

$$n_s = |\psi(\mathbf{r})|^2. \quad (\text{B.12})$$

Podemos ver que diferentemente da teoria de London, n_s não é necessariamente homogêneo no espaço.

A densidade de energia livre de Helmholtz proposta por Ginzburg e Landau para um supercondutor isotrópico, expandida em potências pares do parâmetro de ordem $\psi(\mathbf{r})$ próximo da temperatura de transição pode ser escrita como:

$$f_s = f_{n0} + \alpha|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi(\mathbf{r})|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - e^*\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) \right|^2 + \frac{\mathbf{h}^2(\mathbf{r})}{2\mu_0} \quad (\text{B.13})$$

onde m^* e e^* são a massa e a carga efetiva dos portadores de carga, respectivamente. \mathbf{A} é o potencial vetor dado por $\mathbf{h} = \nabla \times \mathbf{A}$. Na descrição de supercondutores anisotrópicos é importante levar em conta a natureza tensorial de m^* . O primeiro termo do lado direito da Eq. (B.13) corresponde a energia do estado normal, os próximos dois termos correspondem à energia de condensação do estado supercondutor, representado por uma expansão típica para a energia livre na teoria geral de Landau, onde α e β são os parâmetros fenomenológico da expansão. O quarto termo pode ser visto como a energia associada às variações espaciais do parâmetro de ordem (uma das limitações da teoria de London) e pode ser escrito como $\mathbf{P}^2/2m$, onde \mathbf{P} é o momento canônico invariante de calibre. O último termo corresponde ao aumento na energia necessária para assegurar o efeito Meissner, ou seja, para expulsar o fluxo magnético do interior do supercondutor.

Para interpretamos fisicamente as constantes α e β , iremos considerar o funcional de energia na ausência de campos e de variações espaciais do parâmetro de ordem, sendo

assim a energia livre pode ser escrita como

$$f_s = f_{n0} + \alpha|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi(\mathbf{r})|^4. \quad (\text{B.14})$$

Podemos ver claramente que β não pode ser negativo, caso contrário não teríamos um mínimo global de energia (exceto para valores infinitos de ψ onde a expansão não é mais válida). Mesmo com $\beta > 0$, α precisa ser negativo, pois para valores de $\alpha > 0$ o único mínimo possível é para $\psi = 0$, o que faz o material está no estado normal. Para valores de $\alpha < 0$, haverá um mínimo em na energia livre em um valor não nulo de $|\psi|^2$ dado por:

$$|\psi_\infty|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}. \quad (\text{B.15})$$

O comportamento de α com a temperatura é dado por $\alpha(T) = \alpha_0(T - T_c)$. Podemos notar que esta expressão nos dar um valor de α maior que zero para $T > T_c$ e menor que zero para $T < T_c$, temos ainda que $\alpha(T) = 0$ define a temperatura de transição T_c . O índice ∞ na Eq. (B.15) significa que este é o valor que $|\psi|^2$ assume no interior do supercondutor, muito longe das bordas do material, onde a supercondutividade é homogênea.

Usando o valor do mínimo de energia livre dado pela Eq. B.15 na Eq. B.14 e integrando esta equação no volume, obtemos que a diferença de energia entre os estados normal e supercondutor neste limite, é dada por

$$\begin{aligned} F_s - F_{n0} &= \int d^3r (f_s - f_{n0}) \\ &= \int d^3r \left(-\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\beta} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Esta é a energia necessária para manter o campo magnético fora do material supercondutor, F_s e F_{n0} são os valores da energia livre do estado supercondutor e do estado normal respectivamente.

O campo crítico termodinâmico é proporcional a diferença de energia livre entre o estado normal e o estado supercondutor

$$F_s - F_{n0} = \frac{\mu_0}{2} H_c^2, \quad (\text{B.17})$$

sendo assim os valores de α e β se relacionam com o campo crítico termodinâmico pela expressão,

$$H_c^2 = \frac{\alpha^2}{\mu_0 \beta} \quad (\text{B.18})$$

Para obtermos as equações de Ginzburg-Landau temos que minimizar a energia livre dada pela Eq. (B.13) com relação ao parâmetro de ordem ψ e ao potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, temos

então

$$\frac{\partial f_s}{\partial \psi} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla - e^*\mathbf{A})^2 \psi + \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0, \quad (\text{B.19})$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{A}} = 0 \quad \rightarrow \quad \mathbf{j}_s = -i\frac{\hbar e^*}{2m^*} (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{\mathbf{A}e^{*2}}{m^*} |\psi|^2. \quad (\text{B.20})$$

Para chegar nas Eqs. (B.19) e (B.20), usamos o gauge de Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) e definimos o campo magnético como $\mathbf{h} = \nabla \times \mathbf{A}$. j_s é a densidade de corrente supercondutora. As equações B.19 e B.20 são à primeira e a segunda equação de Ginzburg-Landau, respectivamente.

O limite de validade das equações de Ginzburg-Landau foi estimado, em 1959, por L.P. Gorkov. Levando em conta a pureza das amostras, Gorkov mostrou que podemos obter as equações de GL a partir da teoria microscópica BCS enfatizando os seguintes critérios:

- A função de onda deve variar suavemente em distâncias da ordem de ξ_0 , sendo assim uma condição necessária para a validade da teoria é que $\xi(T) \gg \xi_0$.
- As relações locais entre a corrente e o potencial vetor devem ser válidas apenas se \mathbf{h} e \mathbf{A} variarem suavemente em distâncias da ordem de ξ_0 . Para que isto seja verdade temos que $\lambda(T) \gg \xi_0$.

Embora a teoria de GL seja, a princípio, limitada a temperaturas próximas à T_c , ela tem mostrado descrever bem as propriedades das amostras em temperatura longe de T_c . Isto pode ser atribuído ao fato de que a maioria das amostras supercondutoras usadas no nosso dia-a-dia estejam enquadradas no "limite sujo". Neste limite a teoria de GL é válida em um amplo espectro de temperatura.

B.1.3 Comprimentos característicos

Os comprimentos característicos do estado supercondutor, comprimento de coerência $\xi(T)$ e comprimento de penetração $\lambda(T)$, podem ser obtidos a partir da primeira e segunda equação de GL, respectivamente. O comprimento de coerência $\xi(T)$ nos dar a escala de comprimento a partir da qual o parâmetro de ordem pode variar, mede também as distâncias entre os elétrons que formam os pares de Cooper. O comprimento de penetração

$\lambda(T)$ nos dar a escala de comprimento onde os campo e correntes podem variar, numa interface normal-supercondutor.

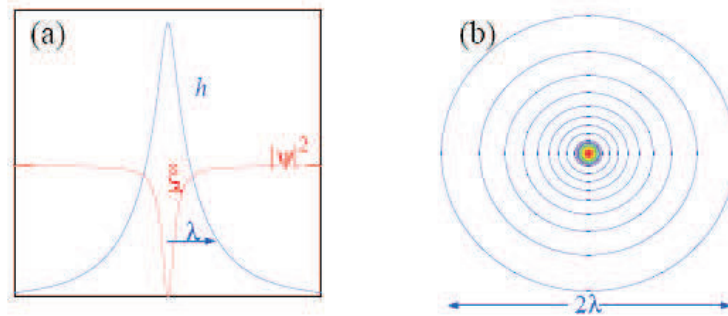


Figura 64: (a) Perfis do campo, \mathbf{h} (azul), e do parâmetro de ordem supercondutor $|\psi|^2$ (vermelho). (b) Linhas de contorno da supercorrente (azul) em torno do núcleo do vórtice. Nesta figura temos $\lambda = 10\xi$. Figura obtida de L. E. Cabral.

Na ausência de campos e de correntes externas, podemos assumir que $\mathbf{A} = 0$ e que todos os coeficientes da Eq. (B.19) são reais de modo que $\psi = \psi^*$, a menos de uma fase. Desta forma a Eq. (B.19) pode ser escrita como,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \beta\psi^3 + \alpha\psi = 0. \quad (\text{B.21})$$

Esperamos que para um supercondutor homogêneo o parâmetro de ordem seja aproximadamente constante ($\psi = \psi_\infty$). Nesta região a solução da Eq. (B.21) nos dar $\psi_\infty^2 = -\alpha/\beta > 0$. Para encontrarmos o comprimento característico de $\psi(x)$ em torno de um ponto onde ($\psi \neq \psi_\infty$), reescrevemos a Eq. (B.21) na forma reduzida,

$$-\xi^2 \frac{d^2f}{dx^2} - f^3 + f = 0, \quad (\text{B.22})$$

onde $f(x) = \psi/\psi_\infty$ e $\xi^2 = \hbar^2/2m^*|\alpha|$, ξ é o comprimento característico da variação de f . Usando a dependência na temperatura de α nós temos

$$\xi^2(T) = \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha(T)|} = \frac{\hbar^2}{2m^*\alpha(0)(T - T_c)} \simeq \frac{\xi^2(0)}{1 - t}, \quad (\text{B.23})$$

onde $t = T/T_c$ é a temperatura reduzida e $\xi(0) = \hbar^2/2m^*\alpha(0)$. podemos ver que para $T \approx T_c$ o comprimento característico ξ diverge.

Para determinar o outro comprimento característico λ , usaremos a Eq. (B.20). Numa aproximação de primeira ordem, a densidade de super-elétrons pode ser substituída pelo seu valor no equilíbrio e em campo zero $\psi_0 = \sqrt{-\alpha/\beta}$ Nesta aproximação podemos escr-

ever,

$$\mathbf{j}_s = -\frac{e^{*2}}{m^*} \mathbf{A} |\psi|^2. \quad (\text{B.24})$$

Tomando o rotacional em ambos os lados da Eq. (B.24) temos que

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{e^{*2}}{m^*} |\psi|^2 \nabla \times \mathbf{A} = \frac{e^{*2}}{m^*} |\psi|^2 \mathbf{h} \quad (\text{B.25})$$

Esta equação é equivalente a segunda equação de London, onde o comprimento de penetração é dado por

$$\lambda^2(T) = \frac{m^* \beta}{\mu_0 e^{*2} \alpha(0) (T - T_c)} \simeq \frac{\lambda^2(0)}{1 - t} \quad (\text{B.26})$$

onde $\lambda(0)$ coincide com o comprimento de penetração de London em $T = 0$.

Existe um parâmetro adimensional, chamado de parâmetro de Ginzburg-Landau, $\kappa = \lambda(T)/\xi(T)$, que descreve a relação entre o comprimento de penetração e o comprimento de coerência de um material supercondutor. Como λ e ξ possuem essencialmente a mesma dependência com a temperatura, κ é um parâmetro constante em T.

Podemos expressar o campo crítico termodinâmico em termos dos comprimentos característicos, sendo assim o campo crítico pode ser escrito como

$$H_c(T) = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi\mu_0} \frac{\Phi_0}{\lambda(T)\xi(T)}, \quad (\text{B.27})$$

onde Φ_0 é o quanto de fluxo magnético dentro do material supercondutor.

Os comprimentos característicos obtidos acima podem ser diretamente relacionado com os comprimentos ξ_0 e λ_0 obtidos pela teoria BCS, de modo que

$$\xi(T) = 0.74 \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}} \quad ; \quad l_{el} \gg \xi_0 \quad (\text{B.28})$$

$$\xi(T) = 0.855 \sqrt{\frac{\xi_0 l_{el}}{\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}} \quad ; \quad l_{el} \ll \xi_0 \quad (\text{B.29})$$

$$\lambda(T) = 0.71 \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}} \quad ; \quad l_{el} \gg \xi_0 \quad (\text{B.30})$$

$$\lambda(T) = 0.64\lambda_L(0) \sqrt{\frac{\xi_0}{l_{el} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}} \quad ; \quad l_{el} \ll \xi_0, \quad (\text{B.31})$$

onde l_{el} é o livre caminho médio elástico dos elétrons normais, as Eqs. (B.28) e (B.30) são válidas apenas no "limite limpo" quando $T \approx T_c$, por outro lado o limite sujo faz com que as Eqs. (B.29) e (B.31) sejam válidas para um grande intervalo de temperatura.

B.2 Teoria de vórtices em supercondutores

B.2.1 Supercondutores do tipo II

Em 1957, Abrikosov explorou a solução das equações de Ginzburg-Landau no limite extremo dos parâmetros λ e ξ . É observado que quando aplicamos um campo magnético em um material supercondutor e a relação entre os comprimentos característicos desse material obedece a relação $\lambda > \xi$ as equações de Ginzburg-Landau apresentam uma solução periódica, e esta solução consiste em uma rede bidimensional e triangular de regiões tubulares bem definida, onde a densidade de elétrons supercondutores vai a zero (regiões normais ou núcleo dos vórtices). Esta rede bidimensional também é conhecida como rede de vórtices ou rede de Abrikosov.

Cada vórtice apresenta um núcleo com raio igual a ξ , onde o fluxo magnético é máximo e o parâmetro de ordem é nulo e um corpo que decai num comprimento característico λ onde encontramos a maior parte do fluxo magnético.

B.2.2 Energia numa interface normal-supercondutor

Para verificarmos o que acontece em uma interface normal-supercondutor iremos considerar uma interface plana paralela ao plano xy na presença de um campo magnético externo \mathbf{h} aplicado na direção z . Consideramos que o material supercondutor está ocupando a região $x > 0$. A energia livre de helmholtz segundo o modelo de London é dada por

$$F = \frac{A}{2\mu_0} \int dx \left(f_s + \mathbf{h}^2 + \lambda^2 |\nabla \times \mathbf{h}|^2 \right), \quad (\text{B.32})$$

onde A é a área da interface, f_s é a densidade de energia de condensação, o segundo e o terceiro termo dentro da integral são respectivamente, a densidade de energia devido ao

campo magnético e a densidade de energia cinética dos super-elétrons. Sendo a energia livre de Gibbs G definida por

$$G = F - \frac{A}{2\mu_0} \int \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) dx , \quad (\text{B.33})$$

fora do material supercondutor, isto é, para $x < 0$ nos temos que

$$G_n = G_s , \quad (\text{B.34})$$

a solução para o campo magnético dentro do material supercondutor, usando a teoria de London, é dada pela Eq. (B.10) ($\mathbf{h}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}e^{-x/\lambda_L}$), usando este resultado na Eq. (B.32) e levando em conta a Eq. (B.33) nós obtemos

$$\begin{aligned} G &= \frac{A}{2\mu_0} \int_0^\infty dx \left[f_s + |\mathbf{H}|^2 \left(e^{-2x/\lambda_L} + e^{-2x/\lambda_L} - 2e^{-x/\lambda_L} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2\mu_0} \int_0^\infty f_s d^3r + \gamma A , \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

onde γ é a energia de superfície por unidade de área (tensão superficial), dada por:

$$\gamma = \frac{H^2}{\mu_0} \left(-\frac{\lambda_L}{2} e^{-2x/\lambda_L} + \lambda_L e^{-x/\lambda_L} \right) \Big|_0^\infty \quad (\text{B.36})$$

$$\gamma = -\lambda_L \frac{H^2}{\mu_0} . \quad (\text{B.37})$$

Podemos ver, que a energia da interface normal-supercondutor é negativa. Este resultado sugere que podemos diminuir a energia total do sistema se aumentarmos a área de contato entre os estados normal e supercondutor. Uma das formas de fazermos isto é criar domínios da fase normal (vórtices) dentro da fase supercondutora, como ocorre em supercondutores do tipo-II.

Em supercondutores do tipo I e/ou no estado Meissner, o estado misto não existe, portanto podemos dizer que eles possuem uma energia superficial positiva. Fisicamente esta energia de superfície positiva é destruída em distâncias da ordem de ξ perpendicular a interface.

B.2.3 A quantização do fluxo magnético

Como vimos anteriormente, em supercondutores do tipo-II, a energia de superfície na interface metal-supercondutor é negativa para campos acima de H_{c1} . Nestas condições, são criados domínios normais no interior do volume supercondutor para maximizar a área de superfície.

As regiões normais no interior do material supercondutor possuem um fluxo magnético quantizado, determinado a partir da Eq. (B.5)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\nabla \times \nabla \times \mathbf{h} + \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{h} \right] = 0 , \quad (\text{B.38})$$

integrando esta equação numa seção transversal de área A , e usando a lei de Ampère, temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int [\lambda^2 \nabla \times \mathbf{j} + \mathbf{h}] \cdot d\mathbf{A} = 0 , \quad (\text{B.39})$$

integrando agora com relação ao tempo ficamos com

$$\int [\lambda^2 \nabla \times \mathbf{j} + \mathbf{h}] \cdot d\mathbf{A} = \phi , \quad (\text{B.40})$$

aplicando agora o teorema de Stokes no primeiro termo, temos

$$\lambda^2 \oint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{l} + \int \mathbf{h} \cdot d\mathbf{A} = \phi . \quad (\text{B.41})$$

Para uma grande área de integração, podemos esperar que o primeiro termo seja pequeno, desde que a corrente decai exponencialmente com um comprimento característico λ , podemos então identificar a constante de integração, ϕ , como o fluxo total contido em um vórtice.

Substituindo $\mathbf{h} = \nabla \times \mathbf{A}$ na Eq. (B.41) e aplicando a lei de Stokes obtemos

$$\oint [\mathbf{p} + e\mathbf{A}] \cdot d\mathbf{l} = e\phi , \quad (\text{B.42})$$

assumimos que $\mathbf{j} = n_s e^* \mathbf{v} = n_s e^* (\mathbf{p}/m^*)$. Podemos identificar o integrando da Eq. (B.42) como sendo o momento canônico associado ao movimento das partículas carregadas na formulação da mecânica Hamiltoniana. F. London concluiu que a supercondutividade era um fenômeno quântico macroscópico, sendo assim ele sugeriu que a Eq. (B.42) precisava ser consistente com a quantização de Bohr-Sommerfeld. Desta forma, chegamos a um valor para ϕ ,

$$\phi = n\phi_0 \quad (\text{B.43})$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$ e $\phi_0 = h/e^*$, ϕ_0 é o valor de um quantum de fluxo magnético, segundo a teoria BCS $e^* = 2e$, sendo assim temos

$$\phi = n \frac{h}{2e} \quad (\text{B.44})$$

$$= 2,07 \times 10^{-15} \text{ Tm}^2 . \quad (\text{B.45})$$

B.2.4 Campos críticos H_{c1} e H_{c2}

O campo crítico inferior, H_{c1} , está relacionado com o campo magnético que permite a nucleação do primeiro vórtice no interior da amostra, nesta situação a energia livre do estado supercondutor pode ser escrita como,

$$F_s = F_n + \varepsilon_v L - H \int \mathbf{b} d^3 r , \quad (\text{B.46})$$

onde F_s é a energia livre do estado normal, ε_v é a energia livre do vórtice por unidade de comprimento e o último termo da Eq. (B.46) corresponde a energia magnética da amostra. Quando $H = H_{c1}$ a energia livre dentro e fora do material supercondutor tem o mesmo valor, sendo assim $F_s = F_N$ e a Eq. (B.46) pode ser escrita como:

$$H_{c1} = \varepsilon_v / \phi_0 . \quad (\text{B.47})$$

No limite em que $\kappa \gg 1$, $\varepsilon_v = \frac{\Phi_0^2}{4\pi\mu_0\lambda^2} \ln\kappa$.

O campo crítico superior H_{c2} é o campo onde a amostra perde as propriedades supercondutoras e passa a se comportar como um metal normal. Quando aumentamos o campo magnético, o espaçamento entre os vórtices diminui. Quando o espaçamento da rede fica da ordem do comprimento de coerência ξ , ocorre a transição do estado misto para o estado normal.

Podemos calcular H_{c2} a partir da primeira equação de GL, sendo o parâmetro de ordem muito pequeno, próximo à H_{c2} , podemos desprezar o termo de ordem superiores a ψ e escrever a Eq. (B.19) como

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi + \alpha\psi = 0 . \quad (\text{B.48})$$

A Eq. (B.48) pode ser vista como a equação de Schrödinger para uma partícula com energia $-\alpha$, massa m^* e carga e^* em um campo magnético \mathbf{H} , que esta associado a um potencial vetor \mathbf{A} . Por questão de simplicidade consideraremos um campo magnético uniforme paralelo ao eixo z , $H_0 \parallel z$. Assumindo o gauge de Landau onde o potencial vetor é dado por $A = H_0 x \hat{y}$, a Eq. (B.48) pode ser escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ie^* \mathbf{H}_0}{\hbar} x \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi + \alpha\psi = 0 , \quad (\text{B.49})$$

assumindo $\psi_{n,k_z,k_y}(x, y, z) = e^{ik_z z + iK_y y} u_n(x)$, podemos aplicar o método de separação

de variáveis na Eq. (B.49), e com isso escrever

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 (x - x_0)^2 \right] u_n(x) = \varepsilon_n u_n(x) , \quad (\text{B.50})$$

onde $x_0 = (\hbar/e^* H_0) k_y$ e $\varepsilon_n = -\alpha - (\hbar k_z^2 / 2m^*)$. A Eq. (B.50) pode ser identificada como a equação de Schrödinger para um oscilador harmônico com frequência $\omega_c = |e^*| H_0 / m^*$ e com energia

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c . \quad (\text{B.51})$$

A função de onda normalizada pode ser escrita como

$$\psi_{n,k_z,k_y} = e^{i(k_y y + k_z z)} e^{-(x-x_0)^2 / 2a_H^2} H_n \left(\frac{x-x_0}{a_H} \right) , \quad (\text{B.52})$$

onde $a_H^2 \equiv \hbar / m^* \omega_c = \phi_0 / 2$ e $H_n(x)$ é o polinômio de Hermite.

Só o menor autovalor dado pela Eq. (B.51) representa uma solução significativa da Eq. (B.50), isto é, só quando $n = 0$, $k_z = 0$ a função de onda dada pela Eq. (B.52) é uma solução significativa. Como a teoria linearizada é válida apenas próximo de H_{c2} , podemos escrever:

$$-\alpha = \frac{1}{2} \hbar \omega_c , \quad (\text{B.53})$$

ou

$$H_{c2} = -\frac{2m^* \alpha}{\hbar e^*} . \quad (\text{B.54})$$

Usando $\alpha(T) = \alpha(0)(T - T_c)$ temos,

$$H_{c2} = \frac{2m^*}{\hbar e^*} \alpha(0)(T_c - T), \quad (\text{B.55})$$

esta expressão é usualmente escrita como:

$$H_{c2} = \frac{\phi_0}{2\pi \xi^2} . \quad (\text{B.56})$$

Podemos ver que para temperaturas próxima da temperatura de transição $H_{c2} \rightarrow 0$ e o valor de H_{c2} cresce linearmente em baixas temperaturas.

B.2.5 Campo magnético de um vórtice isolado

Considerando o limite, $\lambda \gg \xi$, podemos considerar que a densidade de elétrons supercondutores é aproximadamente constante, exceto próximo ao núcleo do vórtice. Nesta aproximação o único termo que contribui significativamente para a variação espacial de ψ é a sua fase.

Substituindo o valor do parâmetro de ordem supercondutor $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|e^{i\varphi\mathbf{r}}$ na segunda equação de GL Eq. (B.20), a densidade de corrente supercondutora é dada por

$$\mathbf{j}_s = \frac{e^*|\psi|^2}{m^*}(\hbar\nabla\varphi - e^*\mathbf{A}), \quad (\text{B.57})$$

A equação eletromagnética de um supercondutor na presença de um vórtice, pode ser obtida tomando o rotacional em ambos os lados da equação B.57 temos

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = \frac{\phi_0}{2\pi\mu_0\lambda^2}\nabla \times \nabla\varphi - \frac{1}{\lambda^2}\mathbf{h}. \quad (\text{B.58})$$

Considerando que a amostra possui apenas um vórtice em seu interior, e que este vórtice seja paralelo ao eixo z localizado em $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ no plano xy , integrando $\nabla \times \nabla\varphi$ no plano xy e usando o teorema de stokes, o termo $\nabla \times \nabla\varphi$ pode ser identificado como:

$$\nabla \times \nabla\varphi = 2\pi\nu(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = 2\pi\hat{z}p\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (\text{B.59})$$

o termo $\nu(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ define a função de fonte ou vorticidade de um vórtice com p quanta de fluxo (onde p é inteiro e positivo). Usando $\mathbf{j}_s = \nabla \times \mathbf{h}$, podemos escrever a equação B.58 como

$$-\lambda^2\mu_0\nabla^2\mathbf{h} + \mu_0\mathbf{h} = \phi_0\nu(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = \hat{z}p\phi_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (\text{B.60})$$

A Eq. (B.60) corresponde a equação de London, incluindo o termo devido a presença de vórtices em $r_i = (x_i, y_i)$. A teoria de London pode ser usada para descrever o comportamento dos vórtices em supercondutores do tipo II, desde que estes sejam inseridos na forma de singularidades. Isto é equivalente a impor que $\xi \rightarrow 0$, o que é verdade para um supercondutor onde $\lambda \gg \xi$.

A solução da Eq. (B.60) pode ser obtida integrando diretamente no espaço real ou usando a transformada de Fourier. Para integrar no espaço real devemos inicialmente reescrever a Eq. (B.60) em coordenadas cilíndricas

$$h_z - \lambda^2 \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dh_z}{dr} \right) \right) = \frac{\phi_0}{\mu_0} p \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (\text{B.61})$$

A Eq. (B.61) é um caso especial da equação de Bessel e tem como solução a função de Bessel modificada de ordem zero K_0 , e pode ser escrita como,

$$\mathbf{h} = \frac{p\phi_0}{2\pi\lambda^2\mu_0} K_0 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}{\lambda} \right) \hat{z}. \quad (\text{B.62})$$

Quando ($r \gg \lambda$) o comportamento da função K_0 decai exponencialmente com $e^{-r/\lambda}$ e quando $r \rightarrow 0$ esta função diverge logaritmicamente com $\ln(r/\lambda)$. Uma maneira de

evitar a divergência de \mathbf{h} no núcleo do vórtice é adotar o procedimento de corte de Clem (Clem, 1975), possibilitando desta forma calcular \mathbf{h} próximo ao núcleo do vórtice. Usando este artifício a solução da Eq. (B.61) passa a ser escrita como,

$$\mathbf{h} = \frac{p\phi_0}{2\pi\lambda^2\mu_0} K_0 \left(\frac{(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| + 2\xi^2)^{1/2}}{\lambda} \right) \hat{z}. \quad (\text{B.63})$$

B.2.6 Energia de um vórtice isolado

No limite de $\lambda \gg \xi$, a energia de um vórtice é dada pela soma da energia cinética das correntes com a energia do campo magnético gerado pelo vórtice, integrando estas energias no plano xy , excluindo a área correspondente ao núcleo do vórtice, temos

$$\varepsilon_v = \frac{1}{2\mu_0} \int_{r>\xi} d\mathbf{r} (\lambda^2 |\nabla \times \mathbf{b}|^2 + \mathbf{b}^2), \quad (\text{B.64})$$

usando a identidade $\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{a} - \nabla \cdot [\nabla \times \mathbf{b}]$, onde assumimos que $\mathbf{a} = \nabla \times \mathbf{b}$ e o teorema da divergência, podemos reescrever a integral da Eq. (B.64) como,

$$\varepsilon_v = \frac{1}{2\mu_0} \int_{r>\xi} d\mathbf{r} (\mathbf{b} + \lambda^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b}^2) + \frac{\lambda^2}{2\mu_0} \oint d\mathbf{l} \cdot (\mathbf{b} \times \nabla \mathbf{b}). \quad (\text{B.65})$$

Como não estamos considerando o núcleo do vórtice, o primeiro termo da Eq. (B.65) se anula. O segundo termo desta equação é integrado em dois caminhos, um de raio infinito e outro de raio igual a ξ , ambos centrado no núcleo vórtice, temos então que

$$\varepsilon_v = \frac{\lambda^2}{2\mu_0} \left[b \frac{db}{dr} 2\pi r \right]_{r=\xi} - \frac{\lambda^2}{2\mu_0} \left[b \frac{db}{dr} 2\pi r \right]_{r \rightarrow \infty}. \quad (\text{B.66})$$

O segundo termo da Eq. (B.66) se anula, pois no infinito o campo magnético do vórtice é zero. Para calcular o primeiro termo nós usamos uma aproximação assintótica para $r \ll \infty$, isto é, $b(r) \simeq \frac{p\phi_0}{2\pi\lambda^2} \ln(r/\lambda)$, temos então que

$$\begin{aligned} \varepsilon_v &= \frac{pe\phi_0^2}{4\pi\mu_0\lambda^2} p^2 \ln \kappa \\ \varepsilon_v &= \frac{\varepsilon}{2} p^2 \ln \kappa. \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

Introduzimos ε como um parâmetro de escala para energia. A energia do vórtice é proporcional ao número de quanta de fluxo que ele possui, sendo assim, é energeticamente desfavorável termos um vórtice com p quanta de fluxo com relação a termos p vórtices com um quantum de fluxo.

B.2.7 Energia de interação vórtice-vórtice

Para sistemas com mais de um vórtice, estes podem interagir desde que a distância entre eles seja menor que λ . Para determinar esta energia consideraremos um sistema com dois vórtices retilíneos e paralelos, localizados em r_i e r_l respectivamente. O vórtice localizado em r_i sente a presença do vórtice localizado em r_l devido a uma distribuição local de corrente $j_s^{(l)}$ gerada pelo vórtice localizado em r_l e vice-versa. Como um vórtice pode ser visto como sendo essencialmente uma linha de fluxo magnético, ele sente uma força de Lorentz devido à corrente do outro vórtice. Sendo assim o vórtice localizado em r_i sentirá uma força por unidade de comprimento dada por

$$f_l^{(i)} = j_s^{(l)}(r_i) \times \phi_0 \hat{z}. \quad (\text{B.68})$$

A corrente gerada por um vórtice é dada por

$$\mathbf{j}_s = \nabla \times \mathbf{h}, \quad (\text{B.69})$$

como $\mathbf{h} = \mathbf{h}(r)\hat{z}$, temos $\mathbf{j}_s = -\partial\mathbf{h}/\partial r$, então:

$$f_l^{(i)} = \hat{r}_{ij} \phi_0 \frac{\partial \mathbf{h}^{(l)}(r_i)}{\partial r_i} = \frac{\phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda^3} K_1\left(\frac{r_{ij}}{\lambda}\right) \hat{r}_{ij}, \quad (\text{B.70})$$

onde $\mathbf{r}_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $\hat{r}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ e $K_1(r_{ij}/\lambda)$ é a função de Bessel modificada de primeira ordem, usando a Eq. (B.70) podemos encontrar a energia de interação vórtice-vórtice como sendo

$$E_{vv}(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{\phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda^2} K_0\left(\frac{r_{ij}}{\lambda}\right). \quad (\text{B.71})$$

Podemos também encontrar este resultado integrando a energia livre no plano xy como fizemos para calcular a energia de um vórtice isolado, porém agora teremos que excluir o núcleo dos dois vórtices, encontraremos então a energia total do sistema que é dada pela soma das autoenergias dos vórtices com a energia de interação vórtice-vórtice.

B.2.8 Equação de movimento dos vórtices

Quando submetemos a rede de vórtices a uma força externa e/ou quando esta encontra-se fora do equilíbrio, ela pode movimentar-se. Este movimento é responsável por criar um campo elétrico $\mathbf{E} = \mathbf{B} \times \mathbf{v} = \frac{\phi_0}{\mathbf{A}} \hat{z} \times \mathbf{v}$, onde \mathbf{A} é a área da amostra no plano normal ao vórtice. O material no interior do núcleo do vórtice se encontra no estado normal,

podendo sofrer efeitos de espalhamento, responsáveis por criar uma força viscosa. Como os efeitos inerciais para o movimento do vórtice podem ser desprezados com relação aos efeitos dissipativos. Esperamos que os vórtices obedeçam a uma equação de movimento super-amortecida,

$$\eta \mathbf{v} = \mathbf{j} \times \hat{\mathbf{z}} \phi_0, \quad (\text{B.72})$$

esta equação pode ser entendida como sendo uma espécie de lei de Ohm, isto fica mais claro se fizermos o produto vetorial desta equação com $\frac{\phi_0}{A} \hat{\mathbf{z}}$, temos:

$$\mathbf{E} = \rho_{ff} \mathbf{j}, \quad \text{onde} \quad \rho_{ff} = \frac{B \phi_0}{\eta}, \quad (\text{B.73})$$

ρ_{ff} é conhecido como resistividade de flux flow que está relacionada ao movimento contínuo de fluxo magnético. Sendo assim, quando uma rede de vórtices se move com velocidade média v a amostra supercondutora se comporta como um condutor convencional com resistividade $\rho_{ff} = n \phi_0^2 / \eta$, e dissipando uma potência $P_{diss} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} = \frac{1}{\rho_{ff}} E^2 = \eta v^2$, definimos a densidade de vórtice como $n = N/A$.

A derivação microscópica da viscosidade η é um tema ainda em aberto. Fenomenologicamente, η pode ser estimada considerando que o efeito dissipativo é devido a um processo puramente resistivo no interior do núcleo do vórtice. Esta dedução foi feita pela primeira vez em 1965 por Bardeen e Stephen, usando a lei de Ohm $\mathbf{j} = 1/\rho(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ para um material normal como para um supercondutor $\rho = 0$ obtemos da equação acima que $\mathbf{E} = -\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ para um material no estado normal, temos que a corrente elétrica dentro do núcleo será $\mathbf{j} = (\mathbf{B} \times \mathbf{v})/\rho_n$ substituindo esta equação dentro da Eq. (B.72) obtemos:

$$\eta = \frac{1}{\rho_n} \phi_0 B c^2 \quad (\text{B.74})$$

Onde ρ_n é a resistividade do estado normal extrapolada para a região de interesse. Esta teoria deve ser válida no limite onde $l \ll \xi$, isto é, onde os processos dissipativos são dominantes. l é o livre caminho médio dos elétrons normais dentro do núcleo do vórtice.

Uma outra força que pode ser incorporada à equação de movimento dos vórtices é a força de ancoragem produzida pelas inomogeneidades do material supercondutor. Usualmente estas inomogeneidades atuam como um potencial atrator de vórtices, ou seja, como centros de ancoragem de vórtices (centro de pinning).

APÊNDICE C – Principais propriedades mesoscópicas no transporte de elétrons

Descreveremos agora algumas das principais propriedades encontradas no transporte de elétrons em sistema mesoscópico.

C.0.8.1 Localização fraca

O efeito da localização fraca foi verificado em sistemas eletrônicos desordenados e em baixas temperaturas. A desordem nestes sistemas é obtida devido a presença de impurezas, responsáveis pelo grande número de colisões. Estas colisões fazem com que os elétrons tenham um movimento browniano fazendo com que, estes materiais apresentem um regime de transporte puramente difusivo. A localização fraca pode ser interpretada como uma correção positiva para a resistividade ρ em metais e em semicondutores, resultando em uma diminuição da condutância $\sigma = 1/\rho$. Este efeito tem origem na interferência construtiva das funções de onda dos portadores de carga que se movimentam sentidos opostos. Esta interferência ocorre devido a presença de uma coerência de fase encontrado no regime de transporte difusivo em sistemas mesoscópicos devido as inúmeras colisões com as impurezas.

A condutância quântica é calculada usando uma combinação de matrizes de espalhamento contendo amplitudes de probabilidade de seções adjacentes, cada seção contendo impurezas em quantidade pequena suficiente para valer a aproximação de Born. A condutância pode ser escrita como:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} T_{\sigma\sigma'}, \quad (\text{C.1})$$

onde o quantum de condutância é dado por $G_0 = e^2/2\pi\hbar$, σ é o operador de spins para

os elétrons, dados pelas matrizes de Pauli e $T_{\sigma\sigma'}$ é o coeficiente de transmissão do canal definido como:

$$T_{\sigma\sigma'} = |t_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 N_\sigma N_{\sigma'}, \quad (\text{C.2})$$

onde $N_\sigma = L/(d\varepsilon_\sigma/dk)$ e $N_{\sigma'} = L/(d\varepsilon_{\sigma'}/dk')$ são as densidades dos estados, $t_{k\sigma,k'\sigma'}$ é conhecido como parâmetro de hopping .

Para um condutor com condutância total muito maior que o quantum de condutância, o decréscimo da condutância devido aos efeitos da localização fraca é da ordem de G_0 . Este efeito pode ser suprimido pela quebra de simetria de reversão temporal causada pela aplicação de um campo magnético.

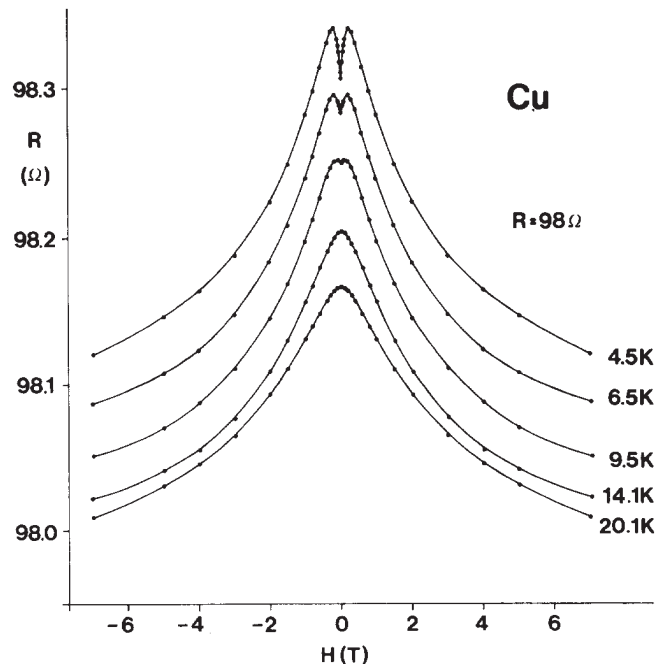


Figura 65: Figura obtida de G. Bergmann publicado em *phys. rev.* **107**, 1 (1984). Este gráfico mostra uma medida de magneto-resistência em um filme fino de *Cu* com espessura de 80 com resistência $R = 98\Omega$ e um auto grau de desordem, o livre caminho médio nesta amostra é da ordem de 10. Neste gráfico podemos ver a supressão do efeito de localização fraca quando a amostra é exposta a um campo magnético vemos também que este efeito é fortemente dependente da temperatura.

Na presença de um campo magnético B de pequena intensidade as funções de onda adquirem um fase adicional que destrói a coerência inicial para $B = 0$, resultando em uma magneto-resistência negativa, (*i.e.*, magneto-condutância positiva). Isto resulta numa supressão da localização-fraca. A localização fraca é um efeitos de natureza quântica e tem origem na desordem eletrônica do sistema, o elétron se move de forma difusiva sofrendo inúmeras colisões devido as impurezas isto resulta numa caminhada aleatória do elétron “random walk”.

A resistividade deste sistema esta relacionada com a probabilidade de um elétron propagar entre dois pontos do espaço. A física clássica assume que esta probabilidade é aditiva, isto é, que a soma das probabilidades dos caminhos que ligam dois pontos. Na mecânica quântica a probabilidade é dada pela soma das amplitudes dos caminhos. A largura deste pico é determinada pelo tempo de coerência de fase do elétron e sua amplitude deste pico pela razão entre este e o tempo de espalhamento spin-órbita. O tempo de coerência de fase do elétron é uma das propriedades mais importantes destes sistemas, pois ele determina o limite quântico destas amostras. Este tempo de coerência ainda nos dá informação sobre as interações elétron-elétron e elétron-fônon.

Hoje em dia a teoria de Localização fraca esta bem estabelecida como um método eficiente para obtermos tempo de relaxação da fase do spin dos elétrons. Este mecanismo é de fundamental importância para o desenvolvimento de dispositivos “*spintrônicos*”.

C.0.8.2 Efeito Ahanorov-Bohm

O efeito Ahanorov-Bohm é um efeito quântico onde partículas carregadas são afetadas por um acampo magnético levando a uma modificação da resistência da amostra. Quando um anel condutor é colocado na presença de um campo magnético a fase da função de onda dos elétrons que atravessam os dois braços do anel é afetada alterando a resistência da amostra.

Devido a quebra de simetria de reversão temporal do sistema quando aplicamos um campo magnético. Uma partícula com carga q que viaja em um determinado caminho P em uma região com campo magnético não nulo $B = \nabla \times A$ pode adquirir uma fase ϕ dada por:

$$\phi = \frac{q}{\hbar} \int_P A dx \quad (\text{C.3})$$

A diferença de fase entre os dois caminhos com mesma extremidade é determinada pelo quantum de fluxo magnético através de uma área entre os caminhos. usando o teorema de Stokes nós podemos obter:

$$\nabla \phi = \frac{q\Phi}{\hbar} \quad (\text{C.4})$$

C.0.8.3 Flutuações universais da condutância

Em sistemas mesoscópicos a condutância flutua com uma amplitude universal independente da amostra. Experimentalmente estas flutuações podem ser observadas em função do campo magnético ou da energia de Fermi. Estas flutuações não são ruídos pois são padrões completamente reproduzíveis numa mesma amostra. O caráter universal na amplitude de oscilações da ordem de G_0 independe da amostra e do valor médio da condutância. As flutuações na condutância são atenuadas com o aumento da temperatura.

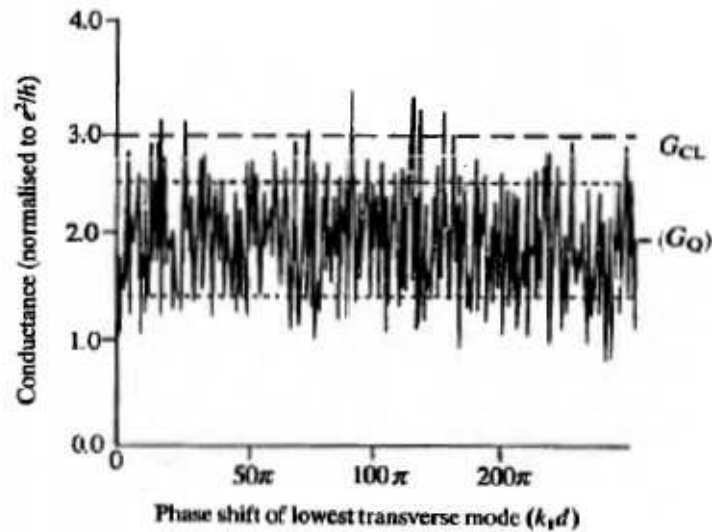


Figura 66: Gráfico obtido de S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge Univ. Press. 1995. Estes resultados foram obtidos por experimentos numéricos para ambas as condutâncias, clássica e quântica. A condutância quântica é calculada por combinar matrizes de espalhamento para sucessivas seções, cada uma contendo uma impureza, assumindo coerência completa. A condutividade clássica é calculada combinando matrizes de probabilidade e assumindo incoerência completa. Os resultados são para um condutor com 30 modos e com 600 impurezas.

Podemos notar que a média da condutância quântica $\langle G_Q \rangle$ é menor que o resultado para a condutância clássica de um valor aproximadamente de (e^2/h) e que também as flutuações da condutância quântica são da ordem de $(\sim e^2/h)$.

C.0.8.4 Quantização da condutância

Estudos das propriedades de transporte de sistemas eletrônicos no regime balístico mostraram que a condutância e como conseqüência a resistividade é quantizada. Inicialmente estes estudos foram feitos em uma constricção como mostrado na Fig. 67, a constricção tem largura W e comprimento L muito menor que o livre caminho médio l_e .

A resistência foi medida em vários pontos de contato como função da voltagem aplicada, para um campo magnético nulo e um temperatura de $0.6K$, estes resultados mostraram vários pattores como podemos ver na Fig. 67.

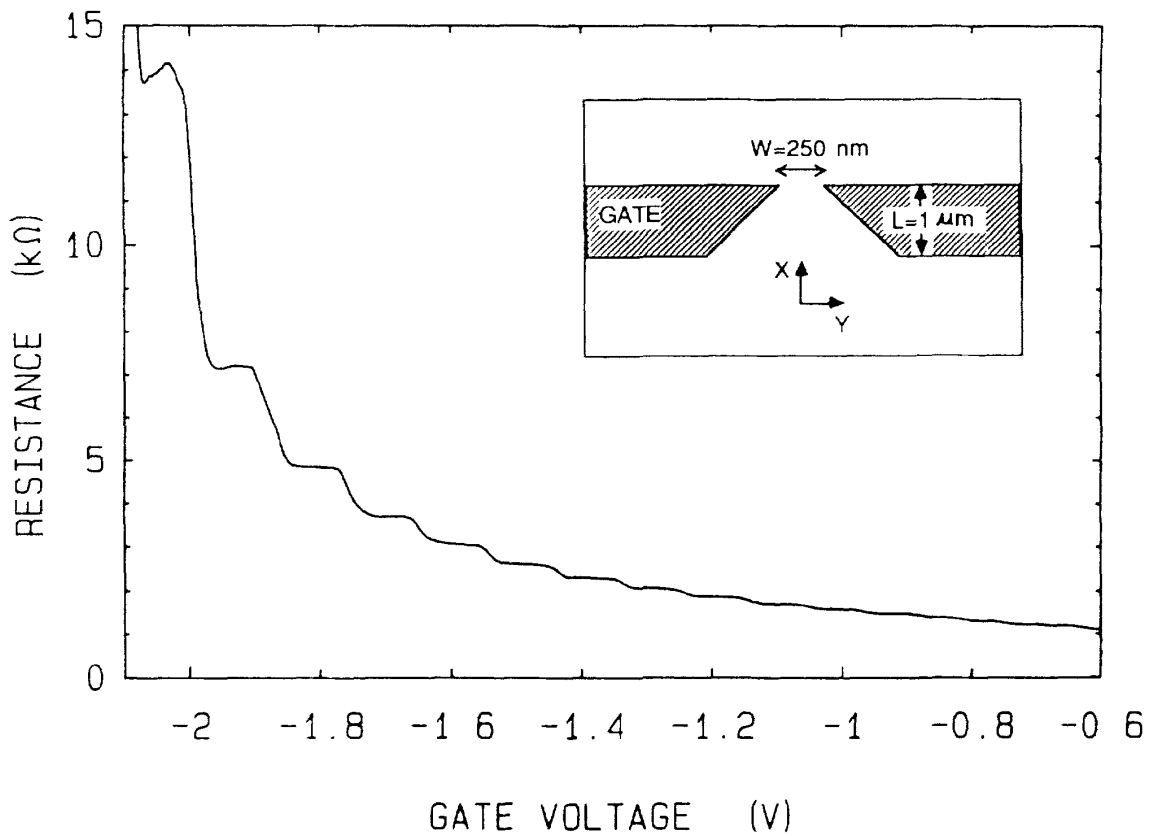


Figura 67: Gráfico obtido por B. J. van Wees (PRL, **60** 848 (1988)). Este gráfico mostra um esboço do sistema usado para fazer as medidas bem como o gráfico da resistência em função da tensão aplicada, esta curva é acompanhada de vários pattores que são resultados da quantização da condutância.

Na Fig. 68 mostramos os resultados obtidos por B. J. van Wees *et al.* para a condutância equivalente ao gráfico da Fig. 67. A Quantização da condutância é atribuída a quantização do momento transversal nos contatos da constricção.

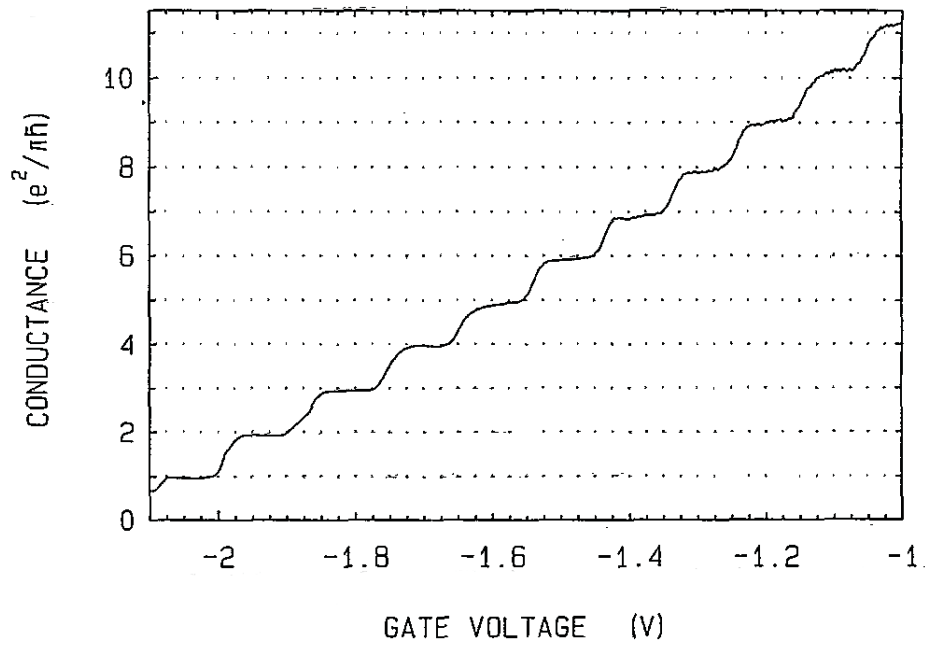


Figura 68: Gráfico obtido por B. J. van Wees (PRL, **60** 848 (1988)). para a quantização da condutância equivalente a resistência mostradas na Fig. 67.

Referências

- 1 A. A. Abrikosov. Type-II superconductor and the vortex lattice. *Nobel Lecture*, 2003.
- 2 P. W. Anderson and Y. B. Kim. Hard superconductivity: Theory of the motion of abrikosov flux lines. *Rev. Mod. Phys.*, 36:39, 1964.
- 3 J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 106:162, 1957.
- 4 J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175, 1957.
- 5 L. Bauernfeind, W. Widder, and H. F. Braun. *Physica C*, 254:151, 1995.
- 6 J. G. Bednorz and K. A. Muller. *Zeit. fur Phys. B*, 64:189, 1986.
- 7 G. Bergamnn. Weak localization in thin films: a time-of-light experiment with conduction electrons. *Phys. Rep.*, 107:1, 1984.
- 8 S. Bhattacharya and M.J Higgins. Dynamics of a disordered flux line lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 70:2617, 1993.
- 9 O. Biham, A. A. Middleton, and D. Levine. Self-organization and a dynamical transition in traffic-flow models. *Phys. Rev. A*, 46:R6124, 1992.
- 10 C. C. Bizonne, J. L. Barrat, L. Bocquet, and E. Charlaix. Low-friction flows of liquid at nanopatterned interfaces. *Nature Mater.*, 2:237, 2003.
- 11 S. T. Chang, V. N. Paunov, D. N. Petsev, and O.D. Velev. Remotey powered self-propelling particles and micropumps based on miniature diodes. *Nature Mater.*, 6:235, 2007.
- 12 M. P. Ciamarra, A. Coniglio, and M. Nicodemi. Shear instabilities in granular mixtures. *Phys. Rev. Lett.*, 94:078001, 2005.
- 13 P. J. de Pablo, J. Colchero, J. Gómez-Herreroa, A. Asenjo, P. A. Serena, and A. M. Baró. Ratchet effect in surface electromigration detected with scanning force microscopy in gold micro-stripes. *Surf. Sci.*, 464:123, 2000.
- 14 I. Derényi. Application of the ratchet effect to improve material quality (reducing vortex density in superconductors and smoothing surfaces). *Appl. Phys. A*, 75:217, 2002.
- 15 J. Dzubiella, G. P. Hoffmann, and H. Löwen. Lane formation in colloidal mixtures driven by an external field. *Phys. Rev. E*, 65:021402, 2002.

- 16 G. C. M. A. Ehrhardt, A. Stephenson, and P. M. Reis. Segregation mechanisms in a numerical model of a binary granular mixture. *Phys. Rev. E*, 71:041301, 2005.
- 17 H. Eisaki, H. Takagi, R. J. Cava, B. Batlogg, J. J. Krajewski, W. F. Peck, K. Mizuhashi, J. O. Lee, and S. Uchida. Competition between magnetism and superconductivity in rare-earth nickel boride carbides. *Phys. Rev. B*, 50:647, 1994.
- 18 I. Felner, U. Asaf, Y. Levi, and O. Millo. Coexistence of magnetism and superconductivity in $R_{1.4}Ce_{0.6}RuSr_2Cu_2O_{10-\delta}$ (R=Eu and Gd). *Phys. Rev. B*, 55:R3374, 1997.
- 19 R. Feynman, R. Leighton, and M. Sands. *The Feynman Lectures on Physics*, volume 1. Addison Wesley, 2005.
- 20 H. F. Fong, P. Bourges, Y. Sidis, L. P. Regnault, J. Bossy, A. Ivanov, D. L. Milius, I. A. Aksay, and B. Keimer. Effect of nonmagnetic impurities on the magnetic resonance peak in $YBa_2Cu_3O_7$. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1939, 1999.
- 21 T. Giamarchi and P. Le Doussal. Moving glass phase of driven lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 76:3408, 1996.
- 22 W. Gillijns, A. V. Silhanek, V. V. Moshchalkov, C. J. Olson Reichhardt, and C. Reichhardt. Origin of reversed vortex ratchet motion. *Phys. Rev. Lett.*, 99:247002, 2007.
- 23 P. Glasson, V. Dotsenko, P. Fozooni, M. J. Lea, W. Bailey, G. Papageorgiou, S. E. Andresen, and A. Kristensen. Observation of dynamical ordering in a confined wigner crystal. *Phys. Rev. Lett.*, 87:176802, 2001.
- 24 L. P. Gorkov. *Sov. Phys JETP*, 9:1364, 1959.
- 25 J. Goyon, A. Colin, G. Ovarlez, A. Ajdari, and L. Bacquet. Spatial cooperativity in soft glassy flows. *Nature*, 454:84, 2008.
- 26 D. S. Grebenkov, M. P. Ciamarra, M. Nicodemi, and A. Coniglio. Flow, ordering and jamming of sheared granular suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 100:078001, 2008.
- 27 P.J. Green and Bernard. W. Silverman. *Nonparametric Regression and Generalized Linear Models: A roughness penalty approach (Monographs on Statistics and Applied Probability)*. Hardcover, 1994.
- 28 H. S. Greenside, E. I. Blount, and C. M. Varma. Possible coexisting superconducting and magnetic states. *Phys. Rev. Lett.*, 46:49, 1981.
- 29 R. M. Hazen, L. W. Finger, R. J. Angel, C. T. Prewitt, N. L. Ross, C. G. Hadidiacos, P. J. Heaney, D. R. Veblen, Z. Z. Sheng, A. Elali, and A. M. Hermann. 100-K superconducting phases in the Tl-Ca-Ba-Cu-O system. *Phys. Rev. Lett.*, 60:1657, 1988.
- 30 D. Helbing. Traffic and related self-driven many-particle systems. *Rev. Mod. Physic*, 73:1067, 2001.
- 31 D. Helbing, I. Farkas, and T. Vicsek. Simulating dynamical features of escape panic. *Nature*, 407:487, 2000.

- 32 D. Helbing, I. J. Farkas, and T. Vicsek. Freezing by heating in a driven mesoscopic system. *Phys. Rev. Lett.*, 84:1240, 2000.
- 33 M. C. Hellerqvist. Vortex dynamics in two-dimensional amorphous Mo₇₇Ge₂₃ films. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4022, 1996.
- 34 S. Hikami, T. Hirai, and S. Kagoshima. *Japanese. Jour. of Appl. Phys. part 2-Lett.*, 26:L314, 1987.
- 35 H. J. Huang and R. Y. Guo. Static floor field and exit choice for pedestrian evacuation in rooms with internal obstacle and multiple exits. *Phys. Rev. E*, 78:021131, 2008.
- 36 A. P. Hynninen, M. E. Leunissen, A. van Blaaderen, and M. Dijkstra. CuAu structure in the restricted primitive model and oppositely charged colloids. *Phys. Rev. Lett.*, 96:018303, 2006.
- 37 Z. Iqbal, T. Datta, D. Kirven, A. Lungu, J. C. Barry, F. J. Owens, A. G. Rinzler, D. Yang, and F. Reidinger. Superconductivity above 130 K in the Hg-Pb-Ba-Ca-Cu-O system. *Phys. Rev. B*, 49:12322, 1994.
- 38 T. Jarlborg. Spin fluctuations, electron – phonon coupling and superconductivity in near – magnetic elementary metals – Fe, Co, Ni and Pd. *Physica C*, 385:513, 2003.
- 39 T. Jarlborg. Spin-phonon interaction and band effects in the high-Tc superconductor HgBa₂CuO₄. *Phys. Rev. B*, 68:172501, 2003.
- 40 T. Jarlborg. Effects of spin – phonon interaction within the CuO plane of high-Tc superconductors. *Physica C*, 454:5, 2007.
- 41 R. Jiang and Q. S Wu. Interaction between vehicle and pedestrians in a narrow channel. *Physica A*, 368:239, 2006.
- 42 B. D. Josephson. Possible new effects in superconductive tunnelling. *Phys. Lett.*, 1:251, 1962.
- 43 M. H. Julien, T. Feher, M. Horvatic, C. Berthier, O. N. Bakharev, P. Segransan, G. Collin, and J. F. Marucco. ⁶³Cu nmr evidence for enhanced antiferromagnetic correlations around zn impurities in YBa₂Cu₃O_{6.7}. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3422, 2000.
- 44 C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, and F. Müller. Drift ratchet. *Phys. Rev. E*, 61:312, 2000.
- 45 M. Koppl, P. Henseler, A. Erbe, P. Nielaba, and P. Leiderer. Layer reduction in driven 2d-colloidal systems through microchannels. *Phys. Rev. Lett.*, 97:208302, 2006.
- 46 A. E. Koshelev and V. M. Vinokur. Dynamic melting of the vortex lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 73:3580, 1994.
- 47 A. I. Larkin and Yu. V. Ovchinnikov. Pinning in type II superconductors. *J. Low Temp. Phys.*, 34:409, 1979.
- 48 C. S. Lee, B. Janko, I. Derenyi, and A. L. Barabasi. Reducing vortex density in superconductors using the 'ratchet effect'. *Nature*, 400:337, 1999.

- 49 P. A. Lee and A. D. Stone. Universal conductance fluctuations in metals: Effects of finite temperature, interaction, and magnetic field. *Phys. Rev. B*, 35:1039, 1987.
- 50 M. E. Leunissen, C. G. Christova¹, A. P. Hynninen, C. P. Royall, A. I. Campbell, A. Imhof, M. Dijkstra, R. van Roij, and A. van Blaaderen. Ionic colloidal crystals of oppositely charged particles. *Nature*, 437:235, 2005.
- 51 Fritz London. *Superfluids*, volume 1. 1961.
- 52 H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi, T. Asano, K. Togano, H. Kumakura, M. Uehara, S. Ikeda, K. Ogawa, S. Horiuchi, and Y. Matsui. *Physica C*, 153:602, 1988.
- 53 C. Marquet, A. Buguin, L. Talini, and P. Silberzan. Rectified motion of colloids in asymmetrically structure channels. *Phys. Rev. Lett.*, 88:168301, 2002.
- 54 S. Matthias and F. Müller. Asymmetric pores in a silicon membrane acting as massively parallel brownian ratchets. *Nature*, 424:53, 2003.
- 55 M. Medebach and T. Palberg. Phenomenology of colloidal crystal electrophoresis. *J. Chem. Physical*, 119:3360, 2003.
- 56 J. G. Bednorz K. H. Muller. *Earlier and Recent Aspects of Superconductivity*, volume 90. 1991.
- 57 R. Nagai and T. Nagatani. Jamming transition in counter flow of slender particles on square lattice. *Physica A*, 366:503, 2006.
- 58 J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu. *Nature*, 410:63, 2001.
- 59 T. Nagatani. Dynamical transition and scaling in a mean-field model of pedestrian flow at a bottleneck. *Physica A*, 300:558, 2001.
- 60 W. Meissner R. Ochsenfeld. *Naturwissenschaften*, 21:787, 1933.
- 61 G. Piacente and F. M. Peeters. Pinning and depinning of a classic quasi-one-dimensional wigner crystal in the presence of a constriction. *Phys. Rev. B*, 72:205208, 2005.
- 62 A. D. Polyanin and V. F. Zaitsev. *Handbook of exact solutions for ordinary differential equations*. CRC, 1995.
- 63 A. Pruyboom, P. H. Kes, E. van der Drift, and S. Radelaar. Flux-line shear through narrow constraints in superconducting films. *Phys. Rev. Lett.*, 60:1430, 1988.
- 64 D. C. Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge University Press, second edition edition, 2004.
- 65 C. Reichhardt, C. J. Olson, J. Groth, S. Field, and F. Nori. Microscopic derivation of magnetic-flux-density profiles, magnetization loop and critical currents in strongly pinned superconductors. *Phys. Rev. B*, 52:10441, 1995.
- 66 P. M. Reis, R. A. Ingale, and M. D. Shattuck. Caging dynamics in a granular fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 98:188301, 2007.

- 67 M. Rex and H. Löwen. Lane formation in oppositely charged colloids driven by an electric field: Chaining and two-dimensional crystallization. *Phys. Rev. E*, 75:051402, 2007.
- 68 R. Roth and D. Gillespie. Physics of size selectivity. *Phys. Rev. Lett.*, 95:247801, 2005.
- 69 B. Sapoval, M. Rosso, and J. F. Gouyet. The fractal nature of a diffusion front and the relation to percolation. *J. Phys. Lett.*, 46:149, 1985.
- 70 A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, and H. R. Ott. Superconductivity above 130 K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system. *Nature*, 363:56, 1993.
- 71 Z. Z. Sheng and A. M. Hermann. Bulk superconductivity at 120 k in the Tl-Ca/Ba-Cu-O system. *Nature*, 332:138, 1988.
- 72 Z. Z. Sheng and A. M. Hermann. Superconductivity in the rare-earth-free Tl-Ba-Cu-O system above liquid-nitrogen temperature. *Nature*, 332:55, 1988.
- 73 C. C. S. Silva, L. R. E. Cabral, and J. Albino Aguiar. Flux penetration, matching effect, and hysteresis in homogeneous superconducting films. *Phys. Rev. B*, 63:134526, 2001.
- 74 C. C. S. Silva, J. V. de Vondel, M. Morelle, and V. V. Moshchalkov. Controlled multiple reversals of a ratchet effect. *Nature*, 440:651, 2006.
- 75 J. B. Ketterson S. N. Song. *Superconductivity*. Cambridge University Press, 1999.
- 76 Y. Tajima, K. Takimoto, and T. Nagatani. Scaling of pedestrian channel flow with a bottleneck. *Physica A*, 294:257, 2001.
- 77 H. Takahashi, K. Igawa, K. Arii, Y. Kamihara, M. Hirano, and H. Hosono. Superconductors : redux. *Nature*, 452:914, 2008.
- 78 M. Tinkham. *Introduction to superconductivity*. 1996.
- 79 H. van Houten B. J. van Wees, C. W. J. Beenaker, J. G. Williamson, P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. Quantized conductance of points contacts in two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 60:848, 1988.
- 80 T. Vicsek, A. Czirók, E. B.-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1226, 1995.
- 81 R. A. Webb and S. Washburn. Aharonov-bohm effect in normal metal quantum coherence and transport. *Adv. Phys.*, 35:375, 1986.
- 82 W. G. Weng, T. Chen, H. Y. Yuan, , and W. C. Fan. Cellular automaton simulation of pedestrian counter flow with different walk velocities. *Phys. Rev. E*, 74:036102, 2006.
- 83 M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu. Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure. *Phys. Rev. Lett.*, 58:908, 1987.

- 84 A. Wysocki and H. Löwen. Instability of a fluid fluid interface in driven colloidal mixtures. *Jour. of Phys.: Condensed matter*, 16:7209, 2004.
- 85 D. Yanagisawa and K. Nishinari. Mean field theory for pedestrian outflow through an exit. *Phys. Rev. E*, 76:061117, 2007.
- 86 Y. F. Yu and W. G. Song. Effect of traffic rule breaking behavior on pedestrian counterflow in a channel with a partition line. *Phys. Rev. E*, 76:026102, 2007.
- 87 S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade. Flux front penetration in disordered superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 86:3622, 2001.
- 88 H. J. Zhao, V. R. Misko, F. M. Peeters, S. Dubonos, V. Oboznov, and I. V. Grigorieva. Vortex configurations in mesoscopic superconducting triangles: Finite-size and shape effects.
- 89 Z. X. Zhao, L. Q. Chen, Q. S. Yang, Y. H. Huang, G. H. Chen, R. M. Tang, G. R. Liu, C. G. Cui, L. Chen, L. H. Wang, S. Q. Guo, S. L. Li, and J. Q. Bi. *Kexue Tongbao*, 32:661, 1987.