



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

Marciel Carvalho Gomes

Modelo contínuo para vórtices de London a
 $T > 0$

Fortaleza

2019

Marciel Carvalho Gomes

Modelo contínuo para vórtices de London a $T > 0$

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para à obtenção do título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira

Coorientador: Prof. Dr. César Menezes Vieira

Fortaleza

2019

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)

G615m Gomes, Marciel Carvalho.

Modelo contínuo para vórtices de London a $T > 0$ / Marciel Carvalho Gomes. – 2019.
53 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2019.

Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.

Coorientação: Prof. Dr. César Menezes Vieira.

1. Modelo Contínuo. 2. Monte Carlo. 3. Potencial de London. 4. Sistemas Superamortecidos. I. Título.
CDD 530

Marciel Carvalho Gomes

Modelo contínuo para vórtices de London a $T > 0$

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para à obtenção do título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Aprovada em 05/02/2019

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. César Menezes Vieira (Coorientador)
Instituto Federal do Ceará (IFCE)

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira
Universidade Federal do Ceará (UFC)

*Aos meus pais, Neuza e
Geraldo e a minha vó
Noeme.*

Agradecimentos

Aos meus pais, irmãos e demais familiares, que nos momentos de minha ausência dedicados aos estudos, sempre fizeram entender que o futuro é feito a partir da constante dedicação no presente.

Ao Professor André Auto Moreira, pela orientação, paciência e incentivo ao longo desse trabalho, que tornaram possível a realização do mesmo.

Ao Professor César Menezes Vieira, pela coorientação e incentivo ao longo desse trabalho, contribuindo significadamente para a realização do mesmo.

Aos amigos e colegas que fazem parte do Laboratório de Sistemas Complexos presentes no dia a dia ao longo desse período, em especial, Israel Nascimento, Emanuel Fontelles, Aurélio Wildson, Felipe Operti, João Paulo Nogueira, Jonathan Marcio, Wagner Sena, Fernando Almeida, Rilder Pires e Samuel Morais, que dispuseram de seu tempo para discussões e que foram de grande ajuda para realização deste trabalho, mesmo nos momentos em que os assuntos não fossem relacionados especificamente a este trabalho.

Agradeço a todos os professores da pós graduação, principalmente aqueles que contribuíram no momento que cursava as disciplinas.

E à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro.

“Saber muito não lhe torna inteligente. A inteligência se traduz na forma que você recolhe, julga, maneja e, sobretudo, onde e como aplica esta informação.”

CARL SAGAN

Resumo

Nesse trabalho, propomos validar um modelo contínuo que descreve a dinâmica de sistemas superamortecidos. Em particular, investigamos a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II. Trabalhos anteriores mostraram que uma boa modelagem desse tipo de sistema pode ser obtida investigando apenas as propriedades do sistema homogêneo. Ou seja, conhecendo apenas estados homogêneos do sistema é possível construir uma descrição dinâmica para a densidade de partículas $\rho(\mathbf{r}, t)$ fora do estado estacionário. Nessa dissertação é investigado o caso onde flutuações térmicas são relevantes. Para tanto, usamos a técnica de Monte Carlo para determinar a energia interna média por partícula $U_{int}(\rho, T)$, dadas as condições de temperatura e densidade. O modelo contínuo obtido permite determinar o estado de um sistema confinado. Finalmente, fazemos simulações de Monte Carlo do sistema confinado que nos permite validar a eficiência de nosso modelo.

Palavras-chave: Modelo Contínuo. Monte Carlo. Potencial de London. Sistemas Superamortecidos.

Abstract

In this work, we validate a continuum model that describes the dynamics of overdamped systems. Namely, we investigate the dynamics of type-II superconducting vortices. Previous works have shown that a good model for these system may be developed by investigating the properties of the homogeneous system. That is, knowing only the homogeneous states of this system it is possible to obtain a dynamical description for the particle density $\rho(\mathbf{r}, t)$ out of the stationary state. In this dissertation the case where thermal fluctuations are relevant is investigated. We employ Monte-Carlo simulations to determine the average internal energy per particle $U_{int}(\rho, T)$, given the conditions of temperature and density. The continuum model obtained allows us to determine the stationary state of a confined system. Finally, Monte-Carlo simulations of the confined system allow us to validate the efficiency of our model.

Keywords: Continuum Model. Monte-Carlo. London Potential. Overdamped Systems.

Lista de Figuras

- 1 Curva da resistência elétrica versus temperatura obtida por Kamerlingh Onnes para o mercúrio. Observa-se que ela mostra cuidadosamente que a resistência tornou-se imensamente pequena, caindo abruptamente a um valor muito baixo. Figura adaptada da Referência [1]. p. 18
- 2 Diagramas mostrando o comportamento de um supercondutor dependendo do campo magnético aplicado. À esquerda temos um supercondutor do tipo I, onde temos efeito Meissner para campos abaixo de H_c e estado normal para campos superiores ao campo crítico. No lado direito, temos o caso de um supercondutor do tipo II, onde temos o efeito Meissner para campos abaixo de H_{c1} , apresenta estado normal para campos superiores a H_{c2} . Além disso, entre H_{c1} e H_{c2} , temos um estado misto, onde podemos observar a formação de vórtices. Figura retirada da Referência [1] p. 22
- 3 Diagrama de fase $H - T$ de um supercondutor do tipo II. Abaixo de um campo crítico H_{c1} , o material é supercondutor e repele completamente o campo magnético. Entre H_{c1} e H_{c2} , o supercondutor está em um estado misto, onde os vórtices podem ser observados. No diagrama, T_c é a temperatura crítica do material supercondutor quando o campo magnético é desligado. Figura retirada da Referência [2]. p. 23
- 4 Visualização da rede de Abrikosov obtida por U. Essmann e H. Trauble em 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. Figura retirada da Referência [3]. p. 24

5	Ilustração do procedimento utilizado para calcular U_{int} . A rede utilizada depende do potencial de interação e da dimensão do sistema, para o potencial de London e um sistema $2D$ temos uma rede triangular. Na figura, r_c é o raio de atuação da força de interação, e v é um vértice qualquer da rede.	p. 35
6	A Figura mostra a energia potencial média por partícula (U_{int}) como função da densidade (ρ).	p. 37
7	Investigamos sistemas de vórtices que interagem segundo o potencial de London, $V_S = \epsilon K_0(r/\sigma)$. Para $T = 0$ as energias por partícula é calculada a partir da rede de Abrikosov. Para $T > 0$ a energia por partícula foram obtidas dos resultados de Monte Carlo, mostrado na Figura (6). Para altas concentrações a função $a(\rho, T)$ converge para $a = 2\pi$, como previsto por [4].	p. 39
8	Soluções das equações diferenciais (Eq. 4.7) para três valores de temperatura para o caso onde as partículas interagem com o potencial de London, $V_S = \epsilon K_0(r/\sigma)$. As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (Eq. 4.7).	p. 40
9	Comparação entre os resultados de simulação (círculos) e as soluções das equações diferenciais (4.7) para $T = 0.1$ considerando o caso em que as partículas interagem com o potencial de London, $V_S = \epsilon K_0(r/\sigma)$. As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (4.7).	p. 42
10	Ilustração do cálculo de uma área arbitrária utilizando o método de Monte Carlo. a) Uma dada superfície de área S contida dentro de um quadrado de lado unitário. b) Sorteamos N pontos no interior do quadrado unitário.	p. 48

Lista de Símbolos

H_c	Campo magnético crítico
H_{c1}	Campo magnético crítico inferior
H_{c2}	Campo magnético crítico superior
k	Constante elástica
k_B	Constante de Boltzmann
r_c	Raio de corte
r_v	Posição do vértice v
T	Temperatura
T_c	Temperatura crítica
V_s	Potencial de London
β	Fator de Boltzmann
λ	Comprimento de London
γ	Viscosidade efetiva do meio

Sumário

1	Introdução	p. 14
1.1	Estrutura da Tese	p. 14
1.2	Sistemas Superamortecidos	p. 15
1.2.1	Limite Superamortecido	p. 16
1.2.2	O Método Monte Carlo	p. 17
1.3	Supercondutores	p. 17
1.3.1	O Efeito Meissner	p. 19
1.3.2	A Teoria de Ginzburg-Landau	p. 19
1.3.3	Supercondutores do Tipo II	p. 21
2	Modelos	p. 26
2.1	Modelo Discreto	p. 26
2.2	Modelo Contínuo	p. 28
2.2.1	A Função $a(\rho)$	p. 29
3	Métodos	p. 32
4	Resultados	p. 36
4.1	Energia do Sistema Homogêneo	p. 36
4.2	Obtenção da Função $a(\rho, T)$	p. 37
4.3	Determinação da Concentração no Estado Estacionário	p. 38
5	Conclusões e Trabalhos Futuros	p. 43

Referências	p. 45
Apêndice A – Métodos Computacionais	p. 47
A.1 Método de Monte Carlo	p. 47
A.1.1 O Algoritmo de Metropolis	p. 48
A.1.2 Algoritmo de Metropolis	p. 50
A.2 Kernel Density Estimation	p. 51
A.3 Cubic Spline Interpolation	p. 52

1 Introdução

As simulações computacionais de partículas que constituem sistemas físicos e biomoleculares têm resultado em uma nova compreensão sobre fenômenos de escala molecular que ocorrem nesses sistemas [5]. Para a realização dessas simulações em Física Estatística, utilizamos alguns métodos computacionais, entre os quais destacamos o método Monte Carlo. Este método será mais detalhado adiante no Apêndice A sobre métodos computacionais.

Dentre os diversos sistemas que podemos estudar por meio de simulação computacional, destacamos os sistemas superamortecidos, onde podemos incluir a este tipo de sistema a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II, de plasmas complexos, de sistemas coloidais, entre outros.

Nossa pesquisa tem como objetivo principal o estudo, através de um modelo contínuo, a dinâmica de sistemas superamortecidos com temperatura diferente de zero. As partículas constituintes do sistema interagem internamente através do potencial de London, que modelam a interação de vórtices em supercondutores do tipo II.

1.1 Estrutura da Tese

Nossa pesquisa se dedica ao estudo de sistemas de partículas que estão imersas em um meio dissipativo, sendo que essas partículas interagem entre si através de um potencial repulsivo e de curto alcance. Este tipo de sistema pode ser aplicado no estudo da dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II, onde chamamos esse potencial de interação de potencial de London.

Pretendemos estudar esse sistema principalmente por meio de uma abordagem contínua, onde exploramos a evolução temporal do sistema se baseando na equação da continuidade. Além disso, teremos como intuito a validação desse modelo levando em conta que nosso sistema está a uma temperatura diferente de zero.

Esta dissertação está dividida da seguinte forma. Na Seção 1.2 abordaremos os sistemas superamortecidos, onde temos como exemplo desse tipo de sistema a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II (Subseção 1.3.3). No Capítulo 2, trataremos sobre os dois modelos com os quais podemos descrever a dinâmica dos vórtices em supercondutores do tipo II. O modelo discreto (Seção 2.1), que leva em conta o movimento individual de cada partícula que constitui o sistema, e o modelo contínuo (Seção 2.2), que é o principal modelo que utilizaremos em nosso trabalho, que aborda a dinâmica baseada na concentração média das partículas. No Capítulo 3, apresentaremos os principais passos que seguiremos em nossa pesquisa. No Capítulo 4, apresentaremos os resultados para o modelo contínuo, levando em consideração que o sistema está a uma temperatura diferente de zero. No Capítulo 5, apresentaremos as conclusões obtidas de nossos resultados e também as perspectivas para a continuação da nossa pesquisa. No Apêndice A, são discutidos alguns conceitos de métodos computacionais que utilizamos neste trabalho.

1.2 Sistemas Superamortecidos

A descrição do movimento $\mathbf{r}(t)$ de uma partícula de massa m é feita através da segunda lei de Newton,

$$\sum \mathbf{F} = m \frac{d^2 \mathbf{r}(t)}{dt^2}, \quad (1.1)$$

onde $\sum \mathbf{F}$ é o somatório de todas as forças que atuam sobre a partícula. Para simplificação da descrição aqui feita, consideremos apenas o movimento em uma direção (movimento unidimensional).

Considere o movimento de uma partícula imersa em um líquido e que exibe um movimento aleatório, o chamado movimento browniano, que é descrito pela equação

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F_{ext} - \gamma \frac{dx(t)}{dt} + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta(t), \quad (1.2)$$

onde F_{ext} é uma força externa que atua sobre a partícula, que pode incluir as outras forças além das devidas ao meio, por exemplo a força peso, a força elétrica e outras. O termo $-\gamma dx(t)/dt$ é a força devido à viscosidade do meio no qual a partícula está imersa. O termo $\eta(t)$ é o ruído térmico, que é uma força flutuante, aleatória, e que varia rapidamente. Na Mecânica Estatística do Não-Equilíbrio existe uma relação entre a dissipação de energia de uma partícula imersa em um meio viscoso e as flutuações térmicas devido às colisões das moléculas que constituem o meio com as partículas. Chamamos essa relação de Teorema da Flutuação-Dissipação [6]. Para que o sistema físico atinja o equilíbrio termodinâmico,

a energia transferida das moléculas do meio para as partículas deve ser igual à transferida das partículas para as moléculas. Essa equivalência entre a força de viscosidade e a força flutuante são parametrizadas por um mesmo fator γ [6, 7]. A força flutuante é uma característica fundamental presente em uma equação estocástica [4]. A força $\eta(t)$ representa os efeitos das colisões entre as partículas e as moléculas que constituem o meio. Destacaremos as principais propriedades da força aleatória, dadas por

$$\langle \eta(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t - t'). \quad (1.3)$$

O movimento browniano é um exemplo de movimento que descreve o comportamento de um sistema de partículas superamortecidas e não interagentes. A equação que descreve a evolução temporal do sistema (Eq. 1.2) é uma equação estocástica com o movimento de partículas em um meio viscoso, sob a ação de uma força externa, e também sujeitas à forças aleatórias. Esta equação (Eq. 1.2), juntamente com as propriedades presente na eq. (1.3), é chamada de equação de Langevin, e sua solução nos fornece como se comportam as grandezas médias como posição e velocidade da partícula no decorrer do tempo.

Para o sistema que temos interesse em estudar, dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II, temos que as vórtices agora são interagentes. No entanto, a equação que descreve essa dinâmica de vórtices é similar a equação que descreve a dinâmica do movimento browniano (Eq. 1.2). Os vórtices interagem entre si através de um potencial interno. No caso de supercondutores do tipo II, esse potencial é de natureza repulsiva e de curto alcance, o chamado potencial de London.

Com isso, a equação que descreve a dinâmica é

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F_{pp} + F_{ext} - \gamma \frac{dx(t)}{dt} + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta(t), \quad (1.4)$$

onde agora F_{pp} são as interações partícula-partícula. E os outros termos são similares aos visto anteriormente para a equação do movimento browniano.

1.2.1 Limite Superamortecido

O sistema mencionado até o momento, na qual estamos interessados, são os supercondutores do tipo II que apresentam uma vibração das partículas pequena, de modo que os efeitos inercias ($m d^2 x(t)/dt^2$) podem ser desprezados quando comparamos com a contribuição viscosa ($-\gamma dx(t)/dt$), ou seja, conforme se comporta os sistemas de natureza superamortecida [8]. Sendo assim, podemos desprezar o termo da derivada segunda da

posição na equação (1.4), isto é, $md^2x(t)/dt^2 \approx 0$. Desse modo, a partícula terá sua velocidade aproximadamente constante quando se aproximar da condição de equilíbrio.

Quando temos este tipo de situação, dizemos que as partículas do sistemas obedecem a uma dinâmica dita superamortecida e a equação (1.4) do movimento para a i -ésima partícula (ou vórtice) se torna

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{1}{\gamma}[F_{pp} + F_{ext} + \sqrt{2\gamma k_B T}\eta(t)]. \quad (1.5)$$

1.2.2 O Método Monte Carlo

Na prática, para um sistema submetido a uma força confinante constante, a dinâmica sempre converge a um estado estacionário. Na ausência de flutuações térmicas, este estado será o de equilíbrio mecânico. Para $T > 0$, o sistema nunca fica imóvel e transita continuamente de um estado para outro. O conjunto de estados visitados pelo sistema pode ser obtido pelo formalismo de Gibbs dos ensembles. Quando o sistema está em contato com um banho térmico, usamos o ensemble canônico. Nessa dissertação usamos o método Monte Carlo, descrito no apêndice A.1, para construir estados visitados pelo sistema discreto.

1.3 Supercondutores

Alguns materiais quando são submetidos a baixas temperaturas, apresentam propriedades eletromagnéticas peculiares. O estado denominado supercondutor foi observado por Kamerlingh Onnes em 1911 [9], três anos após ter conseguido liquefazer o hélio pela primeira vez em seu laboratório. Onnes estudou a resistividade elétrica em metais para temperaturas extremamente baixas. Sua intenção era descobrir qual limite da resistência elétrica dos matérias quando diminua a temperatura até se aproximar de $0K$.

Onnes notou que a resistividade elétrica do mercúrio (Hg) atingia valores extremamente baixos quando este era submetido a temperaturas muito baixas. O que causou maior espanto em Onnes nem foi a resistividade ir a zero, e sim, uma transição que o mercúrio apresentava em torno de $4.2K$, em que a resistência caía para zero abruptamente (Figura 1). Esta temperatura, na qual o mercúrio passava a ter resistência nula, ficou denominada como temperatura crítica (T_c), e cada material estudado tem o seu valor de temperatura crítica. Com isso, Onnes notou que abaixo daquela temperatura crítica, o mercúrio passava para um novo estado, denominado estado supercondutor. Essa tem-

peratura podemos ver que é extremamente baixa, mas a cada momento que as pesquisas avançam, pesquisadores conseguem descobrir novos materiais que apresentam maiores valores de temperatura crítica. Temos que outros elementos metálicos e ligas supercondutoras foram descobertas, como por exemplo o nióbio (Nb), com temperatura crítica de transição $T_c = 9,2K$, o nióbio-germânio (Nb_3Ge) com $T_c = 23,2K$ e a relativamente poucos anos, em 2001, descobriu-se o diboreto de magnésio (MgB_2) que possui transição na temperatura de $39K$ [4, 12]. Atualmente temos conhecimento de supercondutores com temperatura crítica acima de $130K$, conhecidos como supercondutores de altas temperaturas. Encontrar materiais com valores de temperatura de transição acima de $77K$ tem grandes vantagens, no fato de ser esta a temperatura de liquefação do nitrogênio, logo pode-se usar ele para resfriamento do material. Portanto, apesar de essa temperatura ser considerada alta quando se referimos a supercondutores, ainda estamos falando em temperaturas críticas muito baixas, da ordem de $-150^\circ C$. Grande parte desses supercondutores de alta temperatura consiste em cerâmicas com estrutura de perovskita modificada. Um fato muito curioso é que essas cerâmicas são maus condutores de eletricidade na temperatura ambiente. Recentemente pesquisas mostraram que o sulfeto de hidrogênio (H_2S) quando pressurizado, torna-se metálico e supercondutor. Onde para pressões acima de $160 Gpa$, apresenta uma temperatura crítica de $190K$ [13, 14].

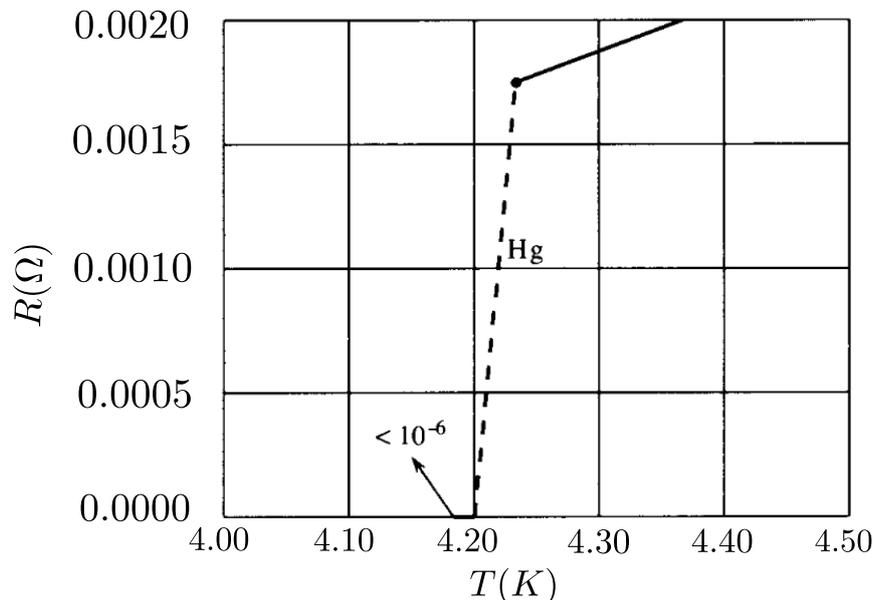


Figura 1: Curva da resistência elétrica versus temperatura obtida por Kamerlingh Onnes para o mercúrio. Observa-se que ela mostra cuidadosamente que a resistência tornou-se imensamente pequena, caindo abruptamente a um valor muito baixo. Figura adaptada da Referência [1].

Os materiais supercondutores tem uma vasta gama de aplicações, apesar que muitas

delas não fazem parte do universo comum da população [10]. Podemos observar aplicações na área de energia, principalmente na transmissão de energia elétrica. Temos também aplicações na área de transporte, donde podemos citar o exemplo de trens que utilizam o fenômeno da levitação magnética. Podemos dizer que essas aplicações são em grandes escalas. Além disso, podemos citar aplicações em aceleradores de partículas, imagem por ressonância magnética, dispositivos eletrônicos, computadores quânticos, entre outros [10, 11].

1.3.1 O Efeito Meissner

A explicação satisfatória para o fenômeno observado por Onnes só veio alguns anos mais tarde. Em 1933, os alemães Karl Walther Meissner e Robert Ochsenfeld descobriram que o estado supercondutor descoberto por Onnes poderia ser destruído. Eles observaram que quando o material em estudo está na sua temperatura crítica, ao submetê-lo a um campo magnético externo acima de um certo limite, o estado supercondutor era destruído, ou seja, o fenômeno de supercondutividade desaparecia. Meissner e Ochsenfeld observaram que abaixo do valor de campo crítico (campo necessário para destruir o estado supercondutor), as linhas de campo magnético que eram aplicadas no material, eram expulsas do interior do mesmo. Esse fenômeno na qual aplica-se um campo magnético em um material supercondutor e o campo magnético no interior do material torna-se nulo, passou-se a ser denominado como efeito Meissner [10]. O fenômeno do efeito Meissner foi descrito quantitativamente pela primeira vez pelos irmãos F. London e H. London em 1935. Partindo de uma formulação clássica que envolve apenas algumas suposições com relação aos elétrons que são responsáveis pelo fenômeno da supercondutividade e o uso das equações de Maxwell do eletromagnetismo com algumas modificações, por exemplo que a lei de Ohm não é satisfeita pelos elétrons supercondutores [15]. Essa nova formulação clássica proposto pelos irmãos London, ficou conhecida como teoria de London.

1.3.2 A Teoria de Ginzburg-Landau

Como uma alternativa à teoria de London foi criada uma outra teoria fenomenológica para tentar explicar o fenômeno da supercondutividade, a teoria de Ginzburg-Landau (GL) (1950). A teoria de GL é uma teoria fenomenológica que partiu de alguns pressupostos para tentar entender o fenômeno da supercondutividade. Nesta teoria algumas quantidades devem ser “aceitas” sem uma justificativa de imediato e alguns parâmetros são quantificados quando confrontados com a experiência [15].

Diferentemente da teoria de London que faz uma descrição totalmente clássica da supercondutividade, a teoria de GL utiliza um parâmetro de ordem quântico ψ , que representa a função de onda do estado superconductor. Na teoria de GL as propriedades são dadas em termos de uma função termodinâmica denominada densidade de energia livre, representada por

$$f_s = f_n + a|\psi|^2 + b|\psi|^4 + \frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla - e^*\mathbf{A})\psi|^2 + \frac{\mathbf{B}^2}{2\mu_0}. \quad (1.6)$$

O primeiro termo do lado direito da equação (1.6), f_n , é a energia livre no estado normal, ou seja, não temos a presença do fenômeno de supercondutividade. ψ é uma função que está relacionada com o número de elétrons supercondutores no material (ou superelétrons). Portanto, o valor $|\psi|^2$ representa a densidade de superelétrons (n_s). A função ψ será zero se o material estiver acima da temperatura crítica, ou seja, $\psi = 0$ se $T > T_c$, pois nesse caso não há supercondutividade. No caso contrário, ψ será diferente de zero para temperaturas abaixo da temperatura crítica ($\psi \neq 0$ se $T < T_c$). Quando temos a presença de um campo magnético externo \mathbf{B} agindo em nosso sistema, sua contribuição está inserido no último termo da equação (1.6). \mathbf{A} é o potencial vetor magnético que nos dá a reação do material ao campo magnético externo. A massa e a carga elétrica dos superelétrons são dadas por¹ $m^* = 2m_e$ e $e^* = 2e$ respectivamente. Os parâmetros a e b são determinados quando confrontamos a teoria com a experiência². Como o parâmetro a depende da temperatura, temos que para acima da temperatura crítica $a > 0$, e no caso de temperatura abaixo da temperatura crítica, $a < 0$. No entanto, b é sempre positivo, pois caso não fosse, não teríamos um mínimo global de energia [15]. Quando temos a temperatura acima da temperatura crítica, $a > 0$, logo não existe supercondutividade, portanto, teremos um mínimo em $\psi = 0$. Já para $a < 0$, ou seja, abaixo da temperatura crítica, o mínimo deve ocorrer para o caso em que

$$n_s = |\psi|^2 = -\frac{a}{2b}. \quad (1.7)$$

Podemos escrever o parâmetro a em termos da temperatura da seguinte forma [16]:

$$a = a_0(T - T_c). \quad (1.8)$$

Além disso, podemos escrever o comprimento de London, λ , em função dos parâmetros

¹Segundo a teoria BCS, os superelétrons são formados por pares de Cooper de dois elétrons, por isso a massa e a carga são duplicadas.

²Estes parâmetros seguem naturalmente da teoria BCS.

da teoria de Ginzburg-Landau,

$$\lambda^2 = \frac{m_e}{\mu_0 e^2 n_s} = \left| \frac{4m_e b}{\mu_0 e^2 a} \right|. \quad (1.9)$$

1.3.3 Supercondutores do Tipo II

Considerando um supercondutor no qual esta sujeito a um campo magnético externo menor que o campo crítico que leva o material ao estado normal. Devido ao efeito Meissner, as linhas de campo são expulsas do interior do supercondutor. Próximo a superfície do supercondutor tende a existir um aumento da densidade de linhas de campo de modo que o campo magnético local poderá superar o valor do campo crítico [16, 4]. Nessa situação, essa região deve sofrer uma transição para o estado normal, no entanto, essa transição não se estende por todo material. Existe, portanto, um estado no qual os dois estados coexistam, tanto o estado supercondutor como o estado normal. Esse estado chamamos de estado misto. Essa forma como o campo magnético penetra no interior do supercondutor, é que define o tipo de supercondutor. Temos dois tipos principais de supercondutores, os do Tipo I e Tipo II, no entanto, atualmente estudos revelaram um novo tipo de supercondutor, os do Tipo 1.5.

Nos supercondutores do tipo I, o campo magnético aplicado penetra no supercondutor destruindo completamente o estado supercondutor, sendo uma transição de forma abrupta. Temos a existência de um campo crítico (H_c) acima da qual o estado supercondutor é destruído e abaixo do qual o efeito Meissner estará presente. Já nos supercondutores do tipo II, o campo magnético externo aplicado, ao penetrar no material supercondutor não destrói o estado supercondutor por completo. Nesse tipo de supercondutor temos a presença do estado misto, portanto, aqui temos a presença de dois campos críticos. Temos um campo crítico inferior (H_{c1}) no qual abaixo dele temos a presença o efeito Meissner e acima dele na qual o campo magnético começa a penetrar no supercondutor, e um campo crítico superior (H_{c2}), acima do qual o estado supercondutor é completamente destruído. Entre esse dois campos críticos temos o estado na qual o estado supercondutor coexiste com o estado normal, o estado misto (Figura 2). Nesse estado é que ocorre a formação dos vórtices, objeto de interesse para o estudo em nossa pesquisa.

Como temos o interesse em estudar a dinâmica dos vórtices formados em supercondutores do tipo II, veremos a seguir como ocorre essa dinâmica.

Vimos anteriormente que os supercondutores do tipo II apresentam dois campos críticos. Temos um inferior (H_{c1}) onde o material apresenta o efeito Meissner, ou seja, a

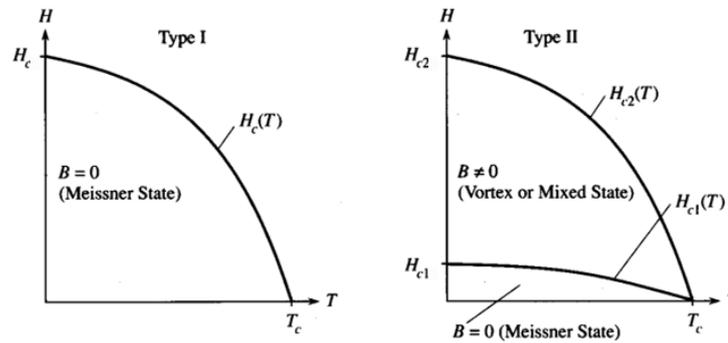


Figura 2: Diagramas mostrando o comportamento de um supercondutor dependendo do campo magnético aplicado. À esquerda temos um supercondutor do tipo I, onde temos efeito Meissner para campos abaixo de H_c e estado normal para campos superiores ao campo crítico. No lado direito, temos o caso de um supercondutor do tipo II, onde temos o efeito Meissner para campos abaixo de H_{c1} , apresenta estado normal para campos superiores a H_{c2} . Além disso, entre H_{c1} e H_{c2} , temos um estado misto, onde podemos observar a formação de vórtices. Figura retirada da Referência [1]

ausência de linhas de campo no interior do material supercondutor. Apresenta também um campo crítico superior (H_{c2}), onde o estado supercondutor é destruído, dito estado normal. No entanto, entre esses dois campos críticos, os supercondutores do tipo II apresentam as duas características, tanto efeito Meissner como estado normal, ou seja, um estado misto (Figura 3).

Uma das propriedades observadas nos supercondutores por Abrikosov em 1957, foi a formação de regiões tubulares (regiões normais ou núcleo dos vórtices) bem definidas, onde a densidade dos elétrons supercondutores tenderia a zero. Estes vórtices se ordenam em uma rede bidimensional e triangular, conhecida como rede de vórtices ou rede de Abrikosov (Figura 4) [17].

Nesse estado misto temos a formação dos vórtices, que são regiões onde houve a penetração de linhas do campo magnético aplicado em uma região de estado normal, sendo que esta região está cercada por supercorrentes. Se o núcleo desses vórtices é muito pequeno quando comparado ao comprimento de London (λ), onde o comprimento de London é distância na qual se estendem as supercorrentes em relação ao centro do vórtices, podemos considerar esses vórtices como partículas isoladas que interagem entre si por meio de uma força dada pela função de Bessel modificada do segundo tipo [18, 19, 20].

A força a que os vórtices estão submetidos é devida a interação de Lorentz entre o campo magnético e a supercorrente na região do vórtice, de natureza repulsiva e de curto

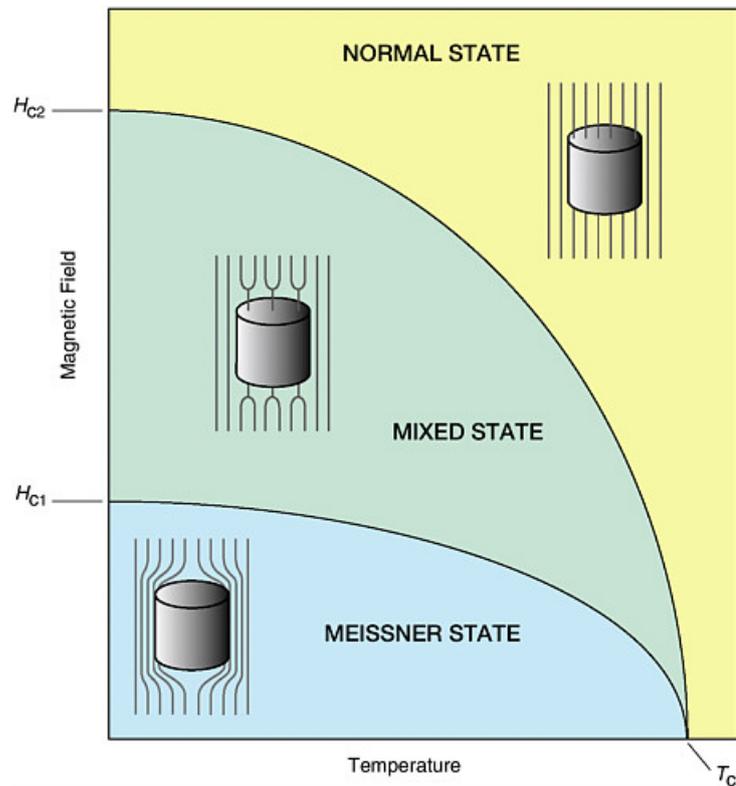


Figura 3: Diagrama de fase $H - T$ de um supercondutor do tipo II. Abaixo de um campo crítico H_{c1} , o material é supercondutor e repele completamente o campo magnético. Entre H_{c1} e H_{c2} , o supercondutor está em um estado misto, onde os vórtices podem ser observados. No diagrama, T_c é a temperatura crítica do material supercondutor quando o campo magnético é desligado. Figura retirada da Referência [2].

alcance.

Quando ocorre a formação dos vórtices no interior do material supercondutor, devido a interação com os demais, estes vórtices tendem a se movimentar. Uma característica que esses vórtices têm é uma dissipação de energia ao entrarem em movimento. O núcleo dos vórtices é uma região que não se apresenta no estado supercondutor, ou seja, o núcleo está no estado normal. Quando está em movimento o núcleo do vórtice entra em contato com as supercorrentes do vórtice vizinho, logo teremos uma dissipação de energia. Quando comparamos a velocidade com que esses vórtices se movimentam com a velocidade presente no termo de viscosidade, o termo inercial é irrelevante frente aos termos viscosos. Com isso podemos desprezar os efeitos inerciais dos vórtices em relação à dissipação, podendo assim considerar que os vórtices em supercondutores do tipo II obedecem a um movimento superamortecido.

O material supercondutor possui uma certa temperatura, na maioria das vezes muito baixa. Esta temperatura é responsável por produzir flutuações no movimento dos vórtices.

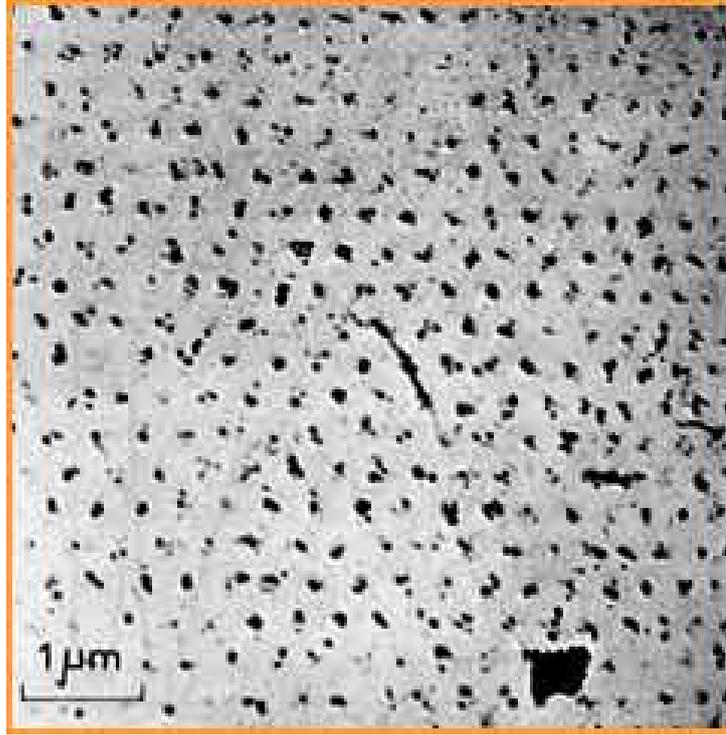


Figura 4: Visualização da rede de Abrikosov obtida por U. Essmann e H. Trauble em 1967. Esta visualização foi obtida pela técnica de decoração magnética, comprovando que os vórtices formam uma rede triangular na ausência de forças externas e de defeitos no material. Figura retirada da Referência [3].

Portanto, para que possamos estudar por completo o movimento dos vórtices em supercondutores do tipo II, além de considerar as interações entre si, teremos que considerar as flutuações térmicas produzidas pela temperatura do meio supercondutor [4].

Com isso, a equação do movimento para a i -ésima partícula (ou vórtice) de um sistema com N partículas interagentes, e sujeitas a uma força externa $\mathbf{F}_{ext}(\mathbf{r}_i)$, é

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_{ext}(\mathbf{r}_i) - \gamma \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + \sum_{j \neq i} \mathbf{J}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta(\mathbf{r}_i, t), \quad (1.10)$$

onde \mathbf{r}_i é a posição da i -ésima partícula, γ é o coeficiente de viscosidade do meio, o termo $\sum_{j \neq i} \mathbf{J}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ representa a somatório de todas as forças devidas as $(N - 1)$ partículas, $\mathbf{F}_{ext}(\mathbf{r}_i)$ representa a força externa e, por fim, $\eta(\mathbf{r}_i, t)$ é o ruído térmico devido as flutuações. Esse ruído tem as seguintes propriedades:

$$\langle \eta(\mathbf{r}_i, t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \eta(\mathbf{r}_i, t) \eta(\mathbf{r}_i, t') \rangle = \delta(t - t'). \quad (1.11)$$

Como já mencionado, os vórtices interagem entre si por meio de um potencial que é dado em termos de uma função de Bessel modificada. Portanto, consideramos na Eq.

(1.10) que a força de interação $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ é dada por uma função de Bessel modificada de segundo tipo ($K_1(\mathbf{r})$), ou seja, $\mathbf{J}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\epsilon}{\lambda} K_1(|\mathbf{r}|/\lambda) \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$. Essa força de interação é oriunda do potencial de interação que é conhecido como potencial de London, tendo como característica ser repulsivo e de curto alcance. O λ é o alcance da interação da força e definido como “comprimento característico”, o qual corresponde ao comprimento de London quando estamos trabalhando com supercondutores.

No entanto, o movimento dos vórtices tem um regime superamortecido. Logo, na equação (1.10) desprezamos o termo inercial e podemos descrever o movimento para cada um dos vórtices por meio da equação

$$\gamma \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{F}_{ext}(\mathbf{r}_i) + \sum_{j \neq i} \mathbf{J}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta(\mathbf{r}_i, t). \quad (1.12)$$

2 Modelos

Neste capítulo apresentaremos as duas formas que podemos analisar nossos sistemas de interesse. A primeira abordagem consiste em um modelo discreto, ou seja, estudamos o movimento de cada partícula do sistema individualmente, baseando-se na equação de Langevin no limite superamortecido. Na segunda abordagem, o sistema será tratado de uma forma contínua, isto é, estudaremos o sistema sem a preocupação de como cada partícula evolui individualmente. Nesse caso, vamos observar o comportamento médio de todo o sistema, tendo como base a equação da continuidade, que descreve a evolução temporal da densidade média de partículas do sistema.

2.1 Modelo Discreto

Dado um sistema com N partículas que interagem entre si através de uma força conservativa, \mathbf{F}_{ij} , que é oriunda da derivada de um determinado potencial de interação, no caso de supercondutores do tipo II, esse potencial é o potencial de London. Também introduziremos uma força externa, \mathbf{F}_{ext} . Esta força externa é uma força de confinamento na direção de x , dada por $\mathbf{F}_{ext} = -k\mathbf{x}$, onde k é a constante elástica. Além disso, teremos que considerar as forças que as partículas estão sujeitas devido o movimento em um meio viscoso, essa força é proporcional à velocidade, $\gamma\mathbf{v}(t)$.

Ao aplicarmos a segunda lei de Newton a uma dada partícula, que tem $\mathbf{r}_i(t)$ como o vetor que fornece sua localização em um instante t , teremos

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij} - \gamma \frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta_i(t), \quad (2.1)$$

onde m_i é a massa da partícula i , N o número total de partículas que constitui o sistema, γ é a viscosidade efetiva do meio e o termo dependente de $\eta_i(t)$ é a flutuação térmica (ruído) no qual o sistema está imerso. Esta equação é chamada de equação de Langevin dependente de ruídos térmicos.

No limite superamortecido, o termo inercial é irrelevante frente aos outros termos, portanto o lado esquerdo da equação anterior (Eq. 2.1) se anula, portanto

$$\gamma \frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \mathbf{F}_{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij} + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta_i(t). \quad (2.2)$$

Reescrevendo a equação anterior, teremos

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \frac{1}{\gamma} \left[\mathbf{F}_{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij} + \sqrt{2\gamma k_B T} \eta_i(t) \right]. \quad (2.3)$$

Através da equação (2.3), podemos determinar a posição que uma partícula terá em um dado instante de tempo t , podendo assim determinar o deslocamento que ela sofrerá entre t e $t + \Delta t$, onde Δt é um intervalo de tempo entre dois instantes consecutivos. Lembrando que como trabalharemos com simulação computacional utilizaremos a versão discreta da equação (2.3), dado por

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \frac{\Delta t}{\gamma} \left[\mathbf{F}_{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij} + \sqrt{\frac{2\gamma k_B T}{\Delta t}} \eta_i(t) \right]. \quad (2.4)$$

Onde $\eta_i(t)$ segue uma distribuição normal de média zero e variância nula. O termo $(\Delta t)^{-\frac{1}{2}}$ em (Eq. 2.4) garante que a difusão a pequenos tempos segue o comportamento esperado, $\langle \mathbf{r}^2 \rangle \sim t$.

Nessa dissertação não utilizaremos diretamente esse modelo discreto. Utilizaremos o método Monte Carlo, mais precisamente o algoritmo de Metropolis para construirmos estados que são visitados quando o sistema se encontra no equilíbrio térmico, nos dando assim a descrição do sistema discreto.

2.2 Modelo Contínuo

Para estudar o comportamento de sistemas superamortecidos, podemos utilizar uma abordagem na qual descrevemos o sistema em termos de uma função contínua $\rho(\mathbf{r}, t)$. Essa função nos fornece a concentração média das partículas em um instante t para cada posição $\mathbf{r}(t)$ do sistema. Essa abordagem possui algumas vantagens em relação à abordagem discreta, pois nos permite descrever sistemas com um número muito grande de partículas.

Uma vez que o número de partículas é conservado, partimos da equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{J} \equiv \rho \mathbf{v}$ e as velocidades das partículas agora são representadas por um campo vetorial $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, que deve ser proporcional ao campo de força total \mathbf{f}_1 ($\mathbf{f}_1 = \gamma \mathbf{v}$) que atua sobre uma partícula próxima de $\mathbf{r}(t)$. Podemos notar que o campo de força total \mathbf{f}_1 é proporcional ao campo de velocidade local $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, essa consequência de ser proporcional é oriunda devido ao sistema ter uma dinâmica superamortecida. Se observamos a equação (1.12) que descreve o movimento de um vórtice no regime superamortecido, ela é semelhante a equação para o campo de força total ($\mathbf{f}_1 = \gamma \mathbf{v}$). Este campo de força total represente as contribuições das forças internas e externas (\mathbf{f}_{int} e \mathbf{f}_{ext} respectivamente) sobre uma partícula, teremos $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext}$. Reescrevendo a equação da continuidade (Eq. 2.5), temos que

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}_1), \quad (2.6)$$

substituindo o valor de \mathbf{f}_1 na equação anterior teremos

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho(\mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext})]. \quad (2.7)$$

O campo externo, \mathbf{f}_{ext} , é dado em função do potencial externo, que no nosso caso é um potencial parabólico, ou seja,

$$\mathbf{f}_{ext} = -\nabla U_{ext}(\mathbf{r}), \quad \text{onde} \quad U_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} k \mathbf{r}^2, \quad (2.8)$$

uma vez que esse potencial só deve depender da posição onde se encontram as partículas. Para o campo de força de interação, como as interações ocorrem entre as partículas, podemos supor que essa força dependa da concentração das partículas, bem como também do seu gradiente, ou seja, $\mathbf{f}_{int} = \mathbf{f}_{int}(\rho, \nabla \rho)$.

Como a força interna depende da concentração e de seu gradiente, um fato que podemos esperar é que a energia U_1 de uma partícula também dependa, visto que o campo total \mathbf{f}_1 depende de \mathbf{f}_{int} . Assim como o campo total \mathbf{f}_1 é expresso como a soma das contribuições das forças internas e externas, podemos expressar a energia como $U_1 = U_{int} + U_{ext}$, onde U_{int} e U_{ext} são as contribuições das energias oriundas das forças internas e das forças externas, respectivamente, para cada uma das partículas no meio contínuo. O potencial de interação entre as partículas é dado em termos de uma função de Bessel modificada do segundo tipo. Teremos que a força de interação entre as partículas tem natureza repulsiva e de curto alcance. Quando a força de interação tem um raio finito, e $\nabla\rho$ varia lentamente, a ponto de ser considerado constante dentro do raio de atuação da força, podemos considerar a expansão da concentração ρ até primeira ordem, ou seja, $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(0, t) + \mathbf{r} \cdot \nabla\rho(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}}$. Além disso, quando temos potenciais repulsivos, o estado de mínima energia é sempre um estado no qual a concentração é constante. Portanto, qualquer contribuição de $\nabla\rho$ na energia interna U_{int} deve ser de segunda ordem, visto que a força resultante (contribuição de primeira ordem em U_{int}) em um estado de concentração constante é nula. Com isso, podemos expressar a energia apenas em termos de ρ , $U_{int} = U_{int}(\rho)$. Temos também a energia externa (U_{ext}), que por outro lado só depende da posição ($U_{ext} = U_{ext}(\mathbf{r})$). Desse modo, podemos escrever

$$U_1 = U_1(\rho, \mathbf{r}) = U_{int}(\rho) + U_{ext}(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

2.2.1 A Função $a(\rho)$

Utilizando a descrição contínua, tomaremos uma região do espaço dv que contém um número de partículas dado por ρdv . Portanto, para obtemos a energia total U_T do sistema, multiplicamos o número de partículas pela energia de cada partícula (Eq. 2.9). A energia total é dada pela integral

$$U_T = \int_v dv \rho U_1(\rho, \mathbf{r}). \quad (2.10)$$

Derivando a equação (2.10) com relação ao tempo, teremos

$$\frac{dU_T}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\int_v dv \rho U_1 \right] = \int_v dv \frac{\partial \rho}{\partial t} \left(U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right). \quad (2.11)$$

Agora utilizando a equação da continuidade (Eq. 2.5), temos que

$$\frac{dU_T}{dt} = - \int_v dv \left(U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right) \nabla \cdot \mathbf{J}. \quad (2.12)$$

Para desenvolvermos a equação (2.12), utilizaremos a identidade $W(\nabla \cdot \mathbf{J}) = \nabla \cdot (W\mathbf{J}) - \mathbf{J} \cdot \nabla W$, onde o termo entre parênteses representa o W em nossa identidade. Logo, reescrevemos (Eq. 2.12) como

$$\frac{dU_T}{dt} = - \int_v dv \nabla \cdot \left[\left(U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right) \mathbf{J} \right] + \int_v dv \mathbf{J} \cdot \nabla \left(U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right). \quad (2.13)$$

Utilizando o teorema de Gauss (Teorema da divergência), a primeira integral em (Eq. 2.13) representa o fluxo de energia que atravessa as bordas do sistema. No entanto, uma vez que não há fluxo de corrente de partículas \mathbf{J} passando pelas bordas de nosso sistema, sua contribuição é nula, resultando em

$$\frac{dU_T}{dt} = \int_v dv \mathbf{J} \cdot \nabla \left(U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right). \quad (2.14)$$

Dado que temos uma energia total devido à força total, podemos determinar a potência dissipada P_T no sistema devido a essa força. Em uma descrição discreta, essa potência é dada por $P_T = \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{v}_i$. Sabemos também que a potência dissipada é dada pelo negativo da variação da energia, ou seja, $P_T = -dU_T/dt$. Logo, escrevendo na forma contínua temos

$$\frac{dU_T}{dt} = - \int_v dv \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}_1 = - \int_v dv \mathbf{J} \cdot \mathbf{f}_1, \quad (2.15)$$

onde substituímos $\rho \mathbf{v}$ por \mathbf{J} .

Se observamos as equações (2.14) e (2.15), o lado esquerdo de ambas são iguais, logo podemos comparar os termos que estão do lado direito da igualdade. Fazendo isso, obteremos uma expressão para o campo de força total para uma partícula

$$\mathbf{f}_1 = -\nabla \left(U_1 + \rho \frac{\partial U_1}{\partial \rho} \right), \quad (2.16)$$

uma vez que integramos em um volume arbitrário, podemos fazer essa comparação.

Vimos que $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext}$ e $U_1 = U_{int} + U_{ext}$, substituindo essas informações e a equação (2.8) em (Eq. 2.16), temos que

$$\mathbf{f}_{int} - \nabla U_{ext} = -\nabla \left(U_{int} + U_{ext} + \rho \frac{\partial U_{int}}{\partial \rho} + \rho \frac{\partial U_{ext}}{\partial \rho} \right). \quad (2.17)$$

Como vimos anteriormente, $U_{int} = U_{int}(\rho)$, $U_{ext} = U_{ext}(\mathbf{r})$, logo $\partial U_{ext}/\partial \rho = 0$. Portanto, usando isso em (Eq. 2.17) concluiremos que

$$\mathbf{f}_{int} = - \left(2 \frac{dU_{int}}{d\rho} + \rho \frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2} \right) \nabla \rho, \quad (2.18)$$

ou seja, determinamos a força interna do sistema. Essa força depende tanto da derivada primeira como da derivada segunda da energia interna como também do gradiente de concentração das partículas.

Definiremos a função $a(\rho)$ como sendo a razão entre os módulos da força interna e do gradiente de concentração, com isso, temos que

$$a(\rho) = 2 \frac{dU_{int}}{d\rho} + \rho \frac{d^2U_{int}}{d\rho^2}, \quad (2.19)$$

portanto, teremos $\mathbf{f}_{int} = -a(\rho)\nabla\rho$. Em posse desse resultado, retornaremos a equação da continuidade (Eq. 2.7), que fica expressa na forma

$$\gamma \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \{\rho[\mathbf{f}_{ext} - a(\rho)\nabla\rho]\}. \quad (2.20)$$

Uma observação importante que podemos fazer na equação (2.20), é quando estudamos uma situação com ausências de forças externas ($\mathbf{f}_{ext} = \mathbf{0}$), teremos

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot [D'(\rho, \mathbf{r})\nabla\rho(\mathbf{r}, t)] \quad (2.21)$$

ou seja, uma equação de difusão, onde D' é o coeficiente de difusão, nesse caso igual a $a(\rho)\rho/\gamma$. Além disso, temos que é uma equação de difusão não-linear, uma vez que o coeficiente de difusão não é constante.

A equação (2.20) consegue descrever o comportamento do sistema na forma contínua. Lembrando que essa equação não leva em consideração quando o sistema está com uma determinada temperatura (ruído térmico), ou seja, ela descreve bem sistemas para temperatura nula. No entanto, a dedução para a equação que descreve o comportamento de um sistema dependente da temperatura é análoga, exceto que devemos acrescentar o termo dependente da temperatura no final.

Nesse trabalho, nosso objetivo principal é estudar a equação que descreve o sistema de forma contínua, ou seja, a equação da difusão levando em consideração o termo dependente da temperatura T , temos [21]

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \{\rho[\mathbf{f}_{ext} - a(\rho)\nabla\rho]\} + k_B T \nabla^2 \rho. \quad (2.22)$$

Quando estudamos o sistema no estado estacionário, o lado esquerdo da equação (2.22) é nulo. Portanto, obtemos a energia potencial de interação, U_{int} , para que possamos determinar $a(\rho)$ através da equação (2.19), e posteriormente, resolver a equação (2.22) no estado estacionário para sistemas que simulam vórtices em supercondutores do tipo II.

3 Métodos

O sistema estudado é composto por N partículas interagentes localizadas em uma “célula de simulação” bidimensional, $L_x \times L_y$. As partículas interagem entre si por meio de um potencial de interação repulsivo e de curto alcance. Além disso, elas se movem em um meio dissipativo e possuem um movimento superamortecido. Esse sistema simula a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II.

Inicialmente, utilizando o método Monte Carlo³, construímos estados que descrevem a configuração do sistema no equilíbrio térmico. Após o sistema chegar ao estado estacionário, ou seja, após um longo período de simulação, com o auxílio de um Kernel Gaussiano (KDE)⁴, determinamos o perfil de densidade através das configurações finais das partículas.

Os resultados obtidos através das simulações de Monte Carlo terão como principal intuito validar os nossos resultados que obteremos com o modelo contínuo, que é o principal objetivo deste trabalho. Também estamos interessados em validar o modelo contínuo para a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II.

Para desenvolvermos e concluirmos nossa pesquisa, utilizaremos o método Monte Carlo, principalmente o algoritmo de Metropolis⁵ para estudarmos o modelo contínuo. De posse da equação de difusão que obtemos com o modelo contínuo (Eq. 2.22)

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \{\rho[\mathbf{f}_{ext} - a(\rho, T)\nabla\rho]\} + k_B T \nabla^2 \rho. \quad (3.1)$$

Note que incluiremos aqui uma possível dependência da temperatura na função a , isto é, $a = a(\rho, T)$. Reescrevendo a equação (3.1) como

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \{\rho[\mathbf{f}_{ext} - a(\rho, T)\nabla\rho] - k_B T \nabla\rho\}. \quad (3.2)$$

³Os detalhes sobre o método Monte Carlo foram dados no apêndice A.1.

⁴O método de KDE é explicado no apêndice A.2.

⁵Os detalhes sobre o algoritmo de Metropolis foram dados no apêndice A.1.1.

A equação (3.2) é semelhante à equação da continuidade (Eq. 2.5), onde o termo entre chaves faz o papel da densidade de corrente de partículas (\mathbf{J}). Como não há fluxo de partículas pelas bordas do sistema, o termo entre chaves é constante. Também como não entram nem saem partículas do sistema, teremos essa constante igual a zero. Outro ponto a considerar é que estamos interessados em estudar o sistema no estado estacionário, portanto teremos em (Eq. 3.2) $d\rho/dt = 0$. A força externa que atua no sistema é de natureza repulsiva, e tem o intuito confinar as partículas na direção do eixo x . Portanto, a equação que teremos que integrar para analisar a dinâmica no modelo contínuo tem a seguinte forma

$$f_{ext} = a(\rho, T) \frac{d\rho}{dx} + \frac{k_B T}{\rho} \frac{d\rho}{dx}. \quad (3.3)$$

Onde f_{ext} é a força de confinamento, dado por $f_{ext} = -kx$. E a função $a(\rho, T)$ é dada pela equação (2.19)

$$a(\rho, T) = 2 \frac{dU_{int}(\rho, T)}{d\rho} + \rho \frac{d^2 U_{int}(\rho, T)}{d\rho^2}. \quad (3.4)$$

Nesse momento faremos uso do algoritmo de Metropolis para a determinação da energia interna (U_{int}) do sistema. Determinaremos U_{int} utilizando um sistema em condições homogêneas de temperatura e densidade. Realizaremos esse processo para vários valores de temperatura e densidade.

De posse de U_{int} , através da equação (3.4) obteremos a função $a(\rho, T)$. No entanto, se observamos teremos que trabalhar com as derivadas de U_{int} . Portanto, utilizaremos um método de interpolação *Spline Cúbico*⁶ que nos auxiliará na obtenção das derivadas de U_{int} , e conseqüentemente da função $a(\rho, T)$. Investigando U_{int} em um sistema homogêneo, obteremos $a(\rho, T)$ que nos permitirá determinar $\rho(\mathbf{r}, t)$ dinâmico inhomogêneo.

Portanto, integramos numericamente a equação (3.3) levando em conta todas essas considerações anteriores, incluindo a interação partícula-partícula (potencial de London), força externa ($F_{ext} = -kx$), além do ruído térmico. Com isso, propomos validar o modelo contínuo, comparando com o simulações de Monte Carlo.

Além disso, estudaremos variações da equação (3.1). Pois nosso intuito é compreender as contribuições de cada termo dependente da temperatura. Modificando a equação (3.1) em quatro novas equações (equações de difusão modificadas) que serão resolvidas

⁶O método de interpolação *Spline Cúbico* é explicado no apêndice A.3.

numericamente. Considerando já no estado estacionário, temos

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, T) \nabla \rho] + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (3.5a)$$

$$-\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}_{ext}) + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (3.5b)$$

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, 0) \nabla \rho] = 0 \quad (3.5c)$$

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, 0) \nabla \rho] + k_B T \nabla^2 \rho = 0. \quad (3.5d)$$

A equação (3.5a) é uma descrição que leva em conta a temperatura dentro da função a , além do termo proporcional a $k_B T$, essa é a descrição completa do modelo contínuo (Eq. 3.1). A equação (3.5b) é uma boa descrição quando as partículas não interagem entre si, porém o meio está a uma temperatura T diferente de zero, como no caso de um gás ideal confinado. A equação (3.5c) é eficiente quando existe interação, porém sem flutuações térmicas, lembrando que essas interações ($a(\rho, T)$) foram parametrizadas com $T = 0$. E à equação (3.5d) é uma alternativa à equação (3.5a), com a diferença que é tomado a função $a(\rho, T)$ obtida a $T = 0$, isto é, os efeitos térmicos nas interações ($a(\rho, T)$) são desprezadas. Estudar essas variações da equação (3.1), tem o intuito de verificar se a correção da temperatura é relevante no modelo contínuo.

Aqui introduzimos os casos quando as interações internas do sistema são tomadas a $T = 0$ ($a(\rho, 0)$). Nesse caso as partículas tendem a formar estruturas de mínimas energia. Este estado de mínima energia pode depender da forma de interação e também da densidade das partículas. Em duas dimensões, que é caso que estamos interessados, as partículas se apresentam uma rede triangular (chamada de rede de Abrikosov) no estado de mínima energia [8]. Desse modo, utilizando a estrutura da rede que é formado pelas partículas, podemos calcular a energia interna U_{int} , que é dada por

$$U_{int}(\rho) = \frac{1}{2} \sum_v V(r_v) \quad (3.6)$$

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

A Figura (5) ilustra de que maneira o cálculo de U_{int} é realizado. O somatório da equação (3.6) é realizado sobre todos os vértices v de uma dada rede cristalina uniforme que estão a uma dada distância r_v de um ponto de referência da rede (círculo central da figura), desde que os pontos da rede estejam dentro do raio de interação da força, isto é, $r_v \leq r_c$. Como essa interação é calculada duas vezes para cada par de vértices da rede, é necessário dividir o resultado por 2. Ao obter a energia interna do sistema podemos

agora obter a função $a(\rho)$, nesse caso é dado por [22]

$$a(\rho) = \frac{1}{2D^2\rho} \sum_v r_v [(D-1)f(r_v) - r_v f'(r_v)], \quad (3.7)$$

sendo D a dimensão do sistema, r_v a posição do vértice v na rede, $f(r_v)$ é a resultante das forças no vértice v devido as partículas nos vértices vizinhos que estão dentro da área de atuação no limite do raio de corte (r_c) e $f'(r_v)$ é a derivada dessa força.

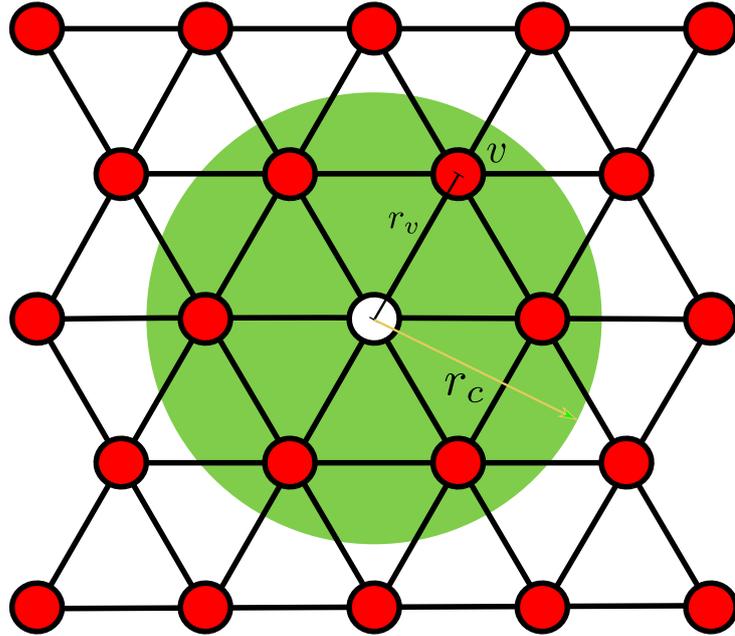


Figura 5: Ilustração do procedimento utilizado para calcular U_{int} . A rede utilizada depende do potencial de interação e da dimensão do sistema, para o potencial de London e um sistema $2D$ temos uma rede triangular. Na figura, r_c é o raio de atuação da força de interação, e v é um vértice qualquer da rede.

4 Resultados

Apresentaremos nas próximas seções alguns resultados para sistemas de partículas superamortecidas. Mostraremos resultados de simulações para vórtices em supercondutores do tipo II que consideramos como partículas interagentes em um meio superamortecido sujeitas a uma agitação térmica. Apresentaremos resultados para o comportamento da energia interna desse sistema em função da temperatura e da densidade de partículas. Posteriormente apresentaremos resultados para o perfil de densidade de partículas no estado estacionário com efeitos de temperatura.

4.1 Energia do Sistema Homogêneo

Abordaremos nessa seção resultados de simulações com o método Monte Carlo. Nosso intuito em utilizar esse método é a obtenção da energia interna do sistema em função da densidade de partículas e da temperatura.

Realizamos simulações iniciando o sistema de N partículas em posições aleatórias com uma densidade fixa e a uma temperatura T . Utilizamos o algoritmo de Metropolis para obter a energia interna por partícula do sistema para cada passo de Monte Carlo, segundo a equação

$$U_{int} = \frac{1}{2N} \sum_i \sum_{j \neq i} V(r_{ij}). \quad (4.1)$$

A cada passo de Monte Carlo, uma partícula pode se mover dependendo da variação de energia como mostrado no apêndice A. Ao alcançar o estado estacionário, calculamos o valor médio da energia para cada valor de temperatura. Posteriormente obteremos um gráfico da energia por partícula (U_{int}) em função da densidade (ρ). Na figura (6) mostramos como a energia por partícula varia com a densidade para os diferentes valores de temperatura, onde consideramos o potencial de interação entre as partículas como sendo o potencial de London, em um sistema bidimensional ($D = 2$).

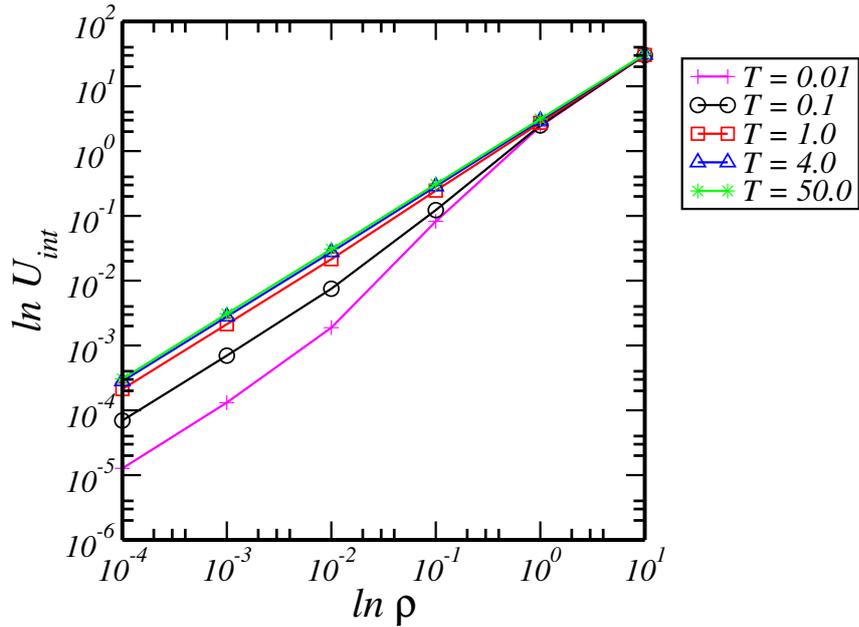


Figura 6: A Figura mostra a energia potencial média por partícula (U_{int}) como função da densidade (ρ).

Observamos que, para uma densidade $\rho = 10^0$, a energia U_{int} assume o mesmo valor para todos valores de temperatura estudados e essa relação permanece à medida que ρ aumenta. Notamos que para baixas densidades existe uma diferença notável entre as energias internas entre as temperaturas $T = 0.01$ e $T = 1.0$. Um fato interessante que quando extrapolamos o valor de T , como exemplo $T = 50.0$, não observamos muito essa diferença nos perfis da energia interna por partícula. Podemos notar que para esse valor de $T = 50.0$, os resultados são bem semelhantes aos resultados para $T = 4.0$, ou seja, estudar o sistema com essa temperatura elevada é semelhante a estudar o sistema para a temperatura em torno de $T = 4.0$. Portanto, fica evidente que o interessante seja estudar estes sistemas para valores mais baixos de temperatura, pois são onde observamos que o sistema apresenta uma maior variação na sua energia interna média.

4.2 Obtenção da Função $a(\rho, T)$

De posse das energias internas por partículas, para obter a $a(\rho, T)$, usamos um interpolador *spline cúbico* para determinar as derivadas da equação (3.4). Ao usar o interpolador *spline cúbico* em nossos dados, vale lembrar que realizamos uma modificação na equação (3.4), as derivadas contidas na função foram calculadas com o logaritmo natural (\ln) dos

dados. Com isso, a derivada primeira fica

$$\frac{dU_{int}}{d\rho} = \exp(\ln U_{int} - \ln \rho) \frac{d \ln U_{int}}{d \ln \rho}. \quad (4.2)$$

E a derivada segunda ficará

$$\frac{d^2 U_{int}}{d\rho^2} = \exp(\ln U_{int} - 2 \ln \rho) \left(\frac{d^2 \ln U_{int}}{d \ln \rho^2} + \frac{d \ln U_{int}}{d \ln \rho} - 1 \right). \quad (4.3)$$

Logo, de acordo com a equação (3.4), a nova função $a(\rho, T)$ que obteremos terá a seguinte forma

$$a(\rho, T) = \exp(\ln U_{int} - \ln \rho) \left(\frac{d^2 \ln U_{int}}{d \ln \rho^2} + 3 \frac{d \ln U_{int}}{d \ln \rho} - 1 \right). \quad (4.4)$$

Portanto com a equação (4.4) obteremos por meio do interpolador os valores para a função $a(\rho, T)$. Essa função nos auxiliará na solução numérica para a nossa equação de difusão (Eq. 3.1) obtida por meio do modelo contínuo, assim como também para as equações de difusão modificadas (Eq. 3.5). Como mencionado anteriormente, as derivadas são obtidas com um *spline cúbico* com os dados da Figura (6).

A figura (7) mostra a função $a(\rho, T)$, calculada para sistemas de vórtices em supercondutores do tipo II a partir de uma rede triangular (linha em vermelho) para $T = 0$. Apresentamos também o comportamento da função $a(\rho, T)$ dependente da temperatura obtidas através de simulações com o método Monte Carlo. Silva (2013)[4] realizou estudos e obteve que a função a era igual a uma constante de valor 2π quando simulamos vórtices em supercondutores do tipo II. No entanto, ele não levou em conta a dependência de ρ , muito menos de T . Notamos que a função a depende tanto de ρ como de T , mas em todos os casos de temperatura estudado para densidades grandes, a função tenta saturar para o mesmo valor obtido por [4], $a = 2\pi$. Entretanto, para densidades menores, as correlações partícula-partícula se tornam mais importantes e $a(\rho, T)$ deixa de ser uma constante.

4.3 Determinação da Concentração no Estado Estacionário

Para a determinação da concentração quando nosso sistema está no estado estacionário, partimos da equação de difusão que obtemos com o modelo contínuo (Eq. 3.1)

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \{ \rho [\mathbf{f}_{ext} - a(\rho, T) \nabla \rho] \} + k_B T \nabla^2 \rho, \quad (4.5)$$

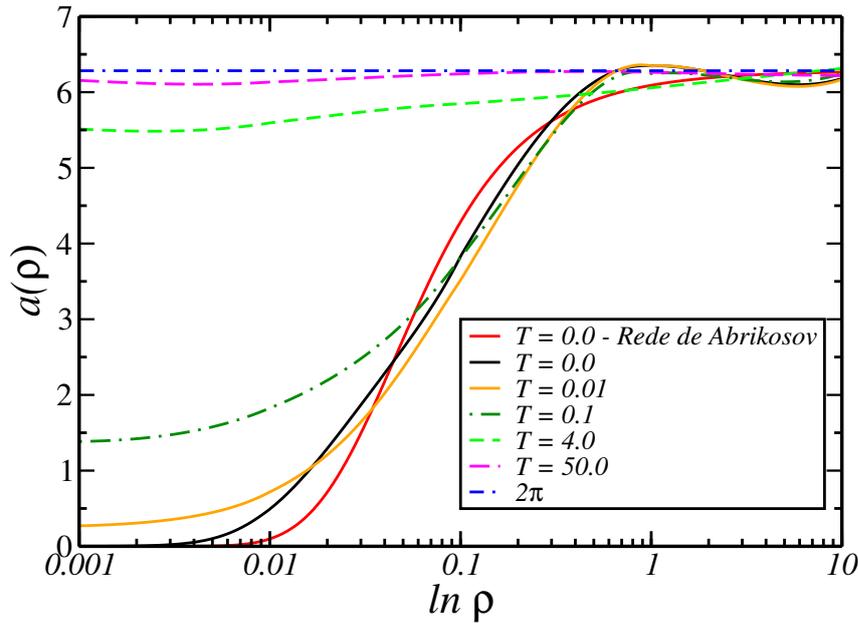


Figura 7: Investigamos sistemas de vórtices que interagem segundo o potencial de London, $V_S = \epsilon K_0(r/\sigma)$. Para $T = 0$ as energias por partícula é calculada a partir da rede de Abrikosov. Para $T > 0$ a energia por partícula foram obtidas dos resultados de Monte Carlo, mostrado na Figura (6). Para altas concentrações a função $a(\rho, T)$ converge para $a = 2\pi$, como previsto por [4].

onde introduzimos a temperatura na função ($a(\rho)$) como já mencionado anteriormente. No estado estacionário, teremos que

$$\nabla \cdot \{\rho[\mathbf{f}_{ext} - a(\rho, T)\nabla\rho]\} = k_B T \nabla^2 \rho. \quad (4.6)$$

Resolvemos essa equação (Eq. 4.6) utilizando a função $a(\rho, T)$ obtida por meio da energia interna do sistema homogêneo (Resultados da Figura 6). Utilizando o interpolador *spline cúbico* obtemos seus valores para diferentes valores de T (Figura 7). Quando temos um sistema a $T = 0$, ou seja, em seu estado de mínima energia, a configuração das partículas no estado estacionário é uma rede regular triangular (rede de Abrikosov) para o caso de supercondutores do tipo II em duas dimensões. Já quando temos o sistema com $T \neq 0$, que é nosso caso de interesse, é razoável esperar que a configuração de mínima energia não seja uma rede regular, exatamente em virtude das flutuações térmicas a qual o sistema está submetido.

Para validar o modelo contínuo levando em conta a temperatura no sistema, e além disso, compreender as contribuições dos termos dependentes da temperatura, resolvemos numericamente a equação (4.6). Além disso, fizemos modificações nessa equação para entender a contribuição da temperatura em nosso sistema. Portanto, resolvemos numeri-

camente as seguintes equações no estado estacionário para alguns valores de temperatura

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, T) \nabla \rho] + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (4.7a)$$

$$-\nabla \cdot (\rho \mathbf{f}_{ext}) + k_B T \nabla^2 \rho = 0 \quad (4.7b)$$

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, 0) \nabla \rho] = 0 \quad (4.7c)$$

$$-\nabla \cdot [\rho \mathbf{f}_{ext} - \rho a(\rho, 0) \nabla \rho] + k_B T \nabla^2 \rho = 0. \quad (4.7d)$$

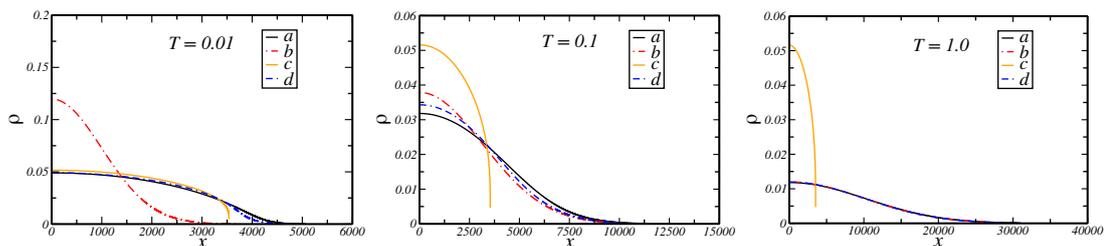


Figura 8: Soluções das equações diferenciais (Eq. 4.7) para três valores de temperatura para o caso onde as partículas interagem com o potencial de London, $V_S = \epsilon K_0(r/\sigma)$. As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (Eq. 4.7).

Na Figura (8) podemos visualizar a solução para cada uma dessas equações de difusão modificadas. Para efeito de visualização, mostramos somente o eixo positivo da posição x do perfil de concentração.

A equação (4.7a) é uma descrição que leva em conta a temperatura dentro da função a , além do termo proporcional a $k_B T$, essa é a descrição completa do modelo contínuo (Eq. 4.5). A equação (4.7b) é uma boa descrição quando as partículas não interagem entre si, porém o meio está a uma temperatura T diferente de zero, como no caso de um gás ideal confinado. Já a equação (4.7c) é eficiente quando existe interação, porém sem flutuações térmicas. Lembrando que essas interações ($a(\rho, T)$) são parametrizadas com $T = 0$. E a equação (4.7d) é uma alternativa à equação (4.7a), com a diferença que é tomado a função $a(\rho, T)$ obtida a $T = 0$, isto é, os efeitos térmicos nas interações ($a(\rho, T)$) são desprezados.

Através da Figura (8) podemos notar que dependendo do valor da temperatura, o perfil de concentração apresenta um comportamento diferente para as soluções das equações modificadas. Para temperatura baixa, ou seja, $T = 0.01$, temos que apenas a solução da equação (4.7b) apresenta uma maior divergência das demais. Nessa situação de temperatura baixa, a ponto que os efeitos das interações sejam bem mais relevantes que os efeitos relacionados às flutuações térmicas, a equação (4.7c) é suficiente para descrever o sistema, e a solução a torna-se semelhante à solução c . Já quando analisamos o caso que temos

uma temperatura mais alta ($T = 1.0$) a única solução que diverge das demais é aquela que não tem o termo proporcional à temperatura (Eq. (4.7c)), ou seja, para temperaturas mais altas o termo de flutuação térmica se tornam mais importantes quando comparado aos efeitos das interações. Logo a descrição do sistema como um gás ideal confinado (Eq. 4.7b) poderia ser suficiente para descrever o sistema.

Ainda na Figura (8) se analisarmos um caso intermediário, para $T = 0.1$ observamos que as soluções das quatro equações modificadas são diferentes. Devido essa diferença entre as soluções para esse valor de T , realizamos simulações de Monte Carlo de um sistema com $N = 48000$ partículas confinadas em uma caixa de simulação bidimensional, $L_x = 40000$ e $L_y = 160$, essas partículas interagem entre si por meio do potencial de London, V_s , estavam sob efeito de uma força externa que as confinavam no centro da caixa na direção do eixo x , e a constante elástica era $k = 10^{-8}$. Além disso, as partículas estavam imersas em um meio com a temperatura $T = 0.1$. O sistema evoluiu por um tempo suficientemente longo até que a energia variasse muito pouco, ou seja, chegasse ao estado estacionário. Posteriormente, com o auxílio do método KDE, traçamos o perfil de densidade da configuração final das partículas. Na Figura (9) apresentamos esses resultados, os símbolos (círculos) são os resultados das simulações de Monte Carlo, enquanto que as outras curvas são os resultados obtidos pelo modelo contínuo através das equações de difusão modificadas. Se observamos bem os resultados das simulações coincidem muito bem com o resultado do modelo contínuo na versão completa (Eq. 4.7a), mostrando que para esse caso de temperatura $T = 0.1$ o modelo contínuo completo descreve muito bem a dinâmica do sistema.

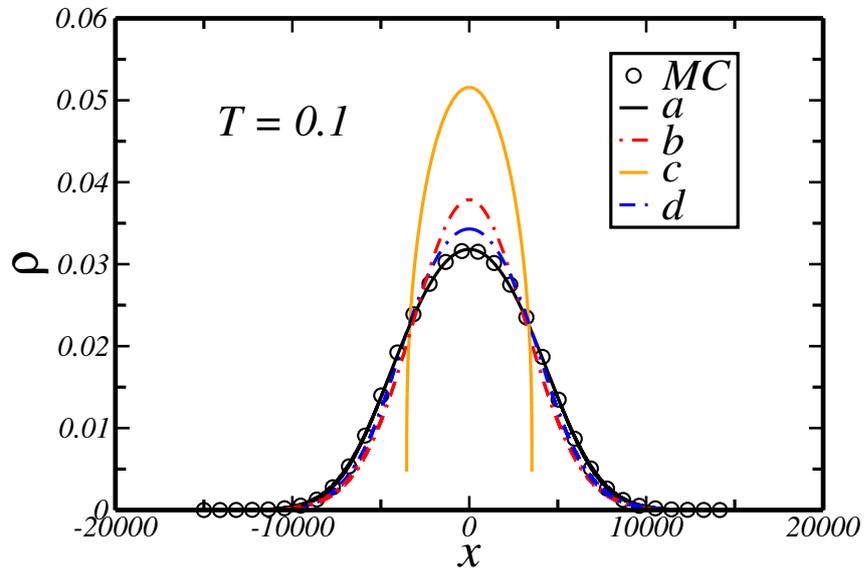


Figura 9: Comparação entre os resultados de simulação (círculos) e as soluções das equações diferenciais (4.7) para $T = 0.1$ considerando o caso em que as partículas interagem com o potencial de London, $V_S = \epsilon K_0(r/\sigma)$. As letras da legenda fazem referência a cada uma das respectivas equações (4.7).

5 Conclusões e Trabalhos Futuros

Nosso trabalho introduziu uma abordagem de um modelo contínuo para descrever a dinâmica de um sistema de partículas interagentes imersas em um meio superamortecido. Este tipo de sistema simula a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo II. A construção desse modelo contínuo tem como base a equação da continuidade. Vimos que nessa abordagem a força sobre as partículas (f_{int}) é proporcional ao gradiente de concentração ($\nabla\rho$), donde o termo de proporcionalidade é na verdade uma função, $a(\rho)$, que depende das derivadas primeira e segunda da energia interna (U_{int}) do sistema. Uma das modificações feitas no modelo foi a introdução de uma dependência da temperatura na função $a(\rho)$, ou seja, $a(\rho, T)$, visando o nosso intuito de estudar o sistema com temperatura diferente de zero.

Ao realizar o estudo da energia interna do sistema homogêneo, notamos que ela dependia tanto da densidade como da temperatura. Observamos que para densidades mais altas, a energia interna do sistema tendia os mesmos valores, independente do valor de temperatura estudado. No entanto, quando a densidade é mais baixa temos uma diferença dependendo do valor de temperatura. Para temperaturas altas, as energias coincidem, mas para temperaturas pequenas temos que o perfil de energia apresenta uma maior divergência entre os demais valores.

Determinado a energia interna do sistema homogêneo, estudamos o comportamento da função $a(\rho, T)$. Como tínhamos proposto, concluímos que além da dependência de ρ como propôs [8], a função a também depende da temperatura. A medida que ρ vai aumentando a função tende a um valor constante de 2π , valor esse que [4] tinha proposto. No entanto, quando a densidade diminui o valor da função a depende da temperatura. Somente quando temos um valor de temperatura alto, a função tende ao valor constante para qualquer valor de ρ .

Agora com os dados para a função $a(\rho, T)$, estudamos a concentração no estado estacionário, baseado na equação de difusão (Eq. 2.22) obtida no modelo contínuo. Notamos

que quando estudamos temperaturas baixas ($T = 0.01$) podemos desprezar o termo das flutuações térmicas. Já quando temos temperaturas mais altas ($T = 1.0$) o nosso sistema se comporta como um gás ideal confinado, ou seja, podemos desprezar os efeitos das interações internas. Também estudamos situações de temperaturas intermediárias ($T = 0.1$) onde o modelo contínuo descreveu muito bem o estado estacionário, sendo comprovado através de simulações de Monte Carlo. Nessa situação é importante a dependência da temperatura tanto nas interações com também das flutuações térmicas.

Como perspectiva para trabalhos futuros, pretendemos estender o modelo contínuo para o estudo de outros sistemas. Um deles seria estudar o caso de um sistema onde os vórtices interagem com defeitos no meio supercondutor, considerando por exemplo a influência de centros fixadores na dinâmica de vórtices a temperatura $T > 0$. Podemos ainda investigar o caso de um sistema que o potencial de interação tenha tantos termos repulsivo como atrativo, esse sistema modela a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo 1.5 [23]. Isso dependeria de estender o modelo contínuo para potenciais que não são estritamente repulsivos. Além disso, podemos estudar sistemas que apresentam uma transição de fase estrutural. O potencial que esse sistema interage apresenta uma peculiaridade, dependendo do valor da densidade, o sistema de partículas interagentes pode assumir estruturas diferentes [8]. Uma outra perspectiva para futuras pesquisas é realizar uma expansão do modelo contínuo para o estudo de sistemas dinâmicos, visto que em nossa pesquisa nos concentramos em estudar o sistema na condição de estado estacionário.

Referências

- [1] ORLANDO, T.; DELIN, K. A. *Foundations of Applied Superconductivity*. [S.l.]: Addison-Wesley, 1991. ISBN 0201183234.
- [2] COUNCIL, N. R. *Opportunities in High Magnetic Field Science*. [S.l.]: The National Academies Press, 2005. ISBN 978-0-309-09582-2.
- [3] TRAUBLE, H.; ESSMAN, U. The direct observation of individual flux lines in type ii superconductors. *Phys. Letters*, v. 24, p. 526, 1967.
- [4] SILVA, G. F. T. *Termoestatística do Movimento Superamortecido de Partículas Interagentes*. 2013. 130 f. Tese (Doutorado em Física) — Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2013.
- [5] VIEIRA, C. M. *Modelo contínuo para distribuição e fluxo de partículas em meios superamortecidos*. 2013. 53 f. Dissertação (Mestrado em Física) — Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2013.
- [6] SCHERER, C. *Métodos Computacionais da Física*. 1. ed. [S.l.]: Livraria da Física, 2005. ISBN 8588325357.
- [7] MENDES, F. M. *Processos estocásticos em física: teoria e fundamentos*. 2009.
- [8] VIEIRA, C. M. *Uma abordagem contínua para sistemas dissipativos de partículas repulsivas*. 2017. 103 f. Tese (Doutorado em Física) — Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2017.
- [9] ONNES, H. K. *Akad. van wetenschappen 14. 113 and 818, Amsterdam*, 1911.
- [10] COSTA, M. B.; PAVAO, A. C. Supercondutividade: um século de desafios e superação. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 34, n. 2, p. 2602, 2012.
- [11] SILVA, D. B. *A supercondutividade e suas aplicações*. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2003.
- [12] MOSHCHALKOV, V. et al. Type-1.5 superconductivity. *Physical review letters*, APS, v. 102, n. 11, p. 117001, 2009.
- [13] DROZDOV, A. P.; EREMETS, M. I.; TROYAN, I. A. Conventional superconductivity at 190 k at high pressures. *arXiv preprint arXiv:1412.0460*.
- [14] FLORES-LIVAS, J. A.; SANNA, A.; GROSS, E. High temperature superconductivity in sulfur and selenium hydrides at high pressure. *The European Physical Journal B*, Springer, v. 89, n. 3, p. 63, 2016.

- [15] PEREIRA, S.; FÉLIX, M. G. 100 anos de supercondutividade e a teoria de ginzburg-landau. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 35, n. 1, p. 1313, 2013.
- [16] MOREIRA, A. A. *Relações de escala em redes complexas e na penetração de fluxo em supercondutores desordenados*. 2002. 121 f. Tese (Doutorado em Física) — Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2002.
- [17] SILVA, P. B. *Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos*. 2009. 140 f. Tese (Doutorado em Física) — Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2009.
- [18] MOREIRA, A. A. et al. Boundary effects on flux penetration in disordered superconductors. *Physical Review B*, APS, v. 66, n. 17, p. 174507, 2002.
- [19] RICHARDSON, R.; PLA, O.; NORI, F. Confirmation of the modified bean model from simulations of superconducting vortices. *Physical review letters*, APS, v. 72, n. 8, p. 1268, 1994.
- [20] OLSON, C.; REICHHARDT, C.; NORI, F. Superconducting vortex avalanches, voltage bursts, and vortex plastic flow: Effect of the microscopic pinning landscape on the macroscopic properties. *Physical Review B*, APS, v. 56, n. 10, p. 6175, 1997.
- [21] ANDRADE, J. S. et al. Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles. *Physical review letters*, APS, v. 105, n. 26, p. 260601, 2010.
- [22] VIEIRA, C. M. et al. General continuum approach for dissipative systems of repulsive particles. *Physical Review E*, APS, v. 93, n. 6, p. 060103, 2016.
- [23] ZHAO, H.; MISKO, V.; PEETERS, F. Vortex configurations with non-monotonic interaction. *Physica C: Superconductivity*, Elsevier, v. 479, p. 130–133, 2012.
- [24] BINDER, K. *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics (Topics in Current Physics)*. [S.l.]: Springer Verlag, 1987. ISBN 0-387-17650-0.
- [25] SOBOL, I. M. *A Primer for the Monte Carlo Method*. [S.l.]: CRC-Press, 1994. ISBN 0-8493-8673-X.
- [26] METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, AIP, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953.
- [27] MENDES, J. Paralelização do algoritmo de método de estimação não-paramétrico por núcleo estimador multivariado (kde) utilizando gpu/cuda. 2014.
- [28] WASSERMAN, L. *All of Nonparametric Statistics (Springer Texts in Statistics)*. [S.l.]: Springer, 2007. ISBN 0-387-25145-6.
- [29] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. [S.l.]: Cengage Learning, 2010. ISBN 9780538733519.

Apêndice A – Métodos Computacionais

Em muitos problemas de física, obter uma solução analítica às vezes é um pouco complicado. Procurando amenizar essas dificuldades, recorreremos ao que chamamos de soluções numéricas. Nos últimos anos os computadores ficaram cada vez mais avançados, logo os métodos computacionais nos permitem obter soluções numéricas cada vez mais “precisas” de problemas ditos complicados.

A.1 Método de Monte Carlo

Simulações Computacionais como já vimos, nos permitem realizar simulações numéricas e comparar com teorias com uma margem de erro muito pequena. As simulações computacionais de Monte Carlo são uma ferramenta comumente usada no campo científico como Física da Matéria Condensada; problemas de Física Aplicada (difusão, separação, etc.); Física Química, incluindo estudo de soluções, reações químicas, estatística de Polímeros, etc.; e Teoria de Campo. Este método também é usado em problemas de Mecânica Quântica, como em sistema de spins quânticos [24].

O método Monte Carlo é o método numérico para soluções de problemas matemáticos através de simulação de variáveis aleatórias. A origem do método é datada que ocorreu em 1949, quando um artigo intitulado “*The Monte Carlo method*” foi publicado por Metropolis e Ulam descrevendo o método. Ganhou esse nome em referência a cidade de Monte Carlo, no principado de Mônaco, que é conhecida mundialmente como a cidade dos casinos [25].

Um dos exemplos mais comum e simples que podemos utilizar o método Monte Carlo é determinar a área de um superfície. Digamos que queremos determinar a área de uma figura arbitraria na qual sua área seja dada por S . Inicialmente supomos que essa figura esteja dentro de um quadrado de lado unitário (Figura 10a). De posse de um gerador de números aleatórios, sorteamos um número N muito grande de números aleatórios entre 0 e

1 nas coordenadas x e y . Essa quantidade de N pontos formados no plano deve ser grande o suficiente para que preencha a área de todo o quadrado (Figura 10b). Agora podemos contar quantos pontos foram sorteados dentro da área S , denotamos essa quantidade por N' . A proporção N'/N será numericamente a área da superfície, ou seja, $S = N'/N$ [25].

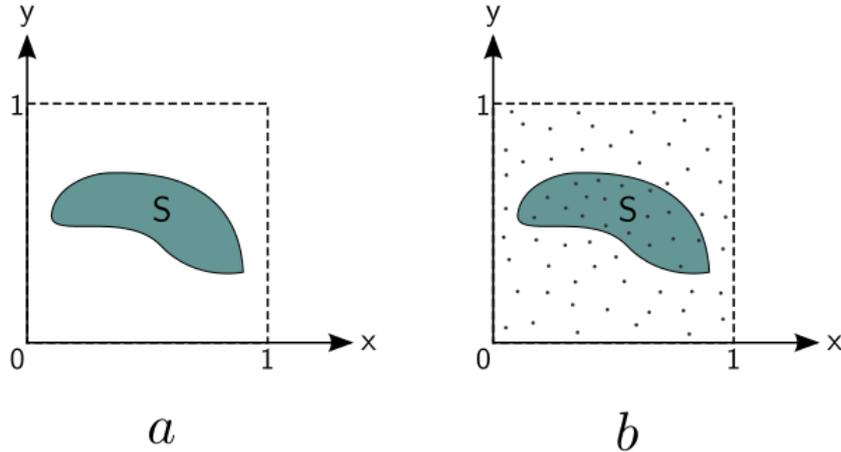


Figura 10: Ilustração do cálculo de uma área arbitrária utilizando o método de Monte Carlo. **a)** Uma dada superfície de área S contida dentro de um quadrado de lado unitário. **b)** Sorteamos N pontos no interior do quadrado unitário.

O método Monte Carlo gera uma série de estados microscópicos por meio de uma regra aleatória que independe das equações de movimento. Portanto, o método ignora as trajetórias naturais de um sistema em troca de uma amostragem aleatória que reproduz uma distribuição de probabilidade com o objetivo de procurar um estado de equilíbrio termodinâmico [5].

A.1.1 O Algoritmo de Metropolis

Dado que sabemos as posições das N partículas que estão na região de nosso interesse, podemos facilmente obter a energia por partícula do sistema através

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

onde $V(r_{ij})$ é a energia de interação entre as partículas e r_{ij} é a distância entre a partícula i e a partícula j .

Podemos expressar a energia de interação total U entre todas as partículas como uma função $U = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$. Temos que as variáveis constantes são N , V e T , portanto calculamos as propriedades do nosso sistema usando o ensemble canônico. Lembrando que, para calcularmos o valor médio de uma quantidade ξ qualquer com

ensemble canônico usamos

$$\bar{\xi} = \frac{\int \xi \exp(-E\beta) d\omega}{\int \exp(-E\beta) d\omega}, \quad (\text{A.2})$$

onde $d\omega$ é o elemento de volume no espaço de fase. O fator $\exp(-E\beta)$ é chamado de fator de Boltzmann, que é definida como $\beta = 1/k_B T$, sendo T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann, cujo valor é $k_B = 1.380649 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

Portanto agora podemos determinar a probabilidade de termos um estado microscópico entre as posições \mathbf{r}_i e $\mathbf{r}_i + \Delta\mathbf{r}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$),

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{\exp[-\beta U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)]}{\int_V \dots \int_V \exp[-\beta U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)] d\mathbf{r}_1, d\mathbf{r}_2, \dots, d\mathbf{r}_N}. \quad (\text{A.3})$$

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

$$p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \rho_j/\rho_i \geq 1, \\ \rho_j/\rho_i, & \text{se } \rho_j/\rho_i < 1, \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

onde ρ_i é dado pela equação (A.3) e $\rho_j/\rho_i = \exp[-\beta(U_j - U_i)]$. Na prática, isso significa que, se a diferença entre o estado novo (U_j) e o estado atual (U_i) for negativa ($U_j < U_i$), o estado j é automaticamente aceito. Caso o estado novo possua energia superior ao antigo ($U_j > U_i$), então o estado novo é aceito com uma probabilidade igual a $\exp[-\beta(U_j - U_i)]$. Se caímos nesse segundo caso ($U_j > U_i$), geramos um número aleatório a entre 0 e 1 e se $a < \exp[-\beta(U_j - U_i)]$ o estado j é aceito. Caso contrário, $a > \exp[-\beta(U_j - U_i)]$, retornamos a posição anterior.

Apresentaremos a seguir a ideia do algoritmo do método Monte Carlo que utilizaremos em nosso trabalho, que é chamado de algoritmo de Metropolis, em homenagem a Nicholas C. Metropolis [26].

A.1.2 Algoritmo de Metropolis

Defina as posições \mathbf{r}_i de todas as partículas
 Defina um vetor de deslocamento máximo, $\mathbf{d} = (dx, dy)$
 Defina a temperatura do sistema, T
 Defina o número máximo de passos de Monte Carlo, n_{max}
 Zere o contador de passos de Monte Carlo, $n_{step} = 0$
enquanto ($n_{step} \leq n_{max}$) **faça**
 Escolha uma partícula aleatória, i
 Calcule a energia do sistema antes de mover i , $U_0 = V(\mathbf{r})$
 Gere dois número aleatórios a_1 e a_2 , entre -1 e 1
 Desloque a partícula i de $\Delta\mathbf{r} = (a_1d_x, a_2d_y) : \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i + \Delta\mathbf{r}$
 Calcule a energia do sistema depois de mover i , $U_1 = V(\mathbf{r})$
 Calcule $\Delta U = U_1 - U_0$
 se ($\Delta U \leq 0$) **então**
 Aceite o estado
 senão se $\Delta > 0$ **então**
 Gere um número aleatório a entre 0 e 1
 Aceite o estado somente se $a > \exp[-(\beta\Delta U)]$
 fim se
 se (estado for rejeitado) **então**
 Retorne ao estado anterior: $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i - \Delta\mathbf{r}$
 fim se
 Atualize $n_{step} = n_{step} + 1$
fim enquanto

A.2 Kernel Density Estimation

O método KDE (Kernel Density Estimation) é um método não-paramétrico bastante comum e usado para normalizar e suavizar distribuições de um determinado conjunto de dados. A partir de um dado número de observações n , encontramos a curva de densidade delas em relação a uma distância de um valor central (chamado de núcleo), para cada um desses pontos. Obtemos a estimativa de densidade final somando esses valores [27].

Dado um conjunto de pontos, x_1, x_2, \dots, x_n , de uma distribuição com função de densidade desconhecida $f(x)$, uma estimativa de função densidade, $\hat{f}(x)$, pode ser encontrada. Um método de kernel pode ser usado para encontrar esta estimativa. A função kernel (K), satisfaz as condições [28]

$$\int K(x) dx = 1, \quad \int xK(x) dx = 0 \quad \text{e} \quad \int x^2K(x) dx > 0. \quad (\text{A.5})$$

Dado então o kernel $K(x)$ e h um número positivo, chamado de largura de banda, a função densidade $\hat{f}(x)$ na qual queremos determinar é definida como

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{h} K\left(\frac{x - x_i}{h}\right). \quad (\text{A.6})$$

No contexto deste trabalho, se desejamos calcular a densidade de partículas ($\rho(x)$), usamos $f_i = \frac{1}{L_y}$; se desejamos calcular a densidade de energia de interação ($u_p(x)$), usamos $f_i = \frac{u_i}{L_y}$, onde u_i é a energia potencial de interação da i -ésima partícula.

A forma do kernel que utilizamos neste trabalho é um dos mais conhecido e mais usado, o kernel Gaussiano, dado por

$$K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{A.7})$$

A.3 Cubic Spline Interpolation

Um spline é uma curva definida por dois ou mais pontos de controle. Esses pontos formadores da curva são chamados de nós. Uma das mais comuns aproximação polinomial de spline é usando polinômios cúbicos entre cada par de nó sucessivos, chamamos de *interpolação de spline cúbico*. O polinômio encontrado tem grau três, então existem quatro constantes a determinar [29].

Dado uma função f definida em $[a, b]$ e um conjunto de nós $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, um *spline cúbico interpolador* S para f é uma função que satisfaz as seguintes condições:

1. $S(x)$ é um polinômio cúbico, denotado $S_j(x)$ no subintervalo $[x_j, x_{j+1}]$ para cada $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;
2. $S_j(x_j) = f(x_j)$ e $S_j(x_{j+1}) = f(x_{j+1})$ para cada $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;
3. $S_{j+1}(x_{j+1}) = S_j(x_{j+1})$ para cada $j = 0, 1, 2, \dots, n - 2$;
4. $S'_{j+1}(x_{j+1}) = S'_j(x_{j+1})$ para cada $j = 0, 1, 2, \dots, n - 2$;
5. $S''_{j+1}(x_{j+1}) = S''_j(x_{j+1})$ para cada $j = 0, 1, 2, \dots, n - 2$;
6. Um das seguintes condições de contorno deve ser satisfeita:
 - $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$ (Chamado *Spline Natural* ou de *Contorno Livre*)
 - $S'(x_0) = f'(x_0)$ e $S'(x_n) = f'(x_n)$ (Chamado *Spline Restrito*)

Para cada par de nós teremos um polinômio cúbico da seguinte forma:

$$S_j(x) = a_j + b_j(x - x_j) + c_j(x - x_j)^2 + d_j(x - x_j)^3 \quad (\text{A.8})$$

para cada $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Dado que temos nossos dados (pontos), devemos com o auxílio do *spline cúbico* determinar as constantes presente no nosso polinômio (Eq. A.8), são elas a_j , b_j , c_j e d_j .

Para construir um *spline cúbico interpolador* S para uma função f , definido os número $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, utilizaremos o seguinte algoritmo⁷:

INPUT $n; x_0, x_1, \dots, x_n; a_0 = f(x_0), a_1 = f(x_1), \dots, a_n = f(x_n)$.

OUTPUT a_j, b_j, c_j e d_j para $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

(Note: $S(x) = S_j(x) = a_j + b_j(x - x_j) + c_j(x - x_j)^2 + d_j(x - x_j)^3$ for $x_j \leq x \leq x_{j+1}$)

Step 1: For $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ set $h_i = x_{i+1} - x_i$.

Step 2: For $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ set $\alpha_i = \frac{3}{h_i}(a_{i+1} - a_i) - \frac{3}{h_{i-1}}(a_i - a_{i-1})$.

Step 3: Set $l_0 = 1; \mu_0 = 0; z_0 = 0$.

Step 4: For $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ set

$$l_i = 2(x_{i+1} - x_{i-1}) - h_{i-1}\mu_{i-1};$$

$$\mu_i = \frac{h_i}{l_i};$$

$$z_i = (\alpha_i - h_{i-1}z_{i-1}).$$

Step 5: Set $l_n = 1; z_n = 0; c_n = 0$.

Step 6: For $j = n - 1, j = n - 2, \dots, 0$ set

$$c_j = z_j - \mu_j c_{j+1};$$

$$b_j = \frac{(a_{j+1} - a_j)}{h_j} - \frac{h_j}{3}(c_{j+1} + 2c_j);$$

$$d_j = \frac{c_{j+1} - c_j}{3h_j}.$$

OUTUP (a_j, b_j, c_j, d_j) for $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;

STOP

⁷Algoritmo retirado da referência [29].