

Felipe de Freitas Munarin

*Estrutura, modos normais e “melting” de
um sistema binário de partículas
carregadas confinadas em um potencial
parabólico*

Fortaleza – CE

Julho / 2005

Felipe de Freitas Munarin

*Estrutura, modos normais e “melting” de
um sistema binário de partículas
carregadas confinadas em um potencial
parabólico*

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

Orientador:

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira

Co-orientador:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

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

Fortaleza – CE

Julho / 2005

*Dedico essa dissertação para as pessoas nas quais
sempre encontro força para ultrapassar
barreiras. Obrigado aos meus pais,
pois devo a eles tudo que
sou e ainda serei.*

Agradecimentos

- Inicialmente, ao Professor Wandemberg Paiva Ferreira pela demonstração de vontade e dedicação na minha orientação. Na sua pessoa de ser professor e amigo, sou grato por me ensinar a seriedade e a responsabilidade de fazer trabalhos científicos em várias áreas da física. Nossas discussões, sempre muito instrutivas, me enriqueceram imensamente.
- Ao Professor Gil de Aquino Farias, pela competência, sabedoria e esforço no sentido da realização das pesquisas que são, certamente, um grande estímulo para mim. Seus valiosos ensinamentos marcarão para sempre minha formação como pesquisador e ser humano.
- Ao Professor José Soares de Andrade Júnior pelo acompanhamento de alguns trabalhos realizados durante minha graduação e mestrado, além de representar o apoio da coordenação desse curso de pós-graduação à realização dessa dissertação.
- Ao Professor Humberto de Andrade Carmona pela participação na banca examinadora.
- Aos professores do departamento de Física da UFC, principalmente àqueles que contribuíram para minha formação acadêmica.
- Aos professores Josué, Raimundo e King pelas discussões desse trabalho e apoio técnico.
- À Professora Eloneid Felipe Nobre por, além de ensinar física e ser um exemplo de ética e responsabilidade para mim, deixar-me conhecer sua família sem nenhum tipo de constrangimento.
- Aos meus grandes amigos Alan, Aristeu, Bruno Abagaro, Bruno Bastos, Cláudio Lucas, David, Francisco Franciné, Francisco Ednílson, Francisco Wagner, Francisco Valderlan, Kátia, Leandro e Victor, uns pela amizade inestimável outros por contribuições intelectuais, mas todos muito importantes para minha formação acadêmica e humana em toda graduação e durante a realização desse trabalho.

- Aos colegas do laboratório da estação de trabalho do grupo de semicondutores, em especial Andrey, Erlânia, Florêncio, Fabrício Potiguar, Marilza, Pedro, Rivelino, Teldo e Welberth pelo companheirismo e trabalho em equipe.
- Aos demais amigos do departamento de Física.
- Aos meus pais por me ajudarem a crescer e pensar, mesmo passando por dificuldades. Seus esforços e dedicações durante toda minha vida foram surpreendentes, pois agüentar um estudante de física é muito difícil. Meu esforço é, também, para retribuir a eles. Apesar de não falar, amo meus pais.
- Ao meu irmão que mudou minha vida de uma hora para outra enchendo-a de felicidade e companheirismo.
- À Talita, por, além de ter me ajudado na realização desse trabalho, me dar ânimo e mais prazer de seguir em frente. Sem ela não estaria tão bem quanto estou hoje. Obrigado por existir.
- Aos funcionários do departamento de Física, em especial ao Elias, Rejane, Ana Cleide, Creuza, pelas facilidades e apoio.
- À CAPES - Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pelo apoio financeiro.

*“Se A é o sucesso, então é igual a X mais Y mais Z.
O trabalho é X; Y é o lazer; e Z é manter a boca fechada.”*

Albert Einstein

Resumo

Neste trabalho são analisadas as propriedades estruturais, dinâmicas e térmicas de um sistema clássico bidimensional, contendo dois tipos de partículas com diferentes cargas e/ou massas. As partículas carregadas interagem através de um potencial coulombiano e são confinadas em uma região finita do plano por um potencial parabólico. A estrutura da configuração do estado fundamental, bem como o espectro de frequências dos modos normais de vibração, são analisados em função da razão entre as cargas e da razão entre as massas dos dois tipos de partículas. Em geral, mostra-se que uma segregação entre os diferentes tipos de partícula ocorre para valores críticos da razão entre as cargas (massas). No entanto, configurações assimétricas, nas quais os dois tipos de partículas estão misturadas são também obtidas. Um elevado número de configurações estáveis do sistema é obtido quando a razão entre as cargas é igual ou aproximadamente igual a razão entre as massas das diferentes partículas. Esse interessante acoplamento das propriedades elétricas e inerciais do sistema tem reflexo na temperatura em que o aglomerado sofre a transição sólido-líquido. O espectro dos modos normais foi cuidadosamente analisado. Em particular, a mínima frequência não-nula, que é associada à estabilidade das configurações do estado fundamental, foi extensivamente analisada em função da razão entre as cargas (massas) das partículas. Observa-se que, para uma mesma configuração do estado fundamental, diferentes modos de vibração, associados a mínima frequência não nula, podem ser excitados. As diferentes configurações do sistema podem ser resumidas em um diagrama de fase. Transições de fase estruturais são observadas quando o sistema muda de uma configuração de mistura, para uma configuração na qual ambos os tipos de partículas estão separadas em camadas distintas. Observa-se que a ordem da transição é determinada pela razão entre as cargas e/ou massas das partículas. Um parâmetro de ordem que caracteriza a configuração de ambos os tipos de partículas é definido. O estado em que as diferentes partículas estão separadas é diferenciado de outros arranjos. Por fim, a transição sólido-líquido é analisada. Em geral, configurações com números “mágicos” de partículas nas diversas camadas apresentam uma alta temperatura de fusão.

Abstract

We analyze in this work the structural, dynamical, and thermal properties of a two-dimensional system with two types of particles with different charges and/or masses. The charged particles interact through a Coulomb potential and are kept together in a finite region of the plane by a parabolic confinement potential. The structure of the ground state configuration, as well as the normal mode spectrum, are analyzed as a function of the ratio between charges and the ratio between masses of the two types of particles. In general, we show that there is a natural segregation of the distinct particles for critical values of the ratio between charges (masses). However, asymmetrical mixed configurations are also obtained. A very large number of stable configurations is obtained when the ratio between charges is equal, or approximately equal to, the ratio between masses of the different type of particles. The coupling between electrical and inertial properties of the system plays an important role in the critical temperature in which the system presents a solid-liquid phase transition. The normal mode spectrum is carefully analyzed. In particular, the lowest non-zero frequency, which is associated to the stability and deformability of the ground state configuration, is extensively studied as a function of the ratio between charges (masses) of the particles. It is found that a particular ground state configuration may present different normal modes, associated to the lowest non-zero frequency, according to the ratio between the charges (masses) of the particles. The degree of mixing of the two types of particles is summarized in phase diagram. Structural phase transitions from a mixed configuration to the one where the distinct types of particles are separated in different shells are observed. We find that the order of the structural phase transition is also determined by the ratio between charges and masses. A like-order parameter, which characterizes the configuration of the cluster, is defined. Finally, the solid-liquid transition is studied. In general, we find that ground state configurations with magic numbers of particles, presents a high melting temperature. In addition, a very interesting re-entrant effect is presented.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 15
1.1	Visão geral	p. 15
1.2	Sistemas teórico e experimentais	p. 17
2	Métodos Numéricos	p. 28
2.1	Monte Carlo	p. 28
2.1.1	Amostragem por importância (<i>Importance Sampling</i>)	p. 29
2.1.2	Método de Metropolis	p. 32
3	Modelo e aproximação numérica	p. 35
3.1	Introdução	p. 35
3.2	Monte Carlo e método de Newton modificado	p. 37
3.3	Modos Normais	p. 39
4	Resultados e discussões	p. 46
4.1	Indrodução	p. 46
4.2	Partículas com diferentes cargas	p. 46
4.2.1	Estrutura	p. 46
4.2.2	Modos Normais	p. 52
4.3	Partículas com diferentes massas	p. 56
4.3.1	Estrutura	p. 56

4.3.2	Modos normais	p. 61
4.4	Diagrama de fase	p. 64
4.5	Transição sólido-líquido - melting	p. 71
5	Conclusões e perspectivas	p. 76
	Referências	p. 80

Lista de Figuras

- 1 Configuração de (a)2, (b)8 e (c)20 ondulações (pontos escuros) dentro de uma parede cilíndrica simétrica numa superfície de hélio. Figura retirada da referência [1].(d)Esquema experimental. (e) Configuração do sistema com $N=3,7,12,19,34$ e 145 partículas. Figura retirada da referência [2]. p. 18
- 2 Visão esquemática de um *dusty* plasma. p. 19
- 3 Esquema da experiência com sistema cilíndrico e Micrográficos para diferentes estruturas cristalinas. (a) Hexagonal; (b)bcc; (c)fcc. Figuras retiradas da referência [3]. p. 20
- 4 Configuração do estado fundamental, em um sistema teórico, para aglomerados com (a)8, (b)20 e (c)230 elétrons em um confinamento parabólico . Para o sistema com 230 elétrons uma construção de Voronoi mostra melhor a configuração hexagonal no centro do sistema. (d) Microimagens instantâneas experimentais da estrutura típica de um aglomerado com diferente N . As escalas das figuras (d) não são as mesmas. Figuras (a), (b) e (c) retiradas da referência [4] e Figura (d) da referência [5]. p. 21
- 5 Modos normais de vibração para o aglomerado com $N=4$. (a) rotação ao redor do centro do potencial parabólico, (b) movimento do centro de massa, (c) modo de respiração, (d)modo antisimétrico. Os símbolos representam valores experimentais.As curvas são os melhores fits para os dados experimentais. Figura retirada da referência [6]. p. 23
- 6 (a) Ilustração de uma armadilha de *Penning*, onde a idéia é confinar partículas carregadas utilizando um campo elétrico e um campo magnético. (b) Esboço do experimento utilizado para confinar as partículas carregadas e (c) imagem do aparelho utilizado no experimento da Ref. [7]. . . p. 24

7	Imagem da fluorescência de um cristal duplo consistindo de íons $^{40}\text{Ca}^+$ íons $^{44}\text{Ca}^+$. (a) Fluorescência apenas da parte dos íons $^{40}\text{Ca}^+$ do cristal. (b) Fluorescência apenas da parte dos íons $^{44}\text{Ca}^+$ do cristal, (c) Imagem da fluorescência de todo o cristal. Figura retirada da Ref. [7]	p. 25
8	Configuração do estado fundamental para $N = 291, 300, 400, 500$ partículas. A estrutura de Voronoi é mostrada e os defeitos (declinações) são indicadas por '+' para partículas com 7 vizinhos mais próximos e '-' para partículas com 5 vizinhos mais próximo.	p. 26
9	Sistema de partículas confinadas através de um potencial (a) coulombiano e (b) parabólico.	p. 36
10	Comparação da precisão obtida entre os métodos de Newton modificado e algoritmo Monte Carlo de Metropolis. Figura retirada da referência [8].	p. 38
11	Estado fundamental para aglomerados com diferentes números de partículas e com diferentes valores do parâmetro α . A razão entre as massas é sempre $\beta = 1$. São mostradas as partículas com carga variável (cinzas) e carga fixa (pretas). O número de partículas nas figuras são: (a-d) $N_f = N_v = 5$; (e-h) $N_f = 7, N_v = 6$; (i-l) $N_f = 12, N_v = 6$; e (m-p) $N_f = 19, N_v = 6$	p. 48
12	Distância de cada tipo de partícula ao centro do potencial de confinamento, em função de α , para aglomerados com (a) $N_f = N_v = 5$ partículas, e com (b)(c) $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. Os pontos pretos indicam a posição do conjunto de partículas, N_f , enquanto os pontos cinzas representam o outro conjunto de partículas, N_v	p. 49
13	(a),(d) Energia em função de α para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas, respectivamente. A primeira e segunda derivada da energia em função de α são mostradas também nas figuras [(b),(e)] e [(c),(f)], respectivamente. As linhas verticais pontilhadas separam regiões caracterizadas pela configuração de camadas de outras nas quais essas configuração não está presente.	p. 50
14	Número de configurações estáveis em função de α para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas e diferentes razões entre as massas dos dois diferentes tipos de partículas ($\beta = 0.5, 1, 2$).	p. 51

15	(a) Freqüência dos modos normais em função de α para um aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. (b) Freqüência dos modos normais da região (I) para o mesmo aglomerado.	p. 53
16	(a) Mínima freqüência não-nula em função de α para um aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. (b) Mínima freqüência não nula da região (I) para o mesmo aglomerado.	p. 54
17	Configuração do estado fundamental para aglomerados com diferentes números de partículas e com diferentes razões entre as massas. As esferas pretas representam as N_f partículas com massa fixa, enquanto as esferas cinzas representam as N_v partículas com massa variável. Nas figuras (a-d) e (i-l) considera-se um aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas, enquanto (e-h) e (m-p) são aglomerados com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. O valor do parâmetro β é indicado nas figuras. Nas figuras (a-h) a razão entre as cargas é $\alpha = 1$, enquanto que em (i-p) considera-se $\alpha = 2$	p. 57
18	Distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento em função de β para aglomerados com (a) $N_f = N_v = 5$ partículas e com (b) $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. A curva escura indica a posição de um conjunto de partículas (N_f), enquanto a curva cinza representa o outro conjunto de partículas (N_v).	p. 58
19	(a) Energia total por partícula em função de β para um aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas. (b)(c) Derivada de primeira e segunda ordem da energia em função de β . (d) Energia total por partícula em relação à β para aglomerados com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. (e)(f) Derivada de primeira e segunda ordem da energia em função de β para o mesmo conjunto de partículas. A derivada de terceira ordem da energia com respeito a β é mostrado no interior de (f).	p. 59
20	Número de configurações estáveis em função de β para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 6, N_v = 5$ partícula e diferentes razões entre as cargas dos dois diferentes tipos de partícula ($\alpha = 0.5, 1, 2$).	p. 60
21	(a) Freqüência dos modos normais em função de β correspondente a configuração fundamental do aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas e (b) $N_f = 6$ e $N_v = 5$ partículas.	p. 62

22	(a) Menor frequência dos modos normais diferente de zero em função de β para aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas. Região (I) e (III) separadas no intervalo β em que o sistema exibi a configuração de camadas. Na região (II) configurações diferentes são observadas. As sub-regiões (Ia), (Ib), (Ic), (IIIa) e (IIIb) separadas em intervalos de β em que a mesma configuração do estado fundamental é observada, mas com modos normais diferentes.	p. 63
23	Modos normais para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas e $\alpha = 1$. Em cada figura a sub-região definida na Figura 22 é indicada.	p. 64
24	Diagrama de fase: razão entre as cargas em função da razão entre as massas para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas. Uma amplificação da região próxima a $\alpha = \beta = 0$ é mostrada em (b). No interior de (a) é mostrado a configuração do estado fundamental para alguns pontos (α , β).	p. 65
25	(a) Semelhante à Figura 24, mas agora para o aglomerado com $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas. Os pontos correspondentes A,B,C e D, correspondem à uma configuração mostrada na Figura 26(a), (b), (c) e (d), respectivamente, enquanto que os pontos E,F,G e H correspondem as configurações apresentadas nas Figuras 11(e), (f), (g) e (h), respectivamente. (b) Amplificação do diagrama de fase (a) proximo ao ponto $\beta \approx 0.15$. Configuração do estado fundamental são mostrados no interior da figura para os pontos P_1 , P_2 , P_3 e P_4	p. 66
26	Configuração do estado fundamental para o aglomerado com $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas nos pontos (a) A, (b) B, (c) C e (d) D mostrados na Figura 25. Distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento em função de α são mostrados nas figuras (e) e (f) para os casos $\beta = 0.5$ e $\beta = 0.8$, respectivamente.	p. 67
27	(a) Distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento e (b) parâmetro de ordem definido na Eq. 4.2 em função de α para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas ($\beta = 2$), e da mesma maneira em (c) e (d) para $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas ($\beta = 0.9$). Uma ampliação desse ultimo caso são mostrados em (e) e (f).	p. 69

28	Configuração para (a) $T < T_o$, (b) $T_o < T < T_R$, e (c) $T \sim T_R$, onde T_o é a temperatura em que a ordem orientacional entre as camadas é perdida e T_R a perda da ordem radial. (d) Média do desvio radial sobre três configurações em função da temperatura. A linha horizontal pontilhada refere-se ao valor do critério de Lindermann para o desvio quadrático das coordenadas das partículas. Figuras retiradas da referência [9]	p. 72
29	(a) Visão lateral da geometria do experimento. (b) Fotografia de um compartimento que é ocupado por um sistema coloidal. Trajetórias das partículas ($N = 29$) em um confinamento circular para diferentes fatores de acoplamento Γ (razão entre o potencial e a energia cinética do sistema): (c) 152; (d) 38; (e) 30; (f) 7.5. Figuras retiradas da referência [10]	p. 73
30	(a) Deslocamento quadrático de todas as partículas. (b) Deslocamento quadrático das partículas internas (b) e externas (c).	p. 74
31	Trajetória das partículas do sistema com $\beta = 1$ em 14000 passos de simulação para (a-h) $\alpha = 2$ e (i-p) $\alpha = 2.5$. Observa-se o fenômeno de re-entrância para $\alpha = 2$ nos gráficos (d), (e), (f), (g). e para $alpha = 2$ nos gráficos (k), (l), (m), (n).	p. 75

1 Introdução

1.1 Visão geral

Sistemas com pequenas dimensões e com número finito de partículas têm sido largamente explorados, pois podem descrever fenômenos que possuem comportamentos variados dependentes da dimensão. Um dos motivos é o grande progresso na indústria da eletrônica e das comunicações, que estão sempre desenvolvendo memórias e processadores cada vez mais rápidos, os quais têm sido obtidos usando chips cada vez menores. Com isso, tem-se estimulado a pesquisa em dispositivos de escala muito reduzida, renovando, assim, o interesse por sistemas com pequeno número de elétrons (por exemplo, pontos e poços quânticos). Esse grande interesse se dá porque, sendo os elétrons os agentes causadores da corrente elétrica, e portanto, os responsáveis pelo funcionamento de quaisquer dispositivos, a informação do estado no qual se encontram (por exemplo, cristalizado ou não), é de fundamental importância na operação dos sistemas.

Em 1934, Wigner mostrou teoricamente que elétrons, em um sistema tridimensional, podem cristalizar numa forma ordenada quando valores críticos de densidade e temperatura são atingidos (alta densidade e baixa temperatura). Isso é devido a alta energia de interação coulombiana entre os elétrons, quando comparada à energia cinética; logo, o efeito de correlação domina fortemente a estrutura eletrônica. No regime clássico, a importância da interação coulombiana é determinada pelo parâmetro de acoplamento $\Gamma = \langle V \rangle / \langle K \rangle$ que é definido pela razão da energia potencial $\langle V \rangle = e^2 \langle 1/r \rangle$ pela energia cinética $\langle K \rangle = k_B T$. De acordo com o parâmetro Γ , diferentes regimes podem ser distinguidos. Quando $\Gamma < 1$, que é realizado em um sistema em alta temperatura, a interação coulombiana tem pouca importância no sistema, o qual é quase um gás de fermions. Para $1 < \Gamma < 100$, os elétrons são correlacionados e o sistema se comporta com um líquido. Para $\Gamma > 100$, que é um regime de alta-densidade e baixa temperatura, a energia potencial coulombiana “domina” a energia cinética e há uma forte correlação

entre os elétrons, que é esperado levar o sistema para um estado ordenado.

Experimentalmente, observações de uma rede de Wigner tridimensional não foram ainda realizadas. Elétrons em materiais como metais ou semicondutores são influenciados por imperfeições que podem estar em qualquer lugar da rede. Defeitos, impurezas ou imperfeições semelhantes, podem destruir uma rede de Wigner tridimensional. Em 1971, Crandall e Williams [11] propuseram observar a rede de Wigner em um sistema bidimensional de elétrons acima de uma superfície de hélio líquido, onde as condições de cristalização podem ser realizadas mais facilmente e também por causa da característica quase ideal do sistema, ou seja, sem imperfeições ou impurezas. A primeira observação experimental da cristalização de Wigner em um sistema bidimensional composto por elétrons foi realizada, em 1979, por Grimes e Adams [12]. Desde então, investigações experimentais têm encontrado a formação de cristais de Wigner em diversos sistemas. Mostra-se, por exemplo, que elétrons em pontos quânticos [13], partículas em suspensões coloidais [10] e partículas carregadas em um plasma confinado [3], podem exibir estruturas ordenadas do tipo cristal de Wigner. Pontos quânticos, que são considerados o análogo quântico do Cristal de Wigner, são pequenas estruturas em que os elétrons são confinados em todas as três direções espaciais. Como um átomo real em que os elétrons são atraídos para uma localização central. Contudo, em um átomo real a posição central é um núcleo carregado positivamente, enquanto que em pontos quânticos, os elétrons são tipicamente confinados em um potencial parabólico. Como um átomo natural, esses pequenos sistemas eletrônicos contêm um número discreto de elétrons e têm espectro discreto, podendo assim serem chamados de *átomo artificial*. Contudo, esses átomos artificiais exibem uma nova física com muitos aspectos não análogas a um átomo real. A origem do comportamento diferente é a natureza do potencial de confinamento parabólico que é mais suave do que o potencial $1/r$ de um átomo real.

Sistemas confinados através do potencial parabólico vem sendo amplamente analisados por causa de sua aplicabilidade tecnológica, da sua simplicidade numérica e por mostrar arranjos interessantes de partículas, que podem cristalizar em uma estrutura triangular ou camadas. Foi observado que há uma competição entre esses dois tipos de configuração que estão associados com o número de partículas no sistema e a distância em relação ao centro de confinamento [4]. A estrutura triangular se forma pelo efeito da interação das partículas carregadas e a estrutura de camadas é a consequência do efeito do potencial de confinamento sobre as partículas, que tem simetria circular. Com baixo número de partículas, observa-se que esses sistemas possuem estruturas de camadas. À medida que se aumenta o número de partículas e todas as camadas atingem um número máximo de

partículas, novas camadas surgem. A partir desses números máximos de partículas em cada camada, foi possível fazer uma tabela análoga a de Mendeleev para átomos [4], onde se indica a configuração do estado fundamental de acordo com o número de partículas do sistema.

O estudo de propriedades dinâmicas em sistemas bidimensionais é também muito importante pois, nesses sistemas, a resposta à excitações externas se dá na forma de modos normais de vibração, que nem sempre é uma oscilação coletiva, em fase e na mesma direção, como no caso das ondas. O estudo das ondas e dos modos normais é muito importante, desde que pode revelar o mecanismo de interação entre as partículas. Desde que sistemas bidimensionais finitos podem modelar diversos sistemas reais (colóides, elétrons em hélio líquido, elétrons confinados em pontos quânticos, *dusty* plasma, etc.), sua caracterização através das propriedades dinâmicas é também de grande importância.

1.2 Sistemas teórico e experimentais

Conforme comentado anteriormente, diversos sistemas reais podem ser modelados por aglomerados bidimensionais de partículas carregadas. Nesta seção apresentam-se alguns desses sistemas, bem como alguns resultados experimentais.

O sistema clássico para a observação de cristais de Wigner bidimensionais é o hélio líquido (He). Nesse caso, os elétrons flutuam numa camada que está, aproximadamente, a 100 Å da superfície do He [1]. Os elétrons são atraídos em direção à superfície devido a uma pequena polarização induzida na mesma, mas são impedidos de penetrarem no líquido devido a uma alta barreira de energia potencial na superfície. Quando um campo elétrico perpendicular é aplicado, o sistema torna-se bastante instável e a distribuição homogênea de cargas é destruída. Os elétrons acima da superfície tornam-se localizados em depressões ou “bolsas” que são formadas na superfície do líquido devido a presença do campo elétrico. Essas depressões, cujo o diâmetro médio é de 1mm contêm, em média, 10^7 elétrons. As bolsas de elétrons podem ser consideradas partículas macroscópicas clássicas interagindo através do potencial coulombiano, levando o sistema para uma configuração de camadas como mostrado nas Figuras 1(a)(b)(c). Esses sistemas de elétrons acima de uma superfície de elétrons se comportam classicamente por sua densidade ser da ordem de $10^5 - 10^9 \text{ e cm}^{-2}$ (energia de Fermi $E_F \sim 0.01 - 100mK$).

Um outro sistema no qual é possível encontrar uma cristalização de cargas e que tem recebido grande atenção nos últimos anos, é o chamado *dusty* plasma ou plasma com-

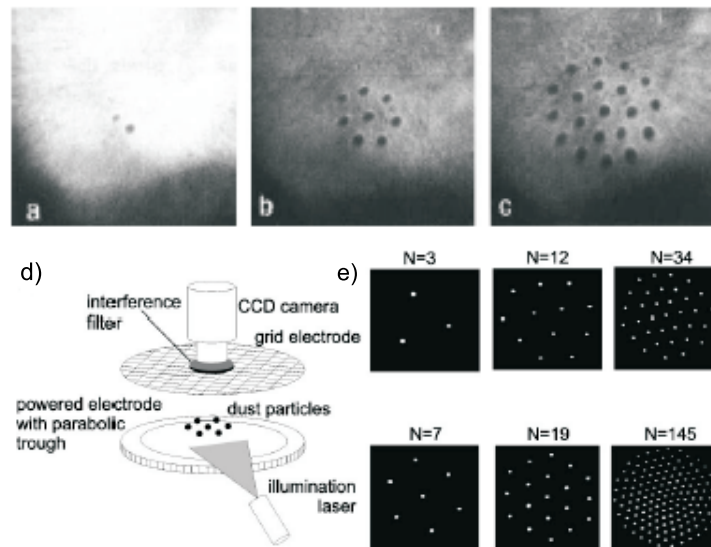


Figura 1: Configuração de (a)2, (b)8 e (c)20 ondulações (pontos escuros) dentro de uma parede cilíndrica simétrica numa superfície de hélio. Figura retirada da referência [1].(d)Esquema experimental. (e) Configuração do sistema com $N=3,7,12,19,34$ e 145 partículas. Figura retirada da referência [2].

plexo [14]. Não só por sua ampla aplicação tecnológica (por exemplo, na deposição de filmes finos, onde a contaminação por impurezas pode resultar em filmes com propriedades bastante diferentes), mas também pela possibilidade de investigação de propriedades fundamentais de sistemas fortemente carregados. Na produção de microchips, o processo para evitar a contaminação por partículas nos vários passos que envolvem plasmas tem sido um grande desafio tecnológico [15, 16]. Por outro lado, o crescimento, transporte e deposição de nanopartículas é o objetivo central de várias técnicas de deposição de plasma na fabricação de células solares. Desde que o sistema estudado nessa dissertação pode servir de modelo para um *dusty* plasma, um comentário a mais será dedicado a este sistema.

Um *dusty* plasma consiste de partículas microscópicas (com tamanho variando entre 10^{-9} m e 10^{-4} m) imersas em um plasma onde estão presentes elétrons, íons e outras partículas neutras [ver Fig. 2]. Nesse meio, as partículas microscópicas tornam-se altamente carregadas (com carga da ordem de 10^4 cargas elementares) devido a um fluxo contínuo de elétrons e íons, que são adsorvidos nas partículas microscópicas (*dust*). Devido ao elevado valor de carga, a interação coulombiana entre as partículas microscópicas excede bastante o valor da energia cinética, de modo que o sistema é dito fortemente acoplado. Quando este acoplamento excede um limiar crítico, as partículas arranjam-se numa estrutura tipo cristalina e este fato relaciona bastante o estudo do *dusty* plasma

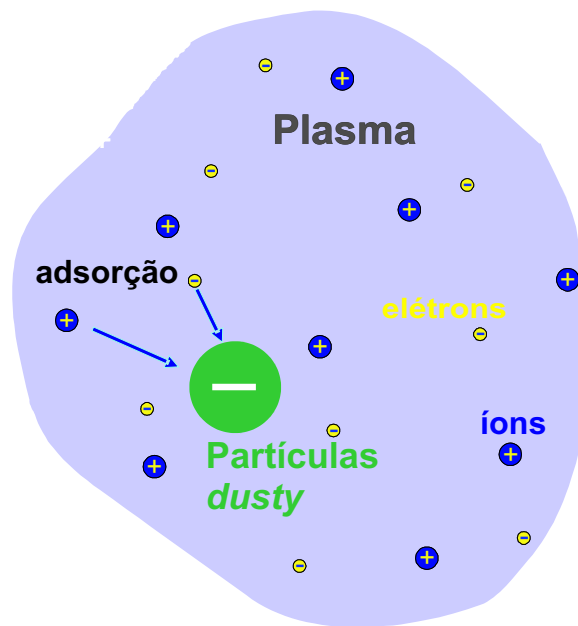


Figura 2: Visão esquemática de um *dusty* plasma.

à pesquisa em matéria condensada [3, 17, 18, 2], visto que as propriedades típicas de cristais podem ser estudadas nesse sistema. Uma das vantagens observadas no sistema *dusty* plasma é que os processos dinâmicos são fracamente amortecidos e as escalas espacial e temporal típicas envolvidas são perfeitas para o uso de vídeo-microscopia [2]. Assim sendo, investigações envolvendo, por exemplo, o tipo de interação entre partículas são convenientes, pois podem ser diretamente comparadas com simulações numéricas e/ou cálculos analíticos.

Um experimento de um sistema bidimensional infinito confinando *dusty* plasma em uma grande região comparada ao diâmetro das partículas, foi analisado por Chu e Lin I [3]. Micropartículas de SiO_2 foram geradas através de uma reação e agregação dos gases O_2 e SiH_4 na fase gasosa, introduzidas numa câmara de gás argônio com pressão de 10 mTorr sob efeito de ondas de rádio (ver Figuras 3), tendo assim, um fator de acoplamento $\Gamma \sim 100$. Chu e Lin I foram capazes de formar e observar as fases líquida e cristalina controlando apenas a potência das ondas de rádio. Quando a potência das ondas de rádio diminuem para aproximadamente 1 W, numa pressão de argônio em torno de 200 mTorr, formações de cristais coloidais são observadas na região onde as partículas de SiO_2 estão aprisionadas. Nas Figuras 3(a), (b), (c) são mostradas algumas das diferentes estruturas observadas. A estrutura hexagonal foi observada ser aquela de mais baixa energia para o sistema 2D infinito. É bem conhecido que a rede hexagonal é a estrutura

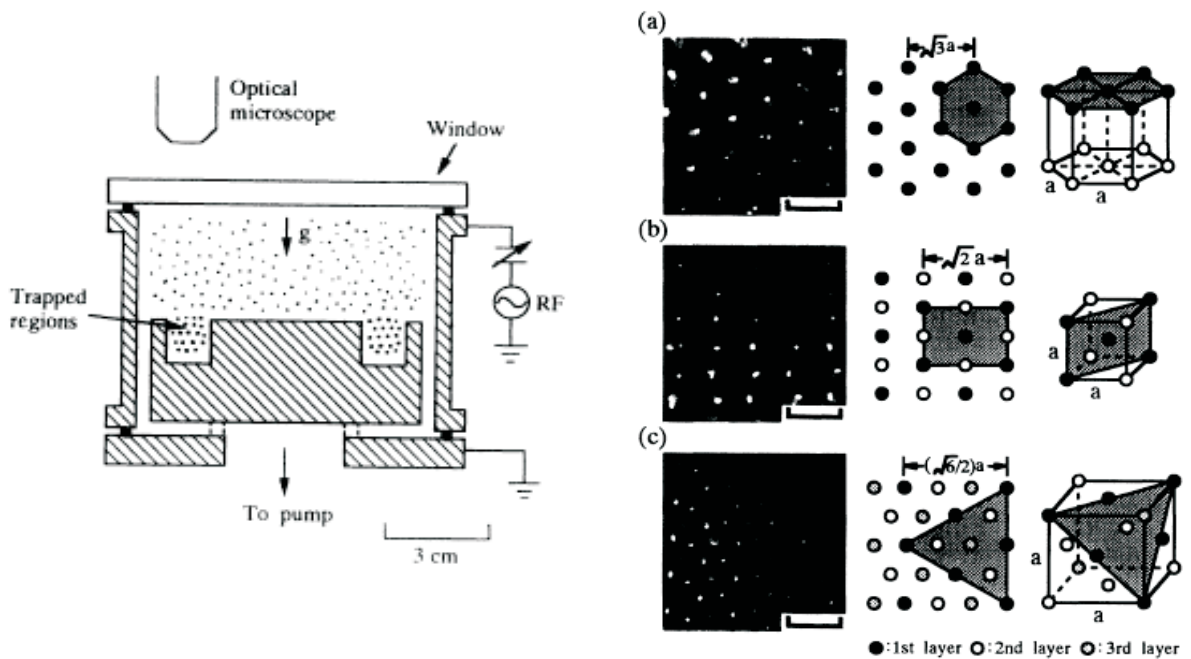


Figura 3: Esquema da experiência com sistema cilíndrico e Micrográficos para diferente estruturas cristalinas. (a) Hexagonal; (b) bcc; (c) fcc. Figuras retirada da referência [3].

mais energeticamente favorecida para um sistema 2D infinito [19].

Juan *et al.* [5] realizaram um experimento similar ao descrito no parágrafo anterior, mas agora num sistema 2D finito. Em vez de confinar as partículas em uma cavidade retangular [3], Juan *et al.* confinaram as partículas em uma cavidade cilíndrica com 3cm de diâmetro e 1,5cm de altura colocada sobre um eletrodo. Operando o experimento numa frequência de rádio muito baixa (< 0.5 W), cria-se um estrutura não uniforme; enquanto que diminuindo a potência da frequência de rádio o tamanho do aglomerado é reduzido. A Figura 4(d) mostra algumas microimagens típicas do aglomerado com N partículas. Para pequenos valores de N , as partículas são empacotadas em camadas concêntricas com o número de partículas em cada camada oscilando em relação a N , como previsto por Bedanov e Peeters [4].

Recentemente vários outros sistemas compostos por *dusty* plasma foram analisados, onde agora, novas técnicas e propriedades têm sido incorporadas aos experimentos. Um exemplo disso, pode ser observado através da análise de um sistema finito de micro-partículas (microesferas), imersas em um plasma, que foi desenvolvida por Melzer *et al.* [2]. Nesse sistema, as microesferas carregadas são confinadas entre dois eletrodos por um campo elétrico, que gera uma força nessas microesferas em direção contrária à força gravitacional, fazendo as partículas levitarem e formando assim, um arranjo bidimensio-

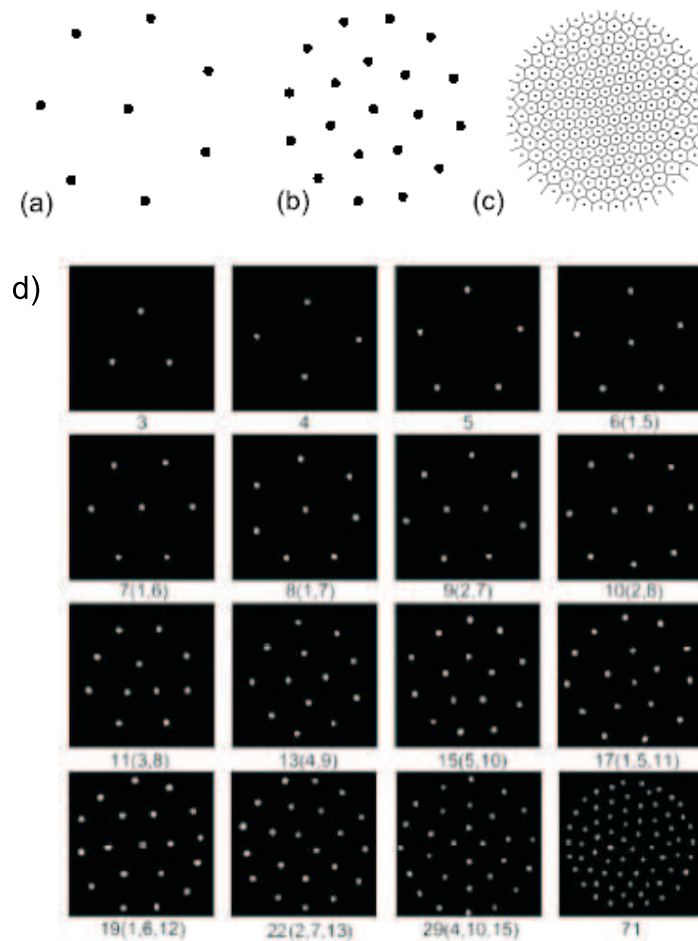


Figura 4: Configuração do estado fundamental, em um sistema teórico, para aglomerados com (a)8, (b)20 e (c)230 elétrons em um confinamento parabólico. Para o sistema com 230 elétrons uma construção de Voronoi mostra melhor a configuração hexagonal no centro do sistema. (d) Microimagens instantâneas experimentais da estrutura típica de um aglomerado com diferente N . As escalas das figuras (d) não são as mesmas. Figuras (a), (b) e (c) retirada da referência [4] e Figura (d) da referência [5].

nal. Uma pequena depressão no eletrodo de baixo, na forma de círculo, faz com que as partículas sejam efetivamente confinadas por um potencial parabólico. O aglomerado é iluminado por um feixe de laser e observado através de uma câmera localizada acima do eletrodo superior (ver Fig. 1(d)). Melzer *et al.* [6], realizaram experimentos no mesmo sistema com o objetivo de estudar também os modos normais. Conforme observado, o aglomerado arranhou-se em camadas regulares como previsto através de simulação numérica por Bedanov e Peeters [4]. Além disso, observou-se que oscilações radiais das partículas, em pequenos aglomerados, podem ser excitadas através do controle da potência da frequência de rádio [6]. Os diferentes modos normais são identificados através das trajetórias das partículas em torno de suas posições de equilíbrio. Como um exemplo, os

modos normais do centro de massa, respiração, antisimétrico e o movimento radial e angular das partículas de um aglomerado com quatro partículas são mostrados na Figura 5. Todos esses modos estão de acordo com os resultados numéricos obtidos por Schweigert e Peeters [8]. No caso de sistemas nos quais as partículas arranjam-se numa configuração com mais de uma camada (ver Figura 4(b)), o modo associado a mínima frequência não nula é uma rotação das várias camadas. Esse modo foi previsto, através de simulação numérica, por Schweigert e Peeters em 1995 [8], os quais consideraram que as partículas interagem através de um potencial coulombiano $1/r$ e confinadas por um potencial parabólico (ver Eq. 1.1). No entanto, os resultados experimentais de Melzer [2], mostram que o referido modo trata-se de um par vórtice-antivórtice e não de uma rotação entre camadas. O resultado experimental de Melzer pode ser obtido pela simples consideração de que as partículas interagem através de potencial do tipo Yukawa [2]. No entanto, recentemente Ferreira *et al.* mostraram que o resultado experimental é obtido sem a necessidade de alterar a forma de interação entre as partículas [20]. Ferreira *et al.* simplesmente mudaram a intensidade do potencial de confinamento. Os modos observados por Melzer [2] e por Schweigert e Peeters puderam ser sintonizados de acordo com a intensidade do confinamento.

Um plasma constituído puramente de partículas positivas (como ions de magnésio) ou puramente de partículas negativas (como elétrons) são extremamente difíceis de controlar por causa da natureza repulsiva da força entre as partículas. Esses sistemas são chamados plasma não-neutro e podem ser controlados em uma armadilha de *Penning*, onde um campo elétrico e um campo magnético são usados para confinar as partículas carregadas. Esse dispositivo de confinamento tem uma simetria tipicamente cilíndrica, que são colocadas baterias nas pontas do cilindro para produzir o campo elétrico e campo magnético de baixo para cima na Figura 6. Além disso, um feixe de laser é utilizado para diminuir a temperatura para valores muito baixos, onde estados de líquido e cristal são encontrados.

A cristalização, utilizando armadilha de *Penning*, com números pequenos de íons ($N < 50$), em aglomerados coulombianos foi primeiro observada por Diedrich *et al.* [21] e Wineland *et al.* [22]. Recentemente, trabalhos em armadilha de *Penning* vêm sendo desenvolvidos, onde novas técnicas de confinamento então sendo utilizadas, como por exemplo, o sistema analisado por Drewsen *et al.* [7]. Esse experimento é composto por quatro eletrodos [ver Figura 6(b)], arranjados de tal forma à aplicar uma frequência de mesma fase nos eletrodos da diagonal, mas com uma fase deslocada de 180° em relação aos eletrodos vizinhos. Através de uma frequência apropriada, confinamentos axiais e

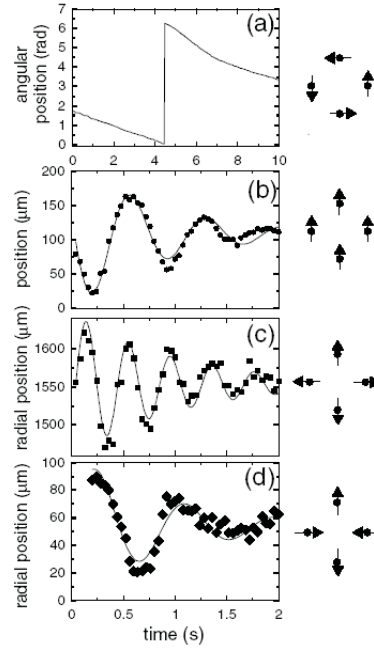


Figura 5: Modos normais de vibração para o aglomerado com $N=4$. (a) rotação ao redor do centro do potencial parabólico, (b) movimento do centro de massa, (c) modo de respiração, (d) modo antisimétrico. Os símbolos representam valores experimentais. As curvas são os melhores fits para os dados experimentais. Figura retirada da referência [6].

radiais podem ser obtidos. Na Figura 7, uma imagem de um cristal duplo, consistindo de dois isótopos de cálcio, é mostrada. Observa-se que a luz proveniente dos íons $^{40}\text{Ca}^+$ se agrupa próxima ao eixo de confinamento em uma estrutura cilíndrica. Enquanto os íons mais pesados $^{44}\text{Ca}^+$ formam uma estrutura do tipo camadas elipsoidais. Essa segregação é uma das características que deverá ser comentada durante essa dissertação em um outro sistema estudado com diferentes partículas. Experimentalmente, é uma característica importante, pois possibilita a seletividade de isótopos, já que as partículas carregadas mais leves situam-se na parte mais externa do aglomerado.

Teoricamente, vários trabalhos têm sido realizados em sistemas com número finito de partículas carregadas. Devido a elevada interação entre as cargas e, em geral, a baixa temperatura, o Hamiltoniano do sistema pode ser aproximado para apenas o termo da energia potencial. Por exemplo, o Hamiltoniano do sistema considerado por Bedanov e Peeters [4] era do tipo

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_i^2 + \frac{q^2}{\epsilon} \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (1.1)$$

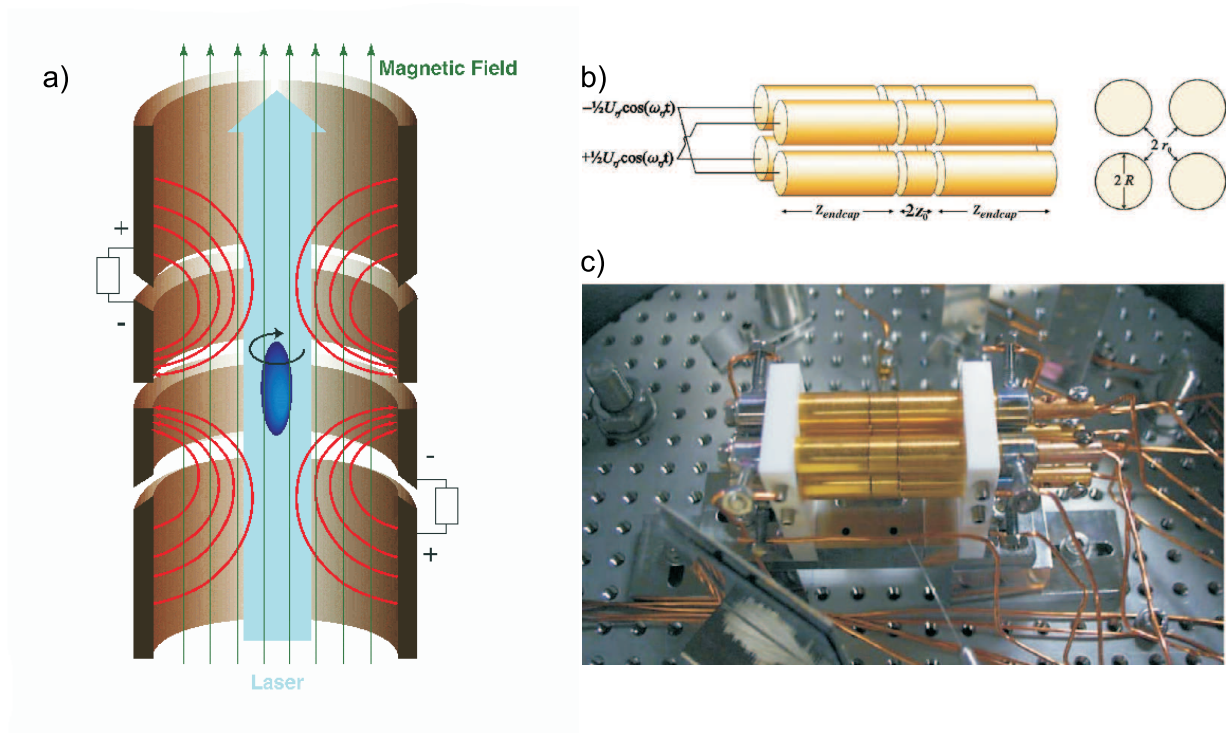


Figura 6: (a) Ilustração de uma armadilha de *Penning*, onde a idéia é confinar partículas carregadas utilizando um campo elétrico e um campo magnético. (b) Esboço do experimento utilizado para confinar as partículas carregadas e (c) imagem do aparelho utilizado no experimento da Ref. [7].

onde m é a massa da partícula, ϵ é a constante dielétrica do meio, q é a carga da partícula e $r_i = |\vec{r}_i|$ é a distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento. Os termos presente na Eq. (1.1) são respectivamente: o potencial de confinamento parabólico e o potencial de interação entre as cargas, que nesse caso, é puramente coulombiano.

Aglomerados 2D de partículas carregadas com repulsão Coulombiana foram investigados no caso de um confinamento parabólico, em 1990, por Lozovik and Mandelshtam [23]. Nesse trabalho, observou-se que, em baixa temperatura, o sistema com um número pequeno de partículas forma estrutura de camadas. Quando o tamanho do aglomerado é suficientemente grande, a estrutura de camadas é destruída. Um estudo mais sistemático do sistema, descrito pela Eq. (1.1), foi realizado por Bedanov e Peeters [4] que estenderam esse sistema para aglomerados com elevados números de partículas. Observou-se que as partículas se arranjam em camadas e que a distância média entre elas depende tanto do raio da camada, em relação ao centro de confinamento, como do número total de partículas. Observou-se também que para aglomerados com elevado valor de N (> 200), uma rede triangular é observada na região central dos mesmos (ver Fig. 4(a), (b), (c)). Isso se deve pela competição existente entre o potencial de interação entre as

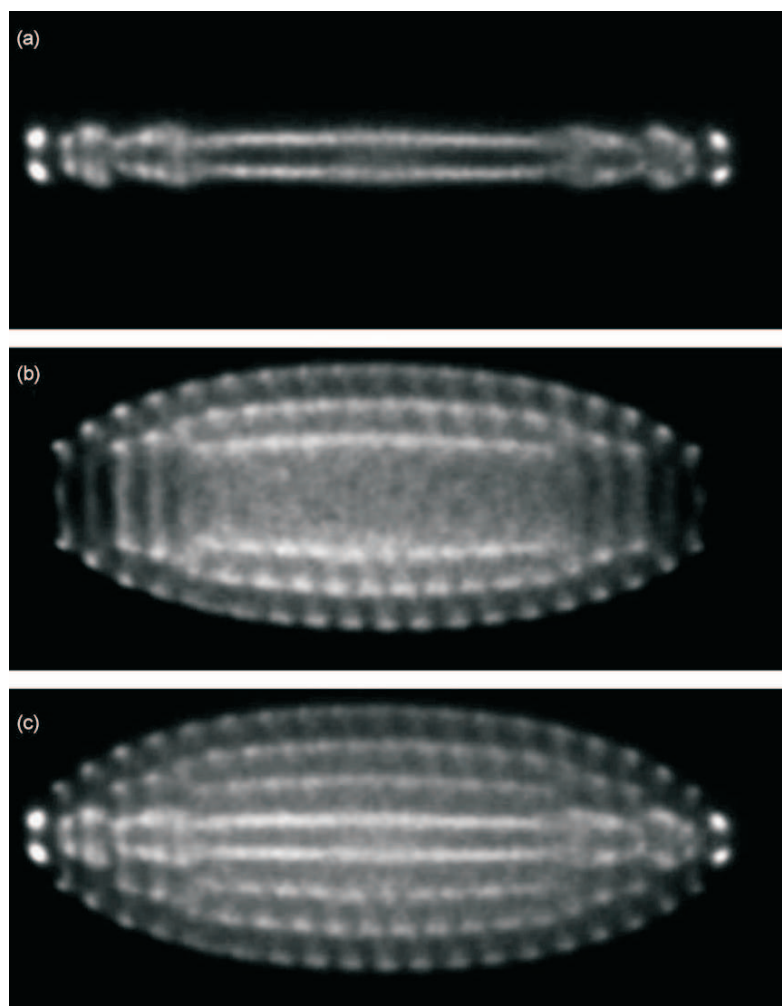


Figura 7: Imagem da fluorescência de um cristal duplo consistindo de íons $^{40}\text{Ca}^+$ e íons $^{44}\text{Ca}^+$. (a) Fluorescência apenas da parte dos íons $^{40}\text{Ca}^+$ do cristal. (b) Fluorescência apenas da parte dos íons $^{44}\text{Ca}^+$ do cristal, (c) Imagem da fluorescência de todo o cristal. Figura retirada da Ref. [7]

partículas, que leva o sistema a uma estrutura triangular, e o potencial de confinamento parabólico, que impõe uma simetria circular no arranjo das partículas. A acomodação de uma rede triangular em uma região circular necessariamente induz ao aparecimento de defeitos geométricos intrínsecos, que são devidos ao potencial de confinamento. Defeitos em aglomerados com grande número de partículas foram investigados por Kong *et al.* [24] através de construções de Voronoi. Exemplos dos resultados obtidos podem ser observados na Figura 8, onde as configurações do estado fundamental para aglomerados com $N=291$, 300, 400 e 500 partículas são mostradas. Uma rede triangular de Wigner é formada na área central do aglomerado, enquanto na extremidade as partículas são arranjadas em camadas circulares. Na região de transição aparecem defeitos geométricos, como grupos de dislocações e disclinações, e esses defeitos estão também arranjados nas

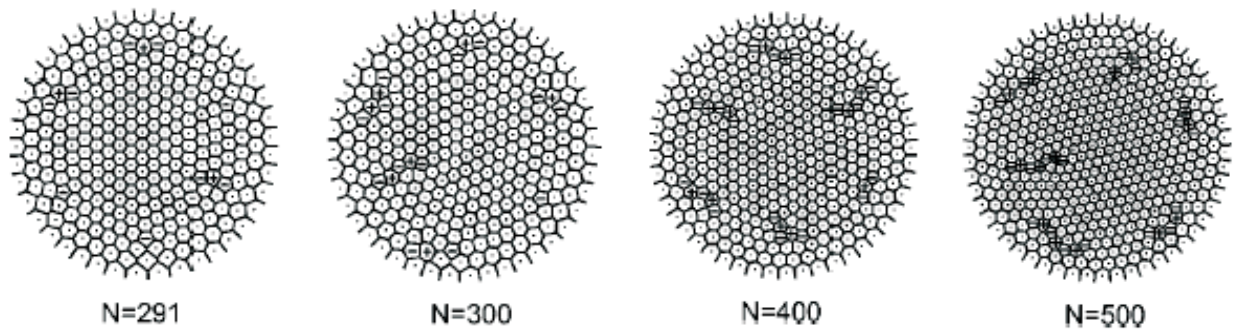


Figura 8: Configuração do estado fundamental para $N = 291, 300, 400, 500$ partículas. A estrutura de Voronoi é mostrada e os defeitos (declinações) são indicadas por '+' para partículas com 7 vizinhos mais próximos e '-' para partículas com 5 vizinhos mais próximo.

extremidades de um hexágono formado dentro do aglomerado. Observa-se também que vários arranjos e tipos de defeitos são possíveis em configurações metaestáveis com energia levemente maior do que a energia do estado fundamental. Além disso, foi observado que o movimento das partículas é fortemente relacionado com a estrutura topológica local. Foi mostrado também nesse trabalho que a transição sólido-líquido do aglomerado se dá inicialmente na região dos defeitos. Acima da temperatura da transição sólido-líquido, Reichhardt mostra que a flutuação do número de defeitos apresenta um ruído do tipo $1/f$. [25].

Nesta dissertação serão analisadas algumas propriedades estruturais, dinâmicas e térmicas de um sistema mais complexo que aqueles anteriormente comentados. Trata-se de um aglomerado bidimensional contendo dois tipos de partículas, que possuem diferentes cargas e/ou diferentes massas. A análise do sistema será a partir de resultados de simulação numérica, onde será utilizado o método Monte Carlo e o método de Newton otimizado.

O Capítulo 2 desta dissertação é dedicado à descrever os métodos numéricos que são utilizados para obter as propriedades relevantes do sistema estudado. Será introduzida a técnica de simulação Monte Carlo que foi utilizada para investigar o sistema descrito nesta dissertação.

No Capítulo 3 é introduzida outra técnica de simulação que foi utilizada apenas na determinação dos estados metaestáveis (estados diferentes do fundamental) do sistema na temperatura $T = 0$. O modelo do sistema é introduzido através do Hamiltoniano, o qual é desenvolvido para obter as quantidades relevantes do sistema. A aproximação usada para o cálculo dos modos normais deste sistema é também tratada neste Capítulo, no

qual é mostrado todos os passos para a construção da matriz de autovetores, responsável pela determinação das frequências, a partir do Hamiltoniano do sistema. Esse cálculo foi desenvolvido dando a devida atenção ao fato das partículas serem diferentes.

No Capítulo 4 serão mostrados os resultados de uma ampla investigação do sistema com partículas diferentes. O estudo será iniciado mostrando as diferentes configurações em que o sistema pode atingir. As distâncias radiais das partículas em relação ao centro de confinamento bem como o espectro de frequências, ambos em função da razão entre as cargas (α) e/ou massas (β) das partículas, serão estudados. As transições de fase estruturais nesse sistema serão classificadas a partir da análise da energia e suas derivadas em função dos parâmetros α e β . Mostra-se que o modo de rotação inter-camadas não depende apenas do número de partículas mas também dos parâmetros α e β . Será observado, para uma mesma configuração que, o modo normal associado a mínima frequência não nula é alterado de acordo com os parâmetros α e β . Um estudo quantitativo do grau de mistura do sistema será realizado através de um diagrama de fase (α, β) e de um parâmetro de ordem que será definido. Além disso, o sistema será estudado em várias temperaturas e algumas propriedades, como o desvio médio quadrático, serão calculadas. Será observado que, o sistema possui um efeito re-entrante quando a temperatura do sistema é aumentada e que esse fenômeno apresenta-se em diferentes temperaturas para diferentes valores do parâmetro α .

No Capítulo 5 serão apresentados os comentários finais e conclusões do trabalho, bem como perspectivas para futuras investigações.

2 Métodos Numéricos

2.1 Monte Carlo

A técnica de Monte Carlo é um método numérico para obter uma solução aproximada de um problema específico usando uma seqüência de valores de variáveis aleatórias. Diferente de outros métodos de simulação, como o método de dinâmica molecular (DM), que calcula as propriedades físicas através de um caminho no espaço de fase que é gerado pela equação fundamental do movimento, o método Monte Carlo (MC) calcula os observáveis do sistema usando a função distribuição e a função de partição, considerando apenas as configurações das partículas de um sistema descrito em termos do Hamiltoniano em um *ensemble* apropriado [26, 27]. A principal característica desse método é a forma estocástica de determinar o valor estimado de um observável, calculando médias a partir de várias amostras, de uma certa propriedade, retiradas do sistema. O Monte Carlo foi escolhido, como método de simulação para dessa dissertação, por estarmos interessado apenas nas propriedades das configurações do estado fundamental e não das trajetórias das partículas do sistemas.

A técnica de Monte Carlo, utilizando definições da mecânica estatística, é descrita adiante. Considerando um observável função das coordenadas e dos momentos das partículas de um sistema, pode-se então determinar a média desse observável através da equação abaixo

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int_{\Omega} P(p^n, r^n) A(p^n, r^n) dp^n dr^n}{\int_{\Omega} P(p^n, r^n) dp^n dr^n}, \quad (2.1)$$

onde (p^n, r^n) representam todas as coordenadas e os momentos das N partículas e $P(p^n, r^n)$ a função peso de um *ensemble* apropriado. A equação acima é chamada de média do observável A (num determinado *ensemble*), que é calculado em todos os pontos (p, r) de todo o volume do espaço de fase Ω .

Contudo, na maioria das vezes, estamos mais preocupado em como determinar o valor da função dependente das coordenadas ($A(r)$), pois a integração com respeito aos momentos ($A(p)$) pode ser calculada analiticamente através do cálculo da energia cinética do sistema. Em geral, quando se calcula a média da quantidade A , tem-se o problema de calcular uma integral de muitas dimensões. Para alguns problemas de integração, usa-se esquemas aproximativos, por exemplo, o método descida íngreme (*down hill*) ou gradiente de descida. No entanto, o método de Monte Carlo não faz nenhuma aproximação, exceto a de considerar o espaço de fase discreto, ou seja, calcula a média do observável através de somatórios de todos os estados do espaço de fase. Nesse caso a média do observável A é dada por

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N P(x_i) A(x_i)}{\sum_{i=1}^N P(x_i)}, \quad (2.2)$$

onde N é o número de estados e x_i é o estado do sistema.

Quando se trabalha em sistemas com grande número de partículas, gasta-se muito tempo calculando as médias de todas as propriedades. Temos agora que encontrar a melhor técnica numérica para calcular essas médias. Uma delas é a técnica de Monte Carlo ou, mais precisamente, o algoritmo de Metropolis com amostragem por importância, introduzida em 1953 por Metropolis *et al.* [28].

2.1.1 Amostragem por importância (Importance Sampling)

Para o observável \hat{A} na Eq. (2.2) representar um sistema real, é necessário computar uniformemente todos os pontos do espaço de fase, ou seja, calcular todas as possibilidades que o sistema pode atingir, satisfazendo assim o teorema da *ergodicidade*. Se um sistema tem muitos estados possíveis, fica impraticável fazer o cálculo de um observável em todos os estados. Um resultado mais rápido é obtido utilizando-se métodos de integração onde se pode calcular apenas os estados mais prováveis. O método de amostragem por importância é um método de integração que utiliza apenas os pontos aleatórios onde há uma contribuição efetiva dos valores das propriedades dinâmicas para a medida de suas médias, desprezando assim os estados que não contribuem para o cálculo do observável na região do espaço de fase. Pode-se fazer uma amostragem dos estados mais prováveis através de uma função densidade de probabilidade associada com a função que se quer integrar. Uma pequena introdução dessa idéia será apresentada. Supondo que se deseja

calcular numericamente uma integral unidimensional I :

$$I = \int_a^b f(x) dx, \quad (2.3)$$

onde $f(x)$ é uma função aleatória de estados no espaço de fase, que está definida em um certo intervalo $[a, b]$. Considerando o espaço de fase constituído por estados discretos, a integral I pode ser resolvida através do teorema do valor médio, utilizando a média da função $f(x)$. Logo, uma aproximação simples da integral I é dada por

$$I = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = (b-a) \langle f(x) \rangle. \quad (2.4)$$

Em Monte Carlo a média $\langle f(x) \rangle$ é calculada determinando $f(x)$ em um grande número de valores de x , escolhidos de forma aleatória e uniforme no intervalo $[a, b]$. Ou seja, Para $N \rightarrow \infty$, a integral I será determinada corretamente, mas se esse cálculo for feito em todo o intervalo de integração, será perdido muito tempo calculando pontos no espaço de fase com contribuições desprezíveis para o valor da média do observável. Supondo que podemos construir uma função densidade de probabilidade $p(x)$ tal que,

$$\int_a^b p(x) dx \equiv g(b) - g(a).$$

Fazendo $g(a) = 0$ e $g(b) = 1$ de forma que

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

calcula-se a integral I [Eq. (2.3)] nos pontos do intervalo $[a, b]$. Introduzindo essa função em (2.3), tem-se

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx, \quad (2.5)$$

Sabendo que

$$p(x) dx = dg$$

e mudando-se a variável $x \rightarrow g$ temos que

$$I = \int_{g(a)=0}^{g(b)=1} \frac{f(g)}{p(g)} dg, \quad (2.6)$$

onde g está sendo considerado como variável de integração.

Escolhem-se agora N pontos aleatórios g_i , uniformemente distribuídos no intervalo

$[a, b]$ para finalmente estimar o valor de I assim

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f[x(g_i)]}{p[x(g_i)]}. \quad (2.7)$$

Deseja-se que a função $p(x)$ seja de tal forma que minimize a variância de I , ou seja, que o erro, por não percorrer todo o espaço de fase, seja o menor possível. Para obter a variância, calcula-se

$$\text{Var}(I) = \langle (I - \langle I \rangle)^2 \rangle. \quad (2.8)$$

Substituindo a equação (2.7) em (2.8) tem-se

$$\text{Var}(I) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left\langle \left(\frac{f[x(g_i)]}{p[x(g_i)]} - \left\langle \frac{f[x(g)]}{p[x(g)]} \right\rangle \right) \left(\frac{f[x(g_j)]}{p[x(g_j)]} - \left\langle \frac{f[x(g)]}{p[x(g)]} \right\rangle \right) \right\rangle, \quad (2.9)$$

onde $\langle \rangle$ é o valor esperado da função em N pontos do espaço de fase. Sendo as amostras i e j totalmente independentes, todos os produtos cruzados deverão desaparecer. Logo tem-se que

$$\text{Var}(I) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\langle \left(\frac{f[x(g_i)]}{p[x(g_i)]} - \left\langle \frac{f[x(g)]}{p[x(g)]} \right\rangle \right)^2 \right\rangle \quad (2.10)$$

$$= \frac{1}{N} \left[\left\langle \left(\frac{f[x(g)]}{p[x(g)]} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{f[x(g)]}{p[x(g)]} \right\rangle^2 \right]. \quad (2.11)$$

Observa-se que a variância é dependente de $1/N$, mas o valor dessa variância pode ser minimizada com a escolha correta da função peso $p(x)$, tal que $f(x)/p(x)$ seja uma função suave em relação a x , ou seja, que a função $p(x)$ determine os pontos no espaço de fase a serem desprezados. Sem perda de generalidade pode-se assumir que $f(x) > 0$, logo uma escolha de $p(x)$ para a variância ser minimizada é

$$p(x) = \frac{f(x)}{\sum_{i=1}^N f(x_i)}. \quad (2.12)$$

Quando se deseja calcular as probabilidades relativas de um sistema em equilíbrio, numa temperatura T , governada por um Hamiltoniano $H(x)$, usa-se uma função conhecida, que pode ser descrita na forma do chamado fator de Boltzmann, ou seja

$$f(x) = e^{-\frac{H(x)}{k_B T}},$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. Substituindo $f(x)$ na equação (2.12), tem-se a

chamada distribuição de Boltzmann, dada por

$$p(x_i) = \frac{e^{-H(x_i)/k_B T}}{\sum_i e^{-H(x_i)/k_B T}} \quad \text{ou} \quad p(x_i) = \frac{e^{-H(x_i)/k_B T}}{Z}, \quad (2.13)$$

onde utilizamos a função de partição $Z = \sum_i e^{-H(x_i)/k_B T}$ de um sistema clássico em um ensemble canônico.

Calcula-se agora o valor do observável \hat{A} dado pela equação (2.2). Ou seja,

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum_i^N f(H(x_i)) A_i}{\sum_i^N f(H(x_i))}, \quad (2.14)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema. Escolhendo-se os estados com a distribuição de probabilidade $p(x)$, a equação anterior torna-se,

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum_i^N p^{-1}(x_i) f(H(x_i)) A_i}{\sum_i^N p^{-1}(x_i) f(H(x_i))}. \quad (2.15)$$

Se $p(x)$ é dado pela equação (2.13), tem-se

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum_i^N Z f^{-1}(H(x_i)) f(H(x_i)) A_i}{\sum_i^N Z f^{-1}(H(x_i)) f(H(x_i))} \quad (2.16)$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{Z}{NZ} \sum_i^N A_i \quad (2.17)$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N A_i \quad (2.18)$$

A equação (2.18) mostra o valor médio do observável \hat{A} é obtido apenas pela média aritmética de \hat{A} nos vários estados, quando se considera uma densidade de probabilidade $p(x)$ proporcional à distribuição de equilíbrio $f(H(x))$. Basicamente, o que se fez foi considerar apenas os estados no espaço de fase que têm contribuições dominantes para a obtenção da média. Note-se que na equação (2.18), obtida através do método de integração de amostragem por importância, a quantidade de cálculos numéricos nos problemas de mecânica estatística é reduzida consideravelmente em relação a outros métodos, como por exemplo, os métodos de quadraturas e o já comentado gradiente de decida, principalmente quando o integrando varia fortemente no espaço de fase.

2.1.2 Método de Metropolis

Como visto na seção anterior, a escolha específica da função densidade de probabilidade significa que é necessário calcular apenas os estados que estiverem no equilíbrio do

sistema. O método desenvolvido por *Metropolis et al.* [28] é baseado no conceito de caminhada aleatória (*random walk*) no espaço de fase. Esse método é essencialmente baseado nas propriedades da distribuição estacionária das cadeias de Markov, onde se começa de um estado inicial \mathbf{x}_0 do espaço de fase, e os demais estados são gerados de acordo com uma distribuição de probabilidade $P(x)$. Numa cadeia de Markov a probabilidade de transição para um novo estado depende apenas do último, ou seja, os estados gerados não são totalmente independentes. A cadeia de Markov é o análogo probabilístico das trajetórias no espaço de fase geradas pela equação de movimento na dinâmica molecular.

As probabilidades de transições numa cadeia de Markov são normalmente representadas por $\mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j)$, que é a probabilidade do sistema ir de um estado x_i para outro estado x_j . Se a probabilidade de transição satisfizer certas condições, pode-se assegurar que o sistema irá para um estado em equilíbrio após um tempo suficiente de simulação. As condições são:

$$(i) \mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j) \geq 0 \quad \text{para todo } i, j; \quad (2.19)$$

$$(ii) \sum_j \mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j) = 1; \quad (2.20)$$

$$(iii) P(x_i)\mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j) = P(x_j)\mathcal{W}(x_j \rightarrow x_i). \quad (2.21)$$

As condições mostram que: (i) toda probabilidade de transição de estados deve ser positiva. (ii) \mathcal{W} tem que ser uma matriz estocástica, na qual cada coluna dessa matriz é um vetor de probabilidade onde a soma dos valores de probabilidades de cada vetor é igual a 1. A condição (iii) é uma condição forte, pois representa a reversibilidade microscópica de dois estados em equilíbrio, que, utilizando a Eq. (2.13), pode ser escrita como

$$\frac{\mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j)}{\mathcal{W}(x_j \rightarrow x_i)} = \frac{P(x_j)}{P(x_i)} \quad (2.22)$$

$$= e^{-[H(x_j) - H(x_i)]/k_B T}. \quad (2.23)$$

Logo, pode-se ver que a probabilidade de transição depende apenas da diferença de energia do estado inicial e final, ou seja

$$\Delta H(x_i, x_j) = H(x_j) - H(x_i).$$

A escolha de Metropolis para $\mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j)$ é dada por

$$\mathcal{W}(x_i \rightarrow x_j) = \begin{cases} \frac{1}{A} e^{-\Delta H(x_i, x_j)/k_B T}, & \text{se } \Delta H > 0 \\ \frac{1}{A} & \text{se } \Delta H \leq 0. \end{cases} \quad (2.24)$$

O fator multiplicativo de $1/A$ é cancelado na equação (2.22) e não influi na reversibilidade do sistema. Observa-se que a probabilidade de transição de Metropolis claramente satisfaz às condições necessárias [condições (2.19), (2.20), (2.21)]. É importante enfatizar que além da probabilidade de transição ocorrer para diferentes estados ($i \neq j$), também é permitida a transição no caso do sistema estar no equilíbrio ($i = j$).

O conceito importante é que a solução nunca pode ser única, mas sempre uma estimativa. Logo o cálculo da variância e do desvio padrão pode ter resultados duvidosos.

Apesar da dinâmica discutida anteriormente conduzir o sistema para um estado de equilíbrio, a velocidade de convergência para o equilíbrio depende da escolha da probabilidade de transição \mathcal{W} . Na prática, usa-se o método da “tentativa e erro” para identificar o tempo de simulação de Monte-Carlo necessário para o sistema encontrar o estado de equilíbrio.

3 Modelo e aproximação numérica

3.1 Introdução

Neste Capítulo serão apresentados os principais modelos utilizados para descrever sistemas bidimensionais de partículas carregadas confinadas, bom como o modelo do sistema estudado nessa dissertação. Em geral o Hamiltoniano (H) que descreve o sistema, com temperatura zero ou próxima de zero, é composto por dois termos, a saber, o potencial de confinamento (V_c) e o potencial de interação entre as partículas (V_i), ou seja,

$$H = V_c + V_i. \quad (3.1)$$

Usualmente, o potencial de confinamento das N partículas é do tipo parabólico, ou seja,

$$V_c = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i \omega_0^2 r_i^2 \quad (3.2)$$

onde ω_0 é a intensidade do confinamento. No entanto, é também usual considerar as partículas confinadas numa região por paredes “duras” [10, 29]. Nesse caso, o potencial de confinamento é dado apenas pelo potencial da parede, o qual é zero no interior do espaço delimitado por ela e infinito sobre ela. Outro tipo de confinamento que foi introduzido por Farias e Peeters em 1996 [30] e estudado de forma sistemática por Ferreira *et al.* [31, 32], corresponde ao confinamento coulombiano [Figura 9(a)]. Nesse caso, as partículas são mantidas numa região finita do plano pela atração eletrostática de uma carga oposta (Z). Conforme mostrado por Ferreira *et al.* [32], o confinamento do tipo parabólico é apenas um caso particular do confinamento coulombiano, e ocorre quando a carga de confinamento é muito maior que o número de cargas a serem confinadas ($Z \gg N$).

Em relação ao potencial de interação, é usual considerar o tipo de interação entre as partículas carregadas do tipo Yukawa $\left(\frac{e^{-kr_{ij}}}{r_{ij}}\right)$ [33], onde k é o parâmetro de blindagem

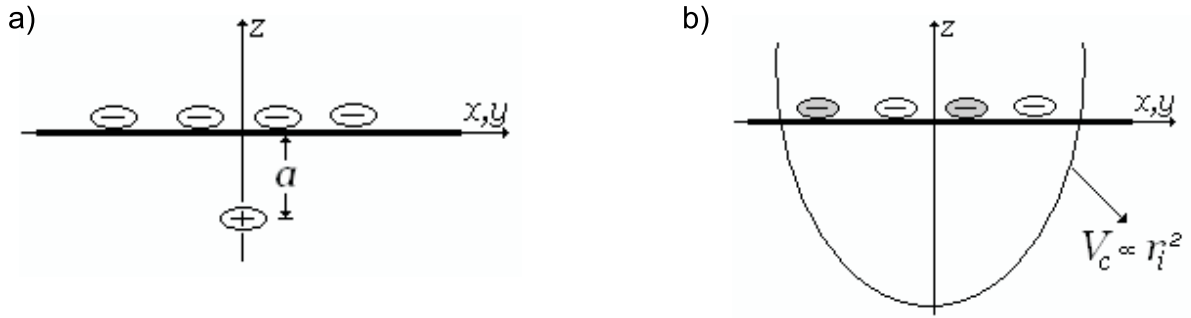


Figura 9: Sistema de partículas confinadas através de um potencial (a) coulombiano e (b) parabólico.

da interação entre as cargas e r_{ij} a distância entre as cargas i e j . Entretanto, em alguns trabalhos foi considerado que a interação entre as partículas era do tipo logarítmica [34, 35] (como ocorre no caso de vórtice de campo magnético em supercondutores do tipo II) ou do tipo dipolar [10, 36].

Sistemas de cargas confinadas não são estudados apenas teoricamente, mas também experimentalmente como foi mostrado em diversos trabalhos recentes [37, 38, 9, 39, 40, 41]. É interessante observar que várias propriedades estruturais dinâmicas e térmicas são perfeitamente descritas pelos modelos simples comentados aqui.

Neste trabalho analisa-se as propriedades estruturais, dinâmicas e térmicas de um sistema de partículas carregadas confinadas por um potencial parabólico e que interagem entre si através de um potencial coulombiano. Diferentemente de trabalhos anteriores, considera-se aqui a presença de partículas com diferentes cargas e/ou massas. Mais especificamente, o sistema binário estudado nesta dissertação consiste de N_f partículas com o valor de carga fixa q_f e valor da massa fixa m_f , e N_v partículas com carga variável q_v e/ou massa variável m_v . A carga e/ou massa variável das partículas são os parâmetros que são mudados durante a simulação ao contrário da carga e/ou massa fixa das partículas que permanecem inalteradas durante a simulação. Todas as partículas interagem através de um potencial Coulombiano do tipo $1/r$. O sistema é confinado através de um potencial parabólico. Considera-se o sistema a temperatura $T = 0$, com isso, conforme já comentado, o termo de interação entre as partículas é dominante. Assim sendo, o Hamiltoniano

do sistema pode ser representado por

$$H = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{1}{2} m_f \omega_0^2 r_i^2 + \sum_{i=1}^{N_v} \frac{1}{2} m_v \omega_0^2 r_i^2 + \frac{q_f^2}{\epsilon} \sum_{i>j=1}^{N_f} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{q_v^2}{\epsilon} \sum_{k>l=1}^{N_v} \frac{1}{|\vec{r}_k - \vec{r}_l|} + \frac{q_f q_v}{\epsilon} \sum_{m=1}^{N_f} \sum_{n=1}^{N_v} \frac{1}{|\vec{r}_m - \vec{r}_n|}, \quad (3.3)$$

onde ϵ é a constante dielétrica do meio onde as partículas estão se movendo, e $r_i = |\vec{r}_i|$ a distância da i -ésima partícula ao centro do potencial de confinamento. Os dois primeiros termos da Eq. 3.3 correspondem ao potencial de confinamento, dado por

$$V_c = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{1}{2} m_f \omega_0^2 r_i^2 + \sum_{i=1}^{N_v} \frac{1}{2} m_v \omega_0^2 r_i^2.$$

Os termos restantes correspondem ao potencial de interação entre as partículas, dado por

$$V_i = \frac{q_f^2}{\epsilon} \sum_{i>j=1}^{N_f} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{q_v^2}{\epsilon} \sum_{k>l=1}^{N_v} \frac{1}{|\vec{r}_k - \vec{r}_l|} + \frac{q_f q_v}{\epsilon} \sum_{m=1}^{N_f} \sum_{n=1}^{N_v} \frac{1}{|\vec{r}_m - \vec{r}_n|}.$$

A fim de revelar os parâmetros importantes do sistema, é conveniente definir os parâmetros $\alpha = q_v/q_f$, $\beta = m_v/m_f$ e escrever a energia e as distâncias em termos de $E_0 = (m_f \omega_0^2 q_f^4 / 2\epsilon^2)^{1/3}$ e $r_0 = (2q_f^2 / m_f \epsilon \omega_0^2)^{1/3}$, respectivamente. Isso permite reescrever o Hamiltoniano da Eq. (3.3) na seguinte forma adimensional:

$$H = \sum_{i=1}^{N_f} r_i^2 + \beta \sum_{i=1}^{N_v} r_i^2 + \sum_{i>j=1}^{N_f} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{k>l=1}^{N_v} \frac{\alpha^2}{|\vec{r}_k - \vec{r}_l|} + \sum_{m=1}^{N_f} \sum_{n=1}^{N_v} \frac{\alpha}{|\vec{r}_m - \vec{r}_n|}. \quad (3.4)$$

A Eq. (3.4) mostra que o sistema depende do número de partículas dos dois tipos (N_f e N_v) e dos parâmetros α e β , diferenciando-se assim, do sistema com apenas um tipo de carga [4, 8], que depende apenas do número total de partículas. É importante observar também, que q_f e m_f são a carga e a massa de referência, respectivamente.

Sistemas binários têm sido estudados recentemente tanto do ponto de vista teórico [42, 43] como experimental.

3.2 Monte Carlo e método de Newton modificado

O método de Monte Carlo já foi comentado no Capítulo 2. O método de Newton modificado, no entanto, foi recentemente proposto por Schweigert e Peeters [8] e trata-se de uma poderosa ferramenta numérica para a determinação da configuração de mínima

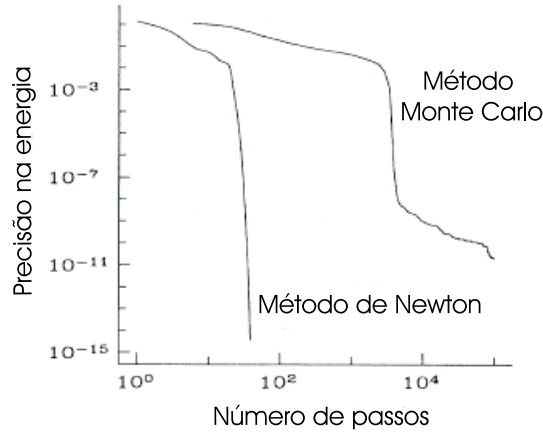


Figura 10: Comparação da precisão obtida entre os métodos de Newton modificado e algoritmo Monte Carlo de Metropolis. Figura retirada da referência [8].

energia do presente sistema. Por se tratar de uma técnica não muito difundida, alguns comentários serão aqui apresentados.

Considera-se que as coordenadas das partículas após n passos de simulação do Monte Carlo são dadas por $r_{\gamma,i}^n$ ($\gamma = x, y; i = 1, 2, 3, \dots, N$). Sabendo que o método do Monte Carlo leva a configuração do sistema para as vizinhanças do mínimo de energia, escrevemos o potencial do sistema, numa aproximação harmônica, através do Hamiltoniano

$$H[r_{\gamma,i}] = H[r_{\gamma,i}^n] - \sum_i \sum_{\gamma} H_{\gamma,i}(r_{\gamma,i} - r_{\gamma,i}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\gamma,\beta} H_{\gamma\beta,ij}(r_{\gamma,i} - r_{\gamma,i}^n)(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n), \quad (3.5)$$

onde $H_{\gamma,i} = -\partial H / \partial r_{\gamma,i}$ é a coordenada γ da força sobre a partícula i . Um elemento da matriz dinâmica é dado por

$$H_{\gamma\beta,ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\gamma,i} \partial r_{\beta,j}}. \quad (3.6)$$

Quando o sistema se encontra no estado de mínima energia, tem-se que $\partial H[r_{\gamma,i}] / \partial r_{\gamma,i} = 0$, de modo que, usando-se a Eq. (3.5), obtém-se a seguinte equação

$$\sum_{j,\beta} H_{\gamma\beta,ij}(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) = H_{\gamma,i}. \quad (3.7)$$

O método de Newton modificado tem uma eficiência maior na vizinhança do mínimo, mais especificamente quando a matriz dinâmica é positiva. Dessa forma, é conveniente utilizar inicialmente o método de Monte Carlo que rapidamente leva o sistema a uma configuração próxima ao mínimo global. Para assegurar a estabilidade do algoritmo, a Eq. (3.7) deve ser modificada pela inclusão de um coeficiente de amortecimento η [8]. Ou

seja,

$$\sum_{j,\beta} (\delta_{\gamma\beta,ij}\eta + H_{\gamma\beta,ij})(r_{\beta,j} - r_{\beta,j}^n) = H_{\gamma,i}, \quad (3.8)$$

onde $\delta_{\gamma\beta,ij}$ representa a matriz unitária. Nas primeiras iterações atribui-se um alto valor para o coeficiente de amortecimento, tipicamente no intervalo $\eta = 10 - 100$. Se nos próximos passos a energia do sistema diminuir, o coeficiente de amortecimento é reduzido, enquanto que no caso contrário, ou seja, se a energia do sistema aumentar, o coeficiente η também será aumentado. É observado que esse processo de escolha do coeficiente de amortecimento garante uma rápida convergência no processo de iteração. O processo de iteração é cessado quando o valor de η torna-se menor que um valor crítico pré-determinado e a precisão desejada no valor da energia é atingida [8]. A eficiência do método de Newton é ilustrada na Figura 10. Como pode ser observado, o método de Newton modificado oferece uma rápida convergência em relação ao método de Monte Carlo padrão.

Para ter a certeza que a configuração de mínima energia foi encontrada, considera-se 1000 diferentes configurações iniciais aleatórias. Contudo, para alguns valores de α e β ($\alpha \approx \beta$), onde se obtém tipicamente um grande número de configurações estáveis ($N_{cs} \approx 160$), considerou-se mais de 4000 diferentes configurações iniciais aleatórias. O procedimento adotado permite encontrar não apenas o estado fundamental, mas também os estados meta-estáveis. De todos os estados estáveis obtidos, aquele de menor energia foi considerado como o estado fundamental do sistema. Após encontrar o estado de mínima energia, calcula-se os autovalores e os autovetores da matriz dinâmica Eq. (3.6) através da técnica de diagonalização de Houserhold [8]. O quadrado da frequência dos modos normais são obtidos através dos autovalores. Garante-se que a configuração será estável quando o menor autovalor for positivo [8].

3.3 Modos Normais

Nesta seção apresenta-se o método usado nos cálculos das frequências dos modos normais de vibração do sistema. O espectro dos modos normais foi obtido através da aproximação harmônica [44].

Partindo-se da configuração do estado fundamental, considera-se um pequeno deslocamento das partículas em torno de sua respectivas posições de equilíbrio (x_0, y_0) , ou

seja,

$$\begin{aligned}x_i &= x_{0i} + \delta x_i, \\y_i &= y_{0i} + \delta y_i.\end{aligned}\tag{3.9}$$

Desse modo, pode-se expandir o Hamiltoniano (3.4) em torno de tais posições. Considerando-se a expansão do Hamiltoniano até o termo de segunda ordem em $(\delta x_i, \delta y_i)$, tem-se

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i \cdot \vec{p}_i}{2m_i} + V(\vec{x}_0, \vec{y}_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta \vec{R}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \delta \vec{R}_j\tag{3.10}$$

onde

$$\begin{aligned}A_{ij} &= \frac{\partial^2 H(R_i - R_j)}{\partial R_i \partial R_j}, \quad (i \neq j) \\A_{ii} &= \sum_{j(\neq i)} \frac{\partial^2 H(R_i - R_j)}{\partial^2 R_i}. \quad (i = j)\end{aligned}\tag{3.11}$$

O segundo termo do lado direito da Eq.(3.10), $V(\vec{x}_0, \vec{y}_0)$, representa o potencial de interação entre as partículas calculado na posição de equilíbrio, enquanto que o último termo representa a segunda derivada, onde $\delta \vec{R}_i = \delta x_i \hat{e}_x + \delta y_i \hat{e}_y$. O termo correspondente a primeira derivada deve ser nulo pois estamos considerando o sistema na posição de equilíbrio, onde a força resultante deve ser nula. Os termos correspondentes a segunda derivada da Eq. (3.10) são explicitamente mostrados abaixo onde foi utilizado a nomenclatura ($u = \alpha, \beta; w = \alpha, \beta$). Para ($u = w$) e ($i \neq j$), tem-se

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial x_j^w} &= + \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} - \frac{3(x_i - x_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\ \frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial y_j^w} &= - \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\ \frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial x_j^w} &= - \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\ \frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial y_j^w} &= + \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} - \frac{3(y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right).\end{aligned}\tag{3.12}$$

Enquanto para o caso ($u = w$) e ($i = j$), tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial y_i^w} &= \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_f} \frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right) + \frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_v} \frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial x_i^w} &= \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_f} \frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right) + \frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_v} \frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial x_i^w} &= m_f \omega_0 - \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_f} \frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} - \sum_{j=1}^{N_f} \frac{3(x_i - x_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right) \\
&\quad - \frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_v} \frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} - \sum_{j=1}^{N_v} \frac{3(x_i - x_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial y_i^w} &= m_f \omega_0 - \frac{q_f^2}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_f} \frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} - \sum_{j=1}^{N_f} \frac{3(y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right) \\
&\quad - \frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\sum_{j=1}^{N_v} \frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} - \sum_{j=1}^{N_v} \frac{3(y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right).
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Agora para ($u \neq w$) e ($i \neq j$), tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial x_j^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\frac{-1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} + \frac{3(x_i - x_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial y_j^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial x_j^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial y_j^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \left(\frac{-1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} + \frac{3(y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right).
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Enquanto para o caso ($u \neq w$) e ($i = j$), tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial y_i^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \sum_{j=1}^{N_v} \left(\frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial x_i^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \sum_{j=1}^{N_v} \left(\frac{3(x_i - x_j)(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial x_i^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \sum_{j=1}^{N_v} \left(\frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} + \frac{3(x_i - x_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right), \\
\frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial y_i^w} &= -\frac{q_f q_v}{\epsilon} \sum_{j=1}^{N_v} \left(\frac{1}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{3/2}} + \frac{3(y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^{5/2}} \right).
\end{aligned} \tag{3.15}$$

onde $u, w = f, v$ (f é o índice para partículas com carga/massa fixa e v o índice para partículas com carga/massa variáveis).

As equações acima podem ser organizadas na forma matricial, como segue,

$$\mathbf{A}_{ij} = \begin{pmatrix} {}^{uw}a_{ij}^{xx} & {}^{uw}a_{ij}^{xy} \\ {}^{uw}a_{ij}^{yx} & {}^{uw}a_{ij}^{yy} \end{pmatrix}, \tag{3.16}$$

onde (no caso $i \neq j$)

$${}^{uw}a_{ij}^{xx} = \frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial x_j^w}, \tag{3.17a}$$

$${}^{uw}a_{ij}^{xy} = \frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial y_j^w}, \tag{3.17b}$$

$${}^{uw}a_{ij}^{yx} = \frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial x_j^w}, \tag{3.17c}$$

$${}^{uw}a_{ij}^{yy} = \frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial y_j^w}, \tag{3.17d}$$

e

$$\mathbf{A}_{ii} = \begin{pmatrix} {}^{uw}a_{ii}^{xx} & {}^{uw}a_{ii}^{xy} \\ {}^{uw}a_{ii}^{yx} & {}^{uw}a_{ii}^{yy} \end{pmatrix}, \tag{3.18}$$

com ($i = j$)

$${}^{uw}a_{ii}^{xx} = \frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial x_i^w}, \quad (3.19a)$$

$${}^{uw}a_{ii}^{xy} = \frac{\partial^2 H}{\partial x_i^u \partial y_i^w}, \quad (3.19b)$$

$${}^{uw}a_{ii}^{yx} = \frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial x_i^w}, \quad (3.19c)$$

$${}^{uw}a_{ii}^{yy} = \frac{\partial^2 H}{\partial y_i^u \partial y_i^w}. \quad (3.19d)$$

Utilizando as Eqs. (3.16) e (3.18), pode-se reescrever o último termo da Eq. (3.10), $\delta \vec{R}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \delta \vec{R}_j$, como

$$\begin{aligned} \delta \vec{R}_i \cdot A_{ij} \cdot \delta \vec{R}_j &= \begin{pmatrix} \delta x_i & \delta y_j \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} {}^{uw}a_{ij}^{xx} & {}^{uw}a_{ij}^{xy} \\ {}^{uw}a_{ij}^{yx} & {}^{uw}a_{ij}^{yy} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta x_j \\ \delta y_j \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \delta \vec{R}_i \cdot A_{ij} \cdot \delta \vec{R}_j &= {}^{uw}a_{ij}^{xx} \delta x_i \delta x_j + {}^{uw}a_{ij}^{xy} \delta x_i \delta y_j + {}^{uw}a_{ij}^{yx} \delta y_i \delta x_j + {}^{uw}a_{ij}^{yy} \delta y_i \delta y_j. \end{aligned} \quad (3.20)$$

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

$$m_i \frac{\partial^2 \delta x_i}{\partial t^2} = -\frac{\partial H}{\partial \delta x_i}, \quad (3.21a)$$

$$m_i \frac{\partial^2 \delta y_i}{\partial t^2} = -\frac{\partial H}{\partial \delta y_i}. \quad (3.21b)$$

A partir das Eqs. (3.10) e (3.20), as Eqs. (3.21) podem ser reescritas como

$$m_i \frac{\partial^2 \delta x_i}{\partial t^2} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N ({}^{uw}a_{ij}^{xx} \delta x_j + {}^{uw}a_{ij}^{xy} \delta y_j), \quad (3.22a)$$

$$m_i \frac{\partial^2 \delta y_i}{\partial t^2} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N ({}^{uw}a_{ij}^{yx} \delta x_j + {}^{uw}a_{ij}^{yy} \delta y_j). \quad (3.22b)$$

Por se considerar as partículas oscilando em torno da posição de equilíbrio, assume-se então uma solução oscilatória do tipo

$$\delta \vec{R}_i(t) = \delta \vec{R}_i e^{-i\omega t}, \quad (3.23)$$

onde $\delta \vec{R}_i(t) = \delta x_i(t) \hat{e}_x + \delta y_i(t) \hat{e}_y$ e $\delta \vec{R}_i = \delta x_i \hat{e}_x + \delta y_i \hat{e}_y$.

Substituindo a Eq. (3.23) nas Eqs. (3.22), tem-se

$$\begin{aligned} -m_i\omega^2\delta x_i &= -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^N(uw_{ij}^{xx}\delta x_j + uw_{ij}^{xy}\delta y_j), \\ -m_i\omega^2\delta y_i &= -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^N(uw_{ij}^{yx}\delta x_j + uw_{ij}^{yy}\delta y_j). \end{aligned}$$

Essas equações podem ainda ser reescritas na seguinte forma:

$$\sum_{j=1}^N[(2m_i\omega^2\delta_{ij} - uw_{ij}^{xx})\delta x_j - uw_{ij}^{xy}\delta y_j] = 0, \quad (3.24a)$$

$$\sum_{j=1}^N[-uw_{ij}^{yx}\delta x_j + (2m_i\omega^2\delta_{ij} - uw_{ij}^{yy})\delta y_j] = 0. \quad (3.24b)$$

As Eqs. (3.24) podem ainda ser escritas na forma matricial. Assim sendo, o problema de encontrar as autofrequências dos modos normais de vibração do sistema é resumido ao cálculo dos autovalores da matriz derivada das Eqs. (3.24), dada na página seguinte, Eq. (3.25). Através dos autovalores da matriz $2N \times 2N$, calcula-se o quadrado das autofrequências dos modos normais de vibração do sistema. Quando todas as frequências dos modos normais são positivas e reais a correspondente configuração das partículas é armazenada, pois é a uma configuração estável do sistema.

Forma matricial do sistema das equações (3.24).

$$\begin{pmatrix}
 (2m_f \omega^2 - uw_{11}^{xx}) - uw_{11}^{xx} & \dots & -uw_{1N}^{xx} & -uw_{11}^{xy} & \dots & -uw_{1N}^{xy} \\
 \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 -uw_{(N-1)1}^{xx} & -uw_{(N-1)2}^{xx} & -uw_{(N-1)N}^{xx} & -uw_{(N-1)1}^{xy} & \dots & -uw_{(N-1)N}^{xy} \\
 -uw_{N1}^{xx} & -uw_{N2}^{xx} & \dots (2m_v \omega^2 - uw_{NN}^{xx}) & -uw_{N1}^{xy} & \dots & -uw_{NN}^{xy} \\
 -uw_{11}^{yx} & -uw_{12}^{yx} & -uw_{1N}^{yx} (2m_f \omega^2 - uw_{11}^{yy}) & -uw_{12}^{yy} & \dots & -uw_{1N}^{yy} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 -uw_{(N-1)1}^{yx} & -uw_{(N-1)2}^{yx} & -uw_{(N-1)N}^{yx} & -uw_{(N-1)1}^{yy} & \dots & -uw_{(N-1)N}^{yy} \\
 -uw_{N1}^{yx} & -uw_{N2}^{yx} & \dots & -uw_{N1}^{yy} & \dots (2m_v \omega^2 - uw_{NN}^{yy}) & \dots
 \end{pmatrix}_{2N \times 2N} \cdot \begin{pmatrix} \delta x_1 \\ \vdots \\ \delta x_{N-1} \\ \delta x_N \\ \delta y_1 \\ \vdots \\ \delta y_{N-1} \\ \delta y_N \end{pmatrix}_{2N \times 1} = 0 \quad (3.25)$$

onde $N = N_f + N_v$, sendo N_f e N_v o número de partículas com carga/massa fixa e partículas com carga/massa variável, respectivamente.

4 Resultados e discussões

4.1 Introdução

Descreve-se neste capítulo os resultados obtidos no sistema introduzido no capítulo anterior [3.4], ou seja, um aglomerado de partículas com diferentes cargas e/ou massas confinadas. Inicialmente, estende-se os resultados apresentados na Ref. [43], onde foi considerado apenas o caso em que $\alpha = 2$ e $\beta = 1$, para diferentes valores da razão entre as cargas (α) e da razão entre as massas (β) dos dois tipos de partículas. Em geral, a estrutura do sistema é fortemente dependente dos parâmetros α e β , e conforme será mostrado, os dois tipos de partículas nem sempre se separam em camadas. De fato, a separação entre as partículas ocorre para valores críticos de α e β . É observado também que o espectro dos modos normais é bastante afetado pelos parâmetros α e β . Deste que os modos normais possam revelar importantes características sobre a ação coletiva das partículas e sobre a estabilidade da configuração do sistema, estes serão analisados em função de α e β . Em seguida, apresenta-se um diagrama de fase em função de α e β , no qual são mostradas regiões onde o sistema de partículas está separado em camadas e o tipo de transição que ocorre no sistema quando há uma separação dos dois tipos de partículas. Por fim, mostra-se que é possível saber quando as diferentes partículas estão numa configuração de camadas através de um parâmetro de ordem que será definido.

4.2 Partículas com diferentes cargas

4.2.1 Estrutura

Inicia-se essa seção com uma discussão sobre as diferentes estruturas do sistema para o caso em que as partículas têm a mesma massa, ($\beta = 1$) e cargas diferentes ($\alpha \neq 1$). Contudo alguns resultados para $\beta \neq 1$ também são comentados. Algumas configurações

do estado fundamental do sistema com N_f partículas com carga fixa e N_v partículas com carga variável são apresentados na Figura 11. Como mostrado, a estrutura na qual as partículas dos dois tipos estão separadas em camadas distintas nem sempre está presente. A separação das partículas depende do parâmetro α e do número de partículas (N_f, N_v). Em geral, há uma clara separação em camadas entre os dois tipos de partículas quando $\alpha \neq 1$. Nesse caso, as partículas com carga de maior valor localizam-se na parte mais externa do aglomerado, enquanto que as partículas com carga de menor valor permanecem nas proximidades do centro do potencial de confinamento. Isto se dá pela interação eletrostática mais intensa entre as cargas de maior valor. Como resultado, essas partículas tendem a se localizar o mais distante possível uma da outra a fim de minimizar a energia total do sistema. No entanto, para determinados valores de α , a competição entre a interação eletrostática entre as cargas e o potencial de confinamento gera configurações extremamente assimétricas e/ou misturadas (Figuras 11(b), (c), (k)). Essa configuração assimétrica pode ser definida no caso em que as partículas com cargas distintas são observadas a uma mesma distância do centro do potencial de confinamento [por exemplo Figura 11 (k)]. Essas configurações foram observadas após várias realizações (~ 4000), do método descrito no Capítulo anterior, para diferentes configurações iniciais e considera-se a configuração do estado fundamental àquela que possui a menor energia.

As diferentes configurações obtidas em função de α , podem ser melhor observadas através do gráfico da distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento (r_i) em função de α . Como exemplo, mostra-se na Figura 12 as curvas r_i x α para aglomerados típicos com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas. Em geral, há dois intervalos de α em que as partículas com cargas distintas são separadas, formando anéis perfeitos. As regiões (I),(II),(III) e (IV), definidas na Figura 12, identificam os intervalos de α nos quais o sistema apresenta uma estrutura na qual as partículas dos dois tipos estão separadas em diferentes camadas de outras configurações do estado fundamental. As linhas pontilhadas verticais representam mudanças da estrutura de camadas para outra estrutura e vice-versa, através de uma transição de fase estrutural de primeira ou segunda ordem que são confirmadas na Figura 13. A linha tracejada vertical na Figura 12(b), indica uma transição da estrutura de camadas para uma configuração diferente sem qualquer transição de fase estrutural, pelo menos de acordo com a definição de transição de fase estrutural que é considerada aqui¹.

Na Figura 12(a) uma perfeita estrutura de camadas é observada nas regiões (I) e (III).

¹Uma transição de fase estrutural de ordem η é aqui identificada por uma descontinuidade de derivada de ordem η da energia em relação ao parâmetro que gera a transição.

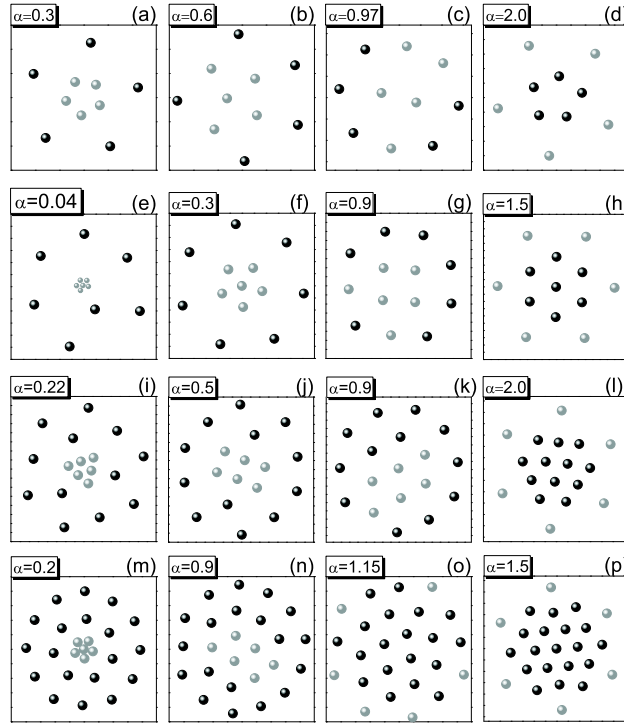


Figura 11: Estado fundamental para aglomerados com diferentes números de partículas e com diferentes valores do parâmetro α . A razão entre as massas é sempre $\beta = 1$. São mostradas as partículas com carga variável (cinzas) e carga fixa (pretas). O número de partículas nas figuras são: (a-d) $N_f = N_v = 5$; (e-h) $N_f = 7, N_v = 6$; (i-l) $N_f = 12, N_v = 6$; e (m-p) $N_f = 19, N_v = 6$.

Note-se que as partículas do mesmo tipo encontram-se a uma mesma distância da origem nas regiões (I) e (III). O mesmo é observado nas regiões (II) e (IV) da Figura 12(b). Para $\alpha \approx 0.3$ na Figura 12(b), essas estruturas começam a se deformar lentamente. Em alguns casos, a estrutura de camadas desaparece no limite $\alpha \rightarrow 0$, como pode ser observado na Figura 12(c) para o caso particular do aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. Nota-se que, nesse limite, as partículas com carga variável (símbolos cinzas) comportam-se efetivamente como uma única partícula.

A variação do parâmetro α gera modificações na configuração do estado fundamental do sistema, como pode claramente ser observado na Figura 12. Tais modificações podem ser abruptas ou contínuas. No primeiro caso, a mudança na configuração é associada a transição de fase estrutural da primeira ordem. Em geral, as transições são classificadas como segue:

- Quando a razão entre as cargas e a razão entre as massas são ambas iguais a um, ou seja $\alpha = \beta = 1$, ocorre uma permutação entre as posições das partículas com cargas diferentes. Partículas de um tipo que estavam localizadas na camada interna

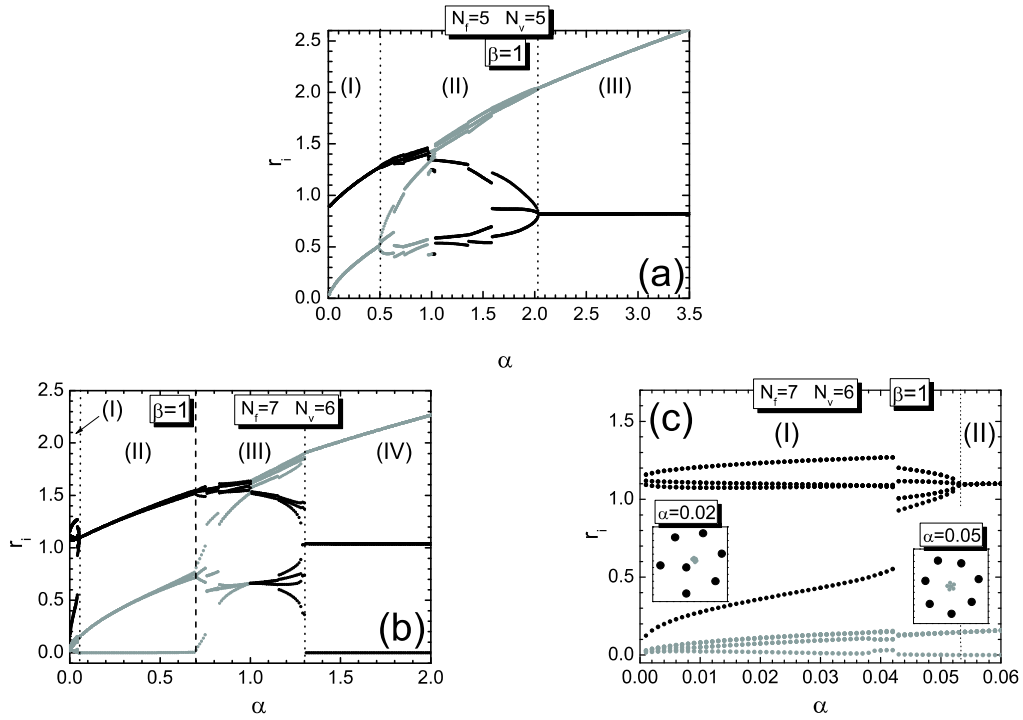


Figura 12: Distância de cada tipo de partícula ao centro do potencial de confinamento, em função de α , para aglomerados com (a) $N_f = N_v = 5$ partículas, e com (b)(c) $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. Os pontos pretos indicam a posição do conjunto de partículas, N_f , enquanto os pontos cinzas representam o outro conjunto de partículas, N_v .

do aglomerado passam para camada externa e as partículas da camada externa passam para interna (ver Figura 12). Essa permutação é caracterizada por uma transição estrutural de primeira ordem, ou seja, ocorre uma descontinuidade na derivada primeira da energia em relação a α . Quando $\beta \neq 1$, nenhuma permutação nas posições das partículas é observada para $\alpha = \beta$;

- Transição de fase estrutural de primeira ordem também ocorre para $\alpha \neq \beta$, quando as posições das partículas muda abruptamente em função de α (ver Figuras 12 e 13);
- A transição da região (I) para a região (II) na Figura 12(a), em que não ocorre nenhuma mudança abrupta nas posições, corresponde a uma transição de fase estrutural de segunda ordem, que é caracterizada por uma descontinuidade na derivada segunda da energia em relação a α [Fig. 13(c)]. A primeira derivada é contínua nesse caso [Fig.13(b)].

Essas características são observadas também para os casos em que $\beta \neq 1$. As transições de fase estruturais anteriormente comentadas podem ser observadas na Figura

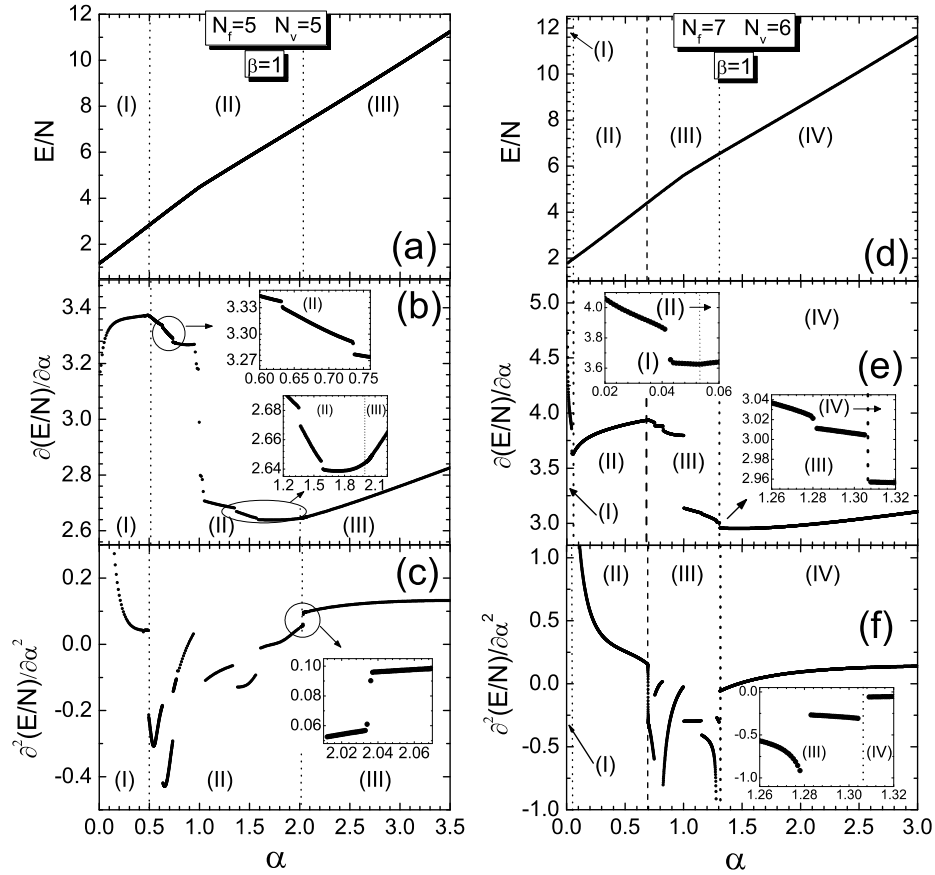


Figura 13: (a),(d) Energia em função de α para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas, respectivamente. A primeira e segunda derivada da energia em função de α são mostradas também nas figuras [(b),(e)] e [(c),(f)], respectivamente. As linhas verticais pontilhadas separam regiões caracterizadas pela configuração de camadas de outras nas quais essas configuração não está presente.

13, para os aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas.

Analisando a Eq. (3.4), é esperado que o valor da energia do sistema diminua ao passo que o valor do parâmetro α decresça. Esse fato pode ser observado nas Figuras 13(a) e 13(d). Analisando a Figura 13 foi observado que no caso onde $N_f = N_v$, a energia para $\alpha < 1$ ($E_{\alpha < 1}$) pode ser obtida a partir da energia para $\alpha > 1$ ($E_{\alpha > 1}$) através do seguinte escalonamento $E_{\alpha > 1} \rightarrow E_{\alpha > 1} \alpha^{4/3}$ e $\alpha \rightarrow 1/\alpha$. No caso de $N_f \neq N_v$, um escalonamento semelhante da energia para $\alpha < 1$ a partir da energia de $\alpha > 1$ é possível através da relação $E_{\alpha > 1} \rightarrow E_{\alpha > 1} \alpha^n$ e $\alpha \rightarrow 1/\alpha$, mas agora o expoente n depende do números de partículas de ambos os tipos (N_f, N_v). Por exemplo, para aglomerados com $N_f = 7, N_v = 6$ partículas encontra-se $n=1.23$.

Ainda em relação à estrutura das configurações, é interessante comentar uma peculiaridade do sistema: quando a razão entre as cargas é aproximadamente igual a razão entre

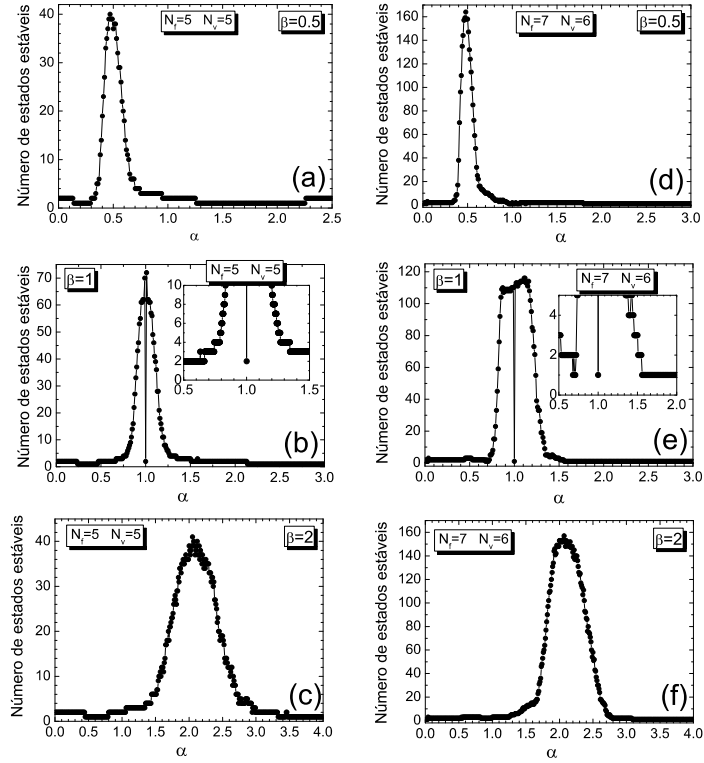


Figura 14: Número de configurações estáveis em função de α para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas e diferentes razões entre as massas dos dois diferentes tipos de partículas ($\beta = 0.5, 1, 2$).

as massas, $\alpha \approx \beta$, um grande número de configurações estáveis é observado. Esse resultado foi obtido através da análise do número de estados estáveis para uma configuração nas diversas realizações (~ 4000). Esse resultado mostra que de alguma forma, as características, elétricas e inerciais das partículas estão acopladas. Quando α é bastante diferente de β , o número de estados estáveis diminui drasticamente. Exemplos desses resultados são mostrados na Figura 14, para os aglomerados anteriormente estudados ($N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$), considerando-se três diferentes valores da razão entre as massas dos dois tipos de partículas, $\beta = 0.5, 1, 2$. No caso específico em que $\beta = 1$ (todas as partículas têm a mesma massa), um grande número de configurações estáveis (caracterizadas por uma mistura dos dois tipos de partículas nas várias camadas) é observado quando $\alpha \approx 1$. No entanto, quando $\alpha = 1$, esse número decresce abruptamente. Isto ocorre porque, no caso $\alpha = \beta = 1$, as partículas são idênticas e a mistura entre os dois tipos de cargas torna-se irrelevante. Ainda considerando $\beta = 1$, o máximo no número de estados estáveis [Figuras 14(b) e 14(e)] é maior no caso em que $N_f \neq N_v$, devido a proximidade da degenerescência nas configurações, que difere apenas por perturbação de duas partículas de tipos diferentes.

Os resultados apresentados na Figura 14 indicam que sistema nos quais $\alpha \approx \beta$ devem apresentar uma temperatura de fusão pequena em relação a aglomerados caracterizados por $\alpha \neq \beta$ (entenda-se valores de α bastante diferentes de β). Essa afirmativa é baseada no fato de que, nos casos em $\alpha \approx \beta$, a curva de potencial é caracterizada por um grande número de mínimos, que em muitos casos, apresentam uma pequena barreira de energia em relação ao estado fundamental. Pequenas variações na temperatura permitem transições para os estados metaestáveis, que é um mecanismo típico da transição sólido-líquido. Além disso, as configurações do estado fundamental, observadas no limite $\alpha \approx \beta$ são caracterizadas por uma distribuição assimétrica das partículas (apesar da simetria circular do potencial de confinamento parabólico), fato que facilita a deformação da estrutura. essa conjectura pode ser confirmada com a simulação do sistema em diferentes temperaturas. Os resultados para esse caso são mostrados na seção 4.5.

Vale enfatizar aqui que o parágrafo anterior é uma conjectura do autor que ainda não foi comprovada, logo é uma extensão natural do trabalho que merece ser investigada.

Conforme comentado anteriormente, vale enfatizar novamente a falta da simetria de rotação da configuração de mínima energia observada em alguns casos [Figuras 11(b), (e), (g) e (k)]. A configuração do estado fundamental, que apresenta a simetria de rotação, é observada apenas em aglomerados confinados com o potencial parabólico quando há um pequeno número de partículas carregadas, onde isso é uma consequência da simetria do potencial de confinamento. Contudo, no presente caso, a correlação de posição entre as partículas com cargas distintas supera a simetria circular do potencial de confinamento, resultando numa configuração assimétrica, observado nos casos onde $\alpha \neq 1$. Conclui-se, portanto, que a presença das partículas com diferentes cargas afeta fortemente as propriedades estruturais do sistema.

4.2.2 Modos Normais

Nesta seção analisam-se as frequências dos modos normais de vibração do sistema descrito pela Eq. (3.4). As frequências dos modos normais foram calculadas através da aproximação harmônica conforme descrito na Seção 3.3. Como um exemplo dos resultados, apresenta-se na Figura 15, as frequências dos modos normais, em função de α , para o aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. As frequências correspondentes ao modo do centro de massa (CM) ($\omega/\omega_0 = \sqrt{2}$), ao modo de respiração (MR) ($\omega/\omega_0 = \sqrt{6}$) e ao modo com frequência $\omega/\omega_0 = 0$ não dependem do parâmetro α , característica, esta observada em todos os casos estudados com $\beta = 1$. Esse comportamento é uma consequência do

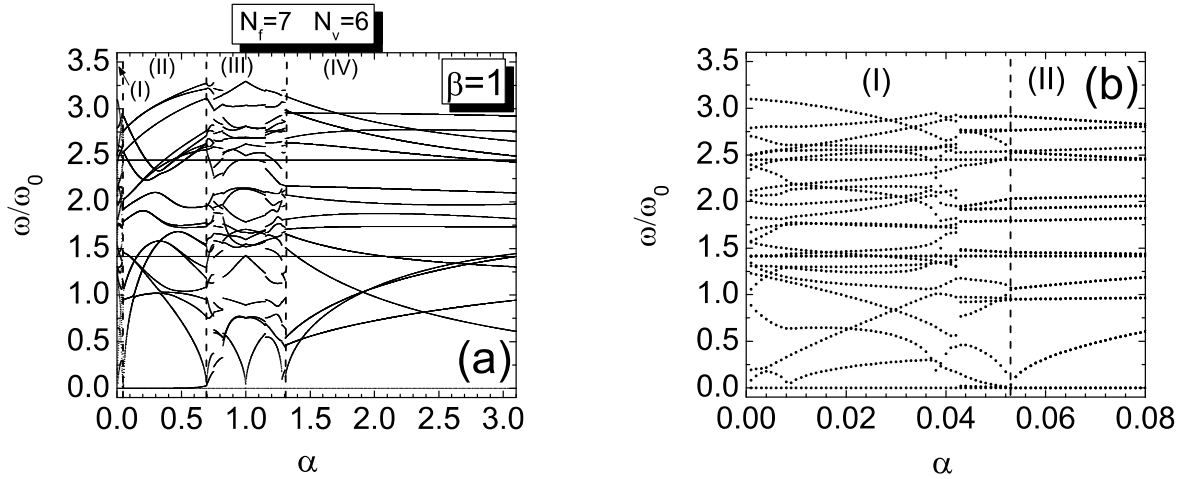


Figura 15: (a) Freqüência dos modos normais em função de α para um aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. (b) Freqüência dos modos normais da região (I) para o mesmo aglomerado.

potencial de confinamento parabólico, que pode ser verificada analiticamente [45]. Contudo, para $\beta \neq 1$, que significa partículas com diferentes massas, ocorre uma quebra de simetria no potencial de confinamento [ver Eq. (3.4)] que leva ao desaparecimento dos modos correspondentes ao CM e MR. Em geral, as freqüências dos modos normais exibem descontinuidades, que estão associadas transições de fase estruturais de primeira ordem (com exceção do caso $\alpha = \beta = 1$). No caso das transições de fase estruturais de segunda ordem, nenhuma descontinuidade nas freqüências dos modos normais é observada, mas a mínima freqüência não nula atinge um valor próximo de zero nos pontos de transição.

As linhas tracejadas verticais na Figura 15 dividem o intervalo em α em quatro regiões [(I),(II), (III), (IV)] associados com o arranjo das partículas no sistema, como anteriormente definido na Figura 12(b). Nas regiões específicas (II)($0.053 \leq \alpha < 0.694$) e (IV)($\alpha \geq 1.309$), partículas com diferentes cargas estão separadas em diferentes camadas. Em cada uma dessas regiões, a freqüência dos modos normais apresenta uma degenerescência, que está associada com a alta simetria da configuração fundamental, maior do que a observada nas regiões (I)($\alpha \leq 0.053$) e (III)($0.694 \leq \alpha < 1.309$). Na região (IV), alguns modos possuem freqüências que tornam-se independentes de α , enquanto outras variam lentamente em função de α .

Analisa-se agora o comportamento da mínima freqüência não nula e o modo normal associado, o qual é relacionado à estabilidade da configuração do estado fundamental. Além disso, o modo normal associado com a mínima freqüência não nula pode oferecer importantes informações sobre a transição sólido-líquido do sistema [8]. Na Figura

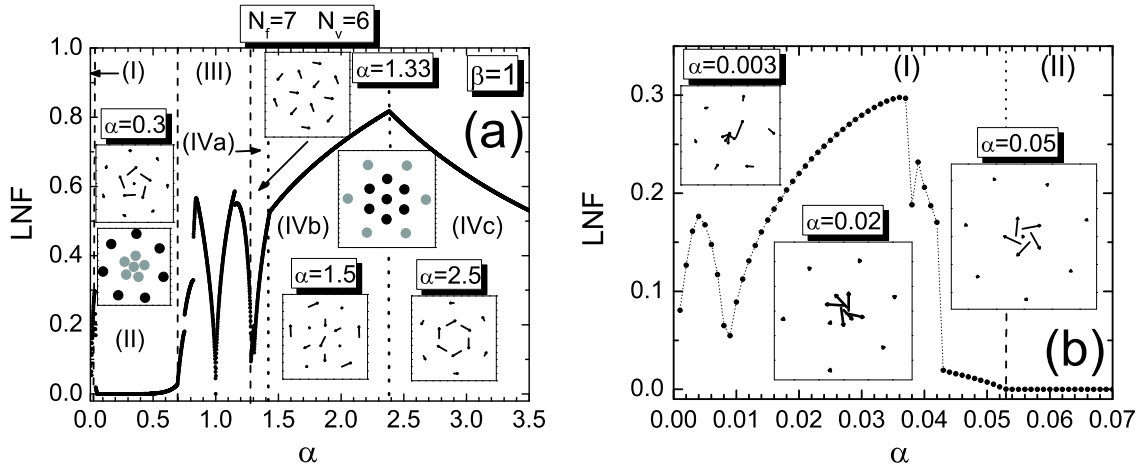


Figura 16: (a) Mínima freqüência não-nula em função de α para um aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas. (b) Mínima freqüência não-nula da região (I) para o mesmo aglomerado.

16 a mínima freqüência não nula do aglomerado com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas, é apresentada em função de α . Esse aglomerado específico é considerado porque apresenta configurações comensuráveis (quando o número de partículas da camada externa pode ser escrito como um múltiplo inteiro do número de partículas da camada interna) ou incomensuráveis, dependendo dos valores de α e β . O comportamento da mínima freqüência não nula será analisado em tais casos. As mesmas regiões da Figura 15 são também apresentadas na Figura 16. Contudo, novas regiões são definidas (distinguidas por linhas pontilhadas), separando diferentes intervalos de α onde a configuração do estado fundamental é a mesma, mas o modo normal de vibração é diferente [regiões (IVa), (IVb), (IVc)]. Na região (II) ($0.053 \leq \alpha < 0.694$), as partículas com carga menor (esferas cinzas) são localizadas na região interna do aglomerado, enquanto as outras partículas (esferas pretas) são localizadas na camada mais externa. O sistema apresenta uma configuração incomensurável (1,5,7) (ou seja, uma partícula com carga variável está localizada no centro do confinamento, cinco partículas com carga variável na primeira camada e sete partículas com carga fixa na camada externa), de modo que o número de partículas na camada externa não é múltiplo inteiro do número de partículas da camada interna. Nas regiões (IV), as partículas também são arranjadas em três camadas, mas agora em uma configuração comensurável (1,6,6), onde todas as partículas com carga de maior valor estão localizadas na camada externa.

Em geral, observa-se que o modo de vibração com menor freqüência não nula LNM (*lowest normal mode*) é fortemente dependente do parâmetro α . Nas regiões (IVa), (IVb) e (IVc), da Figura 16, por exemplo, apesar da mesma configuração, o LNM é alterado de acordo

com o valor de α . No intervalo $1.43 \lesssim \alpha \lesssim 2.38$ [região (IVb)] o LNM corresponde a um movimento do tipo par vórtice-antivórtice, enquanto para $\alpha > 2.38$ [região (IVc)] o LNM corresponde a uma rotação inter-camadas, no qual as várias camadas do sistema giram em sentidos contrários de modo a conservar o momento angular total do sistema [ver Figura 16(a)]. Esse fato mostra que a barreira de potencial para o modo de rotação inter-camadas não é controlada unicamente pela razão do número de partículas nas camadas, como mencionado na Ref. [43], mas também pelo parâmetro α , que controla a barreira de potencial formada pelos dois tipos de partículas. Contudo, quando a rotação inter-camadas é o LNM, a frequência para ativação deste modo é fortemente dependente da razão das partículas nas camadas. Por exemplo, na região (II), onde as partículas estão arranjadas em uma configuração incomensurável, o valor da mínima frequência não nula, correspondente ao modo de rotação inter-camadas, é baixo ($\omega_{min} \sim 10^{-4}$). Por outro lado, na região (IV) as partículas são arranjadas em uma configuração comensurável, de modo que o valor da frequência de excitação para o modo de rotação inter-camadas é alto ($\omega \sim 0.5 - 0.8$), comparado com a frequência do mesmo na região (II). Uma dependência similar da mínima frequência não nula com o número de partículas nas várias camadas diferentes, em um sistema contendo somente um tipo de partícula carregada, foi observada através de simulações numéricas por Schweigert e Peeters [8] e experimentalmente por Melzer [2].

Como mencionado anteriormente, na região (IVc) a rotação inter-camadas corresponde ao LNM. Como pode ser observado nessa região, a mínima frequência não nula diminui com o aumento do valor de α . Esse comportamento é entendido através do efeito de acoplamento entre camadas vizinhas. A interação repulsiva entre partículas com carga variável aumenta com o aumento de α . Conseqüentemente, o raio da camada externa aumenta. Desde que o raio da camada interna permanece constante na região (IV) [ver Figura 12(b)], a distância entre as camadas vizinhas também aumenta. Como conseqüência a intensidade da interação entre as partículas das camadas vizinhas diminui, de modo que a energia necessária para excitar a rotação inter-camadas torna-se menor. Esse comportamento é observado em todos os casos em que as partículas são separadas em camadas distintas e o modo de rotação inter-camadas está presente como o LNM.

A dependência do valor da frequência associada com o modo de rotação inter-camadas com o parâmetro α é outra característica desse sistema. Como comentado anteriormente, desde que a frequência do modo de rotação inter-camadas (como o modo de frequência mínima) desempenha um papel importante na determinação das propriedades da transição sólido-líquido do sistema [8], pode-se concluir que a razão entre as cargas de ambos os

tipos de partículas deverá, também, ser um parâmetro importante para determinar as propriedades da transição sólido-líquido do sistema. Essa é uma direção interessante para futuros estudos no presente sistema.

Na região intermediária (III) ($0.694 \leq \alpha \leq 1.308$), a configuração fundamental é de mistura, ou seja, as partículas com diferentes cargas não estão completamente separadas em diferentes camadas [Figura 11(g)]. Com exceção do caso $\alpha = 1$, os modos normais de vibração não correspondem ao modo de rotação inter-camadas. Em vez disso, todas as partículas oscilam nas vizinhanças de suas posições de equilíbrio como um par vórtice-antivórtice.

4.3 Partículas com diferentes massas

4.3.1 Estrutura

Nesta seção apresentam-se os resultados para o caso em que o sistema, descrito pela Eq. 3.4, consiste de partículas com diferentes massas. O primeiro tipo de partícula tem massa fixa m_f , enquanto o segundo tipo tem massa variável m_v . A razão entre as massas é dada pelo parâmetro $\beta = m_v/m_f$. Aqui, considera-se dois casos para a razão entre as cargas dos dois tipos de partículas, $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$.

Na Figura 17, são mostrados exemplos para a estrutura de aglomerados com diferentes valores do parâmetro β . Para pequenos e grandes valores de β , a configuração do aglomerado é caracterizada por uma separação das partículas em diferentes camadas. Partículas com massas de menor valor localizam-se na camada mais externa. Essa característica é devido ao fato que as partículas com massa de maior valor movimentam-se para a região interna do aglomerado, minimizando assim, a energia de confinamento [ver Eq. (3.4)]. Uma competição entre a repulsão eletrostática das partículas negativas e a intensidade do potencial de confinamento, determina a configuração de mínima energia do sistema. Para determinados valores de β , apesar da simetria circular do potencial de confinamento, observa-se que o sistema pode ser equilibrado em uma configuração sem qualquer simetria de rotação, como mostrado nas Figuras 17[(b), (c), (j) e (k)].

Para observar melhor como a configuração do estado fundamental é influenciada pelo parâmetro β , analisa-se a distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento (r_i) em função de β . As curvas r_i x β para os aglomerados $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 6, N_v = 5$ partículas são mostradas, como exemplo, na Figura 18. Diferentes regiões

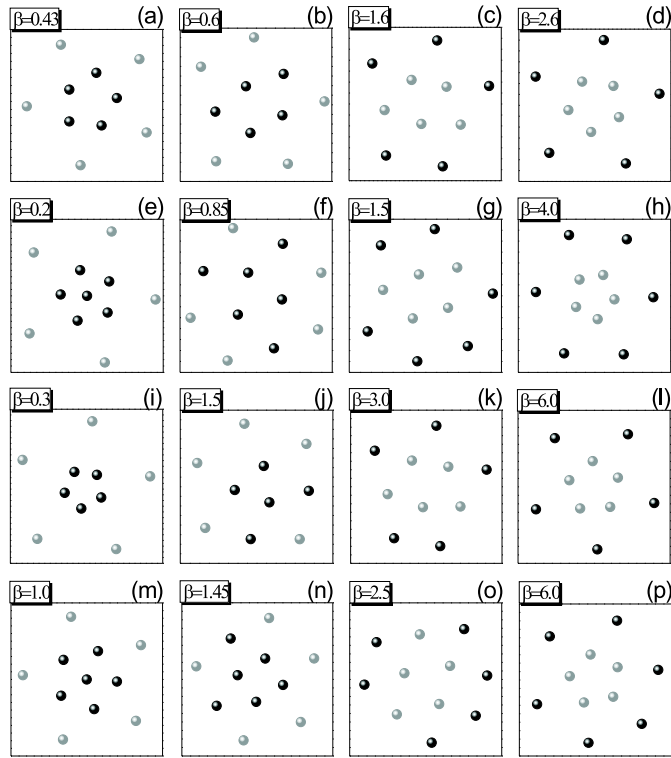


Figura 17: Configuração do estado fundamental para aglomerados com diferentes números de partículas e com diferentes razões entre as massas. As esferas pretas representam as N_f partículas com massa fixa, enquanto as esferas cinzas representam as N_v partículas com massa variável. Nas figuras (a-d) e (i-l) considera-se um aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas, enquanto (e-h) e (m-p) são aglomerados com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. O valor do parâmetro β é indicado nas figuras. Nas figuras (a-h) a razão entre as cargas é $\alpha = 1$, enquanto que em (i-p) considera-se $\alpha = 2$.

[(I), (II) e (III)], associadas com as diferentes configurações do estado fundamental, são mostradas na figura. Para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas [Figura 18(a)], uma configuração na forma de camada circular, semelhante aquelas encontradas nas Figuras 17(a), 17(d), é observada nas regiões (I) e (III), respectivamente. Na região intermediária (II), diferentes configurações são obtidas [ver Figura 17(b), (c)]. a transição da região (I) para a região (II) e da região (II) para a região (III) ocorrem de tal maneira que as posições das partículas mudam continuamente. Isso é uma característica típica de uma transição de fase estrutural de segunda ordem. Esse fato é confirmado nas Figuras 19(a) e 19(c), em que as derivadas de primeira e segunda ordem da energia em relação a β são mostradas. Nota-se que nos pontos de transição entre as regiões (I) e (II) ($\beta = 0.419$) e entre as regiões (II) e (III) ($\beta = 2.386$), a descontinuidade é observada apenas na curva da derivada segunda. A derivada primeira não apresenta descontinuidade nos referidos pontos.

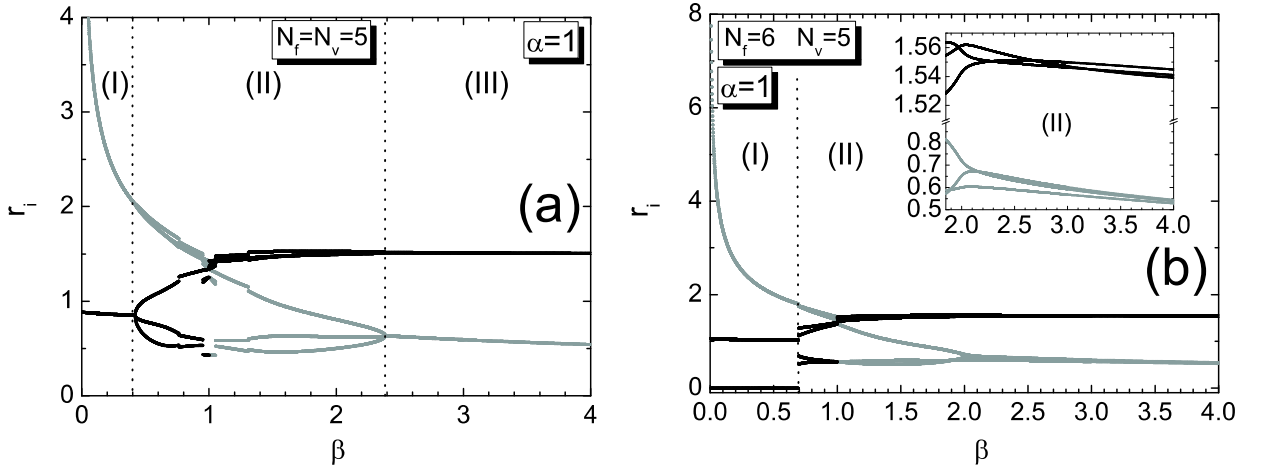


Figura 18: Distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento em função de β para aglomerados com (a) $N_f = N_v = 5$ partículas e com (b) $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. A curva escura indica a posição de um conjunto de partículas (N_f), enquanto a curva cinza representa o outro conjunto de partículas (N_v).

Para alguns valores de β há uma modificação abrupta na configuração do estado fundamental, que é associada a uma transição de fase estrutural de primeira ordem. Quando $\alpha = 1$, a transição de fase estrutural de primeira ordem, que ocorre no ponto $\beta = \alpha$, é caracterizada também por uma inversão nas posições de ambos os tipos de partículas. Para $\alpha \neq 1$, o ponto $\beta = \alpha$ não mais corresponde a inversão nas posições das partículas com diferentes massas. Em geral, partículas com menor valor de massa são localizadas na região interna do aglomerado. Tal comportamento foi observado em aglomerados com valores diferentes de N_f e N_v [Figuras 18(a) e 18(b)].

A energia total em função de β , do aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas, é mostrado na Figura 19(a). É interessante observar, na Figura 19, que, como no caso das partículas com diferentes cargas, a energia com $\beta < 1$ ($E_{\beta < 1}$) pode ser obtida a partir da energia com $\beta > 1$ ($E_{\beta > 1}$), através do escalonamento $E_{\beta > 1} \rightarrow E_{\beta < 1} \beta^{-1/3}$ e $\beta \rightarrow 1/\beta$, que é obtido da análise da Eq. (3.4). Isso é válido apenas para $N_f = N_v$. Quando $N_f \neq N_v$, pode-se encontrar relações semelhantes, a saber, $E_{\beta > 1} \rightarrow E_{\beta < 1} \beta^{-n}$ e $\beta \rightarrow 1/\beta$. No entanto, o expoente n agora depende de N_f e N_v . Por exemplo no caso do aglomerado com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas é encontrado que $n \approx 0.297$, enquanto para o aglomerado com $N_f = 7, N_v = 6$ partículas, obtém-se $n \approx 0.303$.

Para o aglomerado com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas [Figura 18(b)], a estrutura de camadas circulares [Figura 17(e)] é observada apenas na região (I). No intervalo em que $\beta > 1$, nenhuma estrutura de camadas circulares (onde todas as partículas de uma camada

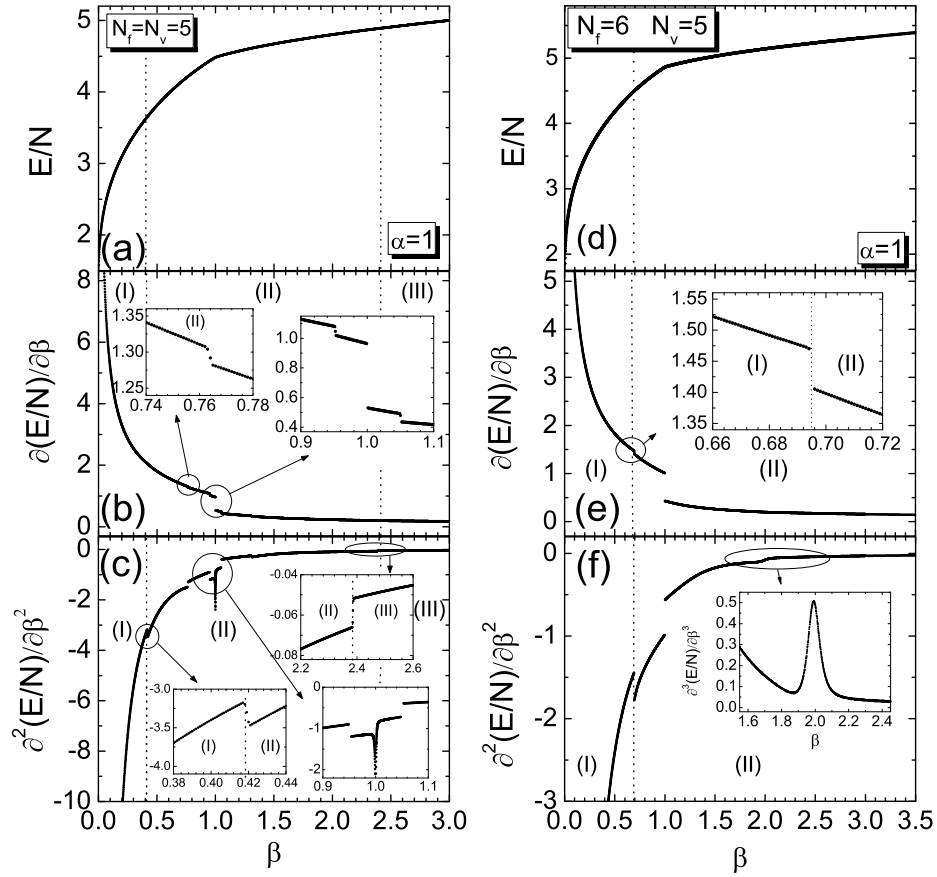


Figura 19: (a) Energia total por partícula em função de β para um aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas. (b)(c) Derivada de primeira e segunda ordem da energia em função de β . (d) Energia total por partícula em relação à β para aglomerados com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. (e)(f) Derivada de primeira e segunda ordem da energia em função de β para o mesmo conjunto de partículas. A derivada de terceira ordem da energia com respeito a β é mostrado no interior de (f).

estão localizadas numa mesma distância do centro do potencial de confinamento), é observada [veja no interior da Figura 18(b)]. Contudo, partículas com massas diferentes ainda estão separadas em camadas distintas. Devido ao número de partículas não comensurável em ambas as camadas, a configuração do estado fundamental com camadas circulares não pode ser obtida, pelo menos para os valores de β considerados. Como mostrado na Figura 18(b), as posições das partículas mudam rapidamente, mas continuamente em relação a β , em $\beta \approx 2.0$. Das Figuras 19(e) e 19(f) está claro que nenhuma transição de fase estrutural é observada no sistema. A forma de *lambda* da derivada $\partial^3 E / \partial \beta^3$ [ver no interior da Figura 19(f)] é semelhante à transição contínua, anteriormente encontrada na referência [46], no caso de um sistema clássico de cargas acopladas.

A transição da região (I) para a região (II) é caracterizada por uma mudança abrupta das posições das partículas. Tal modificação corresponde a transição de fase estrutural de

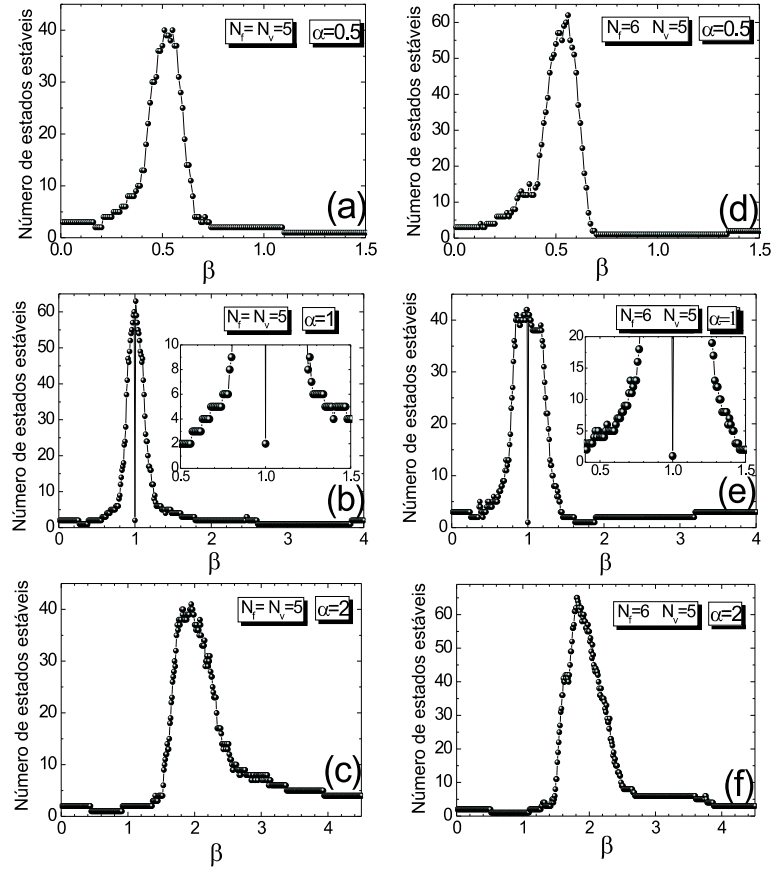


Figura 20: Número de configurações estáveis em função de β para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 6, N_v = 5$ partícula e diferentes razões entre as cargas dos dois diferentes tipos de partícula ($\alpha = 0.5, 1, 2$).

primeira ordem [Figura. 19(e)]. Esse comportamento é diferente do caso $N_f = N_v = 5$ partículas, onde a transição de fase estrutural de segunda ordem é observada quando o sistema muda de uma configuração de camadas circulares para uma outra sem camadas [Figura. 19(c)]. A transição de fase estrutural de segunda ordem não foi observada no sistema com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. Dos resultados até aqui apresentados, conclui-se que a transição de fase estrutural depende dos parâmetros α e β e do número de partículas dos dois tipos, N_f e N_v .

Como mostrado no caso anterior, partículas com diferentes cargas, um máximo no número de configurações estáveis é também observado em função de β . Mais especificamente, o máximo no número de configurações estáveis é observado quando a razão entre as massas é aproximadamente igual a razão entre as cargas ($\alpha \approx \beta$). No caso particular $\alpha = 1$, todas as partículas têm a mesma carga e a mesma massa, e o número de estados estáveis é o mesmo do número de estados estáveis do sistema com $(N_f + N_v)$ partículas idênticas. Na Figura 20, apresenta-se a curva do número de estados estáveis em função de

β considerando-se os aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. Nota-se que nos casos em que as partículas também têm cargas diferentes ($\alpha \neq 1$), o número máximo no número de configurações estáveis é levemente deslocado do valor $\beta = \alpha$ [ver Figuras 20(a)(c)(d)(f)].

4.3.2 Modos normais

Na Figura 21, são mostradas as frequências dos modos normais de vibração em função de β , para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 6, N_v = 5$ partículas. Esses aglomerados são interessante porque apresentam configurações comensuráveis e incomensuráveis, para os diferentes valores de α e β . As mesmas regiões definidas na Figura 18 são novamente consideradas. Em geral observa-se que, a frequência aumenta com β . Com exceção do modo correspondente a rotação do aglomerado inteiro em volta do eixo z ($\omega = 0$), a frequência de todos os outros modos depende de β . Contudo, para grandes valores de β , alguns modos têm frequências que tornam-se independente de β . Os modos correspondentes ao centro de massa e de respiração, que estão presentes no sistema com confinamento parabólico com apenas um tipo de partícula, não são observados no presente sistema, desde que o potencial de confinamento não é o mesmo para os dois tipos de partículas. Tal quebra de simetria do potencial de confinamento destrói os modos do centro de massa e respiração.

No intervalo de β correspondente a configuração de camadas mais simétrica [região (I) e (III) para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas e região (I) para aglomerados com $N_f = 6, N_v = 5$ partículas], a maioria das frequências dos modos normais são degeneradas.

A frequência dos modos normais são afetadas por uma transição de fase estrutural, logo pode-se usar isso para identificar tal transição. Características gerais semelhantes àquelas para transição de fase de primeira e segunda ordem no caso com cargas diferentes são também observadas no caso de com partículas com massas diferentes.

Como regra geral, observa-se que os modos normais são principalmente determinados pela razão entre as massas e pelo número de partículas N_f e N_v . Esse comportamento pode ser confirmado em aglomerados com diferentes números de partículas e com diferentes razões entre as cargas dos dois tipos de partículas (α). Tal comportamento pode ser claramente confirmado pela análise da mínima frequência não nula (LNF).

A LNF fornece informações sobre a estabilidade e da deformabilidade da configuração

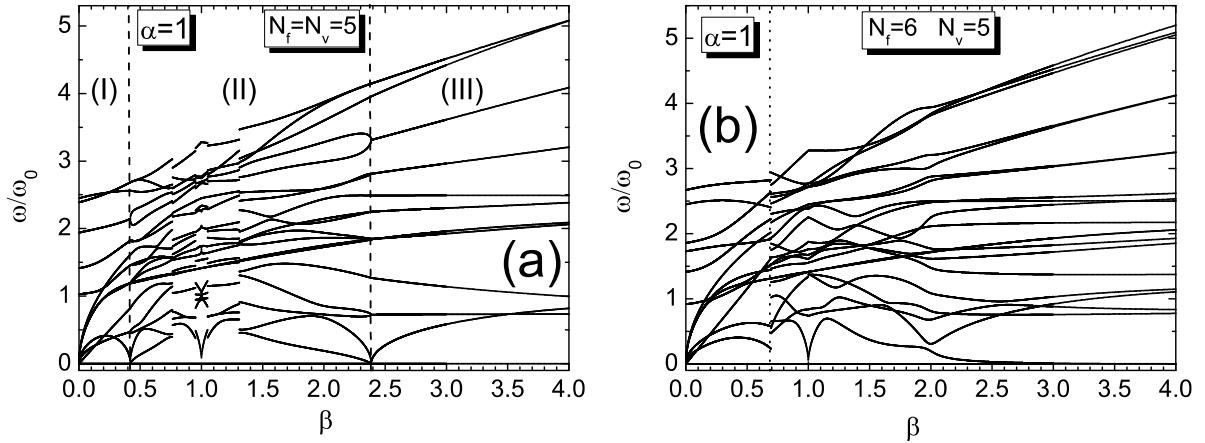


Figura 21: (a) Freqüência dos modos normais em função de β correspondente a configuração fundamental do aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas e (b) $N_f = 6$ e $N_v = 5$ partículas.

do aglomerado. Como exemplo dos resultados obtidos, mostra-se na Figura 22 a LNF em função de β , para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas. As mesmas regiões definidas na Figura 18(a) são consideradas novamente (regiões separadas por uma linha vertical tracejada). Contudo, a fim de melhor entender os resultados, outras regiões foram definidas (distinguidas por linhas verticais pontilhadas). Essas sub-regiões separam os casos em que o aglomerado apresenta a mesma configuração do estado fundamental, mas modos normais distintos.

Na região (Ia) ($\beta \leq 0.136$), Figura 22, as partículas são excitadas para um modo de rotação inter-camadas (ISR) (*intershell rotation*) [Figuras 23(a)]. Aumentando o parâmetro β , a configuração do estado fundamental permanece a mesma, mas o modo normal de vibração é alterado na região (Ib) ($0.136 < \beta \leq 0.284$) [Figuras 23(b)]. Aumentando ainda mais o parâmetro β , o sistema é levado para a região (Ic) ($0.284 < \beta \leq 0.419$), com um modo normal novamente diferente [Figura 23(c)]. No entanto, vale relembrar que as partículas ainda estão arranjadas na mesma configuração do estado fundamental [Figura 17(a)]. Esse resultado mostra que o modo associado a LNF é principalmente determinada pelo parâmetro β .

Na região (II) ($0.419 < \beta \leq 2.385$) diferentes configurações do estado fundamental com mínimos de energia [Figura 20(a)] e diferentes modos normais de vibração são encontrados para o aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas. Na Figura 23(d), o caso particular $\beta = 1$ apresenta, como deve ser, o mesmo modo normal observado em um aglomerado com $N = 10$ partículas.

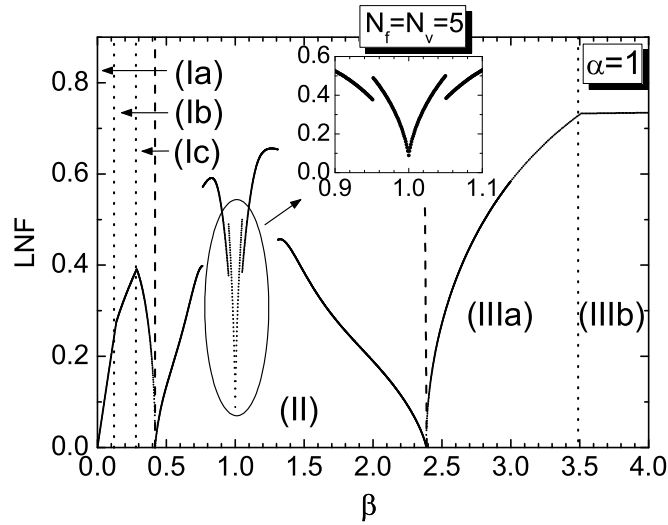


Figura 22: (a) Menor frequência dos modos normais diferente de zero em função de β para aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas. Região (I) e (III) separadas no intervalo β em que o sistema exibe a configuração de camadas. Na região (II) configurações diferentes são observadas. As sub-regiões (Ia), (Ib), (Ic), (IIIa) e (IIIb) separadas em intervalos de β em que a mesma configuração do estado fundamental é observada, mas com modos normais diferentes.

Em $\beta = 2.385$, ocorre uma transição de fase estrutural de segunda ordem para a região (IIIa) ($2.385 < \beta \leq 3.5$), onde o sistema novamente encontra-se numa configuração de camadas circulares [Figura 17(d)]. O modo normal associado é apresentado na Figura 23(e). Para $3.5 < \beta \leq 7.32$ o sistema alcança a região (IIIb) com a mesma configuração do estado fundamental, como observado na região (IIIa), mas com um modo normal distinto, que corresponde àquele mostrado na Figura 23(f). Finalmente, quando $\beta > 7.32$ (caso não mostrado na Figura 22) o sistema ainda permanece em uma configuração de camadas circulares, mas o modo normal associado à LNF é alterado para o modo de rotação inter-camadas.

Como no caso de cargas variáveis e para todos os casos analisados com massa variáveis, observa-se que quando as partículas estão arranjadas em uma configuração comensurável, o modo de rotação inter-camadas é três ou quatro ordens de magnitude maior que a frequência do mesmo modo em uma configuração não-comensurável. Contudo, nota-se que o potencial efetivo que determina a frequência do modo de rotação inter-camadas pode ser sintonizado através dos parâmetros α e β , e conseqüentemente, a estabilidade da configuração do estado fundamental é sintonizada da mesma forma.

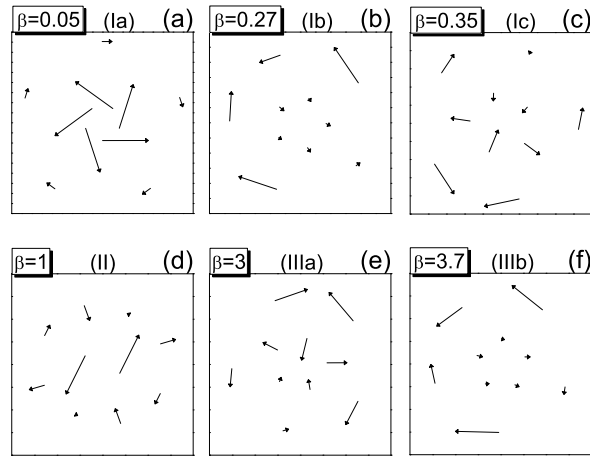


Figura 23: Modos normais para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas e $\alpha = 1$. Em cada figura a sub-região definida na Figura 22 é indicada.

4.4 Diagrama de fase

A partir dos resultados obtidos anteriormente, observa-se que a estrutura do sistema é fortemente dependente da razão entre as cargas (α) e/ou da razão entre as massas dos dois tipos de partículas. Para valores específicos de α e/ou β , os diferentes tipos de partículas podem ser separados em camadas distintas.

O grau de mistura das duas espécies de partículas pode ser resumido em um diagrama de fase (α, β). Isso é mostrado nas Figuras 24 e 25 para os aglomerados discutidos anteriormente com $N_f = N_v = 5$ e $N_f = 7, N_v = 6$ partículas, respectivamente. O diagrama de fase é dividido em diferentes regiões [(I)(II)(III)(IV)] por linhas (e símbolos) que são aqui definidas como linhas de transição, onde ocorre uma transição de fase estrutural entre o arranjo de camadas circulares e outra configuração diferente do estado fundamental. Os símbolos correspondem à ordem da transição, sendo de primeira (quadrados) ou segunda (estrelas) ordem. Em geral, observa-se que, em uma mesma linha de transição, a ordem da transição de fase pode variar. Isso significa que o caráter, ou a natureza, da transição de fase também depende dos parâmetros α e β .

Na Figura 24(a), o diagrama de fase para o aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas é mostrado. Nas regiões (I) e (III), os diferentes tipos de partículas são separadas em camadas distintas, como pode ser observado nas ilustrações também apresentadas na Figura 24. Na região (II), uma mistura dos dois tipos de partículas é observada, ou seja, a estrutura de camadas não mais está presente. Uma configuração de mistura significa que ambos os tipos de partículas podem ser encontrados numa mesma distância do centro

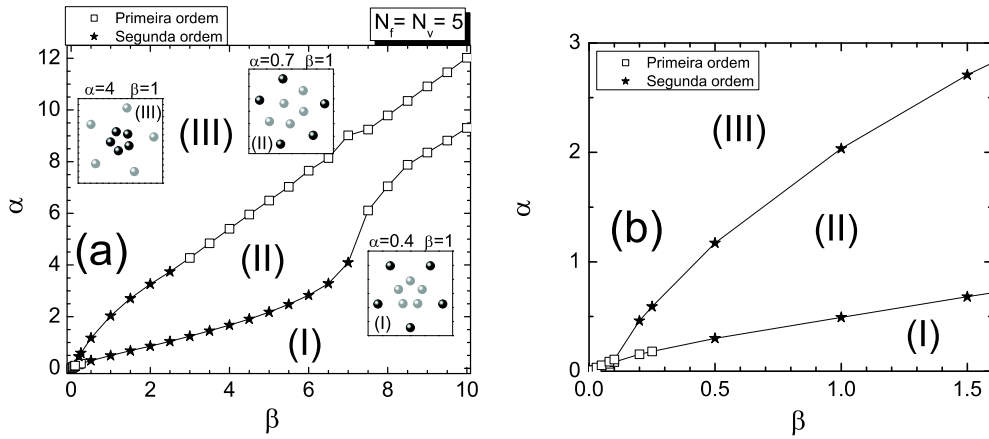


Figura 24: Diagrama de fase: razão entre as cargas em função da razão entre as massas para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas. Uma amplificação da região próxima a $\alpha = \beta = 0$ é mostrada em (b). No interior de (a) é mostrada a configuração do estado fundamental para alguns pontos (α, β) .

do potencial de confinamento. Em outras palavras, pode-se encontrar ambos tipos de partículas em uma dada camada [ver Figura 11(c)]. Para o aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas, a mudança na configuração de camadas para uma outra e vice-versa [transição da região (I) para região (II) e da região (II) para região (III)], ocorre sempre através de uma transição de fase estrutural e essa transição depende dos parâmetros α e β .

Para o aglomerado com $N_f = 7, N_v = 6$ partículas, a estrutura de camadas circulares é observada nas regiões (II) e (IV) [Figuras 25(a)]. Como no caso anterior, uma transição de fase estrutural de primeira ou segunda ordem pode ser observada em uma mesma linha de transição. Mudanças entre as regiões (I) e (II) e entre (III) e (IV) são sempre caracterizadas por uma transição de fase estrutural. No entanto, a transição entre a configuração de camadas circulares [região (II)] para um outro arranjo das partículas [região(III)], nem sempre é caracterizada por uma transição de fase estrutural. Como pode ser observado na Figura 25(a), a linha de transição que caracteriza a mudança da região (II) para a região (III) não está presente para $\beta > 0.7$. Tal comportamento significa que o sistema passa de uma estrutura de camadas para outra diferente configuração de mínima energia sem descontinuidade nas derivadas (primeira ou segunda) da energia em relação a α ou β . O ponto $(\alpha, \beta) = (0.558, 0.7)$ é um ponto crítico onde se tem uma transição de segunda ordem. Na Figura 26(a-d), são apresentados exemplos das configurações nas regiões (II) e (III), nos pontos A(0.5, 0.3), B(0.5, 0.6), C(0.8, 0.43) e D(0.8, 0.75).

Detalhes de como a distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento muda em função de α , nas regiões (II) e (III), são apresentados nas Figuras 26(e) e 26(f),

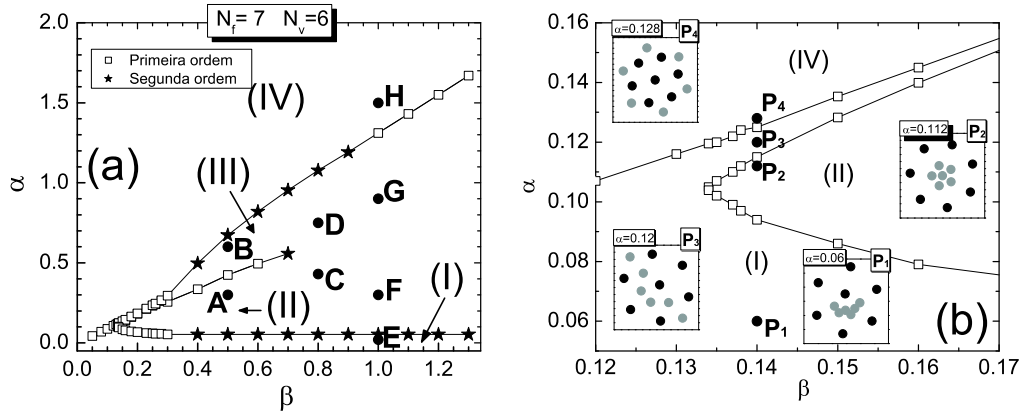


Figura 25: (a) Semelhante à Figura 24, mas agora para o aglomerado com $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas. Os pontos correspondentes A,B,C e D, correspondem à uma configuração mostrada na Figura 26(a), (b), (c) e (d), respectivamente, enquanto que os pontos E,F,G e H correspondem as configurações apresentadas nas Figuras 11(e), (f), (g) e (h), respectivamente. (b) Amplificação do diagrama de fase (a) próximo ao ponto $\beta \approx 0.15$. Configuração do estado fundamental são mostrados no interior da figura para os pontos P_1 , P_2 , P_3 e P_4 .

para os casos $\beta = 0.5$ e $\beta = 0.8$, respectivamente. No caso de $\beta = 0.5$ [Figura 26(e)], a transição $A \rightarrow B$ é caracterizada por uma mudança abrupta na posições das partículas em $(\beta, \alpha) \approx (0.5, 0.42)$. Tal comportamento é uma característica típica de uma transição de fase estrutural de primeira ordem. No caso $\beta = 0.8$ [Figura 26(f)], a transição $C \rightarrow D$ ocorre sem mudança abrupta nas posições das partículas, quando o sistema sai da configuração de camadas circulares ($\beta = 0.606$). Como na Figura 12(b), as linhas tracejadas na Figura 26(f) indicam uma mudança na configuração do estado fundamental, da configuração de camadas circulares para uma outra configuração, sem descontinuidade das derivadas na energia em relação a α . Mais exemplos da configuração do estado fundamental nas regiões do diagrama de fase (α, β) , para aglomerados com $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas, são mostradas nas Figuras 11(e), (f), (g), (h) e tais configurações correspondem aos pontos E, F, G e H na Figura 25(a).

Os resultados apresentados na Figura 24(a) e na Figura 25(a) também indicam que para pequenos valores de α e β , as linhas de transição se unem quando $\alpha \rightarrow 0$ e $\beta \rightarrow 0$. De fato esse é o caso apenas para o aglomerado com $N_f = N_v = 5$ partículas, como pode ser observado na Figura 24(b). O aglomerado com $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas é mais complexo, já que ele apresenta mais que duas linhas de transição. No limite $\alpha \rightarrow 0$ e $\beta \rightarrow 0$, as linhas de transição, que separam as regiões (I)/(II) e regiões (II)/(III), se unem em $(\beta, \alpha) \approx (0.13, 0.1)$ [Figuras 25(b)]. Para pequenos valores de β existe apenas uma linha de transição que separa duas regiões (I) e (IV). Na região (IV) a configuração

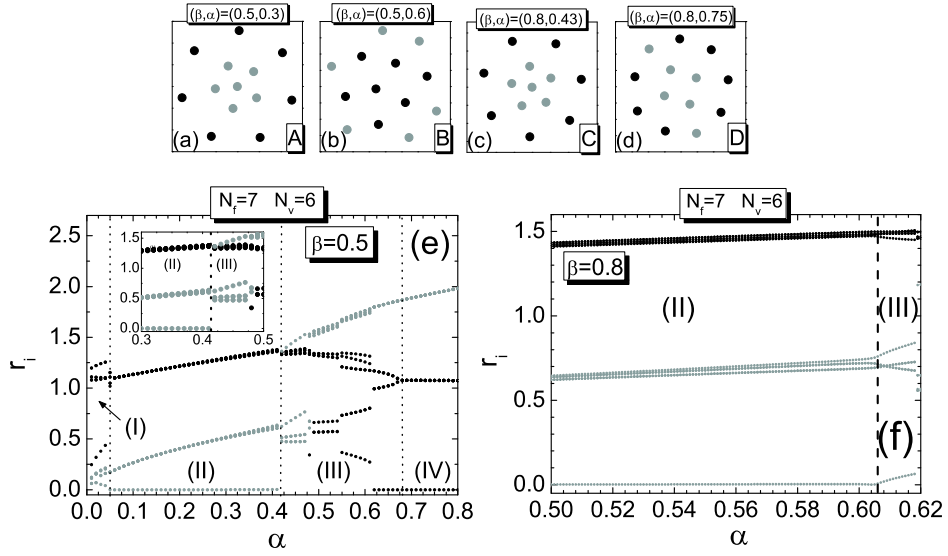


Figura 26: Configuração do estado fundamental para o aglomerado com $N_f = 7$, $N_v = 6$ partículas nos pontos (a) A, (b) B, (c) C e (d) D mostrados na Figura 25. Distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento em função de α são mostrados nas figuras (e) e (f) para os casos $\beta = 0.5$ e $\beta = 0.8$, respectivamente.

do estado fundamental é caracterizada pela presença da estrutura de camadas, enquanto na região (I) um arranjo diferente de partículas é observado [Figuras 11(e) ponto E da Figura 24(a)].

É importante comentar que as regiões (I) e (III) são de fato a mesma. Como pode ser visto na Figura 25(b), existe um canal estreito (ponto P_3) que conecta ambas as regiões (I) e (III). Assim o sistema apresenta um interessante efeito re-entrante em relação ao parâmetro α . Por exemplo, as configurações do estado fundamental mostradas na Figura 25(b) correspondem aos pontos P_1, P_2, P_3 e P_4 na mesma figura. Na região (I) as partículas são arranjadas em uma configuração assimétrica e misturada (ponto P_1). Um aumento no parâmetro α leva o sistema para uma configuração de camadas (ponto P_2). Aumentando mais o valor de α , essa configuração é destruída e deixa as partículas novamente em uma configuração assimétrica (ponto P_3). Finalmente, na região (IV), a configuração de camadas é novamente restaurada (ponto P_4) e nenhuma mudança no arranjo das partículas, para maiores valores de α , é observada. Como mostrado, várias configurações podem ser obtidas em função do parâmetro α e β . Diferente da estrutura de camadas, observa-se para alguns valores de (α, β) as partículas podem ser arranjadas em uma configuração assimétrica e mista. É possível quantificar as diferentes configurações de mínima energia através da definição de um novo parâmetro simples.

Como mostrado por Landau e Lifshitz [47], é possível descrever quantitativamente a

mudança na estrutura de um aglomerado de partículas, quando este passa através de um ponto de transição de fase, por um *parâmetro de ordem*.

Uma vez que o sistema apresentado é sempre considerado na temperatura zero, apenas a fase sólida é observada. Contudo, pode-se fazer aqui uma analogia com o parâmetro de ordem definido por Landau. O parâmetro de ordem (η) definido aqui tem valor zero quando os diferentes tipos de partículas no aglomerado estão separados em camadas distintas, como no caso de uma configuração de camadas circulares [Figuras 17(a),(f)], e recebe um valor diferente de zero quando esse arranjo é destruído. Assim, no caso de uma configuração de mistura, o parâmetro de ordem será diferente de zero. Como já comentado, uma configuração de mistura é considerada quando ambos os tipos de partículas, por exemplo, estão localizadas numa mesma camada [ver Figuras 17(c), (k) e Figuras 17(f), (j)].

Antes de definir o parâmetro de ordem, será introduzida outra quantidade. O centro de massa de um conjunto de partícula é definido como

$$\mathbf{R}_{cm}^j = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{r}_i^j, \quad (4.1)$$

onde $j = f, v$ se refere aos conjuntos de partículas com carga/massa fixa e com carga/massa variável, respectivamente. N_j é o número de partículas com carga/massa fixa ou variável. Quando partículas de diferentes tipos são separadas em camadas distintas, nota-se que os aglomerados, com cada tipo de partícula, são arranjados em uma configuração simétrica em relação ao centro do potencial de confinamento (ver Figura 11). Nesse caso, o centro de massa de cada conjunto de partícula é zero. Por outro lado, quando há uma mistura de ambos os tipos de partículas [ver Figuras 14(g), (n)], os aglomerados de cada tipo de partícula estão arranjados em configurações assimétricas. Nesse caso, o centro de massa de cada conjunto de partícula deverá ser diferente de zero. Agora, pode-se definir um parâmetro de ordem que dá informação se o estado ordenado do aglomerado corresponde a uma configuração de mistura ou não. Tal o parâmetro de ordem é a soma da distância da posição do centro de massa ao centro do potencial de confinamento de cada conjunto de partícula, isto é

$$\eta = R_{cm}^f + R_{cm}^v. \quad (4.2)$$

Quando o aglomerado tem uma configuração de camadas perfeitas (onde as camadas são formadas por cada tipo de partícula), o centro de massa para cada conjunto de partícula é claramente zero e conseqüentemente, o parâmetro de ordem.

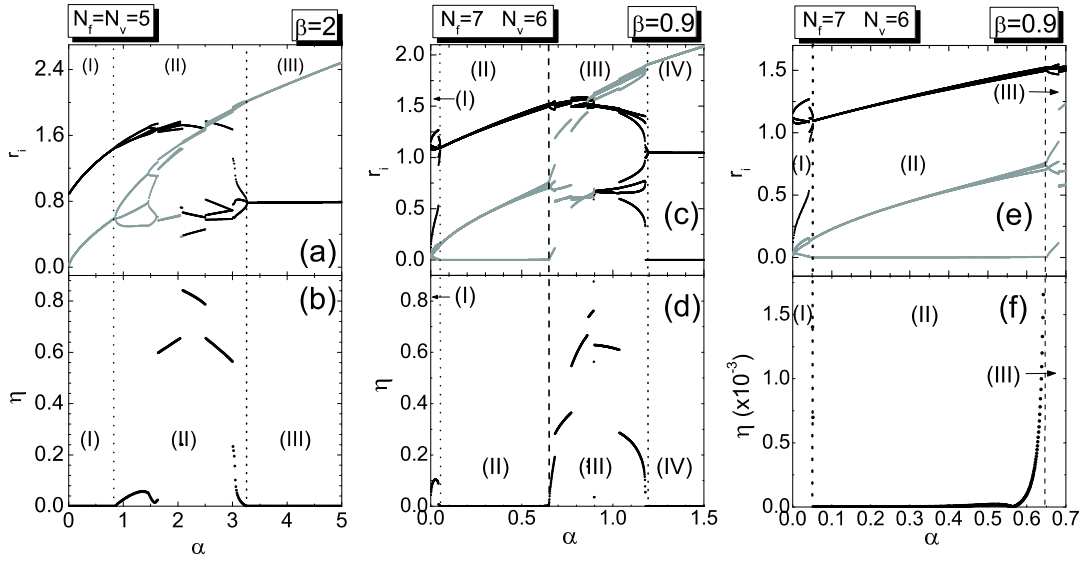


Figura 27: (a) Distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento e (b) parâmetro de ordem definido na Eq. 4.2 em função de α para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas ($\beta = 2$), e da mesma maneira em (c) e (d) para $N_f = 7, N_v = 6$ partículas ($\beta = 0.9$). Uma ampliação desse último caso são mostrados em (e) e (f).

Como exemplo, mostra-se na Figura 27 o parâmetro de ordem em função de α para aglomerados com diferentes números de partículas. Mais especificamente, são mostradas nas Figuras 27(a) e 27(b), a distância de cada partícula ao centro do potencial de confinamento (r_i) e o parâmetro de ordem (η) para aglomerados com $N_f = N_v = 5$ partículas ($\beta = 2.0$). Observa-se que no intervalo de α correspondente a configuração de camadas circulares [região (I) e (III)], o parâmetro de ordem é zero. Para outras configurações, um valor diferente de zero é obtido para η . A distância de cada partícula ao centro de confinamento e o parâmetro de ordem para o aglomerado com $N_f = 7, N_v = 6$ partículas, são mostrados nas Figuras 27(c) e 27(d), respectivamente. Uma configuração de camadas circulares é observada apenas em parte da região (II) e na região (IV). Quando esse é o caso, o parâmetro de ordem é zero. A estrutura de camadas circulares na região (II) começa a ser destruída em $\alpha \gtrsim 0.4$. Observa-se que as distâncias das partículas ao centro do potencial de confinamento começam ser levemente diferentes umas das outras [Figuras 27(e)]. A configuração do estado fundamental muda continuamente e nenhuma transição de fase estrutural é observada [ver Figura 25(a)]. Como consequência, para $\alpha \gtrsim 0.4$ o parâmetro de ordem também começa a ter valor diferente de zero [Figura 27(f)].

O parâmetro de ordem também é sensível à transição de fase estrutural, especialmente no caso da transição de primeira ordem. Nesse caso, ocorre uma descontinuidade no parâmetro de ordem, como esperado. Para transição de fase de segunda ordem, o

parâmetro de ordem não exibe descontinuidade, mas uma mudança abrupta no seu comportamento [ver o comportamento de η em torno de $\alpha \approx 0.8$ e $\alpha \approx 3.2$ na Figura 27(b)].

4.5 Transição sólido-líquido - melting

Apresenta-se nesta Seção, resultados preliminares do comportamento das partículas carregadas com diferentes massas e/ou cargas com a temperatura do sistema.

Estudos recentes em sistemas 2D com pequeno número de partículas mostram que não há temperatura definida para a transição sólido-líquido, mas uma região onde ocorre a transição. Essa região é definida através do critério de Lindermann [48]. Esse critério define um parâmetro universal (Y), para a transição sólido-líquido de cristais bidimensionais, que tem o valor correspondente ao deslocamento entre duas partículas vizinhas de um sistema finito. Observou-se que esse valor concorda com $Y = 0.1$, ou 0.05 para cada coordenada, através de cálculos de fónons anarmônicos [49] e simulações de dinâmica-molecular [50].

Schweigert and Peeters [8] introduziram o cálculo do desvio radial para caracterizar o comportamento de sistemas bidimensionais na transição sólido-líquido, através do cálculo das oscilações das partículas. O desvio radial é dado por

$$\langle u_R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2) / a^2 \quad (4.3)$$

onde $a = 2R/\sqrt{N}$ é a distância média entre as partículas e R é o raio do sistema. Nesse caso $\langle u_R^2 \rangle$ leva-se em conta contribuições das coordenadas (x e y), e portanto, a transição sólido líquido é caracterizada por $\langle u_R^2 \rangle = 0.1$.

Recentemente, vários trabalhos experimentais vem sendo desenvolvidos utilizando o critério de Lindermann para estipular a região da transição sólido-líquido de um sistema. Coupier *et al.* [9], por exemplo, analisaram experimentalmente ilhas de Wigner que são constituídas por esferas de aço (de diâmetro $d=0.8$ mm e peso de $m = 2.15$ mg) localizadas num capacitor plano horizontal. Quando um campo elétrico perpendicular é aplicado ao plano do capacitor, as partículas formam camadas concêntricas conforme visto na Figura 28. Na Figura 28(d), observa-se a dependência do desvio médio radial para diferentes quantidades de esferas de aço. Vale lembrar que o critério de Lindermann nessa propriedade é $\langle u_r^2 \rangle = 0.05$ por se tratar apenas do desvio médio quadrático de uma das coordenadas (considera-se o sistema de coordenadas polares), ou seja, coordenada radial². Além disso, observou-se que o sistema sofre a fusão em dois passos, ou seja, quando a temperatura atinge um valor crítico T_o , o sistema perde a ordem rotacional [Figura 28(b)]

²Para o deslocamento total utiliza-se $\langle u_R^2 \rangle$

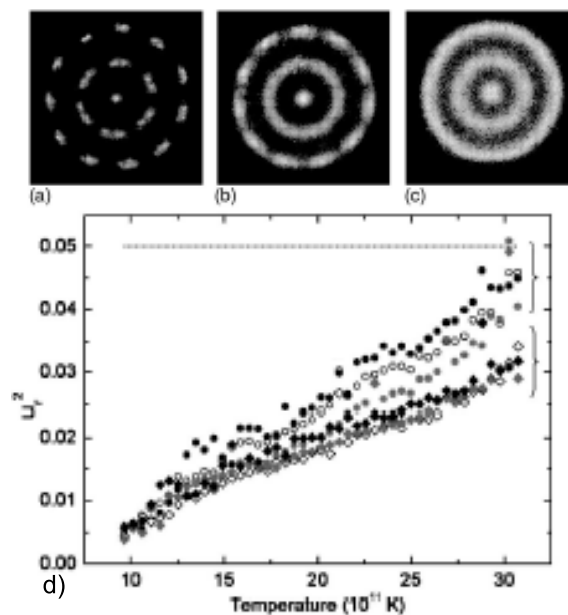


Figura 28: Configuração para (a) $T < T_o$, (b) $T_o < T < T_R$, e (c) $T \sim T_R$, onde T_o é a temperatura em que a ordem orientacional entre as camadas é perdida e T_R a perda da ordem radial. (d) Média do desvio radial sobre três configurações em função da temperatura. A linha horizontal pontilhada refere-se ao valor do critério de Lindermann para o desvio quadrático das coordenadas das partículas. Figuras retiradas da referência [9]

e quando o sistema atinge a temperatura $T_R > T_o$, ocorre uma difusão das partículas entre as camadas [Figura 28 (c)].

Bubeck *et al.* [10] observaram também que a transição sólido-líquido não ocorre diretamente. Para isso os autores consideraram um experimento constituído de esferas coloidais superparamagnéticas confinadas geometricamente e sobre o efeito de um campo magnético externo B , [Figura 29(a)]. Quando um campo magnético forte é aplicado nesse sistema, observou-se o surgimento de uma estrutura de camadas que exibem uma ordem radial e angular [Figura 29(c)]. Diminuindo B , observou-se a perda de ordem angular das camadas adjacentes, mas essa ordem angular foi restaurada antes do sistema se desordenar completamente. Esse fenômeno é chamado de efeito re-entrante e pode ser observado através das trajetórias das partículas nas Figuras 29(d), (e), (f).

Nesta seção analisa-se a transição sólido-líquido no caso particular do sistema com $N_f = 7$ e $N_v = 6$ partículas, onde as massas das partículas são iguais a um ($\beta = 1$). Analisa-se o comportamento desse sistema em função de α e da temperatura, utilizando a definição de desvio radial dada no início dessa seção [Eq. (4.3)].

Na Figura 30, mostra-se o desvio radial [Eq. (4.3)] em função da temperatura para

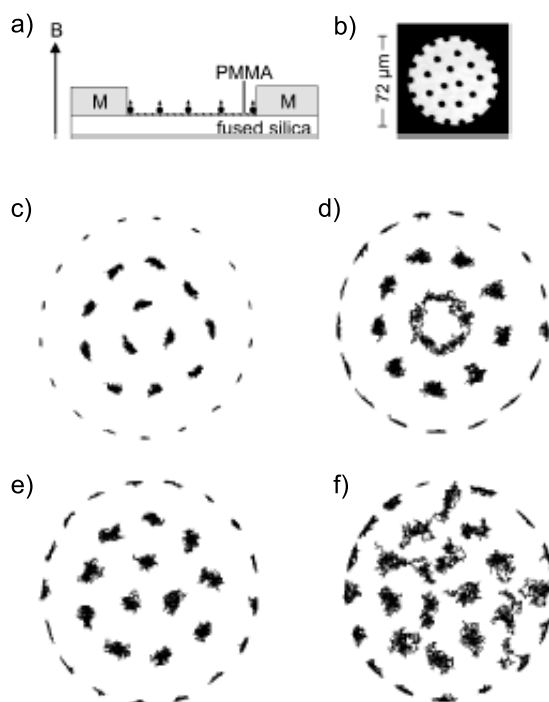


Figura 29: (a) Visão lateral da geometria do experimento. (b) Fotografia de um compartimento que é ocupado por um sistema coloidal. Trajetórias das partículas ($N = 29$) em um confinamento circular para diferentes fatores de acoplamento Γ (razão entre o potencial e a energia cinética do sistema): (c) 152; (d) 38; (e) 30; (f) 7.5. Figuras retiradas da referência [10]

diferentes valores de α . Em particular, são mostrados os resultados para os casos $\alpha = 0.3, 1.2, 2.0, 2.5$ e 3.0 . No primeiro caso, $\alpha = 0.3$, o sistema apresenta uma configuração não-comensurável (1,5,7) [ver a configuração na Figura 16]. No caso $\alpha = 1.2$, o sistema com elevado número de estados estáveis, conforme mostrado na Figura 14. Finalmente para $\alpha = 2.0, 2.5, 3.0$, a configuração do estado fundamental é (1,6,6), portanto uma configuração comensurável, mas os modos normais associados a mínima frequência não-nula são diferentes. [ver Figura 16].

Como pode ser observado na Figura 30(a), o caso $\alpha = 1.2$ apresenta a menor temperatura de fusão. Isso pode ser entendido pelo elevado número de estado estáveis, apresentado pelo sistema nesse caso. A altura da barreira de potencial que separa o estado fundamental dos vários estados metaestáveis é pequena de modo que a transição sólido-líquido é facilitada.

Comparando os resultados dos casos $\alpha = 0.3$ e $\alpha = 2.0, 2.5, 3.0$, observa-se que a configuração do estado fundamental apresenta um papel relevante na transição sólido-líquido. Configurações comensuráveis são mais estáveis que aquelas não-comensuráveis.

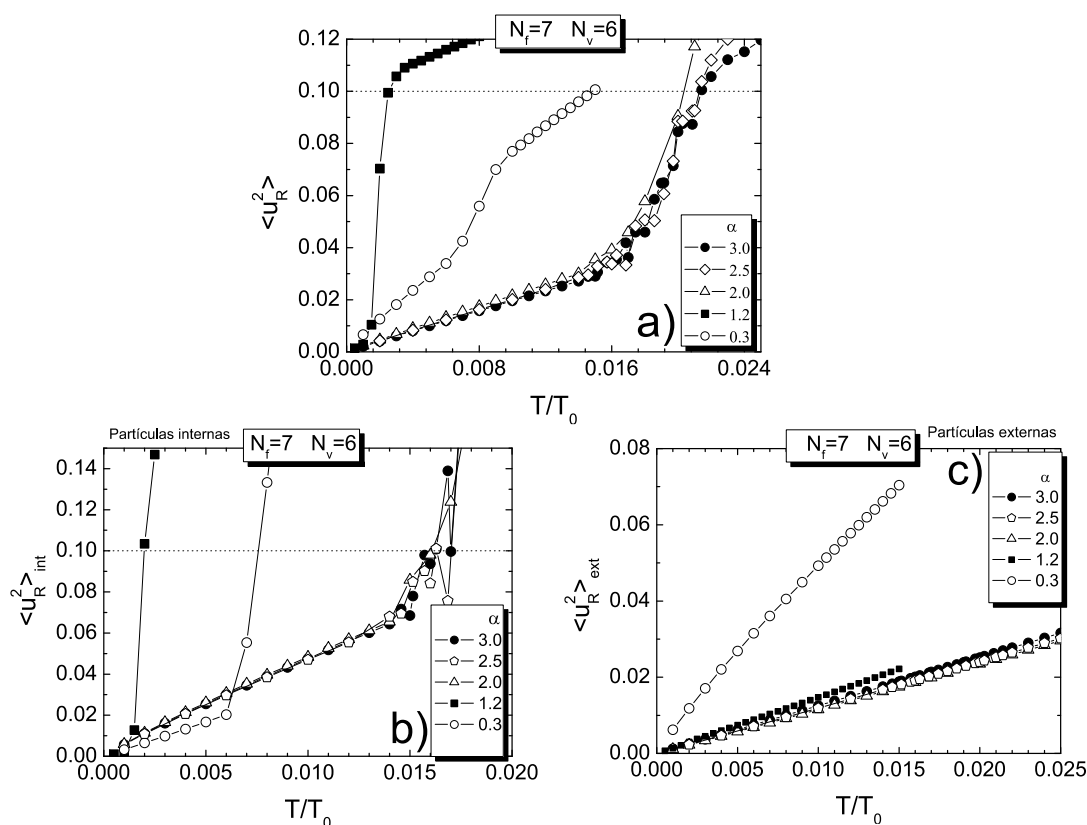


Figura 30: (a) Deslocamento quadrático de todas as partículas. (b) Deslocamento quadrático das partículas internas (b) e externas (c).

Esse resultado está de acordo com aqueles previstos por Schweigert and Peeters [8]; e Drocco *et al.* [43].

Observa-se também, na Figura 30(a) e 30(b), que ocorre a transição sólido-líquido primeiramente nas partículas da camada interna, através de uma mudança abrupta da média do desvio quadrático e por ultrapassar o valor do critério de Lindermann antes das partículas da camada externa, que por sua vez, caracteriza-se por variar o desvio radial linearmente em relação temperatura do sistema. Isso pode ser observado também nas ilustrações das oscilações das partículas do sistema para várias temperaturas [Figura 31], onde é observado que as partículas internas passam de oscilações localizadas para oscilações em anéis circulares antes das partículas externas.

No sistema analisado nesta dissertação, observa-se também o efeito re-entrante na transição sólido-líquido do sistema, semelhante ao trabalho realizado por Bubeck *et al.* comentado anteriormente. Apresenta-se na Figura 31 as trajetórias das partículas em várias temperaturas para dois casos: (a-h) $\alpha = 2, \beta = 1$ e (i-p) $\alpha = 2.5, \beta = 1$. Observa-se que em temperaturas baixas, as partículas possuem pequenas amplitudes de vibração lo-

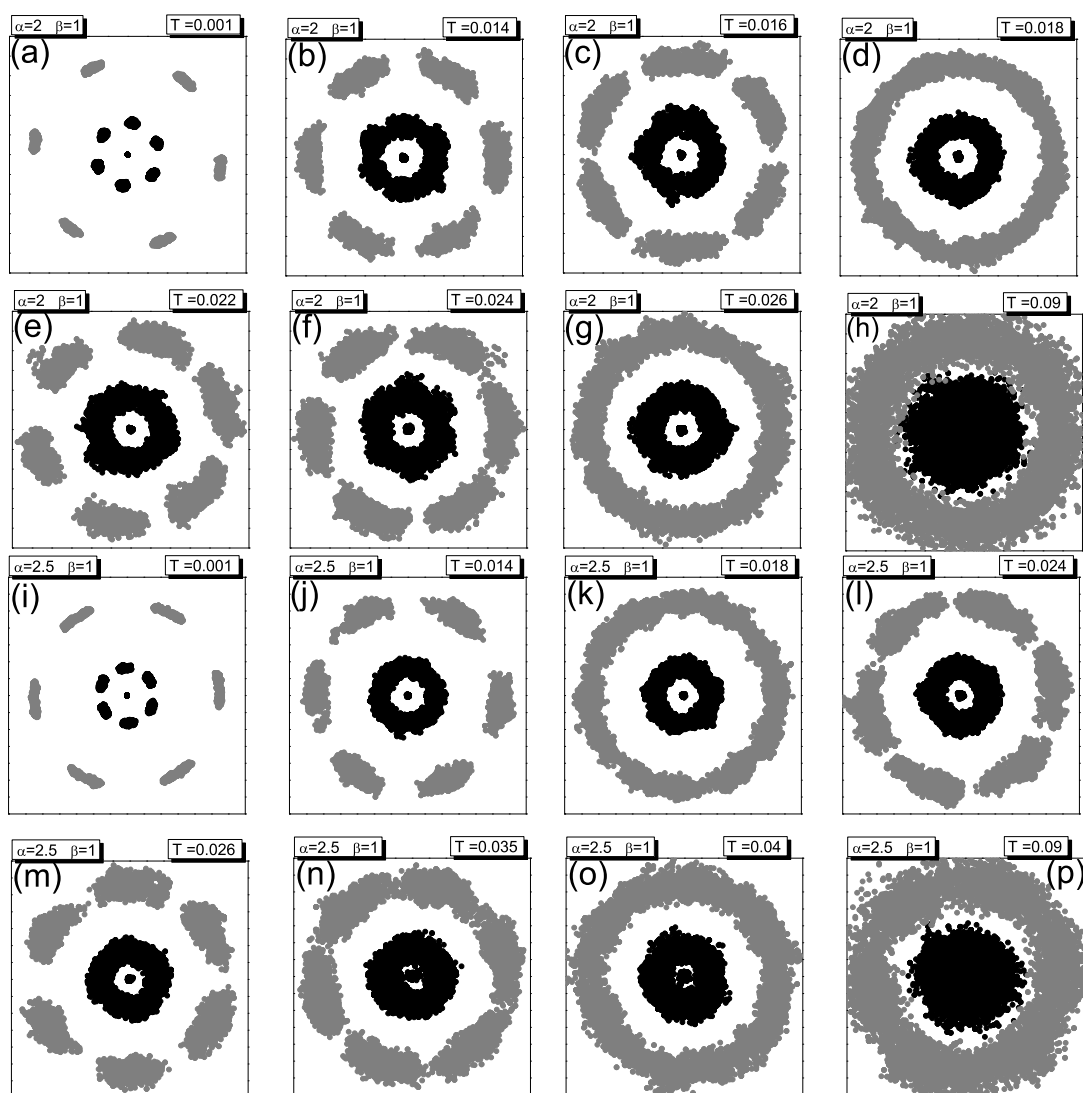


Figura 31: Trajetória das partículas do sistema com $\beta = 1$ em 14000 passos de simulação para (a-h) $\alpha = 2$ e (i-p) $\alpha = 2.5$. Observa-se o fenômeno de re-entrância para $\alpha = 2$ nos gráficos (d), (e), (f), (g). e para $alpha = 2$ nos gráficos (k), (l), (m), (n).

calizadas. Quando a temperatura é aumentada, ocorre o surgimento de uma rotação das camadas onde as partículas começam a atingir as posições iniciais das partículas vizinhas. Contudo, quando se aumenta a temperatura ainda mais, as partículas voltam a se organizar e possuem oscilações localizadas antes do sistema desorganizar completamente [Figura 31(e) e Figura 31 (m)]. Neste momento, altas temperaturas, observa-se que as partículas começam a perder a organização radial.

5 Conclusões e perspectivas

Foram estudadas as propriedades estruturais, dinâmicas e térmicas de um aglomerado bidimensional contendo dois tipos de partículas com diferentes cargas e/ou massas confinadas por um potencial parabólico. Mais especificamente, o sistema é composto por N_f partículas com carga e/ou massa fixa e N_v com carga e ou massa variável. Foram assumidas que todas as interações entre as partículas eram do tipo coulombiana.

A configuração do estado fundamental bem como as frequências dos modos normais são fortemente dependentes da carga e da massa de ambas as partículas. As partículas nem sempre se arranjam numa configuração de camadas circulares. Contudo, em alguns intervalos dos parâmetros α (β), há uma clara separação das partículas com diferentes cargas (massas) em diferentes camadas. Foi observado também que as modificações da estrutura do sistema são caracterizadas por transições de fase estrutural de primeira ou segunda ordem. Apesar da simetria circular do potencial de confinamento, configurações assimétricas foram encontradas.

Os modos normais apresentaram características intrínsecas que dependem dos parâmetros α e β . Foi mostrado que os modos normais de vibração não dependem apenas do número de partículas do aglomerado (N_f e N_v) e da configuração do estado fundamental, mas são principalmente determinados pelo α e β . O modo do centro de massa e o modo de respiração, encontrados num sistema com confinamento parabólico de partículas idênticas, são observados apenas no caso em que as partículas tem diferentes cargas, mas massas iguais. Se as massas de ambos os tipos de partículas são diferentes, há uma quebra de simetria no potencial de confinamento, que destrói os modos do centro de massa e de respiração.

As configurações comensuráveis do estado fundamental apresentaram muitos arranjos estáveis de partículas. A mínima frequência não nula desse caso, é tipicamente três ou quatro ordens de magnitude maior do que a mínima frequência não nula, observada no

caso das configurações não comensuráveis. Esse comportamento é observado nos casos de partículas com diferentes cargas, assim com no caso das partículas com diferentes massas.

Um estudo quantitativo da mistura entre os dois tipos de partículas foi feito também através de um diagrama de fase (α, β) . Foi mostrado que ocorre uma transição de fase estrutural de primeira ou segunda ordem quando o aglomerado transita de uma estrutura de camadas circulares para uma configuração de mistura ou vice-versa. A ordem da transição depende dos parâmetros α e β e configurações re-entrantes de camadas foram observadas para valores específicos desses parâmetros. A mistura entre os diferentes tipos de partículas foi quantitativamente caracterizadas por um parâmetro de ordem unidimensional, que se mostrou sensível à transição de fase estrutural de primeira e segunda ordem.

Um estudo do sistema em várias temperaturas foi apresentado e os resultados preliminares estão de acordo com vários trabalhos experimentais e teóricos. Foi mostrado, com a ajuda da análise do número de estados estáveis do sistema, que o sistema possui menor temperatura de fusão quando possui um maior número de estados estáveis, pois nesse caso as partículas facilmente transitam entre os estados de energia próxima. Através da análise da média do desvio quadrático, observou-se que as partículas da camada externa não sofrem alterações abruptas nesse parâmetro, que por sua vez, muda linearmente em função da temperatura. Contudo, a média do desvio quadrático para as partículas internas ultrapassa o valor do critério de Lindermann, antes das partículas externas. Observou-se também que a transição sólido-líquido do sistema ocorre em dois estágios, primeiro o sistema perde a ordem orientacional entre as camadas e depois perde a ordem radial sobre as partículas e além disso, o sistema sofre um efeito re-entrante do modo de rotação, em função da temperatura do sistema antes de perder completamente o ordenamento radial das partículas. Por fim foi observado que a temperatura de fusão é maior para configurações comensuráveis, estando de acordo com resultados teóricos de outros sistemas.

Além de representar uma contribuição importante para o entendimento de sistemas bidimensionais finitos com diferentes partículas, o sistema discutido nessa dissertação abre a possibilidade de uma série de estudos das propriedades térmicas relacionadas com o presente sistema. Uma extensão natural desse trabalho é o estudo mais aprofundado sobre os efeitos do valor da mínima frequência não nula dos modos normais do sistema com a temperatura da transição sólido-líquido e o entendimento do efeito re-entrante no modo rotacional do sistema. Uma outra extensão desse trabalho, seria a análise do desvio

médio quadrático das partículas para diferentes valores dos parâmetros α e β .

- Parte dos resultados dessa dissertação foram aceitos para publicação no volume 72 da edição de agosto de 2005 do jornal Physical Review E.

Referências

- [1] LEIDERER, P.; EBNER, W.; SHIKIN, V. B. *Surf. Sci.*, v. 113, p. 405, 1987.
- [2] MELZER, A. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 016411, 2003.
- [3] CHU, J. H.; I, L. *Phys. Rev. Lett.*, v. 72, p. 4009, 1994.
- [4] BEDANOV, V. M.; PETEERS, F. M. *Phys. Rev. B*, v. 49, p. 2667, 1994.
- [5] JUAN, W. T.; HUANG, Z. H.; HUS, J. W.; LAI, Y. J.; I, L. *Phys. Rev. E.*, v. 58, p. 6947, 1998.
- [6] MELZER, A.; KLINDWORTH, M.; PIEL, A. *Phys. Rev. Lett*, v. 87, p. 115002, 2001.
- [7] DREWSEN, M.; JENSEN, I.; LINDBALLE, J.; NISSEN, N.; MARTINUSSEN, R.; MORTENSEN, A.; STAANUM, P.; VOIGT, D. *Internatonal Journal of Mass Spectrometry*, v. 229, p. 83, 2003.
- [8] SCHWEIGERT, V. A.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. B*, v. 51, p. 7700, 1995.
- [9] COUPIER, G.; GUTHMANN, C.; NOAT, Y.; JEAN, M. S. *Phys. Rev. E*, v. 71, p. 046105, 2005.
- [10] BUBECK, R.; BECHINGER, C.; NESER, S.; LEIDERER, P. *Phys. Rev. Lett*, v. 82, p. 3364, 1999.
- [11] CRANDALL, R. S.; WILLIAMS, R. *Phys. Lett. A*, v. 34, p. 404, 1971.
- [12] GRIMES, C. C.; ADAMS, G. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, p. 795, 1979.
- [13] ASHOORI, R. C. *Nature*, v. 379, p. 413, 1996.
- [14] MERLINO, R. L.; GOREE, J. A. *Physics Today*, 2004.
- [15] SELWYN, G. S.; SINGH, J.; BENNETT, R. S. *J. Vac. Sci. Technol. A*, v. 7, p. 2758, 1989.
- [16] SELWYN, G. S.; MCKILLOP, J. S.; HALLER, K.; WU, J. *J. Sci. Technol. A*, v. 8, p. 1726, 1990.
- [17] THOMAS, H.; MORFILL, G. E.; DEMMEL, V.; GOREE, J.; FEUERBACHER, B.; MÖHLMANN, D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 73, p. 652, 1994.
- [18] MELZER, A.; TROTTENBERG, T.; PIEL, A. *Phys. Lett. A*, v. 191, p. 301, 1994.
- [19] MARADUDIN, L. B. and A. A. *Phys. Rev. B*, v. 15, p. 1969, 1977.

- [20] FERREIRA, W. P.; PEETERS, F. M.; FARIAS, G. A. *Phys. Rev. E*, v. 68, p. 066405, 2003.
- [21] DIEDRICH, F.; PEIK, E.; QUINT, J. M. C. and W.; WALTHER, H. *Phy. Rev. Lett.*, v. 59, p. 2931, 1987.
- [22] WINNELAND, D. J.; BERQUIST, J. C.; ITANO, W. M.; BOLLINGER, J. J.; MANNEY, C. H. *Phy. Rev. Lett.*, v. 59, p. 2935, 1987.
- [23] LOZOVIK, Y. E.; A.MANDELSHTAM, V. *Phys. Lett. A*, v. 145, p. 269, 1990.
- [24] KONG, M.; PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 021608, 2003.
- [25] REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. *Phys. Rev. Lett*, v. 90, p. 095504, 2003.
- [26] FRENKEL, D.; SMIT, B. *Understanding Molecular Simulation*. [S.l.]: Academic Press, 1996.
- [27] HEERMANN, D. W. *Computer Simulation Methods*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990.
- [28] METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; TELLER, A. H.; TELLER, E. *J. Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087, 1953.
- [29] KONG, M.; PARTOENS, B.; MATULIS, A.; PEETERS, F. M. *Phis. Rev. E*, v. 69, p. 036412, 2004.
- [30] FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. *Solid State Commun.*, v. 100, p. 711, 1996.
- [31] CARMONA, W. P. F. and G. A. Farias and H. A.; PEETERS, F. M. *Solid State Commun.*, v. 122, p. 665, 2002.
- [32] FERREIRA, W. P.; MATULIS, A.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 046601, 2003.
- [33] LAI, Y. J.; I, L. *Phy. Rev. E*, v. 60, p. 4743, 1999.
- [34] CALINON, R. H.; CHOQUARD, P.; JAMIN, E.; NAVET, M. *Ordering in Two Dimensions*. New York: Elsevier, 1980.
- [35] PARTOENS, B.; DEO, P. S. *Phys. Rev B*, v. 69, p. 245415, 2004.
- [36] KONG, M.; PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. *New Journal of Physics*, v. 5, p. 23, 2003.
- [37] WOLTER, M.; MELZER, A. *Phy. Rev. E*, v. 71, p. 036414, 2005.
- [38] LIU, B.; AVINASH, K.; GOREE, J. *Phy. Rev. E*, v. 69, p. 036410, 2004.
- [39] NOSENKO, V.; AVINASH, K.; GOREE, J.; LIU, B. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 085001, 2004.
- [40] NUNOMURA, S.; GOREE, J.; HU, X. W. S.; BHATTACHARJEE, A.; AVINASH, K. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 035001, 2002.

- [41] NUNOMURA, S.; SAMSONOV, D.; GOREE, J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, p. 5141, 2000.
- [42] NELISSEN, K.; PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. E*, n. 69, p. 046605, 2004.
- [43] REICHHARDT, J. A. D. and C. J. Olson Reichhardt and C.; JANKÓ, B. *Phys. Rev. E*, v. 68, p. 060401, 2003.
- [44] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. [S.l.]: Saunders College, 1976.
- [45] PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 9, p. 5383, 1997.
- [46] PARTOENS, B.; SCHWEIGERT, V. A.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 3990, 1997.
- [47] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Statistical Physics*. [S.l.]: Pergamon Press, 1980.
- [48] LINDERMANN, F. *Z. Phys.*, v. 11, p. 609, 1980.
- [49] LOZOVIK, Y. E.; FARTZDINOV, V. M. *Solid State Commun.*, v. 54, p. 725, 1985.
- [50] BEDANOV, V. M.; GADIYAK, G. V.; LOZOVIK, Y. E. *Phys. Lett.*, v. 109A, p. 289, 1985.