



Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação em Física

FILLIPE CESAR OLIVEIRA DA SILVA

Formação e estabilidade de cristais espirais conformes
bidimensionais

Recife

2020

FILLIPE CESAR OLIVEIRA DA SILVA

Formação e estabilidade de cristais espirais conformes
bidimensionais

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física.

Área de concentração: Física da Matéria Condensada e de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Ribeiro Eulálio Cabral

Coorientador: Prof. Dr. Clécio Clemente de Souza Silva

Recife

2020

Catálogo na fonte
Bibliotecária Mariana de Souza Alves CRB4-2105

S586f Silva, Fillipe Cesar Oliveira da
Formação e estabilidade de cristais espirais conformes bidimensionais / Fillipe
Cesar Oliveira da Silva. – 2020.
160f., il., fig., tab.

Orientador: Leonardo Ribeiro Eulálio Cabral.
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN, Física,
Recife, 2020.
Inclui referências e apêndices.

1. Física da Matéria Condensada e de Materiais. 2. Cristais Conformes. 3.
Defeitos Topológicos. 4. Flutuações Térmicas. I. Cabral, Leonardo Ribeiro Eulálio.
(orientador) II. Título.

530.41 CDD (22. ed.)

UFPE-CCEN 2021-29

FILLIPE CESAR OLIVEIRA DA SILVA

Formação e estabilidade de cristais espirais conformes bidimensionais

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Aprovada em: 29/10/2020.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Leonardo Ribeiro Eulálio Cabral
(Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. José Américo de Miranda Neto
(Examinador interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Renê Rodrigues Montenegro Filho
(Examinador interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Enzo Granato
(Examinador externo)
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

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

*À minha esposa e companheira de todas as horas, Stella Carvalho,
e ao nosso filho, Miguel Oliveira de Carvalho.
Sem vocês, nada disso seria possível.*

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores, Leonardo Cabral e Clécio Clemente, por terem se aventurado nessa loucura, que quase não chegou ao fim. Além das inúmeras discussões e sugestões para crescimento profissional e pessoal, ao longo desses 5 anos.

Aos meus pais, Hilda e Evaldo, por fundamentarem quem eu sou, por estarem comigo e me apoiarem em todos os momentos.

Aos meus colegas de laboratório, Ferreira (Suporte, do qual estou devendo muitos litros de coca-cola), Matheus (Inventor), Daniel (Turista), Rubens (Gameplay) e Emerson (Vigia). Um agradecimento especial a Raí Menezes (Sr. Produção), colaborador que ajudou imensamente esse trabalho sair do papel.

Aos meus amigos/colegas do Departamento de Física, Mário Rocha (Panicat), Ricardo Batista (Rick 2/3), Tiago Araújo (Mendigo), Alyson Carvalho (Mago) e Wellington Moreira (Gordo), pelos incentivos, ajudas e debates sobre Física, além dos momentos de lazer (sentirei falta). Aqueles que eu esqueci de mencionar, é porque faltou, novamente, paciência de escrever o nome de todos, mas sintam-se agradecidos.

À Alexsandra Melo (secretária da Pós-Graduação) por resolver incontáveis problemas burocráticos.

Aos colegas Ademias e Aziel (*in memoriam*), por agilizarem todas as demandas solicitadas internamente.

Ao Departamento de Física/UFPE por ter fornecido as condições necessárias para realização do trabalho.

Ao IF-Sertão, pelo afastamento fornecido para conclusão dessa jornada.

Às agências de fomento CNPq, CAPES e FACEPE.

*A esperança padece num raio sem cor,
para assim chegar ao domínio do infinito.*

(FILLIPE CESAR OLIVEIRA DA SILVA, 2020)

RESUMO

Esta tese aborda as propriedades estáticas e dinâmicas de aglomerados bidimensionais (2D) não uniformes de partículas com interação logarítmica de longo alcance. O sistema está sujeito a um potencial externo projetado para produzir um perfil de densidade variando aproximadamente como $1/r^2$, onde r é a distância de seu centro. As equações de movimento superamortecidas das partículas foram integradas no tempo usando simulações de dinâmica de Langevin. O equilíbrio entre a repulsão mútua das partículas e a simetria radial do potencial externo leva a estruturas em forma de anel altamente ordenadas apresentando linhas espirais cristalinas, típicas de cristais conformes. Em cristais conformes, a inhomogeneidade da distribuição de partículas é acompanhada por uma pequena densidade de defeitos topológicos nos arranjos de partículas. Para nossa geometria simplesmente convexa, os defeitos topológicos estão concentrados principalmente perto do centro dos clusters, mantendo a maior parte da superfície do cristal livre de defeitos. Encontramos diferentes arranjos de cristais conformes que foram classificados com base na distribuição de suas linhas espirais. Para investigar as propriedades dinâmicas de nossos cristais conformes, aplicamos três abordagens diferentes: uma análise do modo elástico dos aglomerados de partículas, a resposta do sistema às flutuações térmicas e a deformação na estrutura do anel das partículas induzida por cisalhamento externo. A análise do modo elástico revela que os modos de cisalhamento são mais pronunciados para os automodos de energia mais baixa. Por outro lado, os modos de compressão se manifestam gradualmente com o aumento dos autovalores, agindo das camadas mais externas para as mais internas. Como esperado, o automodo associado à rotação pura do sistema é sempre aquele com o menor autovalor para um sistema estável. Variando a temperatura nas simulações, observamos que esses cristais conformes são resilientes às flutuações térmicas até uma determinada temperatura, acima da qual os defeitos topológicos migram progressivamente do centro para o resto do sistema. Finalmente, ao aplicar um acionamento externo não uniforme ao longo da direção angular, obtemos rotação do corpo rígido para baixa intensidade de acionamento e um comportamento semelhante ao líquido para altos valores de acionamento. Para forças de acionamento intermediárias o sistema sofre fluxo plástico, subdividido em diferentes fases dinâmicas conforme a força de acionamento aumenta e com a proliferação de defeitos topológicos. Esses resultados são

analisados dentro da aproximação de campo médio associando a curvatura gaussiana local do cristal à distribuição dos defeitos.

Palavras-chave: Cristais Conformes. Defeitos Topológicos. Flutuações Térmicas. Tensão de Cisalhamento.

ABSTRACT

This thesis addresses the static and dynamic properties of non-uniform two-dimensional (2D) clusters of particles with long-range logarithmic interaction. The system is subjected to an external potential designed to produce a density profile varying approximately as $1/r^2$, where r is the distance from its center. The particles overdamped equations of motion were time integrated by using Langevin dynamics simulations. The balance between the particles mutual repulsion and the external potential radial symmetry leads to highly ordered ring-shaped structures presenting crystalline spiral lines, typical of conformal crystals. In conformal crystals, the particle distribution inhomogeneity is accompanied by a small density of topological defects in the particle arrangements. For our simply connected geometry the topological defects are mainly concentrated close to the center of the clusters, keeping most of the crystal surface free from defects. We encounter different arrangements of conformal crystals which were classified based on the distribution of their spiral lines. In order to investigate the dynamical properties of our conformal crystals, we applied three different approaches: An analysis of the particle clusters elastic mode, the system response to thermal fluctuations, and the strain on the particles ring structure induced by external shear stress. The elastic mode analysis reveals that shear modes are more pronounced for the lowest energy eigenmodes. On the other hand, compression modes manifest themselves gradually with increasing eigenvalues, acting from the outermost to the innermost shells. As expected, the eigenmode associated with the system pure rotation is always the one with the lowest eigenvalue for a stable system. By varying the temperature in the simulations we observe that these conformal crystals are resilient to thermal fluctuations up to a certain temperature, above which topological defects progressively migrates from the center to the rest of the system. Finally, when applying a non-uniform external drive along the angular direction, we obtain rigid body rotation for low drive intensity and a liquid-like behavior for high drive values. For intermediate drive strengths the system undergoes plastic flow, subdivided in different dynamical phases as the drive strength increases and with proliferation of topological defects. These results are analyzed within the mean field approximation associating the local Gaussian curvature of the crystal to the distribution of defects.

Keywords: Conformal Crystals. Topological Defects. Thermal Fluctuations. Shear Stress.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1 – Exemplos de parasticidades observadas na natureza. Na primeira fileira temos exemplificadas as espécies *Pinus sp.*, *Aloe polyphylla* e *Dahlia sp.*, na segunda fileira *Crassula sp.*, *Helianthus annuus* e *Taraxacum officinale*, respectivamente. Figuras extraídas da Ref. [1] 28
- Figura 2 – Três fotografias do experimento. Os números mostram a ordem de deposição das gotas (origem arbitrária). (a) $\varphi = 180^\circ$, (b) $\varphi = 150^\circ$ e (c) $\varphi \approx 139^\circ$ (espiral de Fibonacci). Figuras extraídas da Ref. [2]. 29
- Figura 3 – À esquerda, um seção semicircular de uma rede regular hexagonal no plano z . À direita, o mapeamento conforme usando a transformação $w(z) = (1/i\alpha) \ln(iaz)$ com $\alpha = \pi/L$, onde L é a base do retângulo, para ajustar a geometria semianular. As letras em vermelho são guias para identificar onde cada região está mapeada. Figura extraída e modificada da Ref.[3]. 31
- Figura 4 – À direita: exemplo da distribuição das partículas no plano z . À esquerda: transformada do hexágono original no plano w . Figura extraída e modificada da Ref.[4]. 33
- Figura 5 – Representação esquemática das famílias de hexágonos centradas em uma posição w . H_n representa a quantidade n de hexágonos com tamanhos entre $d = (\sqrt{3}/2)nb$ e $d = nb$. As três possibilidades de H_3 são mostradas em destaque. Figura extraída da Ref.[4]. 36
- Figura 6 – Na parte superior, são mostrados os estados obtidos em diferentes valores da temperatura T e da densidade de fluxo B_I produzida por uma bobina ou ímã no centro da amostra. A triangulação mostra os resultados das transformações conformes $w = z^{1+\alpha/2}$, aplicadas nas configurações acima delas. A simetria triangular levemente deformada das configurações transformadas no plano w caracteriza a natureza conforme do cristal no plano z . Figura extraída da Ref.[5]. 40

Figura 7 – Exemplos de dois casos generalizados que mostra a densidade de bolhas concentrada longe (a-c) e próximo (d-e) do centro da amostra para diferentes valores de $\alpha > 0$. Em (a) e (d) são mostrados os aparatos experimentais; em (b) e (e) a predição numérica; e em (c) e (f) os resultados experimentais para os dois casos genéricos. O sombreamento mostra como as linhas das células vizinhas são transformadas. Figura extraída da Ref.[6].	41
Figura 8 – Partículas em uma interface óleo-água. As partículas interagem repulsivamente, formando uma rede triangular, na ausência de um potencial de confinamento espacialmente variável. Figura extraída da Ref.[7].	43
Figura 9 – (A) Exemplo de uma configuração de um sistema em equilíbrio. Cada partícula é identificada e a estrutura resultante é triangulada [8]. Defeitos com 5 (7) vizinhos são coloridos em vermelho (azul). A carga líquida livre de defeitos resulta em ± 6 , conforme exigido por restrições topológicas. (B) Rede perfeitamente conforme usada na Ref. [4] para um modelo de partículas repulsivas em um campo gravitacional. . .	44
Figura 10 – Representação esquemática de uma partícula com ordenamento com 5 vizinhos (à esquerda) e uma outra partícula com ordenamento de 7 vizinhos (à direita). Figura extraída da Ref. [9].	45
Figura 11 – Um zoom em uma região de carga topológica total de 0, porém com uma deslocação. Este ponto específico, apresenta um par de disclinações constituído de uma partícula com 5 vizinhos (círculo vermelho) e uma outra partícula com 7 vizinhos (quadrado azul), de modo que a carga topológica total de 0. Ao desenhar um circuito de Burgers em torno do limite da deslocação temos uma falha de fechamento que, com uma carga topológica nula, se mantém constante com a distância do centro.	47

- Figura 12 – (A) Comparativo da intensidade da força que atua em uma partícula, localizada a uma distância r do centro da amostra. A linha preta, corresponde à força devida ao potencial $U_c(\mathbf{r})$ [ver Eq. (2.28)] gerado para um sistema com $N = 20$ e $R = 0.5r_0$, e a linha vermelha pontilhada, corresponde à força devida ao potencial de confinamento parabólico. Em $r = 0.5r_0$, a diferença entre F_{conforme} e $F_{\text{parabolico}}$ é de aproximadamente 11%. (B) Comparativo entre o potencial de confinamento parabólico e o potencial de confinamento $U_c(\mathbf{r})$. Na inserção em (B) a diferença entre os confinamentos torna-se mais nítida. 61
- Figura 13 – Rede hexagonal no plano w (A-D) e mapeamento do cristal conforme no plano z (F-I), de acordo com a Eq. (1.44b). Os eixos de simetria da rede hexagonal (linhas azul, laranja e verde) no plano w são transformadas em espirais no plano z . Quando uma das linhas de simetria (linha verde) faz um ângulo β de $\pm\pi/6$ (E) com o eixo horizontal, a linha mapeada torna-se um círculo e a configuração é chamada de concêntrica (F). Quando linha verde está alinhada com o eixo horizontal, nós temos uma configuração radial (H). Para ângulos entre 0 e $\pm\pi/6$, nomeamos a configuração como sendo quiral (*chiral*), dextrógiro ou levógiro (G, I). Figura extraída da Ref. [10]. 63
- Figura 14 – (A) Comparação entre as densidades $n(\mathbf{r})$ e $n_{DEC}(r)$ [Eq.(1.43), com $\alpha = -2$], linha pontilhada vermelha e linha contínua preta, respectivamente. (B) Distribuição das cargas topológicas esperada no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha preta horizontal, corresponde à carga topológica em uma distribuição uniforme. A linha vertical tracejada representa R^* 68
- Figura 15 – Comportamento do decaimento da temperatura em função do número de passos de temperatura considerado. Nas últimas etapas, a temperatura decai linearmente até alcançar $T = 0$ 69

- Figura 16 – Estado obtido de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial aproximadamente parabólico ($R = 0.5r_0$). No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. . 70
- Figura 17 – Dependência da energia por partícula em função de N ($5 \leq N \leq 30$) para diferentes valores de confinamento R . Na inserção N ($40 \leq N \leq 100$). 71
- Figura 18 – Estado de menor energia (primeira linha) e estado metaestáveis para $N = 9, 24$ e 27 . Quadrados (círculos) azul (vermelho) correspondem a defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$). Na configuração $(1, 8)$ o defeito central corresponde a um defeito topológico $+2$. No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas, e no canto inferior direito E/N . Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. . 73
- Figura 19 – Configurações de menor energia para $N = 100$ e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 . Com o aumento da região de confinamento, $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_{DEC}(\mathbf{r})$, a distribuição dos defeitos topológicos fica concentrada na região não-conforme, $r < R^*$. Quadrados (círculos) azul (vermelho) correspondem a defeitos topológicos -1 ($+1$). No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas, e no canto inferior direito E/N . O círculo verde representa R^* . Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. 74

- Figura 20 – Exemplos de configurações com diferentes valores de N obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$ e $N = 300$, (B) $128r_0$ e $N = 600$, (C) $128r_0$ e $N = 900$, e (D) $128r_0$ e $N = 900$. As respectivas posições no espaço- w , após aplicação da Eq. (1.44b), são mostrados em (E-H). A linha tracejada vertical preta representa R^* , enquanto as linhas sólidas são diretrizes para ajudar a identificar eixos de simetria da estrutura hexagonal [cf. Fig. 13]. Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Nas legendas (A-D), os defeitos profundos no interior dos clusters não são mostrados para melhor visualização. Figura extraída da Ref. [10]. 75
- Figura 21 – Distribuição $P(\theta)$ da ligação dos primeiros vizinhos fazendo um ângulo θ com o eixo u no plano w (A - D). As distribuições levam em consideração todas as configurações (A) concêntricas, (B) radiais, (C) quirais e (D) policristalinas. Os mapas de cores (E)-(F) correspondem, respectivamente, à fração de ocorrência de cada um desses tipos de configuração em função do número de partículas N e do logaritmo do raio do cluster R . Figura extraída da Ref. [10]. 77
- Figura 22 – Exemplo de configurações com $N = 200$ e (A) $R = 0.5r_0$ e (B) $R = 32r_0$. (A-B) Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. O círculo vermelho vazado apresenta carga topológica $+2$. Uma expansão da configuração concêntrica é mostrada em (B) e mostra que apenas as disclinações (com carga topológica $+1$) aparecem na parte interna da configuração (círculo verde de raio R^*). (C) Número de partículas N e de defeitos N_d acumulado radialmente em função de r/R são representadas pelas linhas tracejadas. Os pontos azul e preto representam os resultados para $R = 0.5r_0$ e para $R = 32r_0$ correspondentes às configurações mostradas em (A) e (B), respectivamente. A linha azul (preta) representa a densidade esperada para o potencial conforme $U_c(\mathbf{r})$ (aproximação parabólica) no limite contínuo $N_{CL} = 2\pi \int_0^r n(r')r'dr'$. Figura extraída e modificada da Ref. [10]. 79

Figura 23 – Espectro de excitação dos modos normais em função do número de partículas na aproximação parabólica $R = 0.5r_0$. As autofrequências, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$, são obtidas através das configurações apresentadas na Fig. 16.	85
Figura 24 – Autofrequências para $N \leq 50$ partículas, interagindo via potencial logarítmico confinados parabolicamente. Figura extraída da Ref [11].	86
Figura 25 – Autofrequências para as configurações: (A) analíticas e confinamento parabólico, (B) analíticas e confinamento conforme, $R = 0.5r_0$. Em (C) configuração de menor energia obtida pela dinâmica molecular para $R = 0.5r_0$ [ver Fig. 16]. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$	87
Figura 26 – Modo de respiração (<i>breathing</i>) para $N = 5$ (A), 6 (B), 7 (C), 8 (D), 9 (E), 12 (F), 15 (G), 20 (H), 27 (I), 28 (J), 29 (K), 30 (L); correspondendo a mais alta autofrequência. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$, para $R = 0.5r_0$	88
Figura 27 – (a) O modo <i>breathing-like</i> para $N = 40$ correspondente a maior autofrequência para confinamento $\sim r^3$. (b) O modo <i>breathing</i> para $N = 40$ e confinamento puramente parabólico. Figura extraída da Ref. [11] .	88
Figura 28 – Modos elásticos para $N = 19$ (1,6,12) e $R = 0.5r_0$. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$. O menor e maior modo elástico, correspondem ao estado de rotação e compressão, respectivamente. As autofrequências intermediárias estão relacionadas aos diversos tipos de movimentos, como rotações opostas (Ω_2), convecções (Ω_3 e Ω_9), compressão mista (Ω_{16}), translação (Ω_{20}), rotação mista (Ω_{26} e Ω_{30}).	90
Figura 29 – Espectro de excitação dos modos normais em função do número de partículas com o aumento da região de confinamento $R = r_0$ (A), $R = 2r_0$ (B), $R = 4r_0$ (C), $R = 8r_0$ (D), $R = 16r_0$ (E), $R = 32r_0$ (F), $R = 64r_0$ (G), $R = 128r_0$ (H).	91

Figura 30 – Primeiras e mais elevada autofrequências para clusters com $N = 100$ e $R/r_0 = 4$ (A), 8(B), 16(C), 32(D), 64(E) e 128(F). Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 . O círculo verde representa $r = R^*$	92
Figura 31 – Modo de respiração atuando individualmente nas camadas localizadas em $r \geq R^*$ para $N = 100$ e $R = 32r_0$. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 . O círculo verde representa $r = R^*$	94
Figura 32 – Modos de compressão f_c (círculos sólidos) e de cisalhamento f_s (quadrados vazados) para $N = 7$ em função de $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128.	95
Figura 33 – Autovetores e mapa de cores para vorticidade $ (\nabla \times \vec{v})_z $ e divergente $ \nabla \cdot \vec{v} $ associados a um sistema com $N = 7$ e $R = r_0$	96
Figura 34 – Modos de compressão f_c (círculos sólidos) e de cisalhamento f_s (quadrados vazados) para $N = 100$ e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128.	97
Figura 35 – Autovetores e mapa de cores para vorticidade $ (\nabla \times \vec{v})_z $ e divergente $ \nabla \cdot \vec{v} $ associados a um sistema com $N = 100$ e $R = 64r_0$	99
Figura 36 – Modo de translação e respiração que atuam em camadas específicas em um sistema com $N = 100$ e $R = 128r_0$. As autofrequências $\Omega_{37}, \Omega_{57}, \Omega_{77}$ e Ω_{97} correspondem ao modo de respiração das camadas S_{10}, S_9, S_8 e S_7 , respectivamente. As autofrequências $\Omega_{29}, \Omega_{49}, \Omega_{70}$ e Ω_{90} correspondem ao modo de translação que atuam nas camadas S_{10}, S_9, S_8 e S_7 , antes do modo de respiração ser ativado. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0	100
Figura 37 – Autovetores e mapa de cores para vorticidade $(\nabla \times \vec{v})_z$ e divergente $\nabla \cdot \vec{v}$ associados a um sistema com $N = 100$ e $R = 128r_0$	101

- Figura 38 – (A – E) Distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, região próximo de R^* é mostrada na inserção, em função de r para diferentes temperaturas em amostras com: (A) $R = 8r_0$, (B) $R = 16r_0$, (C) $R = 32r_0$, (D) $R = 64r_0$ e (E) $R = 128r_0$. As linha sólida representa o valor esperado no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha vertical pontilhada marca $r = R^*$. As diferentes cores (mapa de cor no topo) representa as diferentes temperaturas que variam de $T = 0$ (azul) to $T/T_0 = 0.01$ (vermelho). (F) Carga topológica líquida $\bar{Q}_{QCR}$ na região quase-conforme, $r \geq R^*$, para R de $8r_0$ até $128r_0$ 106
- Figura 39 – Dependência do número médio de defeitos $\bar{N}_d$, em função da temperatura, em cada uma das camadas na região quase-conforme ($r \geq R^*$) de configurações para $N = 100$ e (B) $R = 8r_0$, (C) $R = 16r_0$, (D) $R = 32r_0$, (E) $R = 64r_0$ e (F) $R = 128r_0$. Em (A) mostramos $\bar{N}_d$ para o confinamento aproximadamente parabólico $R = 0.5r_0$. Linhas verticais representam a temperatura de *crossover* T_c em que $\bar{Q}_{QCR} > 0.1$ [veja a Fig. 38(F)]. 107
- Figura 40 – (A) Distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, região próximo de R^* é mostrada na inserção, em função de r para $R = 64r_0$ com configuração (3, 8, 10, 5×11 , 2×12). A linha sólida representa o valor esperado no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha vertical pontilhada marca $r = R^*$. As diferentes cores (mapa de cor no topo) representa as diferentes temperaturas que variam de $T = 0$ (azul) to $T/T_0 = 0.01$ (vermelho). (B) Carga topológica líquida $\bar{Q}_{QCR}$ na região quase-conforme, $r \geq R^*$, para duas configurações obtidas para $R = 64r_0$. A distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, para a configuração (4, 8, 8×11), é apresentada na Fig. 38(D). (C) Dependência do número médio de defeitos em cada uma das camadas na região quase-conforme, em função da temperatura, para configuração (3, 8, 10, 5×11 , 2×12). A linha vertical representa a temperatura de *crossover* T_c em que $\bar{Q}_{QCR} > 0.1$ [veja a Fig. 40(B)]. 110

- Figura 41 – (A) Distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, região próximo de R^* é mostrada na inserção, em função de r para $R = 256r_0$ para as configurações quiral (A) e radial (B), ambas para $N = 200$ e $R = 256r_0$ (as configurações correspondentes estão representadas na inserção). As linhas sólidas representam o valor esperado no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha vertical pontilhada marca $r = R^*$. As diferentes cores (mapa de cor no topo) representam as diferentes temperaturas que variam de $T = 0$ (azul) to $T/T_0 = 0.01$ (vermelho). (C) Carga topológica líquida $\bar{Q}_{QCR}$ na região quase-conforme, $r \geq R^*$, para as duas configurações em estudo. Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Os defeitos internos não são mostrados para melhor visualização. 111
- Figura 42 – Mostramos o modelo esquemático da força ($\mathbf{F}^d$ em vermelho), descrita pela Eq. (6.1), atuando em uma amostra com 19 partículas. A força de confinamento que atua na i -ésima partícula é destacada por $\mathbf{F}^c$ (em azul). A força atua do centro para a borda da amostra com um decaimento $1/r$, representado pelo degradê. 115
- Figura 43 – Primeiras autofrequências para clusters com $N = 200$ e $R/r_0 = 64$ (A) e 256(B e C). Em cada quadro, Ω_l corresponde a autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 119
- Figura 44 – Módulo da velocidade angular em função da posição radial média das partículas (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$ e (C) $R = 256r_0$, nas respectivas configurações concêntricas (D), quiral (E), e radial (F), destacadas no lado direito. Essas configurações são submetidas a quatro intensidades da forças motriz $I_0/\varepsilon_0 = 5 \times 10^{-4}$, 3×10^{-2} , 1×10^{-1} , e 1.0. As linhas horizontais e tracejadas sólidas representam, respectivamente, a velocidade angular calculada do corpo rígido ω_{RB} e a dependência esperada de $1/r^2$ da velocidade angular para partículas no regime de movimento laminar. As marcas de linhas tracejadas verticais dividem as regiões não conformes (esquerda) e quase-conformes (direita). Quadrado azul sólido e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Defeitos no interior dos clusters não são mostrados para melhor visualização. 120

- Figura 45 – Dependência temporal da posição radial r para a configuração mostrada na Fig. 44(D), com $N = 200$, $R = 64r_0$ e $I_0 = 1.0\varepsilon_0$. Os quadros estão correlacionados com as velocidades angulares apresentadas na Fig. 46, e.g., (A) com Fig. 46(A), (B) com Fig. 46(B), e assim sucessivamente. 121
- Figura 46 – Dependência temporal da velocidade angular $|\omega|$ para a configuração mostrada na Fig. 44(D), com $N = 200$, $R = 64r_0$ e $I_0 = 1.0\varepsilon_0$. Os quadros estão correlacionados com as posições radiais apresentadas na Fig. 45, e.g., (A) com Fig. 45(A), (B) com Fig. 45(B), e assim sucessivamente. . 122
- Figura 47 – Velocidades angulares médias $\bar{\omega}$ (primeira linha) e o deslocamento médio quadrático $\langle u_r^2 \rangle$ (segunda linha) em função de I_0 (intensidade do torque produzido pela força externa) para configurações com $N = 20$ e $R = 0.5r_0$ [(A) e (E)], $R = 16r_0$ [(B) e (F)], $R = 32r_0$ [(C) e (G)], e $64r_0$ [(D) e (H)]. As respectivas configurações para $I_0 = 0$ – com posições das partículas representadas por pontos e círculos vermelhos para ajudar a identificar as camadas – são mostradas nas inserções. S_j é o rótulo da j^{th} camada, enquanto que a linha sólida destaca a velocidade angular do corpo rígido (RB). Para baixos I_0 todas as configurações rotacionam como corpo rígido. À medida que I_0 aumenta, as camadas começam a se separar e as linhas pontilhadas verticais indicam os valores I_{ck} em que camadas desacoplam. 123
- Figura 48 – Velocidades angulares médias $\bar{\omega}$ (primeira linha) e o deslocamento médio quadrático $\langle u_r^2 \rangle$ (segunda linha) em função de I_0 (intensidade do torque produzido pela força externa) para configurações com $N = 30$ e $R = 0.5r_0$ [(A) e (E)], $R = 16r_0$ [(B) e (F)], $R = 32r_0$ [(C) e (G)], e $64r_0$ [(D) e (H)]. As respectivas configurações para $I_0 = 0$ – com posições das partículas representadas por pontos e círculos vermelhos para ajudar a identificar as camadas – são mostradas nas inserções. S_j é o rótulo da j -ésima camada, enquanto que a linha sólida destaca a velocidade angular do corpo rígido (RB). Para baixos I_0 todas as configurações rotacionam como corpo rígido. À medida que I_0 aumenta, as camadas começam a se separar e as linhas pontilhadas verticais indicam os valores I_{ck} em que camadas desacoplam. 125

- Figura 49 – Dependência temporal da velocidade ω_{S_j} para a configuração (1, 5, 4×6) e $R = 64r_0$. O tempo está normalizado pelo tempo total da janela de captura. Cada quadro representa um valor de I_0 : $0.017\varepsilon_0$ (A), $0.018\varepsilon_0$ (B), $0.020\varepsilon_0$ (C), $0.021\varepsilon_0$ (D), $0.022\varepsilon_0$ (E) e $0.037\varepsilon_0$ (F). Ver Fig. 48(D e H). 127
- Figura 50 – Velocidades angulares médias $\bar{\omega}$ (esquerda) e o deslocamento médio quadrático $\langle u_r^2 \rangle$ (direita) em função de I_0 (intensidade do torque produzido pela força externa) para configurações com $R = 0.5r_0$ [(A) e (D)], $R = 16r_0$ [(B) e (E)], e $R = 32r_0$ [(C) e (F)]. As respectivas configurações para $I_0 = 0$ – com posições das partículas representadas por pontos e círculos vermelhos para ajudar a identificar as camadas – são mostradas nas inserções. S_j é o rótulo da j -ésima camada, enquanto que a linha sólida destaca a velocidade angular do corpo rígido (RB). Para baixos I_0 todas as configurações rotacionam como corpo rígido. À medida que I_0 aumenta, as camadas começam a se separar e as linhas pontilhadas verticais indicam os valores I_{ck} em que camadas desacoplam. (A) A segunda inserção mostra uma ampliação da região em torno da primeira corrente de desacoplamento, acima da qual a configuração deixa de girar como um corpo rígido. 128
- Figura 51 – Dependência temporal da velocidade ω_{S_j} para a configuração com $N = 100$, $R = 32r_0$ e $I_0 = 0.045\varepsilon_0$. O tempo está normalizado pelo tempo total da janela de captura. As camadas são agrupadas em cinco conjuntos: $S_1 - S_2$ (A), $S_3 - S_4$ (B), $S_5 - S_6$ (B), S_7 (C) e $S_8 - S_9$ (C). 133
- Figura 52 – Dependência temporal da posição radial r_i para a configuração com $N = 100$, $R = 32r_0$ e $I_0 = 0.045\varepsilon_0$. O tempo está normalizado pelo tempo total da janela de captura. As linhas de diferentes cores representam as partículas. 134

Figura 53 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $(R = 8r_0)$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q > 0$ ($q < 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. 150

Figura 54 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 16r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito, listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios(vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. 151

Figura 55 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 32r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. 152

- Figura 56 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 64r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. 153
- Figura 57 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 128r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. 154
- Figura 58 – Exemplos de configurações com $N = 100$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 256r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e radial. 155
- Figura 59 – Exemplos de configurações com $N = 200$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e radial. 155
- Figura 60 – Exemplos de configurações com $N = 300$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal. 156

Figura 61 – Exemplos de configurações com $N = 400$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 128r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.	156
Figura 62 – Exemplos de configurações com $N = 500$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.	157
Figura 63 – Exemplos de configurações com $N = 600$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 128r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.	157
Figura 64 – Exemplos de configurações com $N = 700$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.	158
Figura 65 – Exemplos de configurações com $N = 800$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e radial.	158
Figura 66 – Exemplos de configurações com $N = 900$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.	159
Figura 67 – Exemplos de configurações com $N = 1000$ obtidos depois do processo de <i>annealing</i> para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.	159

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	CRISTAIS CONFORMES	30
1.1.1	Rede Conforme	30
1.2	CRISTAL ESTRITAMENTE CONFORME (CEC)	33
1.2.1	Cristal Estritamente Conforme - Simetria de Rotação	39
1.3	APROXIMAÇÃO LIMITE CONTÍNUO E PERFIL DE DENSIDADE ESTRITAMENTE CONFORME - (DEC)	42
1.4	GEOMETRIA CONFORME E DEFEITOS TOPOLÓGICOS	43
2	MODELO TEÓRICO E APROXIMAÇÃO NUMÉRICA	50
2.1	DINÂMICA MOLECULAR	51
2.1.1	Diferentes Algoritmos para integração das Equações de Newton . . .	52
2.2	MÉTODO ESTOCÁSTICO E DINÂMICA MOLECULAR DE LANGEVIN (DML)	55
2.3	FORMALISMO	58
3	CONFIGURAÇÕES ESTRUTURAIS E PROCESSO DE ANNEALING . .	65
3.1	MODELO E MÉTODO NUMÉRICO	66
3.2	CONFIGURAÇÕES DE EQUILÍBRIO	67
3.2.1	Sistemas Pequenos	69
3.2.2	Sistema Maiores e Estrutura dos defeitos Topológicos	72
4	PROPRIEDADES ESPECTRAIS	82
4.1	MODOS ELÁSTICOS NA APROXIMAÇÃO PARABÓLICA	83
4.2	MODOS ELÁSTICOS COM DENSIDADE QUASE-CONFORME	90
4.3	MODOS DE COMPRESSÃO E CISALHAMENTO	93
5	ESTABILIDADE TÉRMICA	103
5.1	GRANDEZAS ANALISADAS	104
5.2	RESULTADOS E DISCUSSÃO	105
6	TENSÃO DE CISALHAMENTO	113

6.1	MODELAGEM DA TENSÃO DE CISALHAMENTO	114
6.2	RESPOSTA A TENSÃO DE CISALHAMENTO DE CONFIGURAÇÕES CONCÊNTRICA, QUIRAL E RADIAL	118
6.3	FASE PLÁSTICA DE CONFIGURAÇÕES CONCÊNTRICAS	122
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	135
	REFERÊNCIAS	139
	APÊNDICE A – OUTRAS CONFIGURAÇÕES DE MENOR ENERGIA .	148
	APÊNDICE B – ARTIGO PUBLICADO	160

1 INTRODUÇÃO

Havia um século na ponta do lápis,
 Não na que escreve.
 Na que segura borrachas!

A Espera - Juliano Holanda

Douday e Couder discutem a formação de um ordenamento cristalino, envolvendo a série de Fibonacci, fora do crescimento dinâmico da filotaxia observado em plantas. A partir de simulação experimento e simulação numérica, os mesmos padrões são obtidos a partir de uma auto-organização em um processo iterativo. O resultado é obtido através de um processo de crescimento dinâmico semelhante à formação de filotaxia de parasticidades em plantas, como uma tendência de evitar uma organização racional, periódica [2].

A estruturação e crescimento da planta é caracterizado por um espaçamento regular ao longo dos caules e ramos que a compõe. Esse arranjo é conhecido como filotaxia (do grego: *phýllon* que significa "folha" e *táxis* que significa "arranjo"). Kuhlemeier classifica os padrões de parasticidades em quatro tipos de filotaxia: descontínua, espiralada, espiral e multijugado [12, 13], sendo a mais comum a filotaxia espiral na sequência de Fibonacci [14, 15]. Na Fig. 1 mostramos alguns exemplos de parasticidades observadas na natureza. Na primeira fileira temos exemplificadas as espécies *Pinus sp.*, *Aloe polyphylla* e *Dahlia sp.*, na segunda, *Crassula sp.*, *Helianthus annuus* e *Taraxacum officinale*, respectivamente.

Através de experimento com esferas magnéticas interagindo repulsivamente entre si e formando uma rede periódica, e submetidas a uma força externa, tal como gravidade ou gradiente de campo magnético, Rothen *et al.* observam a formação de estrutura altamente ordenada que pode ser descrita por uma transformação conforme da rede periódica. Essa estrutura é chamada de cristal conforme [16].

Em 1996, Rothen e Pieranksi passam a analisar qual a relação entre o mapeamento conforme e as características geométricas. Eles demonstram que com um único módulo de elasticidade pode descrever as propriedades elásticas dos cristais conformes. Além de

Figura 1 – Exemplos de parasticidades observadas na natureza. Na primeira fileira temos exemplificadas as espécies *Pinus sp.*, *Aloe polyphylla* e *Dahlia sp.*, na segunda fileira *Crassula sp.*, *Helianthus annuus* e *Taraxacum officinale*, respectivamente. Figuras extraídas da Ref. [1]

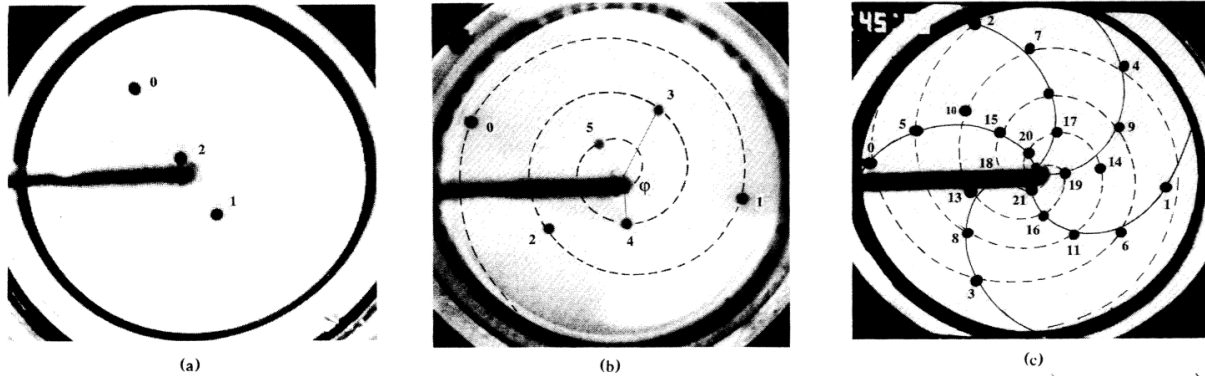


Fonte: Figuras extraídas da Ref. [1].

calcularem qual a distorção de um cristal estritamente quando um campo de força induz uma pequena deformação [4]. Drenckhan *et al.* Reproduzem experimentalmente mapas conformes de uma rede hexagonal, como os favos de mel, produzindo espumas entre duas superfícies de vidro adequadamente angulada ou curvada. Impondo uma variação específica da área da bolha. A estrutura reproduz mapas conformes hexagonal com uma boa aproximação quando mapeadas em um plano com densidade uniforme [6].

Douady e Couder apresentam uma série de artigos [2, 17–19] em que os diversos modos filotáticos estão relacionados a sucessivas interações entre dois possíveis sistemas dinâmicos simples. Os padrões são obtidos experimentalmente e numericamente, surgindo através de uma auto-organização em um processo interativo. Experimentalmente, gotas de ferrofluido são utilizadas para simular a formação das parastiches. Três fotografias para diferentes padrões de formação são apresentadas na Fig. 2. Essa ordenação se deve à tendência do sistema em se distanciar de um ordenamento hexago-

Figura 2 – Três fotografias do experimento. Os números mostram a ordem de deposição das gotas (origem arbitrária). (a) $\varphi = 180^\circ$, (b) $\varphi = 150^\circ$ e (c) $\varphi \approx 139^\circ$ (espiral de Fibonacci). Figuras extraídas da Ref. [2].



Fonte: S. Douady and Y. Couder [2].

nal periódico [17]. Surge, então, a questão de saber se cristais espirais semelhantes, de partículas semelhantes, poderiam resultar de uma minimização global de energia, e não de um processo dinâmico específico, e quão estável seria esse sistema.

Neste trabalho, demonstramos que um sistema 2D de partículas interativas de longo alcance, confinado a um potencial externo projetado adequadamente, pode cristalizar em configurações não homogêneas altamente ordenadas, caracterizadas por linhas cristalinas em espiral. Dependendo da intensidade do potencial confinante, o conjunto de linhas espirais cristalinas principais pode ser: (i) quiral, com quiralidade geral para dextrógiros ou levógiros, ou (ii) não quiral, com duas linhas cristalinas principais em espiral de quiralidade oposta e a terceira consistindo em círculos concêntricos ou linhas radiais. Em contraste com os clusters homogêneos, como os encontrados em armadilhas harmônicas, a carga topológica induzida pela geometria é concentrada no núcleo da configuração, enquanto o restante do cristal está quase livre de defeitos [Cap. 3]. Dentre as configurações obtidas, investigamos a dinâmica de algumas configurações de menor energia e metaestáveis, estudando os seus modos elásticos. Esses modos elásticos correspondem a uma mistura entre os modos de cisalhamento e compressão. Um comportamento característico é observado para os automodos de baixa energia, que corresponde ao modo de cisalhamento. Enquanto que o comportamento do modo de compressão é mais relevante nos automodos mais elevados, apresentando-se de maneira peculiar ao observado quando confinado por um potencial parabólico [Cap. 4]. Essas estruturas são resistentes a flutuações térmicas até um certo limite de temperatura, acima do qual a carga líquida topológica começa a migrar do núcleo para o corpo do

cristal. Concomitantemente, à medida que a temperatura aumenta acima do limite, distribuições localizadas de carga neutras, como deslocações e pregas, proliferam e o cristal derrete progressivamente do centro para a borda [Cap. 5]. Analisamos esses resultados à luz de uma aproximação de campo médio, que permite associar a curvatura gaussiana local do cristal à distribuição de defeitos. Também discutimos a estabilidade do cristal em relação à tensão de cisalhamento produzida por um campo de força azimutal não uniforme [Cap. 6].

Esse capítulo é organizado da seguinte maneira. Inicialmente, faremos um apanhado geral sobre cristais conformes e rede conforme, na Seção 1.1. Na Seção 1.2 mostraremos as circunstâncias nas quais um conjunto de partículas constitui um cristal estritamente conforme (CEC) e o tipo de simetria que estaríamos interessados. Na Seção 1.3, através da aproximação do limite contínuo, minimizaremos o funcional da energia livre do sistema para obter o potencial confinador que satisfaça a densidade não-uniforme, discutida na seção anterior. Por fim, na Seção 1.4 discutiremos os efeitos da geometria conforme e dos defeitos topológicos em nosso sistema.

1.1 CRISTAIS CONFORMES

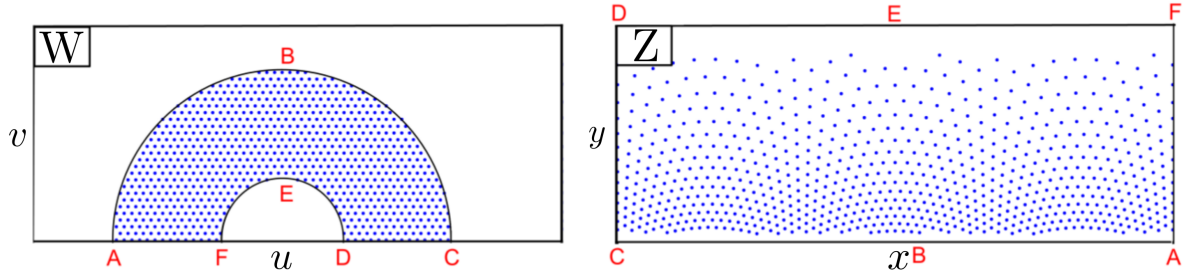
Nessa seção abordaremos o ordenamento estrutural que pode ser formado quando distribuímos as partículas de forma não uniforme. Em uma situação de densidade uniforme, sabemos que as partículas tendem a convergir para um mínimo de energia apresentando ordenamento de uma rede triangular. Faremos uma revisão conceitual de cristais conformes e usaremos um método simples para calcular o potencial externo, capaz de equilibrar tais estruturas conformes [20].

1.1.1 Rede Conforme

Mapeamento conforme é um tema bastante estudado em análise complexa. Define-se uma função matemática que transforma um número do plano z , $z = x + iy$ em um outro número no plano w , $w(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, preservando a orientação e o ângulo. Os primeiros experimentos com cristais conformes indicaram um mapeamento conforme logarítmico, do tipo $w(z) = (1/i\alpha) \ln(i\alpha z)$ com $\alpha = \pi/L$, onde L é a base do retângulo, como possível solução para explicar configurações de *gravity rainbow* [4, 16].

Para satisfazer a definição de um cristal perfeito ou estritamente conforme,

Figura 3 – À esquerda, um seção semicircular de uma rede regular hexagonal no plano z . À direita, o mapeamento conforme usando a transformação $w(z) = (1/i\alpha)\ln(iaz)$ com $\alpha = \pi/L$, onde L é a base do retângulo, para ajustar a geometria semianular. As letras em vermelho são guias para identificar onde cada região está mapeada. Figura extraída e modificada da Ref.[3].



Fonte: Figura extraída e modificada da Ref. [3].

proposto por Rothen *et al.* [4, 16], o cristal precisa obedecer às condições analíticas do mapeamento que o define. Reproduziremos os procedimentos utilizados para calcular o equilíbrio mecânico de cristais conformes, nos quais as partículas interagem através de forças isotrópicas tipo lei de potência [4]. Outros trabalhos de referência podem ser encontrados em [6, 16, 21, 22].

Consideremos um conjunto de partículas pontuais interagindo através de forças isotrópicas tipo lei de potências e distribuídas em uma estrutura hexagonal regular. Vamos analisar como o sistema se acomoda sob um mapeamento conforme e quais condições devemos satisfazer para que seja considerado um cristal conforme.

Consideremos uma transformação genérica, dada por

$$w = f(z) = u(x, y) + iv(x, y), \quad (1.1)$$

que mapeia uma estrutura hexagonal perfeita do plano z em uma estrutura conforme no plano w . A distância entre as partículas será alterada, de acordo com a métrica do espaço transformado (mas preservando a orientação e o ângulo entre os vetores distâncias), dada por

$$ds_w^2 = du^2 + dv^2, \quad (1.2)$$

onde nós podemos reescrever du e dv como

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy \quad ; \quad dv = \frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy. \quad (1.3)$$

$f(z)$ é dita conforme se, somente se, f é uma função analítica de z , i.e., $f(z)$ deve satisfazer as relações de Cauchy-Riemann [23]

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (1.4)$$

Substituindo as Eqs. (1.3) em (1.2) e usando as relações de Cauchy-Riemann, podemos reescrever a Eq. (1.2) como

$$ds_w^2 = \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 ds_z^2, \quad (1.5)$$

onde $ds_z^2 = dx^2 + dy^2$ é a métrica do espaço original. Note que a Eq. (1.5) implica em uma relação entre os elementos de área de cada espaço, dado por $da_w = |dw/dz|^2 da_z$. Consequentemente, desde que a densidade local das partículas seja dada pelo número de pontos por unidade de área, a rede conforme apresenta uma densidade de partículas dada por

$$n_w = n_z \left| \frac{dz}{dw} \right|^2, \quad (1.6)$$

onde n_z é a densidade de partículas no plano original. Para uma rede hexagonal a densidade é $n_z = 2/\sqrt{3}b^2$, onde b é a distância entre os vizinhos mais próximos.

A derivada de w em relação a z , que definiremos como $\zeta(w) \equiv dw/dz$, contém todas as informações sobre a geometria da rede deformada em torno de w . Rothen [4] se refere a $\zeta(w)$ como uma sendo distorção no plano complexo (*complex distortion*), que pode ser reescrita como

$$\zeta(w) = |\zeta| e^{i\phi}, \quad (1.7)$$

onde ϕ é uma fase. Sendo Δz o vetor no plano z que conecta dois pontos vizinhos, e Δw o mapa desse vetor no plano w

$$\begin{aligned} \Delta z &= |\Delta z| e^{i\phi_z}, \\ \Delta w &= |\Delta w| e^{i\phi_w}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

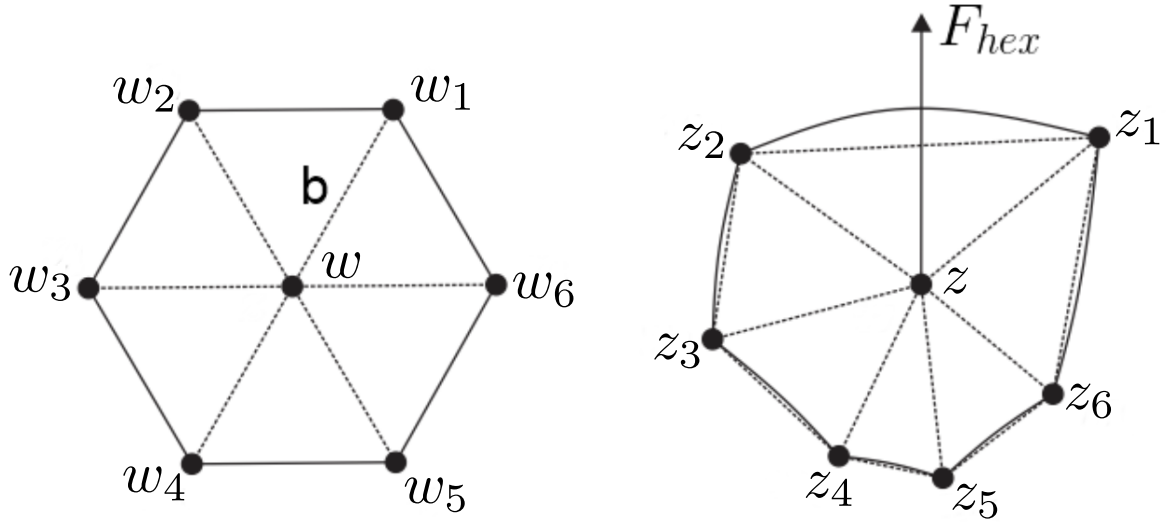
Fazendo uma expansão de Δw em relação a Δz , temos

$$|\Delta w| e^{i\phi_w} = \Delta w = \frac{dw}{dz} \Delta z + O(\Delta z^2). \quad (1.9)$$

Considerando que Δz é muito menor do que o comprimento característico em que a função $w(z)$ muda consideravelmente e usando as Eqs. (1.7) e (1.8), a Eq. (1.9) se torna

$$|\Delta w| e^{i\phi_w} \approx |\zeta| |\Delta z| e^{i(\phi_z + \phi)}. \quad (1.10)$$

Figura 4 – À direita: exemplo da distribuição das partículas no plano z . À esquerda: transformada do hexágono original no plano w . Figura extraída e modificada da Ref.[4].



Fonte: Figura extraída e modificada da Ref. [4].

Aqui, ϕ está diretamente relacionado ao ângulo no qual o hexágono da rede conforme foi girado em relação ao hexágono correspondente da rede original, e $|\zeta|$ indica a dilatação das distâncias entre as partículas vizinhas de w .

1.2 CRISTAL ESTRITAMENTE CONFORME (CEC)

Um conjunto de partículas constitui um cristal estritamente conforme (CEC) se cada partícula estiver posicionada exatamente nos locais da rede conforme. Considerando um par de partículas, i e j , pertencentes a um CEC e interagindo através de uma força repulsiva, F_{ij} , dada por

$$F_{ij} = A \frac{z_j - z_i}{|z_j - z_i|^{k+2}}, \quad (1.11)$$

onde k é um expoente fixo e A é uma constante positiva. Vamos calcular a força total que partículas posicionadas nos vértices do hexágono z_l , $l = 1, 2, \dots, 6$, exercem em uma partícula localizada no centro desse mesmo hexágono, ver Fig. 4.

O hexágono original, no plano w , é exemplificado na Fig. 4 (esquerda), onde nós definimos w_l como as posições dos vértices e w como a posição central. Nós podemos reescrever w_l como

$$w_l = w + b e^{i\alpha_l}, \quad (1.12)$$

onde b é a distância entre o centro e os vértices do hexágono, $\alpha_l = l\pi/3$, e $l = 1, 2, \dots, 6$. Sendo assim, podemos escrever $\Delta w = w_l - w = be^{i\alpha_l}$. Assumindo que b é muito menor do que o comprimento característico, r , em que a função $z(w)$ muda consideravelmente, temos

$$\frac{1}{|z|} \left| \frac{dz}{dw} \right| \approx \frac{1}{r} \quad \text{e} \quad \frac{b}{r} \ll 1. \quad (1.13)$$

Analogamente à Eq. (1.9), podemos expandir Δz como

$$z_l - z = \Delta z = \frac{dz}{dw} \Delta w + \frac{1}{2} \frac{d^2 z}{dw^2} (\Delta w)^2 + \mathcal{O}(\Delta w^3). \quad (1.14)$$

Definindo $\eta(z) \equiv d^2 z / dw^2 = |\eta| e^{i\psi}$ e usando a Eq. (1.12), a Eq. (1.14) pode ser reescrita como

$$z_l - z = |\zeta| b e^{i(\alpha_l + \phi)} + \frac{1}{2} |\eta| b^2 e^{i(2\alpha_l + \psi)} + \mathcal{O}(b^3), \quad (1.15)$$

e,

$$\frac{1}{|z_l - z|^{k+2}} = \left[\frac{1}{b|\zeta|} \right]^{k+2} \left[1 - \frac{k+2}{2} b \left| \frac{\eta}{\zeta} \right| \cos(\alpha_l + \psi - \phi) \right] + \dots, \quad (1.16)$$

onde usamos uma expansão binominal. Com isso, a força atuando na partícula central produzida pela partícula em z_l , pode ser escrita como

$$F_l = A \frac{z - z_l}{|z - z_l|^{k+2}} = F_l^x + iF_l^y. \quad (1.17)$$

Usando as Eqs. (1.15), (1.16) e (1.17), nós obtemos a força total que atua sobre a partícula central, F_{hex} , produzida pelas partículas localizadas em cada um dos vértices do hexágono ($z_1, \dots, z_6$).

$$\begin{aligned} F_{hex} &= \sum_{l=1}^6 F_l = -A \sum_{l=1}^6 \left[\frac{1}{b|\zeta|} \right]^{k+1} \left[e^{i(\alpha_l + \phi)} + \frac{b|\eta|}{2|\zeta|} e^{i(2\alpha_l + \psi)} \right] \\ &\quad \left[1 - \frac{k+2}{2} b \left| \frac{\eta}{\zeta} \right| \cos(\alpha_l + \psi - \phi) \right] + \dots \end{aligned} \quad (1.18)$$

Como $\sum_{l=1}^6 e^{i\alpha_l} = \sum_{l=1}^6 e^{i2\alpha_l} = 0$, o termo evanescente da Eq. (1.18) corresponde ao produto $e^{i(\alpha_l + \phi)} \cos(\alpha_l + \psi - \phi)$, i.e.,

$$F_{hex} = A \frac{k+2}{z} \frac{|\eta|}{b^k |\zeta|^{k+2}} \sum_{l=1}^6 e^{i(\alpha_l + \phi)} \cos(\alpha_l + \psi - \phi) + \mathcal{O}(b/r) \quad (1.19)$$

Podemos ainda reescrever o cosseno em termos de exponenciais, $\cos(\theta) = (e^{i\theta} + e^{-i\theta})/2$, e calcular a contribuição de todas as seis partículas. Com isso, a Eq. (1.19) resulta em

$$F_{hex} = A \frac{k+2}{2} \frac{|\eta|}{b^k |\zeta|^{k+2}} 3e^{i(2\phi-\psi)} + \mathcal{O}(b/r) = F_{hex}^x + iF_{hex}^y. \quad (1.20)$$

Note que, na Eq. (1.20), F_{hex} depende explicitamente da orientação específica do hexágono, ϕ . Podemos evitar essa dependência se reescrevermos F_{hex} em termos da densidade de partículas. Definimos um operador gradiente, atuando no plano z , como sendo $\nabla = \partial/\partial x + i\partial/\partial y$, atuando na densidade do CEC. Usando a Eq. (1.6), teremos

$$\nabla n_z = n_w \frac{\partial}{\partial x} \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 + i n_w \frac{\partial}{\partial y} \left| \frac{dw}{dz} \right|^2, \quad (1.21)$$

onde,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{dw}{dz} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* \right] = \frac{\partial z}{\partial x} \frac{d^2 w}{dz^2} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* + c.c., \quad (1.22)$$

onde a^* é o complexo conjugado de a . Usando $\partial z/\partial x = 1$, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial x} \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 = \frac{d^2 w}{dz^2} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* + \left[\frac{d^2 w}{dz^2} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* \right]^*. \quad (1.23)$$

Do mesmo modo,

$$\frac{\partial}{\partial y} \left| \frac{dw}{dz} \right|^2 = i \frac{d^2 w}{dz^2} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* - i \left[\frac{d^2 w}{dz^2} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* \right]^*. \quad (1.24)$$

Portanto, usando as Eqs. (1.21), (1.23) e (1.24) e a densidade $n_w = 2/\sqrt{3}b^2$ para uma rede hexagonal, nós obtemos

$$\nabla n_z = \frac{4}{\sqrt{3}b^2} \left[\frac{d^2 w}{dz^2} \left(\frac{dw}{dz} \right)^* \right]^*, \quad (1.25)$$

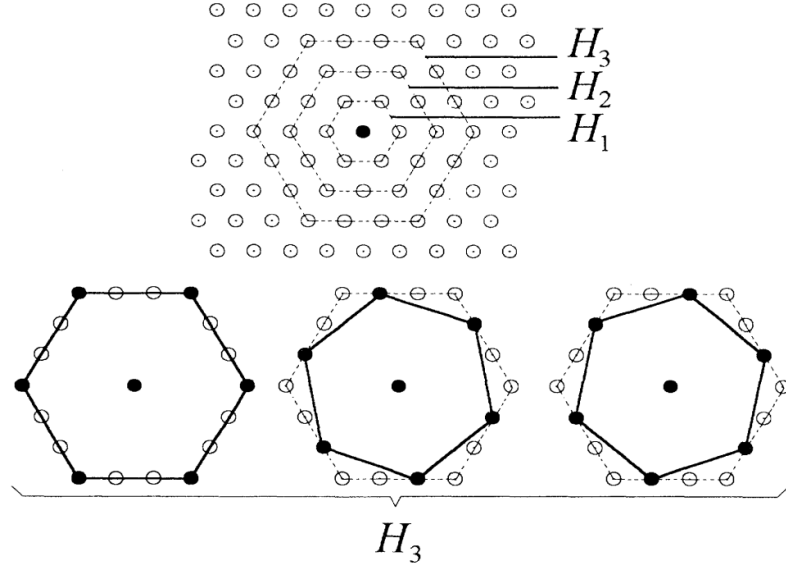
onde,

$$\frac{d^2 w}{dz^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{dw}{dz} \right) = \frac{dw}{dz} \left[\frac{d}{dw} \left(\frac{dw}{dz} \right) \right] = -\frac{d^2 z}{dw^2} \left(\frac{dz}{dw} \right)^{-3}. \quad (1.26)$$

Por fim, usando $d^2 z/dw^2 = |\eta|e^{i\psi}$ e $dz/dw = |\zeta|e^{i\phi}$, o gradiente de densidade de CEC pode ser escrito através da equação

$$\nabla n_z = -\frac{4}{\sqrt{3}b^2} \frac{|\eta|}{|\zeta|^4} e^{i(2\phi-\psi)}. \quad (1.27)$$

Figura 5 – Representação esquemática das famílias de hexágonos centradas em uma posição w . H_n representa a quantidade n de hexágonos com tamanhos entre $d = (\sqrt{3}/2)nb$ e $d = nb$. As três possibilidades de H_3 são mostradas em destaque. Figura extraída da Ref.[4].



Fonte: Rothen e Pierański [4].

Analogamente, podemos obter a expressão para $\nabla(n_z^{k/2}) = (k/2)n_z^{(k/2)-1}\nabla n_z$. Comparando com a Eq. (1.20), podemos obter

$$F_{hex} = -A \left(\frac{k+2}{k} \right) \frac{3^{(k+4)/4}}{2^{(k+2)/2}} \nabla(n_z^{k/2}), \quad (1.28)$$

onde consideramos o plano complexo como sendo o plano uv , i.e., $\mathbf{a} = (a^x, a^y)$ representa um vetor em coordenadas Cartesianas. Note que, agora F_{hex} depende apenas do tipo de força de interação, dado por A e k , e do gradiente do CEC.

A Eq. (1.28) representa a força que atua em uma partícula do CEC devido aos seis vizinhos mais próximos. Para calcularmos a contribuição das demais partículas, podemos decompor a rede em hexágonos concêntricos de diferentes tamanhos e orientações, como mostrado na Fig. 5. A contribuição de cada hexágono será dada pela Eq. (1.28), reescalada para os correspondentes tamanhos. Um hexágono em que a distância, d , do centro difere de b por um fator multiplicativo, α , i.e., $d = \alpha b$, temos uma contribuição de $(1/\alpha^k)F_{hex}$, ver Eq. (1.20). Mantendo a definição das família dos hexágonos $H_1, H_2, \dots$, como mostrado na Fig. 5, a primeira família, H_1 , tem apenas um hexágono exercendo uma força F_{hex} na partícula central; H_2 contribui com dois hexágonos, um com lado $d = 2b$ e outro com $d = \sqrt{3}b$, então a contribuição de H_2 para a força total, F_{int} , é dada

por $(1/2^k)F_{hex} + (1/3^{k/2})F_{hex}$. Portanto, a contribuição da família H_n , com n hexágonos com tamanhos entre $d = (\sqrt{3}/2)nb$ e $d = nb$, para $n > 2$, para a força total, não é maior do que $n[1/(n\sqrt{3}/2)^k]F_{hex}$. Podemos expressar a força que atua na partícula central como

$$\mathbf{F}_{int} = f(k)\mathbf{F}_{hex}, \quad (1.29)$$

onde

$$1 < f(k) < 1 + \frac{1}{2^k} + \frac{1}{3^{k/2}} + \sum_{n=3}^{\infty} n \left(\frac{2}{n\sqrt{3}} \right)^k \equiv g(k). \quad (1.30)$$

Note que $g(k)$ converge apenas para $k > 2$. Usando a Eq. (1.28), podemos reescrever a força total como

$$\mathbf{F}_{int} = -AJ(k)\nabla(n_z^{k/2}) \quad , \quad k > 2, \quad (1.31)$$

onde

$$J(k) \cong \left[\frac{k+2}{k} \right] \frac{3^{(k+4)/4}}{2^{(k+2)/2}} g(k) \quad , \quad k > 2. \quad (1.32)$$

Se o potencial é de curto alcance ($k > 2$), a Eq. (1.31) é uma boa aproximação quando a influência dos vizinhos mais próximos é muito maior do que a influência das partículas adicionais, e os hexágonos com d/r não muito menores que 1 (condição assumida na Eq. (1.13)) têm influência desprezível. Um exemplo disso, é o experimento de *gravity rainbow* proposto por Rothen, onde as esferas magnetizadas interagem através de um potencial $U \sim 1/r^3$, que implica em $k = 3$. Note também que, para um sistema contendo um número fixo de partículas, a soma da Eq. (1.30) é finita, independentemente de k .

A Eq. (1.31) é calculada considerando $z(w)$ e dz/dw funções analíticas de w . Dessa maneira, é esperado que exista $\phi(z)$ tal que $\zeta(z) = |\zeta|e^{i\phi}$ seja uma função analítica de z . Portanto, podemos usar a relação de Cauchy-Riemann [Eq. (1.4)] como

$$\frac{\partial |\zeta|}{\partial x} = |\zeta| \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad \frac{\partial |\zeta|}{\partial y} = -|\zeta| \frac{\partial \phi}{\partial x}. \quad (1.33)$$

Da relação de Cauchy-Riemann, nós obtemos

$$\nabla^2 \ln |\zeta| \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln |\zeta| + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \ln |\zeta| = 0 \quad (1.34)$$

Usando isso, além de um fator constante $n_z = |\zeta|^{-2}$, ver Eq. (1.6), a Eq. (1.34) resulta em

$$\nabla^2 \ln(n_z) = 0. \quad (1.35)$$

Comparando a equação acima com Eq. (1.31), também obtemos

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{F}_{\text{int}}}{A n_z^{k/2}} \right) = 0. \quad (1.36)$$

As Eqs. (1.35) e (1.36) representam as condições na qual as forças internas e a densidade de partículas deve satisfazer para estarem em concordância com a analiticidade do mapeamento conforme. O campo externo de forças necessário para alcançar o equilíbrio mecânico do CEC é determinado por $\mathbf{F}_{\text{int}} + \mathbf{F}_{\text{ext}} = 0$. Das Eqs. (1.31) e (1.36), temos

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = A J(k) \nabla(n_z^{k/2}), \quad (1.37)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{F}_{\text{ext}}}{A n_z^{k/2}} \right) = 0. \quad (1.38)$$

Essas duas equações definem o campo de força externo necessário para estabilizar CEC. Rothen *et al.* [4] mostram, através de simulação numérica, que as Eqs. (1.37) e (1.38) descrevem de maneira satisfatória as forças de equilíbrio em um CEC em diferentes simetrias (planar e radial) para $U(r) \sim 1/r^3$.

Com isso, a Eq. (1.35) nos fornece a distribuição de densidade de partículas de um CEC para qualquer mapeamento conforme, e a Eq. (1.37) o campo de força externo necessário para equilibrá-lo. Entretanto, a expressão obtida na Eq. (1.37) é limitada, isso porque é válida apenas no limite em que a distância entre as partículas é pequena

[Eq. (1.13)] e para interações de leis de potência com $k > 2$ [Eq. (1.11)]. Essa limitação restringe o formalismo para algumas leis importantes de interação, como Coulomb e logarítmica, além de interações entre vórtices, seja em materiais espessos ou em filmes finos. Uma outra teoria mais abrangente, faz-se necessária.

1.2.1 Cristal Estritamente Conforme - Simetria de Rotação

Como visto na seção anterior, uma transformação conforme é uma ferramenta matemática que mapeia um domínio no plano complexo $z = x + iy$ no plano $w = u + iv$, preservando o ângulo entre duas curvas de interseção dentro do domínio. No contexto de cristais 2D, uma rede hexagonal regular pode ser mapeada através de uma transformação conforme nos chamados cristais conformes. Apesar de resultar em uma densidade diferente de pontos, a transformação conforme preserva a simetria hexagonal local da rede original. A transformação resulta em uma densidade única, geralmente não uniforme, dada por

$$n_z = n_w \left| \frac{dw}{dz} \right|, \quad (1.39)$$

onde $n_w = \text{const.}$ que representa a densidade uniforme dos pontos na rede hexagonal original. Além disso, para cumprir a analiticidade imposta pelo mapa conforme, o logaritmo da densidade transformada deve satisfazer a equação de Laplace [4, 24]

$$\nabla^2 \ln(n_z) = 0. \quad (1.40)$$

Para um sistema com simetria de rotação, i.e., $n_z = n_z(r)$, onde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, reescrevendo a Eq. (1.40) em coordenadas polares (r, ϕ) , teremos

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \ln(n_z) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \ln(n_z) = 0 \implies \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{n_z} \frac{\partial n_z}{\partial r} \right) = 0. \quad (1.41)$$

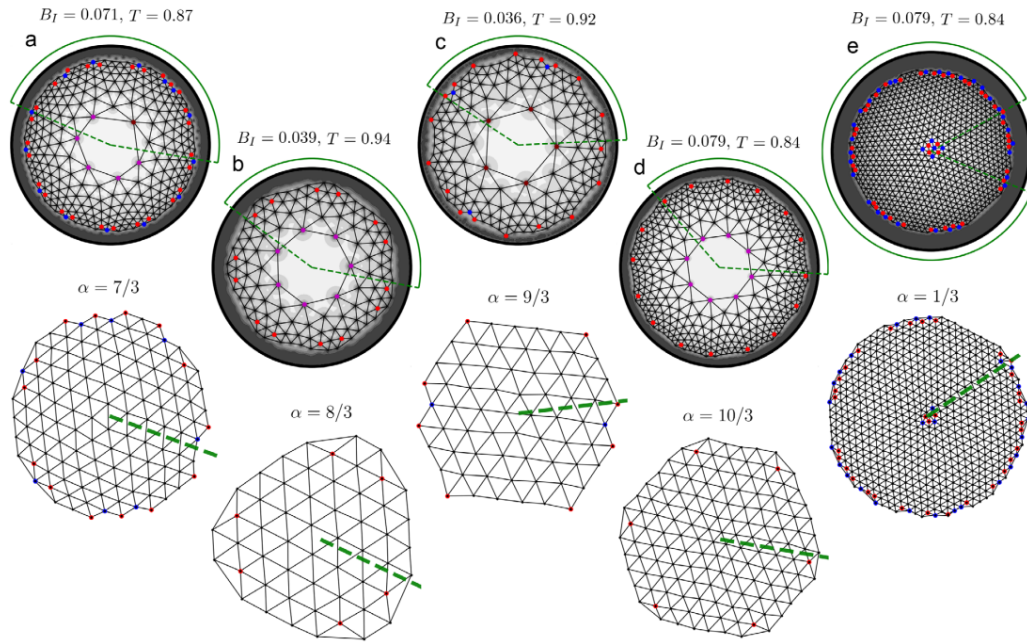
Portanto,

$$\frac{r}{n_z} \frac{\partial n_z}{\partial r} = \text{const}, \quad (1.42)$$

que tem como solução

$$n_z = ar^\alpha, \quad (1.43)$$

Figura 6 – Na parte superior, são mostrados os estados obtidos em diferentes valores da temperatura T e da densidade de fluxo B_I produzida por uma bobina ou ímã no centro da amostra. A triangulação mostra os resultados das transformações conformes $w = z^{1+\alpha/2}$, aplicadas nas configurações acima delas. A simetria triangular levemente deformada das configurações transformadas no plano w caracteriza a natureza conforme do cristal no plano z . Figura extraída da Ref.[5].



Fonte: Menezes *et al.* [5].

com a e α são constantes reais. Nesse caso, o mapa conforme correspondente pertence ao conjunto de transformações:

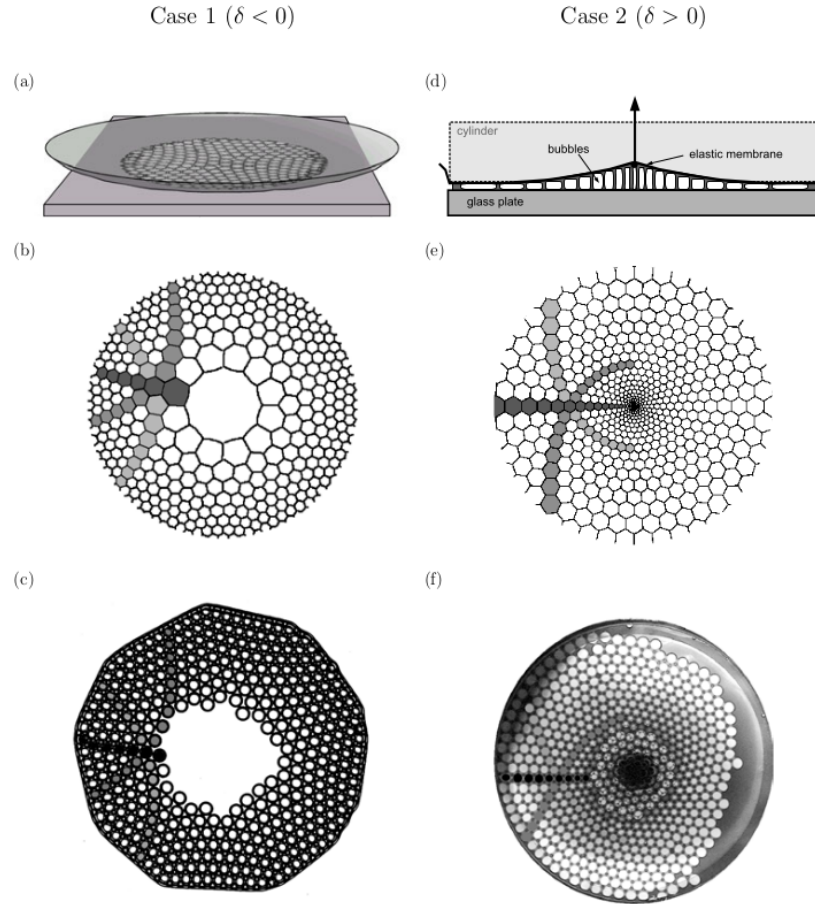
$$z = cw^{2/(\alpha+2)}, \quad \text{if } \alpha \neq -2, \quad (1.44a)$$

$$z = e^{cw}, \quad \text{if } \alpha = -2. \quad (1.44b)$$

onde $c = [n_w(\alpha + 2)^2/4a]^{1/(\alpha+2)}$ se $\alpha \neq -2$, e $c = \sqrt{n_w/a}$ se $\alpha = -2$. Neste trabalho, estaremos particularmente interessados no segundo caso ($\alpha = -2$), que corresponde a uma alta densidade no centro da amostra $n \propto 1/r^2$.

Sistemas que apresentam alta densidade longe do centro da amostra, caso descrito em (1.44a), já foram estudados em diversas situações com $\alpha > 0$ [5, 6]. Menezes *et al.* investigaram vórtices em um disco supercondutor do tipo-II submetido a potenciais de confinamento altamente não uniformes, produzidos por texturas magnéticas não homogêneas, ver Fig. 6. As configurações alcançadas, dependem do conjunto de

Figura 7 – Exemplos de dois casos generalizados que mostra a densidade de bolhas concentrada longe (a-c) e próximo (d-e) do centro da amostra para diferentes valores de $\alpha > 0$. Em (a) e (d) são mostrados os aparatos experimentais; em (b) e (e) a predição numérica; e em (c) e (f) os resultados experimentais para os dois casos genéricos. O sombreamento mostra como as linhas das células vizinhas são transformadas. Figura extraída da Ref.[6].



Fonte: Drenckhan *et al.* [6].

transformações conformes permitidas (diferentes valores de α), e dos parâmetros magnéticos e térmicos no qual o sistema é submetido. Drenckhan *et al.* [6] realizaram um experimento bidimensional onde espumas monodispersas são produzidas capturando uma camada de bolhas de volume igual entre duas superfícies de vidro, ver Fig. 7. Eles comparam as predições teóricas com resultados experimentais para sistemas 2D com simetria translacional, do tipo *gravity's rainbow* [4, 16], e rotacional, comumente referenciada em filotaxia e em sistemas com crescimento celular [25]. Destacamos que o nosso caso de interesse é $\alpha = -2$, que será discutido em detalhes no Cap. 2.

1.3 APROXIMAÇÃO LIMITE CONTÍNUO E PERFIL DE DENSIDADE ESTRITAMENTE CONFORME - (DEC)

Considerando um sistema de N partículas interagindo via potencial $V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ e sujeito a um potencial externo $U(r)$, a energia livre do sistema, $\mathcal{F}$, dentro da aproximação contínua, pode ser expressa como [26]

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (1.45)$$

onde o primeiro termo da integral representa a auto-energia de cada partícula sob o potencial externo $U(r)$ e o segundo se refere a energia de interação entre as partículas, $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de distribuição de duas partículas. Considerando que o espaçamento entre as partículas é menor que qualquer outra escala de comprimento relevante, n_2 pode ser aproximado como $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')$.

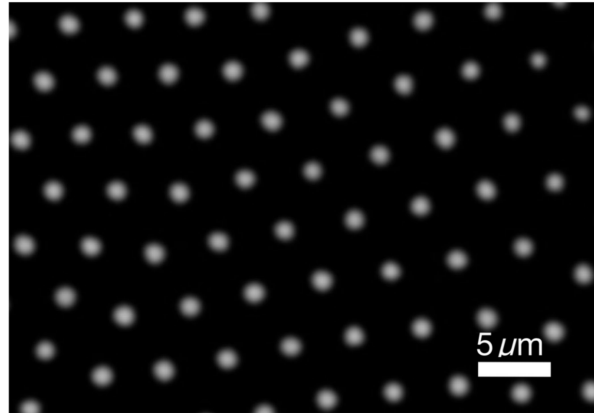
Note que, para um dado $n(\mathbf{r})$, nós podemos encontrar um potencial externo que minimiza a energia, minimizando o funcional $\mathcal{F}$ com respeito a $n(\mathbf{r})$. Esta minimização resulta na condição

$$U(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}') V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + C, \quad (1.46)$$

onde C é uma constante a ser determinada pela condição $\int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = N$. Da Eq. (1.46), podemos calcular qual o potencial capaz de acomodar as partículas, com um perfil de densidade estritamente conforme (DEC) escolhendo $n(\mathbf{r})$ como na Eq. (1.44).

Para elucidar o método da aproximação contínua, tomamos como exemplo o caso descrito na Ref. [20], onde um potencial de confinamento unidimensional, $U(y)$, é considerado para confinar vórtices. Nesta situação, a única transformação que produz um perfil de densidade 1D é dado por $z(w) = -il \ln(iw/l)$ [4, 21]. A densidade conforme, no plano físico, é dada por $n(y) = n_0 e^{-2y/l}$, onde n_0 é dado pela condição de conservação de partículas no sistema, $\int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N$. Além disso, para um número finito de vórtices, considera-se que o potencial é periódico em um comprimento L , de modo que $U(y + L) = U(y)$, além de condições periódicas em x , também sobre um comprimento L . Para um mapeamento que leve um retângulo de base L para uma região semianular, é fixado $l = L/\pi$. De modo que, se $l \ll 2L \implies n_0 \simeq 2N/l$.

Figura 8 – Partículas em uma interface óleo-água. As partículas interagem repulsivamente, formando uma rede triangular, na ausência de um potencial de confinamento espacialmente variável. Figura extraída da Ref.[7].



Fonte: Soni *et al.* [7]

Em um supercondutor espesso de espessura $d \gg \lambda$, onde λ é o comprimento de penetração de London[§], os vórtices interagem entre si através do potencial de interação dado por $V_{int} = \varepsilon_0 K_0(r/\lambda)$, onde $K_0(z)$ é uma função de Bessel modificada de ordem zero do segundo tipo e $\varepsilon_0 = \phi_0^2 d / 2\pi \mu_0 \lambda^2$, com ϕ_0 sendo o fluxo de quantum e μ_0 é o coeficiente de permeabilidade magnética do vácuo. Assumindo ainda que $l \gg \lambda$, a aproximação local permanece válida, e o potencial confinante pode ser escrito como

$$U(y) = \begin{cases} -gn_0 y / \tilde{\xi} & , \quad 0 \leq y < \tilde{\xi}, \\ -gn_0 e^{-2(y-\tilde{\xi})/l} & , \quad \tilde{\xi} \leq y \leq L, \end{cases} \quad (1.47)$$

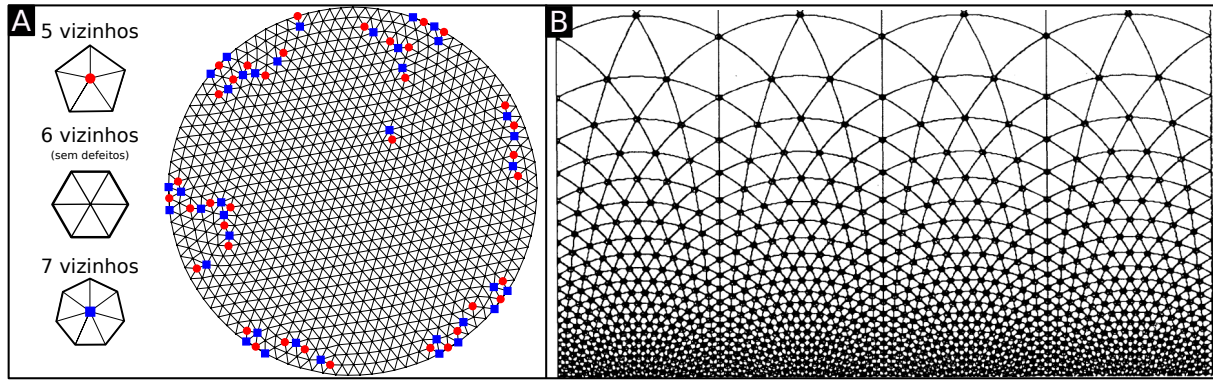
onde o primeiro termo corresponde ao confinamento da distribuição na região $y > 0$, com $g = \phi_0^2 / \mu_0$. A fim de assegurar a conservação da vorticidade, a largura da parede $\tilde{\xi}$ foi definida de modo que a força máxima exercida pelo potencial de confinamento, $gn_0 / \tilde{\xi}$ seja menor do que a força de desassociação entre o par vórtice-antivórtice.

1.4 GEOMETRIA CONFORME E DEFEITOS TOPOLÓGICOS

Já se tem conhecimento de que em um sistema bidimensional e na ausência de um potencial de confinamento, espacialmente variável, com um número infinito de partículas, elas formarão um rede triangular uniforme [ver Fig. 8] por todo o espaço.

[§] O comprimento de penetração de London é a distância característica da interface em que correntes elétricas e campos eletromagnéticos tem magnitude não desprezível.

Figura 9 – (A) Exemplo de uma configuração de um sistema em equilíbrio. Cada partícula é identificada e a estrutura resultante é triangulada [8]. Defeitos com 5 (7) vizinhos são coloridos em vermelho (azul). A carga líquida livre de defeitos resulta em ± 6 , conforme exigido por restrições topológicas. (B) Rede perfeitamente conforme usada na Ref. [4] para um modelo de partículas repulsivas em um campo gravitacional.



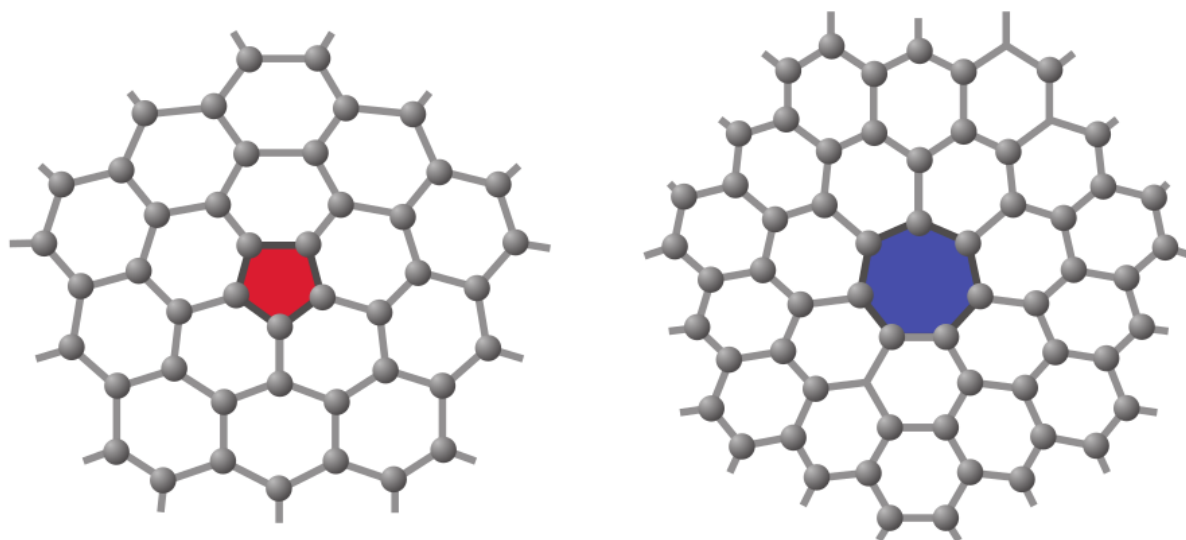
Fonte: O autor (2020) e Rothen e Pierański. [4]

Confinando as partículas, e.g., por uma parede, elas irão se acomodar na borda desse confinamento, se a interação for repulsiva. Com esse novo estado definido, podemos usar teoria da elasticidade [27, 28] para tratar os desvios desse novo estado cristalino, que podem resultar em compressão, cisalhamento ou defeitos topológicos.

Uma força de confinamento comprime as partículas, causando uma deformação da rede cristalina. Nos cristais (rede triangular), é possível observar padrões de defeitos, incluindo cicatrizes (*scars*) – que incluem cadeias de defeitos alternados de 5 (carga topológica positiva) e 7 (carga topológica negativa) vizinhos [29], ver Fig. 9. A presença desses defeitos é um indicativo de uma incompatibilidade entre a variação do espaçamento da estrutura e a estrutura triangular, sendo uma consequência do comportamento global do sistema. Na Fig. 9(B) mostramos uma estrutura livre de defeitos, onde cada partícula apresenta seu próprio espaçamento de rede, de maneira uniforme. Uma analogia pode ser feita à frustração encontrada ao buscar revestir uma superfície curva com um cristal triangular uniforme [30]. Notemos que, a frustração não é uma consequência inevitável da curvatura, uma vez que é possível revestir um cilindro perfeitamente, e sim de como ocorre essa curvatura.

Se a curvatura Gaussiana [31] está presente, a frustração torna-se inevitável. A curvatura Gaussiana é uma propriedade intrínseca das superfícies, onde a sua curvatura é invariante perante uma mudança de coordenadas. Uma vez que a colocação de um

Figura 10 – Representação esquemática de uma partícula com ordenamento com 5 vizinhos (à esquerda) e uma outra partícula com ordenamento de 7 vizinhos (à direita). Figura extraída da Ref. [9].



Fonte: Philip Kim [9]

cristal uniforme, em uma superfície com curvatura Gaussiana, fará com que as linhas da rede, que seriam paralelas, converjam ou diverjam, distorcendo a estrutura do estado cristalino. Os defeitos topológicos emergentes permitem que um cristal, de densidade uniforme, se adapte à superfície [30, 32–35].

Uma distribuição não uniforme de partículas interagentes é composta de defeitos topológicos, com prevalectimento de disclinações (*disclinations*) e deslocções (*dislocations*), frustrando a ordem global do sistema. As disclinações e deslocções são imperfeições plásticas características de um sólido deformado [22, 36]. Em uma rede triangular, uma disclinações pode ser descrita como uma deformação angular do cristal resultante da remoção (inserção) de uma fatia de ângulo $\pi/3$ [36] [ver Fig. 10]. Na Fig. 10 mostramos uma representação esquemática de uma partícula com ordenamento com 5 vizinhos (à esquerda) e uma outra partícula com ordenamento de 7 vizinhos (à direita). Nesse processo, a partícula perde (ganha) um vizinho, enquanto que as demais mantém sua coordenação com 6 vizinhos, em uma rede infinita triangular. Uma deslocção é um par de duas disclinações vizinhas com número de coordenação menor e maior do que seis (usualmente 5 e 7) [ver Fig. 9]. Definimos a carga topológica, descrita acima como uma disclinação, em um local de uma rede distorcida como

$$Q = \tilde{\nu} - \nu \quad (1.48)$$

onde ν corresponde ao número de coordenação real (i.e. o número de vizinhos mais próximos), e $\tilde{\nu}$ o valor de referência à uma rede perfeita. Para uma rede triangular, pertencentes ao interior da amostra $\tilde{\nu} = 6$, enquanto para os situados na borda $\tilde{\nu} = 4$. A carga topológica líquida do sistema é dada pela soma das cargas topológicas de cada sítio.

$$Q_{liq} = \sum_{i=1}^N Q_i = \sum_{i=1}^N (\tilde{\nu}_i - \nu_i), \quad (1.49)$$

onde N é o número de partículas no sistema e Q_i é carga isolada de uma disclinação. Pelo teorema de Euler [37, 38], essa carga líquida é invariante e sempre igual a 6. No limite de muitas deslocções, os defeitos podem ser descritos por meio de uma densidade de carga topológica [36]:

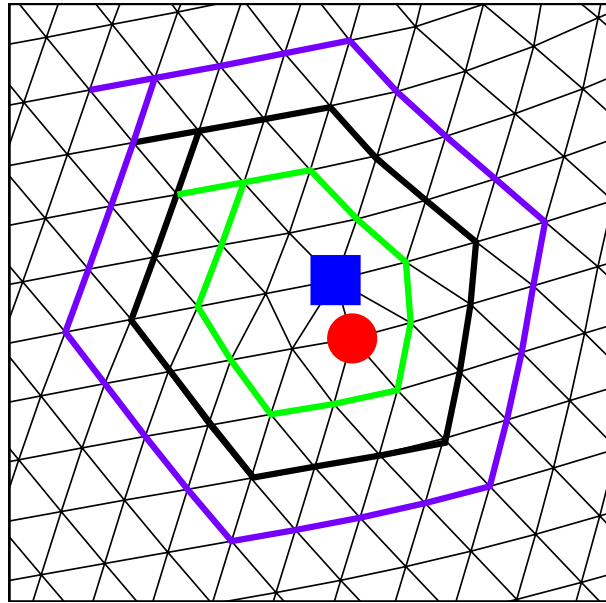
$$\sigma(\mathbf{r}) = \sum_i Q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - \nabla \cdot [\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{b}(\mathbf{r})], \quad (1.50)$$

onde $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ é a densidade do vetor de Burgers induzido pela deslocção. Fazendo uma analogia com a eletrostática, o termo $\nabla \cdot [\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{b}(\mathbf{r})]$, pode ser entendido como uma densidade de carga de polarização e $\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{b}(\mathbf{r})$ o vetor densidade de polarização. O vetor de Burgers indica a magnitude e a direção de uma distorção da rede cristalina, resultante do surgimento de defeitos topológicos no cristal. É possível interpretar a imperfeição da rede 2D [5, 22, 38], onde temos a indução de um gradiente no espaçamento da rede $a(\mathbf{r})$, através da equação:

$$\frac{\pi}{3} \mathbf{b}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{z}} \times a(\mathbf{r}) \nabla a(\mathbf{r})^{-1} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{z}} \times \nabla \ln n(r) \quad (1.51)$$

Um exemplo do vetor de Burgers é mostrado na Fig. 11. Desenhemos um circuito de Burgers em torno de uma deslocção, i.e., um circuito fechado em torno de um ponto da rede. Este ponto específico, apresenta um par de disclinações constituído de uma partícula com 5 vizinhos (círculo vermelho) e uma outra partícula com 7 vizinhos (quadrado azul), de modo que a carga topológica total de 0. Se não existem disclinações,

Figura 11 – Um zoom em uma região de carga topológica total de 0, porém com uma deslocação. Este ponto específico, apresenta um par de disclinações constituído de uma partícula com 5 vizinhos (círculo vermelho) e uma outra partícula com 7 vizinhos (quadrado azul), de modo que a carga topológica total de 0. Ao desenhar um circuito de Burgers em torno do limite da deslocação temos uma falha de fechamento que, com uma carga topológica nula, se mantém constante com a distância do centro.



Fonte: O autor (2020)

o circuito seria fechado ao voltar ao ponto inicial. Quando temos o surgimento de um defeito topológico, como mostrado na Fig. 11, o ponto final fica deslocado do ponto inicial. Esse deslocamento é o que caracteriza o vetor de Burgers, sendo este perpendicular à discrepância. Note que, apesar da carga topológica ser nula naquela região, a deslocação impede o fechamento que do circuito.

Nas Refs. [7, 31, 39], o arranjo de partículas distribuídas não uniformemente no espaço plano é mapeado em uma superfície curva, apresentando uma distribuição uniforme. Nessas transformações, as distâncias nas superfícies curvas e planas se relacionam por $ds'^2 = \gamma ds^2$, onde $\gamma = n(\mathbf{r})/n_0$ é o parâmetro de escala e n_0 é uma constante arbitrária que corresponde a uma distribuição uniforme na superfície curva. A curvatura Gaussiana pode ser parametrizada como [40]

$$K(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\gamma(\mathbf{r})} \nabla^2 \ln \gamma(\mathbf{r}). \quad (1.52)$$

A conexão entre a curvatura integrada sobre um remendo na superfície curva, $K \equiv dS' K(\mathbf{r})$ (onde dS' é o elemento de área nesse remendo) e sua carga topológica líquida,

Q , é determinada pelo Teorema de Gauss-Bonnet [41]

$$K = 2\pi\chi$$

onde χ é a característica de Euler do fragmento. Para uma rede triangular simplesmente conexa, $\chi = Q/6$. Usando a Eq. (1.52) e o teorema de Stokes, a curvatura em um contorno C é dado por

$$K = -\frac{1}{2} \oint_C d\ell \mathbf{u} \cdot \nabla \ln n = \frac{\pi}{3} Q, \quad (1.53)$$

onde $\mathbf{u}$ denota o vetor unitário normal a C e n a densidade de partículas. Q pode ser calculado integrando a Eq. (1.50) sobre a área fechada C . Para uma distribuição de partículas com simetria de rotação, da Eq. (1.53) a carga topológica dentro de um caminho circular de raio r é dada por

$$Q(r) = -3 \frac{r}{n} \frac{dn}{dr} \quad (1.54)$$

Vimos que cristais estritamente conformes (CEC) satisfazem a equação de Laplace Eq. (1.40). Sendo assim, da Eq. (1.53), a curvatura gaussiana local e, conseqüentemente, a carga topológica, em todo lugar em um cristal conforme é zero. A distribuição de defeitos na amostra não ocorre necessariamente de forma contínua, com a presença de linhas de defeitos, mas também com o aparecimento de defeitos isolados, as tais disclinações. Deformações da rede cristalina podem ser produzidas por disclinações nesses pontos isolados, onde a transformação não é analítica [22], ou a distribuição de carga topológica encontra-se em um domínio fora da aplicabilidade da transformação, denominada região não conforme.

Nos próximos capítulo apresentaremos o modelo teórico e formalismo adotado para obtermos as configurações homogêneas altamente ordenadas, apresentadas nessa introdução. No Cap. 3 mostraremos quais são configurações esperadas analiticamente e quais as obtidas através da dinâmica molecular. Apresentaremos no Cap. 4 uma análise espectral dos modos elásticos e os modos de compressão e cisalhamento, obtidos através das configurações de menor energia. Além disso, mostraremos como a carga topológica pode influenciar a estabilidade das estruturas cristalina, quando submetidas à flutuações

térmicas e diferentes regiões de confinamento e quantidades de partículas [Cap. 5]. Por fim, discutiremos a estabilidade do cristal em relação à tensão de cisalhamento produzida por um campo de força azimutal não uniforme [Cap. 6]. Os resultados dessa tese resultaram no artigo *Formation and stability of conformal spirals in confined 2D crystals*, ver Apêndice B.

2 MODELO TEÓRICO E APROXIMAÇÃO NUMÉRICA

Computadores fazem arte
 Artistas fazem dinheiro, dinheiro
 (...)
 Computadores avançam
 Artistas pegam carona
 Cientistas criam o novo
 (...)

Computadores Fazem Arte - Fred Montenegro

Ferramentas computacionais tiveram seu desenvolvimento intensificado durante a segunda guerra mundial. Tais ferramentas foram utilizadas para resolução de mensagens criptografadas e o desenvolvimento de armas nucleares. No pós-guerra, os computadores se tornaram acessíveis para parte da sociedade civil. Em 1946, John Eckter e John Mauchly colocaram em funcionamento o ENIAC (*Electronic Numerical Integrator and Computer*), o primeiro computador digital eletrônico de grande escala [42, 43].

Diversos métodos numéricos se desenvolveram no passar dos anos, possibilitando simulações computacionais em sistemas com limitações experimentais [44, 45]. Com o intuito de conhecer propriedades e realizar antecipações do comportamento de sistemas em diversas áreas de conhecimento como física, engenharia, química, medicina e biologia, faz-se uso de métodos numéricos para realização de simulações computacionais.

Em 1953, Nicholas Metropolis *et al.* [46] publicam um dos artigos mais importantes para estudos de matéria condensada, fazendo uso de simulação computacional. Metropolis *et al.* utilizam uma versão modificada do algoritmo de Metropolis e Ulam [47], já chamado de Monte Carlo. Um outro método, que baseia-se em determinar as trajetórias de partículas que representam um espaço de fase através da solução numérica das suas equações de movimento de Newton, é o que chamamos de dinâmica molecular (DM).

Neste capítulo iremos descrever qual o método para obtenção dos padrões estruturais abordados no capítulo anterior, assim como o formalismo adotado para se alcançar a densidade de partículas $n \propto 1/r^2$. Além disso, apresentaremos quais são as

configurações esperadas, através do mapeamento do cristal conforme no plano z .

2.1 DINÂMICA MOLECULAR

O método de dinâmica molecular (DM) é baseado nas soluções das equações de movimento de partículas, consideradas muitas vezes como puntiformes, que interagem com as demais partículas, com o meio em que estão imersas e, eventualmente, com campos externos aplicados. O início das investigações de sistemas descritos por potenciais contínuos foi em 1964: Rahman [48] estudou um sistema de 864 partículas interagindo através de um potencial de Lennard-Jones, com condições de contorno periódicas, para simular a DM de argônio líquido, mostrando que poderia reproduzir de forma satisfatória as propriedades termodinâmicas do sistema.

Uma vez que a DM descreve a evolução do sistema físico, é possível calcular propriedades estáticas e dinâmicas. É necessária informação sobre as posições e velocidades de cada partícula e em cada instante de tempo da simulação, de modo que sua trajetória possa ser descrita no espaço de fase. A forma mais elementar da DM implica no uso da segunda Lei de Newton. Em alguns sistemas, a utilização de outros métodos se torna mais factível, como por exemplo, métodos que utilizam as equações de Lagrange e Hamilton. Tomamos como exemplo o estudo de moléculas que apresentam graus de liberdade internos e estão sujeitas à forças estruturais, que são tratadas pelo método de Lagrange, para que se incorpore efeitos geométricos do sistema nas equações de movimento [45].

Como mencionado, simulação computacional nos permite analisar diversas propriedades de sistemas de muitos corpos. Apesar disso, algumas dessas propriedades não condizem com as que são obtidas experimentalmente. DM obtém diretamente as posições e velocidades das partículas do sistema, mas não temos acesso a essas informação com experimentos reais. Sendo assim, é preciso utilizar o contexto da mecânica estatística, relacionando os resultados brutos das simulações com as grandezas experimentais [49]. De forma sucinta, a mecânica estatística conecta a descrição microscópica do sistema com suas propriedades macroscópicas.

Na simulação, parâmetros macroscópicos podem ser mantidos constantes, formando conjuntos como: NpT (isobárico), NVE (microcanônico), NVT (canônico) e μVT

(grand-canônico), onde N é o número de partículas, p é a pressão, T é a temperatura, V é o volume, E é a energia total do sistema e μ é o potencial químico da substância. Um *ensemble* apresenta um desses conjuntos de parâmetros específicos, permitindo que diferentes funções termodinâmicas possam ser mais pertinentemente calculadas em um determinado *ensemble*. Esses conjuntos correspondem às especificações dos estados microscópicos do sistema.

Pelo *teorema da ergodicidade* [45], após um tempo suficientemente grande, se cada réplica do sistema passar por todas as regiões do espaço de fases onde a densidade de probabilidade é não nula, a média temporal, onde as funções termodinâmicas são determinadas, é equivalente a média sobre *ensemble*. No *ensemble canônico*, o número de partículas N é fixo e o sistema encontra-se imerso em um banho térmico. O equilíbrio médio de alguma quantidade Q é expresso em termos de integrais sobre o espaço de fase envolvendo a energia potencial $U(\mathbf{r}_N)$:

$$\langle Q \rangle = \frac{\int Q(\mathbf{r}_N) e^{-\beta U(\mathbf{r}_N)} d\mathbf{r}_N}{\int e^{-\beta U(\mathbf{r}_N)} d\mathbf{r}_N}, \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{r}_N$ é o conjunto das coordenadas, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, e k_B é a constante de Boltzmann. A Eq. (2.1) representa uma média sobre um conjunto de ensembles independentes. O método de DM utiliza o teorema da ergodicidade como fundamento, permitindo o cálculo das médias por:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M Q_k(\mathbf{r}_N), \quad (2.2)$$

sobre uma série de medidas M calculadas durante a evolução do sistema.

O ambiente de equilíbrio sistemático de um sistema simulado por DM é o *ensemble microcanônico*. Além de manter o número de partículas fixo, o sistema varre o espaço de fase mantendo um valor constante de energia, uma vez que não há troca de calor entre o ensemble e o exterior.

2.1.1 Diferentes Algoritmos para integração das Equações de Newton

Dinâmica Molecular (DM) consiste em uma técnica de simulação computacional, onde a evolução temporal de um conjunto de partículas interagentes é calculada

numericamente a partir das suas equações de movimento. Essa integração temporal é embasada no método de diferenças finitas, onde o tempo é discretizado em um intervalo finito, com intervalos de tempo Δt . Dessa forma, temos uma aproximação das trajetórias de todas as partículas, assim como suas velocidades. É importante ressaltar que a técnica de DM é determinística. Portanto, dado um conjunto inicial de posições e velocidades, sua evolução temporal é, teoricamente, completamente determinada.

Como já comentado anteriormente, a forma usual do método de DM envolve as leis de Newton. Apesar que, em alguns casos, os sistemas são estudados com equações de Lagrange e Hamilton. Exemplos dessas variações, são moléculas que apresentam graus de liberdades internos, e.g., sujeitos à forças estruturais causando defeitos geométricos em sua estrutura [50]. É necessário que os efeitos quânticos sejam desprezados para uma correta representação clássica do sistema. Sendo assim, sistemas atômicos podem ser tratados como clássicos se, somente se, o comprimento de onda de de Broglie [51]

$$\Lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{1/2} \quad (2.3)$$

for menor do que a distância média entre as partículas, sendo m a massa do átomo, k_B é a constante de Boltzmann e $\hbar$ é a contante de Planck reduzida. Nesse cenário, as partículas apresentam um comportamento clássico, suas posições e velocidades são bem definidas, passando a serem distinguíveis. É igualmente necessário que a energia do sistema seja muito menor do que a energia específica das vibrações intermoleculares, uma vez que a dinâmica com alta frequência precisa ser tratada com formalismo quântico [52].

Cada vez mais indispensável para estudos das propriedades de sistemas de líquidos e gases, defeitos em cristais, superfícies, DM torna-se uma ferramenta fundamental para obtenção das propriedades eletrônicas e de transporte, biomoléculas e processos de não equilíbrio, entre outros [53].

Sistemas de partículas são comumente descritos através do hamiltoniano do sistema, composto por um termo cinético e um termo que descreve o potencial de interação entre as partículas:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} + \sum_{i>j}^N U(r_{ij}) , \quad (2.4)$$

onde r_{ij} é a distância entre as partículas i e j , $\mathbf{p}_i$ e m_i são o momento linear e a massa da i -ésima partícula respectivamente. $U(r_{ij})$ é a energia potencial do sistema em função das posições das N partículas. A força resultante em uma partícula é calculada através do gradiente do potencial de interação. Sabendo que a força resultante é dada por $\mathbf{F} = -\nabla U$, a componente x da força resultante da i -ésima partícula é dada por

$$F_{x_i}(r_{ij}) = -\frac{x_i}{r_{ij}} \left[\frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \right], \quad (2.5)$$

similarmente para as componentes y e z . A equação de movimento para cada partícula segue a segunda lei de Newton

$$m_i \left(\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} \right) = \mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{f}_{ij}, \quad (2.6)$$

onde $\mathbf{f}_{ij}$ é a força que a partícula j exerce na partícula i .

Um algoritmo de integração temporal utilizado de forma eficiente é o algoritmo de Verlet [54]. Expandido em série de Taylor as coordenadas de uma partícula temos acesso à evolução temporal das posições e das velocidades em função do tempo t , ou seja,

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \dot{\mathbf{r}}(t)\Delta t + \ddot{\mathbf{r}}(t)\frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3), \quad (2.7)$$

onde $\dot{\mathbf{r}}(t)$ e $\ddot{\mathbf{r}}(t)$ correspondem a velocidade e aceleração, respectivamente. Analogamente, para um intervalo de tempo Δt anterior a t , temos

$$\mathbf{r}(t - \Delta t) = \mathbf{r}(t) - \dot{\mathbf{r}}(t)\Delta t + \ddot{\mathbf{r}}(t)\frac{\Delta t^2}{2} - O(\Delta t^3). \quad (2.8)$$

Somando as Eqs. (2.7) e (2.8), temos

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) + \mathbf{r}(t - \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) + \ddot{\mathbf{r}}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4), \quad (2.9)$$

ou

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \ddot{\mathbf{r}}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4). \quad (2.10)$$

Note que, as contribuições de 3ª ordem se anulam, restando apenas um erro na atualização da posição da ordem de Δt^4 . Sabendo como se comporta a trajetória da

partícula, pode-se obter a velocidade subtraindo as Eqs. (2.7) e (2.8). Isolando o termo $\dot{\mathbf{r}}(t)$, temos

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (2.11)$$

Apesar do algoritmo de Verlet ser de 4ª ordem (i.e., negligenciamos os termos de ordem Δt^4 e de ordem superior), fácil de implementar e apresenta uma boa precisão e estabilidade no cálculo da trajetória, a velocidade não determina a posição, e sim o oposto. O termo da velocidade apresenta um erro de ordem Δt^2 . O algoritmo é de difícil aplicação quando avaliamos sistemas com temperatura constante, pressão constante ou cálculos de DM fora do equilíbrio, consumindo mais tempo de simulação computacional. Outros métodos de integração podem oferecer maior precisão na velocidade, tais como *leap-frog*, *Runge-Kutta* e *predictor-corrector* [55, 56].

Das Eqs. (2.10) e (2.11), é possível calcular a energia cinética e energia potencial em cada passo de tempo Δt . Em sistemas compostos por forças conservativas e isolados, a energia total do sistema deverá ser conservada. Podemos calcular a temperatura instantânea do sistema através do teorema da equipartição [52], logo

$$T(t) = \frac{1}{Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2(t)}{d}, \quad (2.12)$$

onde N é o número de partículas e d o número de graus de liberdades das partículas do sistema.

2.2 MÉTODO ESTOCÁSTICO E DINÂMICA MOLECULAR DE LANGEVIN (DML)

Em nível microscópico, descrever o contato das partículas com um reservatório térmico é algo complicado. No entanto, em escala macroscópica, o movimento térmico das partículas parece ser aleatório, nos levando a um tratamento estocástico da dinâmica de suas partículas.

Em sistemas conservativos e na ausência de trabalho externo as equações de movimento de Newton preservam a energia do sistema. Não havendo troca de energia com o ambiente externo, a descrição do movimento das partículas torna-se mais preciso.

Quando ocorre troca de energia com o ambiente ou quando existem diferentes graus de liberdade, as equações de movimento devem sofrer modificações para uma correta realização da dinâmica molecular. Estando o sistema em evolução descrito por uma distribuição canônica de probabilidade e em equilíbrio térmico com um reservatório, o movimento das partículas pode ser descrito pelas equações de Langevin [57].

A equação de Langevin é uma equação diferencial estocástica, onde dois termos de força são adicionados às equações de Newton com o objetivo de aproximar os efeitos dos graus de liberdades anteriormente negligenciados. O primeiro termo representa a força de atrito (fricção), que é proporcional à velocidade, e o segundo termo corresponde a uma força aleatória. O atrito retira a energia cinética do sistema, ao passo que a força aleatória fornece energia cinética. Para a geração de um *ensemble* canônico, ambos os termos devem obedecer ao teorema da flutuação-dissipação.

O sistema de Langevin consiste de um sistema clássico, onde graus de liberdade foram retirados. Esses graus de liberdade removidos exercem forças conservativas e atrito no sistema resultante. Admite-se que todas as forças restantes contribuem como uma força aleatória. O exemplo mais comum desse sistema é uma partícula coloidal em um solvente, sendo as forças de atrito e aleatórias causadas pelas colisões das moléculas do solvente com a partícula coloidal. Um outro formalismo para derivar a dinâmica de Langevin é a partir do operador de projeção de Zwanzig [58] e Mori [59].

Como mencionado anteriormente, o método de DM se aplica a sistemas onde não há troca de calor entre o sistema e o ambiente, i.e., o *ensemble* microcanônico (NVE). Podendo haver troca de calor entre o sistema e o ambiente ou a adição de diferentes graus de liberdade ao sistema, a equação de movimento de Newton para a i -ésima partícula é substituída pela equação de Langevin:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\eta \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_i^{ext} + \mathbf{F}_{stoc}^i(t), \quad (2.13)$$

onde η é o coeficiente de viscosidade do meio (associado à dissipação de energia do sistema), $\mathbf{F}_{ij}$ é a força de interação entre as partículas, $\mathbf{F}_i^{ext}$ corresponde a uma força externa atuando sobre o sistema e $\mathbf{F}_{stoc}^i(t)$ é uma força estocástica que depende da temperatura absoluta do sistema, que corresponde ao acoplamento do sistema a um reservatório térmico. Na Eq. (2.13) o termo $-\eta d\mathbf{r}_i/dt$ corresponde ao termo que retira energia cinética do sistema (atrito), enquanto $\mathbf{F}_{stoc}^i(t)$ é o termo que fornece energia

cinética ao sistema. Para assegurar um estado de equilíbrio no *ensemble* canônico, deve existir uma relação entre o termo dissipativo (η) e o banho térmico, sendo conectados pela expressão de flutuação-dissipação. Também conhecido como processo de Wiener, o termo estocástico (também chamado de “ruído branco”) deve obedecer às seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{F}_{stoc}^i(t) \rangle &= 0, \\ \langle \mathbf{F}_{\alpha,stoc(l)}^i(t) \mathbf{F}_{\beta,stoc(m)}^j(t') \rangle &= 2\eta k_B T \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde (α, β) representam as coordenadas, δ_{ij} é o delta de Kronecker e $\delta(t - t')$ é a distribuição delta de Dirac.

No limite em que a partícula se encontra suspensa em um meio viscoso, no qual o efeito do atrito η torna-se mais relevante que a massa da partícula. Podemos então, desprezar o termo inercial na Eq. (2.13), ou seja:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} \approx 0. \quad (2.15)$$

Essa aproximação do método DML é conhecida como dinâmica browniana (DB).

O atrito viscoso passa a apresentar efeitos mais expressivos na dinâmica de partículas, levando a distribuição de velocidades a um valor constante antes de uma mudança considerável em suas posições, possibilitando o uso da aproximação (2.15)

Neste regime sobreamortecido (“*overdamped*”), para um sistema confinado a um potencial externo $U_c(r_i)$ e onde a força de interação entre partículas se deve a um potencial de interação $U_{int}(r_{ij})$, a Eq. (2.13) pode ser reescrita como:

$$\eta \mathbf{v}_i = - \sum_{j=1}^{N-1} \nabla U_{int}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \nabla U_c(\mathbf{r}_i) + \mathbf{\Gamma}_i(T, t), \quad (2.16)$$

onde $\mathbf{r}_i$ e $\mathbf{v}_i$ correspondem a posição e velocidade da i -ésima partícula. $\mathbf{\Gamma}_i(T, t)$ é a força estocástica de Langevin representando a flutuação térmica, que satisfaz as propriedades da Eq. (2.14). A aproximação acima é válida apenas quando o intervalo de tempo de relaxação da velocidade é consideravelmente menor do que as variações mais lentas em suas posições. Utilizaremos tal aproximação para simular o sistema de interesse.

2.3 FORMALISMO

Nos próximos passos, estaremos em busca do potencial de confinamento $U(\mathbf{r})$ capaz de confinar um CEC com simetria de rotação com $\alpha = -2$ [ver Eq. (1.44b)]. Com isso, vamos escrever a Eq. (1.46) como

$$U(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') \quad ; \quad n(\mathbf{r}') = n_0 \frac{r_0^2}{r'^2}, \quad (2.17)$$

onde $U(\mathbf{r})$ é convolução de $n(\mathbf{r}')$ e $V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Aqui, n_0 é dado pela condição $\int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = N$. Reescrevendo $U(\mathbf{r})$ em termos da transformada de Fourier de $V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= - \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}') \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}_{\text{int}}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[\int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \right] \tilde{V}_{\text{int}}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Definindo $\tilde{n}(\mathbf{k})$ como

$$\tilde{n}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'}, \quad (2.18)$$

podemos então reescrever $U(\mathbf{r})$ como

$$U(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{n}(\mathbf{k}) \tilde{V}_{\text{int}}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \text{ITF} [\tilde{n}(\mathbf{k}) \tilde{V}_{\text{int}}(\mathbf{k})], \quad (2.19)$$

onde o termo TIF corresponde a transformada inversa de Fourier [60].

Para resolver a Eq. (2.19), vamos inicialmente resolver a Eq. (2.18)

$$\begin{aligned} \tilde{n}(\mathbf{k}) &= \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \\ &= n_0 r_0^2 \int \frac{dr}{r} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{ikr \cos \theta} \end{aligned}$$

A solução da integral em relação a θ resulta em uma função de Bessel do primeiro tipo $J_0(kr)$ [61]

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{ikr \cos \theta} = 2\pi J_0(kr). \quad (2.20)$$

Substituindo Eq. (2.20) na expressão $\tilde{n}(\mathbf{k})$, teremos:

$$\tilde{n}(\mathbf{k}) = 2\pi n_0 r_0^2 \int_0^\infty dr \frac{J_0(kr)}{r}. \quad (2.21)$$

No entanto, a Eq. (2.21) diverge na origem. Para evitar tal divergência, adicionamos um *cut-off* na expressão para a densidade, $n(\mathbf{r}') \propto 1/(r^2 + r_0^2)$. Alterando $n(\mathbf{r}')$ na Eq. (2.18), teremos

$$\tilde{n}(\mathbf{k}) = 2\pi n_0 r_0^2 \int_0^\infty dr \frac{r}{r^2 + r_0^2} J_0(kr) \quad \therefore \quad \tilde{n}(\mathbf{k}) = 2\pi n_0 r_0^2 K_0(kr_0), \quad (2.22)$$

onde $K_0(kr_0)$ é uma função de Bessel modificada do 2º tipo [61].

Estamos interessados que a interação entre as partículas seja do tipo logarítmica. Sendo assim, por simplicidade, vamos escrever o potencial de interação $V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, como

$$V(\mathbf{r}) = -\varepsilon_0 \ln(r), \quad (2.23)$$

onde ε_0 é a unidade de energia. A transformada de Fourier associada ao potencial de interação é dada por $V(\mathbf{k}) = 2\pi\varepsilon_0/k^2$. Substituindo na Eq. (2.19), além da Eq. (2.22), teremos

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} 2\pi n_0 r_0^2 K_0(kr_0) \tilde{V}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= -n_0 r_0^2 \varepsilon_0 \int dk \frac{K_0(kr_0)}{k} \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-ikr \cos \theta}}_{2\pi J_0(-kr)} \\ &= -2\pi n_0 r_0^2 \varepsilon_0 \int_0^\infty dk \frac{K_0(kr_0) J_0(-kr)}{k}, \end{aligned}$$

usando a propriedade de paridade da função de Bessel $J_0(-\xi) = J_0(\xi)$ [61], podemos reescrever a equação acima como

$$U(\mathbf{r}) = -2\pi n_0 r_0^2 \varepsilon_0 \underbrace{\int_0^\infty dk \frac{K_0(kr_0) J_0(kr)}{k}}_{\text{diverge em } k=0}. \quad (2.24)$$

Para contornar a divergência na Eq. (2.24), sabemos que a força F que atua em uma partícula genérica é dada pelo gradiente de $U(\mathbf{r})$. Dada a simetria do problema, F depende apenas da posição radial da partícula, logo

$$F = -\nabla U = -\frac{d}{dr}U(r) \longrightarrow \frac{dJ_0(kr)}{dr} = -kJ_1(kr), \quad (2.25)$$

onde $J_1(kr)$ é uma função de Bessel do 1º tipo. Sendo assim, podemos calcular a força F como

$$F = -2\pi n_0 \varepsilon_0 r_0^2 \int_0^\infty dk K_0(kr_0) J_1(kr). \quad (2.26)$$

Usando a identidade abaixo [61],

$$\int_0^\infty K_0(ax) J_1(bx) dx = \frac{1}{2b} \ln \left(1 + \frac{b^2}{a^2} \right), \quad a \text{ e } b > 0, \quad (2.27)$$

obtemos a força atuante em cada partícula, devida ao potencial de confinamento, dada por

$$F = -\frac{\pi \varepsilon_0 r_0^2 n_0}{r} \ln \left(1 + \frac{r^2}{r_0^2} \right). \quad (2.28)$$

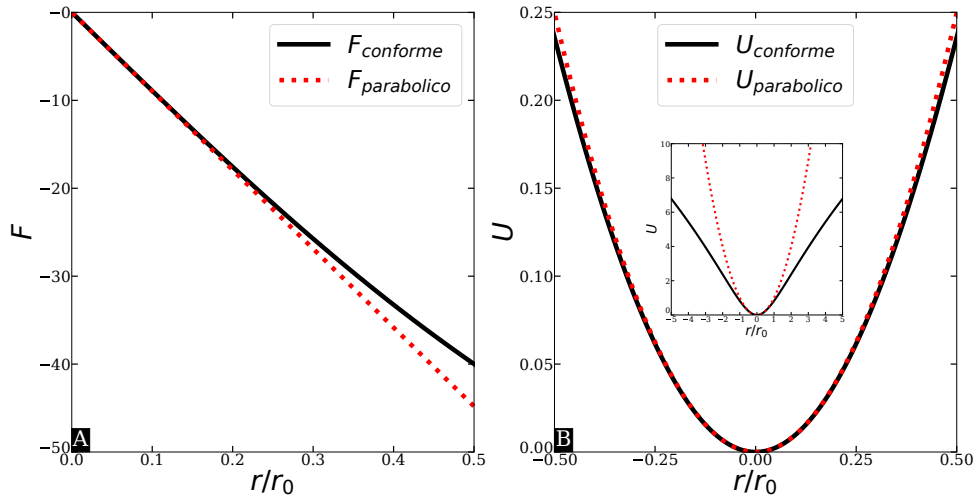
Substituindo a Eq. (2.28) em (2.25), e limitando o espaço de confinamento das partículas até uma distância radial R , teremos

$$\begin{aligned} U &= - \int dr F \\ &= \pi \varepsilon_0 r_0^2 n_0 \int \frac{1}{r} \ln \left(1 + \frac{r^2}{r_0^2} \right) \\ &= -\frac{\pi \varepsilon_0 r_0^2 n_0}{2} Li_2 \left(-\frac{r^2}{r_0^2} \right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Da expressão da distribuição de partículas desejada, i.e.,

$$n(\mathbf{r}) = n_0 \frac{r_0^2}{r^2 + r_0^2}, \quad \text{com} \quad \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = N, \quad (2.30)$$

Figura 12 – (A) Comparativo da intensidade da força que atua em uma partícula, localizada a uma distância r do centro da amostra. A linha preta, corresponde à força devida ao potencial $U_c(\mathbf{r})$ [ver Eq. (2.28)] gerado para um sistema com $N = 20$ e $R = 0.5r_0$, e a linha vermelha pontilhada, corresponde à força devida ao potencial de confinamento parabólico. Em $r = 0.5r_0$, a diferença entre F_{conforme} e $F_{\text{parabolico}}$ é de aproximadamente 11%. (B) Comparativo entre o potencial de confinamento parabólico e o potencial de confinamento $U_c(\mathbf{r})$. Na inserção em (B) a diferença entre os confinamentos torna-se mais nítida.



Fonte: O autor (2020)

teremos

$$n_0 = \frac{1}{\pi r_0^2} \frac{N}{\ln \left(1 + R^2/r_0^2 \right)}. \quad (2.31)$$

Note que, para $r \gg r_0$, recuperamos a densidade proposta na Eq. (2.17). Entretanto, próximo de $r = 0$ a Eq. (2.30) induz uma região não conforme, similar a um potencial de confinamento parabólico. Sendo assim, o potencial externo $U(\mathbf{r})$ é dado por:

$$U(\mathbf{r}) = U_c(\mathbf{r}) = -\frac{N\varepsilon_0}{2} \frac{Li_2 \left(-r^2/r_0^2 \right)}{\ln \left(1 + R^2/r_0^2 \right)}, \quad (2.32)$$

onde $Li_2 \left(-r^2/r_0^2 \right)$ é uma função polilogarítmica de 2ª ordem e R é o alcance de confinamento do cluster.

A função polilogarítmica, também conhecida como função de Jonquière, é definida pela série [62]

$$Li_2(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^2}, \quad \text{para } |z| < 1, \quad (2.33)$$

fazendo com que $U_c(\mathbf{r})$ se comporte como um potencial parabólico para r próximo da origem. A Fig. 12(A) compara a intensidade da força que uma partícula está submetida para dois tipos de confinamentos (parabólico e conforme) próximo do centro da amostra. A Fig. 12(B) apresentamos o comportamento do potencial de confinamento (parabólico e conforme) próximo ao centro da amostra. Na inserção presente na Fig. 12(B) claramente temos uma discrepância entre os confinamentos, na medida em que as partículas apresentam uma maior distância radial. Concluimos então que a partícula sujeita ao confinamento $U_c(\mathbf{r})$ converge ao confinamento parabólico, quanto menos afastada do centro ela se encontra. Definimos em $r = 0.5r_0$ o limite de aproximação em que $U_c(\mathbf{r}) \propto r^2$, i.e., nossa aproximação para o confinamento parabólico ocorre quando $R = 0.5r_0$. Quando $r = 0.5r_0$, a diferença entre F_{conforme} e $F_{\text{parabolico}}$ é de aproximadamente 11%. A escolha de $R = 0.5r_0$ como limite para aproximação parabólica, foi uma escolha puramente técnica. Para menores valores de R encontramos dificuldades em obter configurações estáveis para altos valores N .

Retomando ao caso de interesse ($\alpha = -2$), (1.44b). Para $z = e^{cw}$, podemos escrever z em coordenadas polares

$$z = re^{i\phi} \implies \begin{cases} r = e^{cu} \\ \phi = cv \end{cases}. \quad (2.34)$$

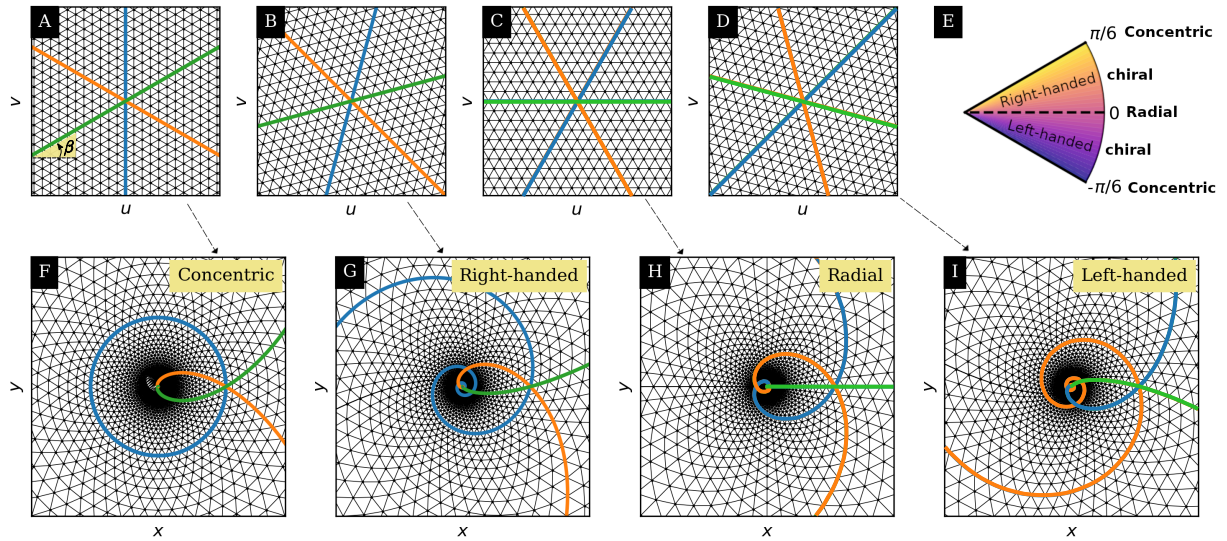
Fica evidente que uma linha reta em w , $v = v_0 + bu$ se torna uma espiral logarítmica no plano z , dada por

$$r = Ce^{\phi/b}, \quad (2.35)$$

onde $C = e^{-cv_0/b} = \text{const.}$ O parâmetro b determina a rapidez com que a espiral espirala à medida que r aumenta e seu sinal determina a direção da circulação, dextrógiro ($b > 0$) ou levógiro ($b < 0$). Vamos nos referir a b como a taxa de circulação, uma vez que ela satisfaz $b = r d\phi/dr$.

Para exemplificar como uma rede hexagonal no plano w está relacionada a um cristal conforme com linhas cristalinas em espiral, mostramos na Fig. 13 o resultado do mapeamento de redes hexagonais com orientações diferentes no plano z conforme. A

Figura 13 – Rede hexagonal no plano w (A-D) e mapeamento do cristal conforme no plano z (F-I), de acordo com a Eq. (1.44b). Os eixos de simetria da rede hexagonal (linhas azul, laranja e verde) no plano w são transformadas em espirais no plano z . Quando uma das linhas de simetria (linha verde) faz um ângulo β de $\pm\pi/6$ (E) com o eixo horizontal, a linha mapeada torna-se um círculo e a configuração é chamada de concêntrica (F). Quando linha verde está alinhada com o eixo horizontal, nós temos uma configuração radial (H). Para ângulos entre 0 e $\pm\pi/6$, nomeamos a configuração como sendo quiral (*chiral*), dextrógiro ou levógiro (G, I). Figura extraída da Ref. [10].



Fonte: F.C.O. Silva *et al.* [10]

orientação da rede original é definida pelo ângulo $\beta = \tan^{-1} b$ entre uma das linhas da rede de alta simetria e o eixo u , conforme indicado na Fig. 13(A). As linhas de simetria da rede hexagonal no plano w são transformadas em espirais no plano z (linhas azul, laranja e verde na Fig. 13). Para $\beta = \pi/6$ (A), um dos três eixos de alta simetria da rede hexagonal é vertical ($b = \infty$) e mapeia como círculos concêntricos no plano conforme. Os outros dois eixos mapeiam como espirais com quiralidade oposta, mas simétrica, $b = \pm 1/\sqrt{3}$. Para $\beta = 0$ (C), um eixo de alta simetria em w é alinhado horizontalmente e, portanto, mapeia como linhas radiais em z (H). Os outros eixos se transformam em espirais de quiralidade oposta, mas simétrica, $b = \pm\sqrt{3}$. Além desses casos especiais, todas as outras orientações da estrutura hexagonal levam a um cristal conforme com uma quiralidade bem definida: dextrógiro (*right-handed*), $b > 0$ (G) ou levógiro (*left-handed*), $b < 0$ (I). Nessas configurações quirais, todas as linhas cristalinas são espirais logarítmicas.

No próximo capítulo apresentaremos as configurações estruturais de menor energia, após o processo de recozimento (*annealing*), para diferentes valores de N e R . Para classificar tais configurações, utilizaremos a Fig. 13 como parâmetro de controle.

Sendo assim, os estados de menor energia podem, em princípio, serem classificadas como configurações concêntricas, quirais (dextrógiro ou levógiro) e radiais, conforme apresentado anteriormente.

3 CONFIGURAÇÕES ESTRUTURAIS E PROCESSO DE ANNEALING

Rios, pontes e overdrives,
impressionantes esculturas de lama
(...)

Rios, Pontes & Overdrives - Chico Science e Fred Montenegro

Em um sistema finito, há uma competição entre a rede triangular e o potencial de confinamento circular que tenta estruturar as partículas em uma configuração circular em camada. Configurações de camadas em clusters 2D foram amplamente investigadas por Bedanov [63], onde uma tabela do tipo Mendeleev foi construída para estruturas clássicas semelhantes a átomos. A estrutura, dinâmica e/ou propriedades espectrais desses aglomerados 2D com potencial de confinamento parabólico, mas diferentes potenciais de interação, foram investigados (Coulomb [64–67], *screened* Coulomb [64, 68–74] potencial, e o potencial de confinamento de parede dura [11, 72]). Para outros sistemas com diferentes potenciais de interação e/ou condições de contorno, diferentes formas de agregados 2D são gerados [75–79].

Um sistema 2D de partículas, com interação de longo alcance, do tipo logarítmico, em particular, confinadas por um potencial externo projetado de maneira adequada, pode cristalizar em configurações não homogêneas, determinadas por linhas cristalinas em espiral. A mudança da intensidade do potencial externo, promove a existência de três conjuntos de linhas espirais cristalinas que podem ser: (i) quiral, com quiralidade global levógira ou dextrógira, (ii) não quiral, com duas linhas cristalinas principais em espiral de quiralidades opostas, e um terceiro conjunto constituído por camadas concêntricas ou linhas radiais.

Neste capítulo nós estudaremos o estado de menor energia obtido para sistemas com poucas partículas ($N < 100$) e configurações acessíveis (metaestáveis) para clusters maiores. As configurações de menor energia mudam de acordo com a região de confinamento, mantendo o mesmo valor de N . Quando passamos a estudar grandes aglomerados, usamos a teoria dos defeitos para compreender a natureza topológica das estruturas formadas, através da técnica de construção da triangulação de Delaunay [8].

3.1 MODELO E MÉTODO NUMÉRICO

Nós utilizamos simulações de dinâmica molecular para investigar a formação e a estabilidade dos cristais conformes mencionados nos capítulos anteriores. Para as simulações, consideramos um sistema de modelo bidimensional de N partículas interagindo logaritmicamente e confinadas por um potencial externo.

A dinâmica das partículas é governada pela equação de movimento de Langevin no regime superamortecido,

$$\eta \mathbf{v}_i = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \nabla_i V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \nabla U_c(\mathbf{r}_i) + \mathbf{\Gamma}_i(T, t), \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{r}_i$ é a posição e $\mathbf{v}_i$ é a velocidade da i -ésima partículas, $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -\varepsilon_0 \ln(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ é o potencial de interação inter-partícula, $U_c(\mathbf{r}_i)$ é o potencial de confinamento, e η o coeficiente de viscosidade. $\mathbf{\Gamma}_i(T, t)$ é a força estocástica de Langevin representando a flutuação térmica, que satisfaz $\langle \mathbf{\Gamma}_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \mathbf{\Gamma}_{i,\alpha}(t), \mathbf{\Gamma}_{j,\beta}(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta_{\alpha,\beta} \delta_{i,j} \delta(t - t')$, onde k_B é a constante de Boltzmann, e os índices α, β indicam as componentes do vetor.

O potencial de confinamento $U_c(\mathbf{r})$ é criado exigindo que ele forneça uma distribuição de partículas desejada, $n(\mathbf{r})$. Da aproximação contínua [Seção 2.3], temos

$$U_c(\mathbf{r}) = -\frac{N\varepsilon_0}{2} \frac{Li_2\left(-r^2/r_0^2\right)}{\ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)}, \quad (3.2)$$

onde $Li_2\left(-r^2/r_0^2\right)$ é uma função polilogarítmica de 2ª ordem e R é o alcance de confinamento do cluster. Para evitar uma divergência em $r = 0$ na expressão da densidade, usamos um *cut-off* e reescrevemos $n(\mathbf{r})$ como

$$n(\mathbf{r}) = n_0 \frac{r_0^2}{r^2 + r_0^2}, \quad \text{com} \quad \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = N, \quad (3.3)$$

logo

$$n(\mathbf{r}) = \frac{N}{\pi \ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)} \frac{1}{r^2 + r_0^2}. \quad (3.4)$$

Com isso podemos escrever o hamiltoniano do sistema como

$$H = -\frac{N\varepsilon_0}{2 \ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)} \sum_i Li_2\left(-r_i^2/r_0^2\right) - \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{i,j} \ln|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (3.5)$$

onde N é o número de partículas, $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ é o vetor posição da i -ésima partícula. Além disso, substituindo a Eq. (3.4) na Eq. (1.54) obtemos a carga topológica integrada dentro da aproximação do limite contínuo,

$$Q(r) = \frac{6r^2}{r^2 + r_0^2}. \quad (3.6)$$

A partir de agora a energia e comprimento serão denotadas em unidades de ε_0 e r_0 , respectivamente. Em nossas simulações nós usamos $dt = 0.001\eta r_0^2/\varepsilon_0$, onde $dt_0 = \eta r_0^2/\varepsilon_0$ é a unidade de tempo. A temperatura é expressa em unidades de $T_0 = \varepsilon_0/k_B$, onde k_B é a constante de Boltzmann.

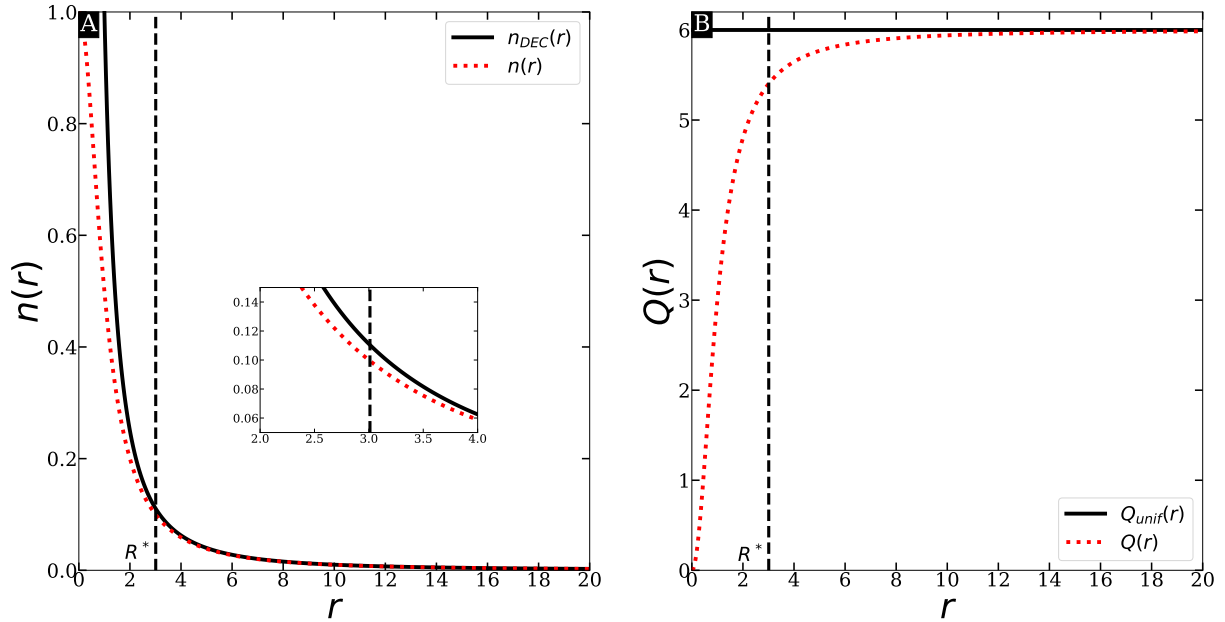
Devido à introdução do *cut-off*, a densidade $n(\mathbf{r})$ não é estritamente conforme próximo da origem [Eq. (1.43)]. Definimos $R^* = 3.01r_0$ como a distância radial acima da qual a densidade fornecida pela Eq. (3.4) difere em menos de 10% da DEC, com $\alpha = -2$. Isso nos permite distinguir duas regiões de confinamento: quase-conforme para $r \geq R^*$ e não-conforme para $r < R^*$. Além disso, 90% da carga topológica líquida esperada da teoria do limite contínuo está concentrada na região $r < R^*$, pois $Q(R^*) = 5.4$ e a carga topológica líquida de uma geometria simplesmente conectada é 6.

A comparação entre as densidades descritas pelas Eqs. (3.4) e (1.43), com $\alpha = -2$, linha pontilhada vermelha e linha contínua preta, respectivamente, é apresentada na Fig. 14(A). As curvas se aproximam assintoticamente à medida que a distância radial se afasta da origem. Uma ampliação da região próxima de R^* é apresentada na Fig. 14(A). A Fig. 14(B) mostra a distribuição radial das cargas topológicas esperada no limite contínuo [Eq. (3.6)], linha tracejada vermelha, em função do raio. A linha preta horizontal, corresponde à carga topológica líquida em uma distribuição uniforme. Em ambos os gráficos, a linha vertical tracejada representa R^* .

3.2 CONFIGURAÇÕES DE EQUILÍBRIO

Para encontrar configurações estáveis e de mais baixa energia, nós inicializamos o sistema distribuindo de forma aleatória N partículas dentro de uma caixa quadrada de lado $L = 2R$ em uma temperatura alta suficiente para assegurar que elas estejam na fase líquida. Em seguida, adotamos um procedimento de recozimento (*annealing*) simulado, em que a temperatura diminui lentamente para $T = 0$. Para isso, 64 etapas de temperatura são adotados, com um decaimento de $T \propto \exp -n$, onde n é a n -ésima

Figura 14 – (A) Comparação entre as densidades $n(r)$ e $n_{DEC}(r)$ [Eq.(1.43), com $\alpha = -2$], linha pontilhada vermelha e linha contínua preta, respectivamente. (B) Distribuição das cargas topológicas esperada no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha preta horizontal, corresponde à carga topológica em uma distribuição uniforme. A linha vertical tracejada representa R^* .

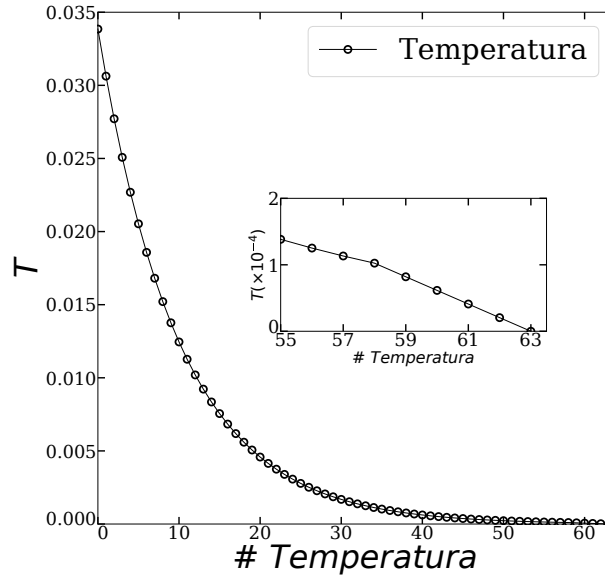


Fonte: O autor (2020)

temperatura. Na Fig. 15 mostramos o comportamento do decaimento da temperatura em função do número de etapas adotadas. Nas últimas etapas, a temperatura decai linearmente até alcançar $T = 0$, ver inserção da Fig. 15. A cada temperatura, a Eq. (2.16) é integrada numericamente, usando o método estocástico de Langevin, em mais de $\sim 10^7$ etapas de tempo.

Para cada valor de N e R este processo de *annealing* foi repetido pelo menos 10 vezes. É importante lembrar que este procedimento não garante que o estado fundamental para determinados valores de N e R seja alcançado, apenas é possível assegurar que as configurações finais sejam pelo menos metaestáveis. Entre estados metaestáveis e os de menor energia existe uma barreira de potencial. O sistema preferirá trespassar a barreira de menor potencial, que corresponde a configuração do ponto de sela entre esses mínimos de energia, transitando de uma configuração estável para outra. Para altos valores de N , estados metaestáveis são predominantes. Estados metaestáveis podem decair para estados mais estáveis após a superação de uma barreira energética não desprezível. Portanto, estaremos concentrados não nos estados fundamentais, mas nos possíveis estados (meta)estáveis e na frequência com que eles aparecem após o

Figura 15 – Comportamento do decaimento da temperatura em função do número de passos de temperatura considerado. Nas últimas etapas, a temperatura decai linearmente até alcançar $T = 0$.



Fonte: O autor (2020)

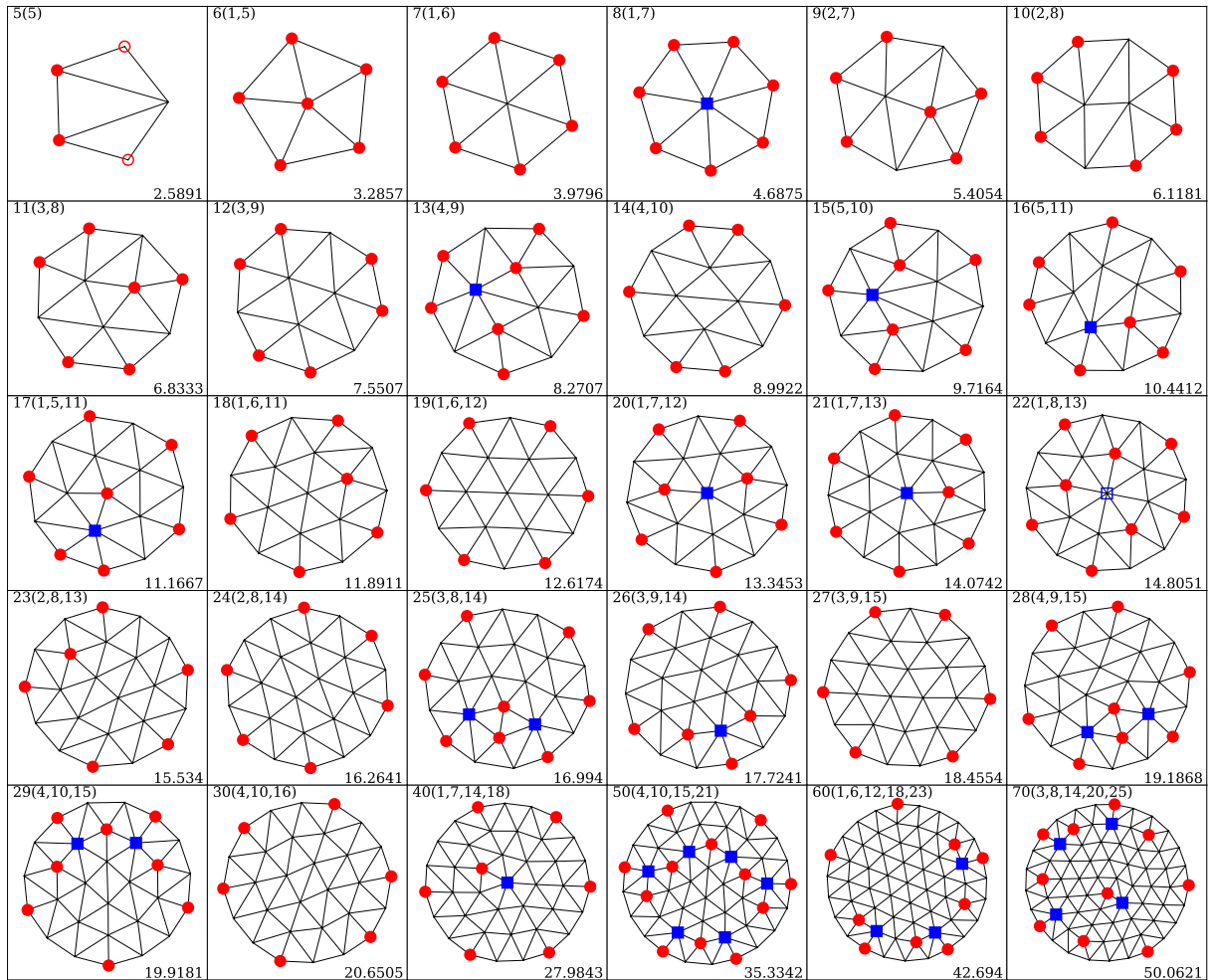
processo de minimização.

3.2.1 Sistemas Pequenos

Inicialmente, apresentaremos as propriedades estruturais e estáticas de estados (meta)estáveis de $N = 5$ até 100 e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128. Devido à competição entre o potencial de confinamento e a interação inter-partículas, as partículas se organizam de forma não uniforme na direção radial, resultando em uma densidade de partículas de acordo com a Eq. (3.4). Na busca do estado fundamental (ou de menor energia), para $N \leq 100$, repetimos 100 vezes o processo de *annealing* para cada par (N, R) de parâmetros. As configurações são analisadas e comparadas com resultados experimentais [80, 81] e resultados previstos por aproximações teóricas [73, 74, 82, 83], quando o potencial de confinamento é parabólico e a interação inter-partículas do tipo logarítmico.

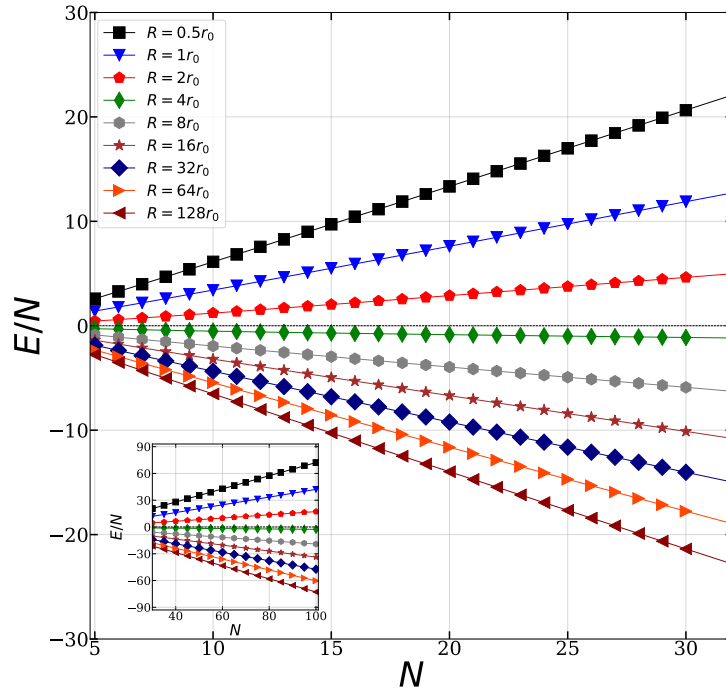
Na Fig. 16 mostramos as configurações de menor energia, obtidas para diferentes valores de N em nossa aproximação parabólica, $R = 0.5r_0$. No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula E/N está indicada no canto inferior direito. O símbolo quadrado (círculo) azul (vermelho) indica uma partícula com carga topológica $q < 0$ ($q > 0$) [ver

Figura 16 – Estado obtido de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial aproximadamente parabólico ($R = 0.5r_0$). No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



Fonte: O autor (2020)

Figura 17 – Dependência da energia por partícula em função de N ($5 \leq N \leq 30$) para diferentes valores de confinamento R . Na inserção N ($40 \leq N \leq 100$).



Fonte: O autor (2020)

Seção 1.4], diferente da esperada para aquela região [ver Eq. (1.48)]. Para configurações denominadas concêntricas, denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada. A dependência do valor absoluto de $|E/N|$ cresce linearmente com o aumento de N independente do valor de R calculado, ver Fig. 17.

Para $N = 5$ temos a formação de polígono regular. Para $N = 6, 7$ e 8 , temos um pentágono, hexágono e heptágono centrado, formando $(1, 5)$, $(1, 6)$ e $(1, 7)$, respectivamente. De $N = 9$ até 22 , apenas estruturas com duas camadas são obtidas. Configurações com duas camadas são observadas experimentalmente para $10 \leq N \leq 22$ [81]. Quando $N \geq 23$, estados de menor energia com três camadas são encontrados. Note que, quando aumentamos N , há uma competição entre dois tipos de estruturas: um ordenamento em uma rede triangular (rede de Wigner) e um ordenamento em camadas, o que fomenta padrões auto-organizados em camadas concêntricas. Comparamos as distribuições das partículas obtidas, com as distribuições das configurações de menor energia com dados experimentais [80, 81] e outras previsões teóricas [64, 73, 74, 84]. Com exceção de $N = 9$ e 15 , todos os estados fundamentais são previstos teoricamente e/ou experimentalmente.

A obtenção experimental e previsão teórica do estado fundamental para $N = 9$,

corresponde a uma configuração (1, 8) e para $N = 15$ uma configuração (4, 11), que contrasta com nosso resultado (2, 7) e (5, 10), respectivamente. A configuração (1, 8) é metaestável, para a aproximação parabólica ($R = 0.5r_0$), enquanto que (4, 11) não foi obtida. Para $10 \leq N \leq 22$ e $23 \leq N < 29$, os resultados experimentais [81] e os obtidos numericamente apresentam 2 e 3 camadas, respectivamente. Nosso resultado difere apenas para o caso com $N = 9$, comentado anteriormente, possivelmente devido à diferença entre o potencial de confinamento parabólico e a nossa aproximação, $R = 0.5r_0$.

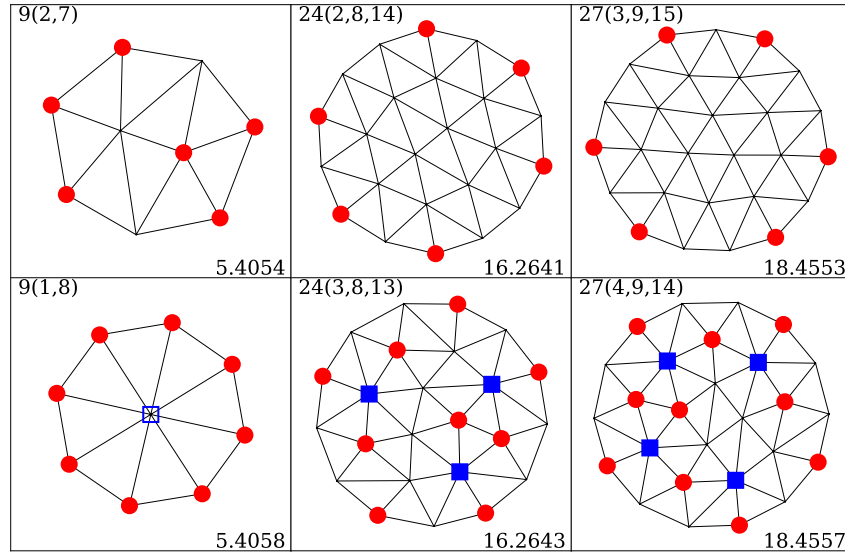
Na Fig. 18 apresentamos 3 casos de configurações (meta)estáveis para $N = 9, 24$ e 27; formando estruturas (2, 7) e (1, 8), (2, 8, 14) e (3, 8, 13), e (3, 9, 15) e (4, 9, 14), respectivamente. Note que, o estado de menor energia para $N = 24$ (2, 8, 14) e $N = 27$ (3, 9, 15), apresentam camadas proporcionais, i.e., as camadas apresentam um denominador em comum. Nessas situações a carga topológica fica usualmente concentrada na borda da amostra, como pode ser visto para $N = 10, 12, 14, 19$ e 30 [ver Fig. 16]. Note que, as configurações metaestáveis apresentam energia próximas do estado fundamental, a diferença entre elas é menor do que $8 \cdot 10^{-3}\%$, ver Fig. 18.

3.2.2 Sistema Maiores e Estrutura dos defeitos Topológicos

Sabemos que a rede hexagonal é energeticamente mais favorável para estruturas de partículas clássicas interagindo com potencial central em um plano 2D infinito em baixas temperaturas [27, 85]. Em um sistema finito de partículas interagindo repulsivamente, confinadas por um potencial de simetria radial, a estrutura formada exige um equilíbrio entre a formação de uma rede hexagonal e a forma imposta pela simetria azimutal do confinamento. A configuração do sistema é alcançada devido à competição entre esses dois efeitos, a estrutura triangular (rede Wigner) e a simetria circular [63]. Esse conflito leva a defeitos intrínsecos no cluster, que são defeitos induzidos pela geometria do potencial de confinamento. O estado fundamental não é livre de defeitos, como visto na seção anterior. Além disso, a carga topológica total do sistema deve ser conservada.

Inicialmente, estudamos a distribuição dos defeitos topológicos quando deixamos a densidade de partículas mais conforme. i.e., quando aumentamos o tamanho da região de confinamento R . Na Fig. 19, mostramos as configurações de menor energia para um sistema com $N = 100$ e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128. Para a aproximação

Figura 18 – Estado de menor energia (primeira linha) e estado metaestáveis para $N = 9$, 24 e 27. Quadrados (círculos) azul (vermelho) correspondem a defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$). Na configuração (1, 8) o defeito central corresponde a um defeito topológico +2. No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas, e no canto inferior direito E/N . Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



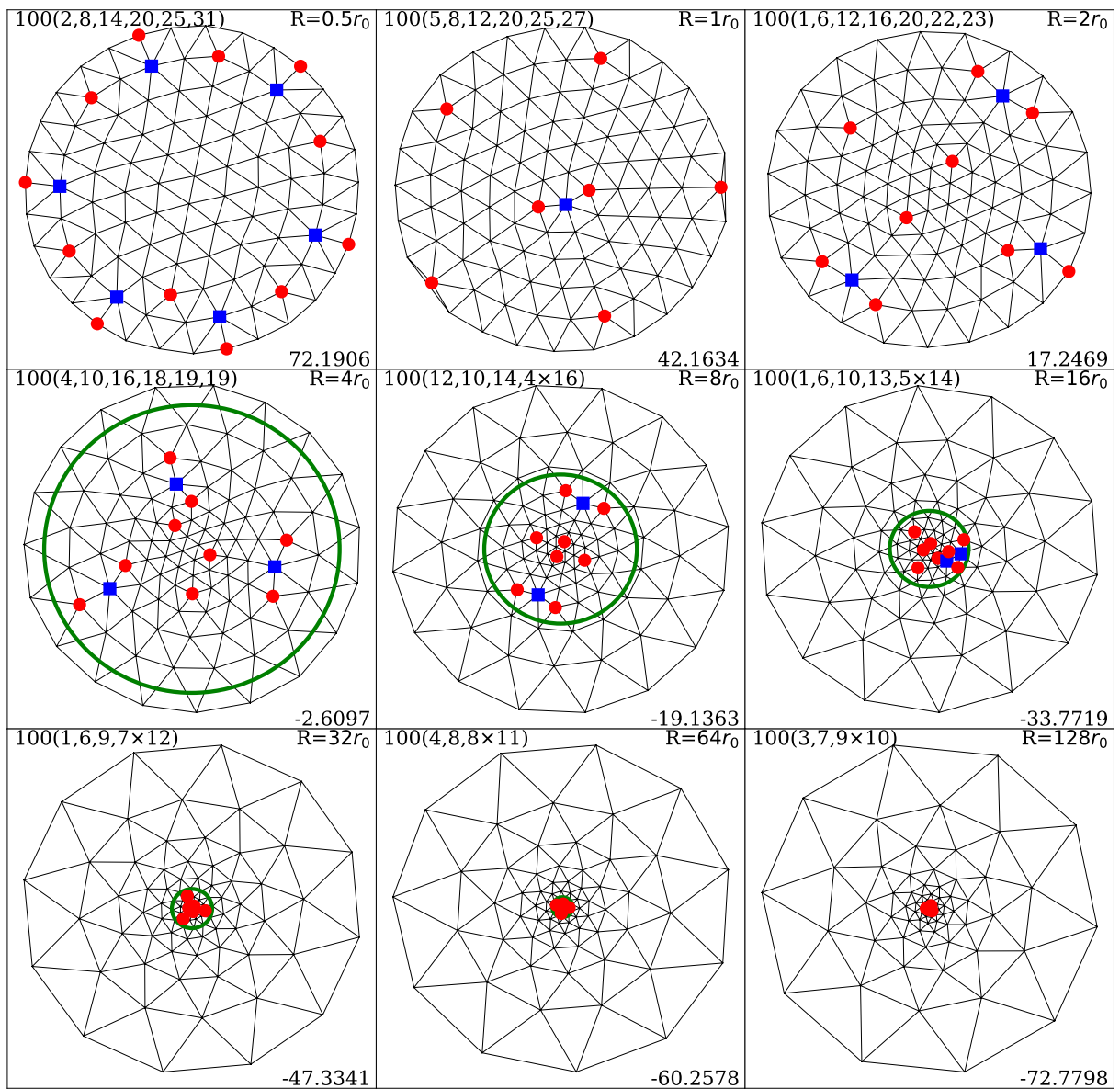
Fonte: O autor (2020)

parabólica, $R = 0.5r_0$, os defeitos topológicos estão concentrados próximos da borda do cluster. Com o aumento da região de confinamento, esses defeitos começam a migrar para a região central da amostra, ficando concentrados em $r < R^*$, região não conforme [cf. Seção 3.1]. Note que, mesmo com o aumento da região de confinamento, quando $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_{DEC}(\mathbf{r})$, não isenta que a configuração de menor energia fique livre de defeitos na região conforme. No entanto, a carga topológica total nessa região é nula [cf. Fig. 14], visto que os defeitos existentes são deslocções, com carga topológica total 0.

Para cada conjunto de N e R repetimos o processo de *annealing* pelo menos 10 vezes. Este procedimento não garante que o estado fundamental para os valores fornecidos de N e R será alcançado, mas assegura que as configurações finais sejam pelo menos metaestáveis. Nessa seção, nosso foco não é o estado fundamental, mas os possíveis estados metaestáveis e a frequência com que eles aparecem após o processo de minimização.

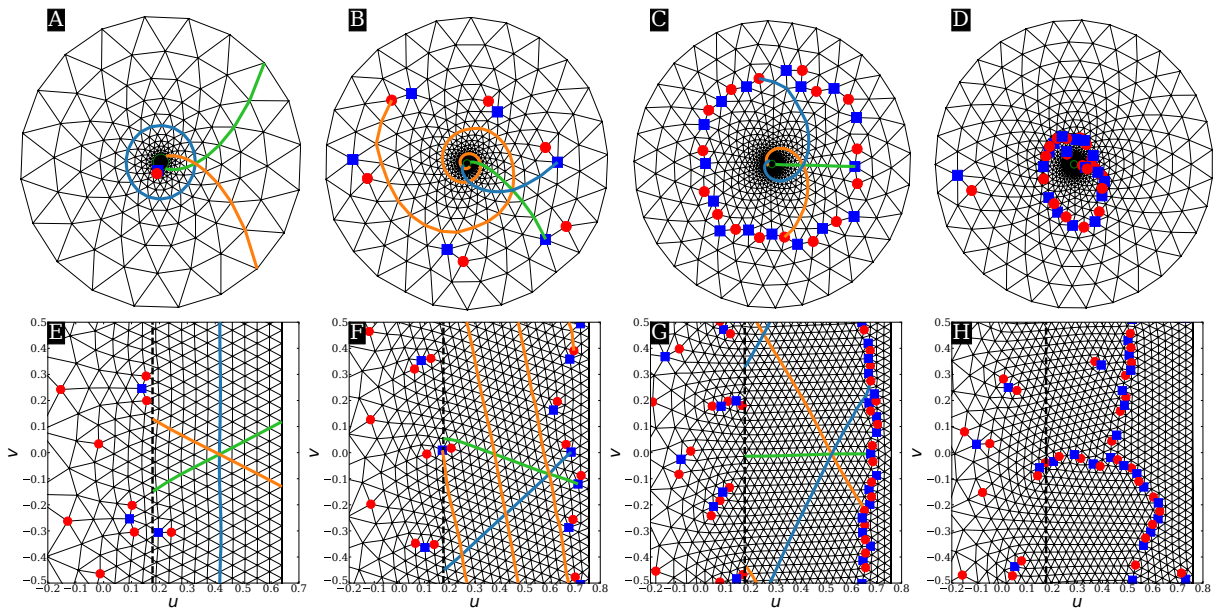
O processo de *annealing* foi realizado para N de 100 até 1000 partículas e $R/r_0 = 8$,

Figura 19 – Configurações de menor energia para $N = 100$ e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 . Com o aumento da região de confinamento, $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_{DEC}(\mathbf{r})$, a distribuição dos defeitos topológicos fica concentrada na região não-conforme, $r < R^*$. Quadrados (círculos) azul (vermelho) correspondem a defeitos topológicos -1 ($+1$). No canto superior esquerdo de cada painel, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas, e no canto inferior direito E/N . O círculo verde representa R^* . Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



Fonte: O autor (2020)

Figura 20 – Exemplos de configurações com diferentes valores de N obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$ e $N = 300$, (B) $128r_0$ e $N = 600$, (C) $128r_0$ e $N = 900$, e (D) $128r_0$ e $N = 900$. As respectivas posições no espaço- w , após aplicação da Eq. (1.44b), são mostrados em (E-H). A linha tracejada vertical preta representa R^* , enquanto as linhas sólidas são diretrizes para ajudar a identificar eixos de simetria da estrutura hexagonal [cf. Fig. 13]. Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Nas legendas (A-D), os defeitos profundos no interior dos clusters não são mostrados para melhor visualização. Figura extraída da Ref. [10].



Fonte: F.C.O. Silva *et al.* [10]

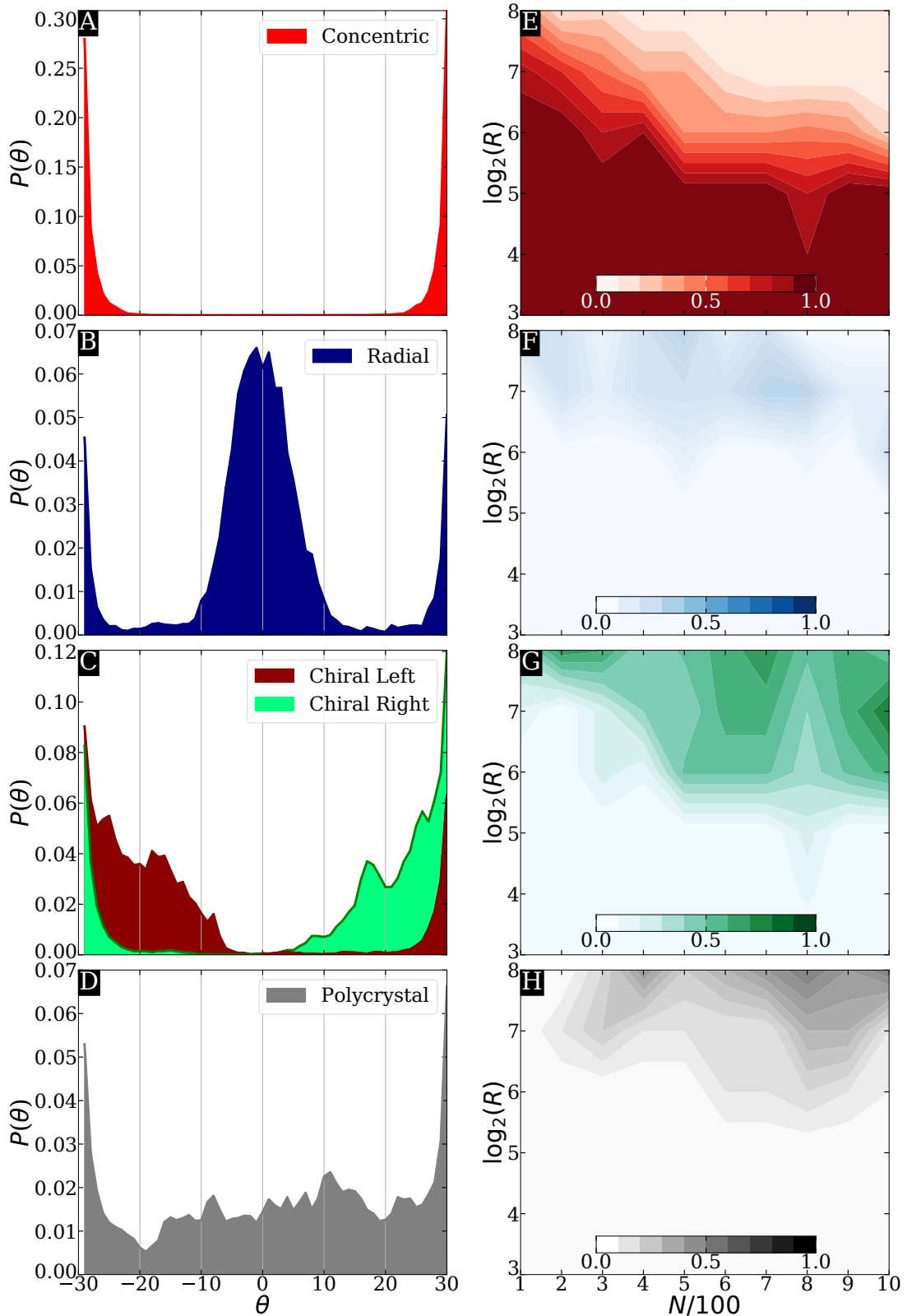
16, 32, 64, 128 e 256. Na Fig. 20 apresentamos exemplos representativos dos quatro tipos de estruturas cristalinas encontradas em nossas simulações, classificadas como concêntricas (A), quirais (B), radiais (C) e policristalinas (D). Também são mostrados, (E)-(H), seus respectivos mapas conformes no plano w , obtidos representando as posições das partículas $\mathbf{r}_k$ no plano z como $z_k = x_k + iy_k$ e mapeando-as no plano w usando a Eq. (1.44b). Os cristais concêntricos apresentam camadas circulares de partículas contendo o mesmo número de partículas que mapeiam no plano w com linhas verticais. Os outros dois grupos de eixos cristalinos de alta simetria mapeiam em w como linhas retas inclinadas em relação a u . Portanto, esses eixos são espirais logarítmicas, semelhantes aos vistos na Fig.13 (F). A configuração quiral e radial assemelham-se às redes quirais e radiais teóricas mostradas na Fig. 13 (I) e (H), respectivamente. No caso quiral, todos os três eixos cristalinos mapeiam linhas retas inclinadas, portanto todos são espirais logarítmicas. Para configurações radiais, semelhante ao caso concêntrico, apenas dois eixos são

espirais logarítmicas, mapeadas como linhas retas inclinadas em w . As linhas radiais aparecem em linhas quase horizontais. Embora todas as configurações concêntricas sejam encontradas na forma de domínio único, as configurações espirais e radiais normalmente apresentam um domínio concêntrico próximo à borda do cluster. Uma transição similar de uma rede localmente hexagonal para camadas externas circulares também é observada em aglomerados confinados em armadilhas harmônicas [38, 86]. Essa transição decorre do fato de que as partículas próximas à borda da amostra são menos influenciadas pela interação entre partículas, sendo mais propensas a seguir a simetria circular imposta pelo confinamento. Definimos como policristais todas as configurações com mais de dois domínios cristalinos com diferentes orientações da rede hexagonal na região conforme. Na Fig. 20(D) mostramos um exemplo de uma configuração policristalina com $N = 900$ e $R = 128r_0$. Três diferentes orientações cristalinas conformes (concêntrica, quiral, e radial) coexistem na amostra, como pode ser visto no plano w representado na Fig. 20(H). Observe que aqui a fase concêntrica não se restringe às poucas camadas externas da configuração, mas penetra profundamente na configuração. Os limites dos grãos formados por defeitos topológicos separam as orientações distintas. Estruturas de contorno de grãos semelhantes foram observados em outros materiais 2D como grafeno policristalino [87, 88], cristal coloidal [89–91], cristais esféricos [35, 92, 93], *plastic flows* [94].

Em todas as mais de 600 configurações obtidas em nossas simulações, os cristais ou domínios cristalinos encontrados na região $r > R^*$ são mapeados em uma rede hexagonal regular em w . Como apresentado na Fig. 13, a orientação β da estrutura hexagonal está intimamente relacionada ao tipo de espirais que aparecem no cristal conforme. Enquanto para configurações concêntricas e radiais β está bem definido, as configurações quirais podem, em princípio, assumir qualquer valor no intervalo $0 < |\beta| < 30^\circ$.

Para identificar os tipos mais frequentes de configurações em espiral, calculamos a distribuição das orientações θ das ligações vizinhas mais próximas no plano w em relação ao eixo u , $P(\theta)$. Consideramos apenas partículas com 6 vizinhos, pertencentes à região quase-conforme ($r \geq R^*$), nesta análise e, por simplicidade, reduzimos os ângulos de ligação calculados para o intervalo $[-30^\circ, 30^\circ]$. Realizamos esse cálculo para todas as configurações dentro de cada uma das quatro categorias definidas acima, de modo que

Figura 21 – Distribuição $P(\theta)$ da ligação dos primeiros vizinhos fazendo um ângulo θ com o eixo u no plano w (A - D). As distribuições levam em consideração todas as configurações (A) concêntricas, (B) radiais, (C) quirais e (D) policristalinas. Os mapas de cores (E)-(F) correspondem, respectivamente, à fração de ocorrência de cada um desses tipos de configuração em função do número de partículas N e do logaritmo do raio do cluster R . Figura extraída da Ref. [10].



Fonte: F.C.O. Silva *et al.* [10]

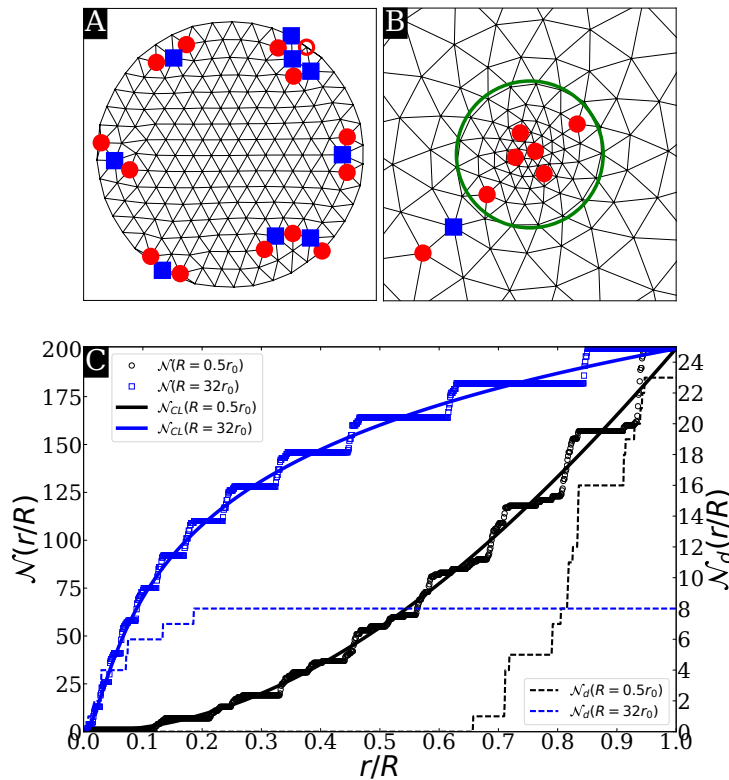
$P(\theta)$ representa a fração de ligações com orientação reduzida θ para uma determinada categoria de cristal conforme [ver Figs. 21(A)-(D)].

Devido às camadas concêntricas que estão presentes próximo à borda do cluster, todas as configurações apresentam um pico de $P(\theta)$ em $\theta = \pm 30^\circ$. Enquanto, para configurações concêntricas, $P(\theta)$ não possui outro pico, demonstrando seu caráter de domínio único, os tipos radiais apresentam um pico adicional em torno de $\theta = 0^\circ$ em $P(\theta)$, conforme esperado. Para as configurações quirais-direita (esquerda), $P(\theta)$ é distribuído mais à direita (esquerda) de $\theta = 0^\circ$. Embora a distribuição seja bastante ampla, os picos podem ser identificados em $\theta \approx \pm 9^\circ, \pm 17^\circ$ e $\pm 27^\circ$, evidenciando uma certa preferência na orientação β das linhas da rede no plano w para configurações quirais. Consequentemente, implica em uma seletividade da taxa de enrolamento em espiral b no plano físico z . Particularmente, as configurações quirais com taxa de enrolamento semelhante à da Fig. 20(B), com $b \approx \tan(\pm 17^\circ) = \pm 0.306$, são as mais frequentes observadas. Essa seletividade pode estar associada a configurações de menor energia da fronteira de grão entre as partes quirais e concêntricas do cristal, semelhante ao fenômeno de desorientações selecionadas de fronteiras de grão encontradas no grafeno e outros cristais 2D [87, 89, 95, 96]. Os tipos policristalinos apresentam uma distribuição de ângulo de união mais uniforme e equilibrada, que também apresenta uma estrutura de pico mais complexa do que no caso quiral.

As Figs. 21(E-H) mostram as frequências de ocorrências de cada tipo de configuração mapeada nas diferentes realizações do processo de *annealing* para os valores de N e R avaliados. Note que, as configurações concêntricas predominam para tamanhos de amostra menores, Fig. 21(E). Essas amostras apresentam uma região confome mais estreita, sendo mais influenciadas pelo limite da amostra. Para R maiores, os outros tipos de configurações aparecem frequentemente para valores grandes de N e R . Em particular, a configuração quiral [Fig. 21(G)] domina os grandes valores de N e R . No geral, concêntricas corresponderam a 62.1% das configurações encontradas em nossas simulações, as quirais representaram 24.6%, os policristais 7.8% e as configurações radiais apareceram 5.6% das vezes.

Clusters 2D conectados individualmente compartilham um invariante topológico comum: sua carga topológica total é sempre $Q = 6$ [38]. Em aglomerados homogêneos ou quase homogêneos, essa carga intrínseca, induzida por geometria, é distribuída

Figura 22 – Exemplo de configurações com $N = 200$ e (A) $R = 0.5r_0$ e (B) $R = 32r_0$. (A–B) Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. O círculo vermelho vazado apresenta carga topológica $+2$. Uma expansão da configuração concêntrica é mostrada em (B) e mostra que apenas as disclinações (com carga topológica $+1$) aparecem na parte interna da configuração (círculo verde de raio R^*). (C) Número de partículas N e de defeitos N_d acumulado radialmente em função de r/R são representadas pelas linhas tracejadas. Os pontos azul e preto representam os resultados para $R = 0.5r_0$ e para $R = 32r_0$ correspondentes às configurações mostradas em (A) e (B), respectivamente. A linha azul (preta) representa a densidade esperada para o potencial conforme $U_c(\mathbf{r})$ (aproximação parabólica) no limite contínuo $N_{CL} = 2\pi \int_0^r n(r')r'dr'$. Figura extraída e modificada da Ref. [10].



Fonte: F.C.O. Silva *et al.* [10]

perto da borda do aglomerado, como disclinações isoladas ou pacotes não-neutros de disclinações [38, 97, 98]. Em contraste com isso, uma característica comum de todas as configurações conformes discutidas anteriormente, é que sua carga topológica intrínseca está concentrada perto do centro da amostra na região não conforme $r < R^*$, seja como carga topológica isolada $q = +1$ ou uma sequência de cargas, resultando em uma carga topológica líquida $q = +1$ [exemplos são vistos na Fig. 20(E) - (H)]. Essa diferença marcante é ilustrada na Fig. 22, onde apresentamos duas configurações estáveis de $N = 200$ obtidas em duas simulações diferentes: (i) $R = 0.5r_0$, onde o confinamento dado pela Eq. (3.2) aproxima um potencial parabólico [veja a Fig. 22(A) e (B)] (ii) $R = 32r_0$, onde a região conforme ocupa a maior parte da amostra [veja a Fig. 22(B)]. No último caso, apenas a região próxima à região não-conforme, delimitada pelo círculo verde na Fig. 22(B), é mostrada para destacar a distribuição das disclinações no centro, que somam $Q = 6$. Uma deslocação também é mostrada fora da região não-conforme. Fora da área de ampliação, o cristal não apresenta defeitos, conforme evidenciado na distribuição cumulativa de defeitos N_d mostrado na Fig. 22(C). Também são mostradas na Fig. 22(C) a distribuição radial cumulativa $N(r)$ de partículas para ambas as configurações, que concorda muito bem com as densidades teoricamente previstas (linhas sólidas) fornecidas pela Eq. (1.43).

Sendo assim, a carga intrínseca nas configurações conformes está sempre concentrada perto do centro da amostra. No entanto, distribuições de carga neutra podem aparecer na região conforme, especialmente para grandes valores de R e N . Um tipo de distribuição de carga, já discutido, são limites neutros de grãos, que separam diferentes domínios cristalinos nas configurações quiral, radial e policristalina. Outro tipo comum são deslocamentos isolados, aparecendo em algumas configurações concêntricas e quirais. Em configurações concêntricas, os defeitos $q = -1$ e $q = +1$ que formam a deslocação são orientados radialmente. Essa orientação não altera o arranjo concêntrico das camadas de partículas, mas resulta em uma incompatibilidade no número de partículas nas camadas vizinhas. Nas configurações quirais, as deslocações isoladas parecem um pouco inclinadas em relação aos eixos radiais e normalmente terminam uma linha espiral existente ou criam uma nova, ou seja, nas configurações quirais, as deslocações têm o papel de alterar a taxa de enrolamento.

Outros resultados de menor energia e metaestáveis são apresentados no Apên-

dice A.

4 PROPRIEDADES ESPECTRAIS

Cheguei, meu sangue está quente
Zumbindo igualmente cavalo do cão
(...)

Trincheira da fuloresta - Siba e Fuloresta

Após a discussão das propriedades estáticas dos cristais quase-conformes, vamos agora discutir suas propriedades dinâmicas, i.e., os modos normais de vibração desses cristais. Em princípio, os modos normais são obtidos a partir do movimento térmico browniano das partículas em torno de sua posição de equilíbrio. Usualmente, cristais de Wigner são usados para estudar o modo normal e oscilações coletivas em processos dinâmicos fundamentais. A partir desses modos, temos as informações da tendência de movimento do sistema, quando submetidos à uma excitação energética. Schweigert e Peeters estudaram as propriedades espectrais de estados fundamentais de clusters 2D, confinados por um potencial parabólico [66].

Os espectros de excitação correspondentes às configurações de estado fundamental em cluster 2D, com potencial de interação de Coulomb e Yukawa confinadas por um potencial parabólico e parede dura, já são amplamente conhecidos [11, 29, 66, 99, 100]. Em sistema supercondutor, a dinâmica e estabilidade de configurações de vórtices em disco finos foram estudados por Cabral e Peeters a partir dos modos elásticos [101].

Esse capítulo é organizado da seguinte maneira. Na Seção 4.1 trataremos dos modos elásticos na aproximação parabólica, quando $R = 0.5r_0$, destacando as diferenças entre o nosso sistema e um com confinamento puramente parabólico e interação logarítmica. Sequencialmente, na Seção 4.2 estudaremos o comportamento dos modos elásticos quando aumentamos o potencial de confinamento, distribuindo as partículas na região quase-conforme ($R \geq R^*$). Por fim, na Seção 4.3, detalhes dos modos de compressão e cisalhamento contendo os modos elásticos para sistemas com diferentes números de partículas e regiões de confinamento serão estudados.

4.1 MODOS ELÁSTICOS NA APROXIMAÇÃO PARABÓLICA

Para obtermos o espectro de excitação do cluster, é preciso uma análise dos modos normais do sistema. Para isso, diagonalizando a matriz dinâmica, obtemos as autofrequências que correspondem à raiz quadrada dos autovalores da matriz dinâmica. Em um sistema com N partículas, temos $l = 2N$ modos normais. Para analisar a estabilidade das configurações, obtemos os autovalores (modos normais) λ e autovetores $\vec{v}_\lambda$ da matriz dinâmica [66]

$$H_{\beta\gamma, lk} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\beta l} \partial r_{\gamma k}} \quad (4.1)$$

onde β, γ indicam as componentes vetoriais ($\beta, \gamma = \{x, y\}$) e l, k os índices das partículas. Partindo do Hamiltoniano [Eq. (3.5)]

$$H = U_c + U_{\text{int}} = -\frac{N\varepsilon_0}{2\ln\left(1 + \frac{R^2}{r_0^2}\right)} \sum_i Li_2(-r_i^2/r_0^2) - \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{i,j} \ln(r_{i,j}), \quad (4.2)$$

e aplicando a Eq. (4.1) no primeiro termo e usando $r_i^2 = \sum_\alpha r_{\alpha i}^2$, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_c}{\partial r_{\gamma k}} &= -\frac{N\varepsilon_0}{2\ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)} \sum_i \frac{\partial}{\partial r_{\gamma k}} Li_2(-r_i^2/r_0^2) \\ &= \frac{N\varepsilon_0}{\ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)} \frac{\ln\left(1 + r_k^2/r_0^2\right)}{r_k^2} r_{\gamma k}. \end{aligned}$$

Aplicando a segunda derivada parcial,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_{\beta l}} \frac{\partial U_c}{\partial r_{\gamma k}} &= \frac{\partial}{\partial r_{\beta l}} \left[\frac{N\varepsilon_0}{\ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)} \frac{\ln\left(1 + r_k^2/r_0^2\right)}{r_k^2} r_{\gamma k} \right] \\ &= \frac{N\varepsilon_0}{\ln\left(1 + R^2/r_0^2\right)} \left[\frac{2r_{\beta k} r_{\gamma k}}{r_0^2 r_k^2 \left(1 + r_k^2/r_0^2\right)} \delta_{lk} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\ln\left(1 + r_k^2/r_0^2\right)}{r_k^2} \delta_{\beta\gamma} \delta_{lk} - \frac{2r_{\gamma k} r_{\beta k} \ln\left(1 + r_k^2/r_0^2\right)}{r_k^4} \delta_{lk} \right]. \quad (4.3) \end{aligned}$$

Do segundo termo, relacionado ao potencial de interação, e usando $r_{ij}^2 = \sum_{\alpha} (r_{\alpha i} - r_{\alpha j})^2$, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial r_{\gamma k}} &= -\frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial r_{\gamma k}} \ln(r_{ij}) \\ &= \varepsilon_0 \sum_i \frac{1}{r_{ik}^2} (r_{\gamma i} - r_{\gamma k}). \end{aligned}$$

Da segunda derivada parcial

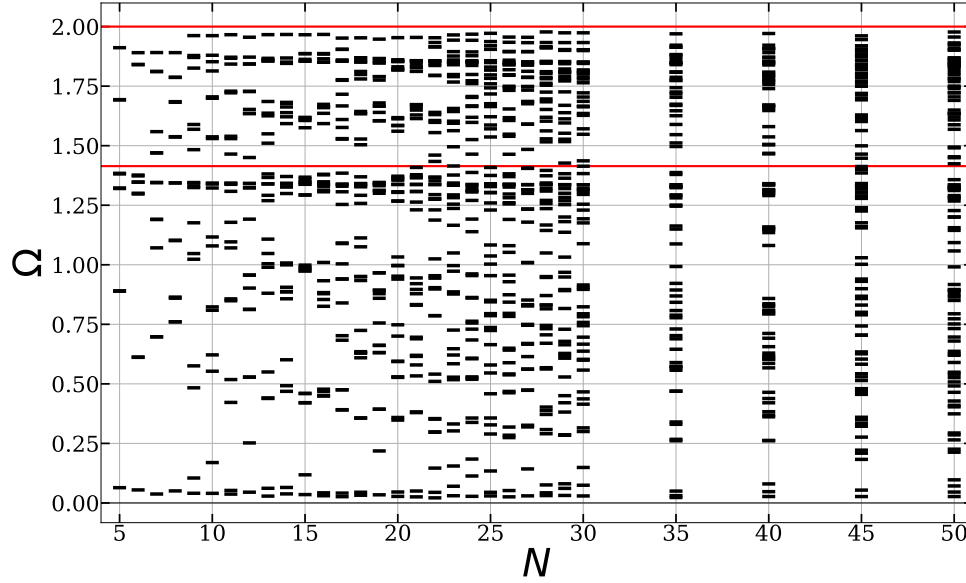
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_{\beta l}} \frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial r_{\gamma k}} &= \frac{\partial}{\partial r_{\beta l}} \left[\varepsilon_0 \sum_i \frac{1}{r_{ik}^2} (r_{\gamma i} - r_{\gamma k}) \right] \\ &= \varepsilon_0 \left[\sum_i \frac{1}{r_{ik}^2} \delta_{\beta\gamma} \delta_{li} - \sum_i \frac{1}{r_{ik}^2} \delta_{\beta\gamma} \delta_{lk} + \right. \\ &\quad \left. -2 \sum_i \frac{(r_{\gamma i} - r_{\gamma k})(r_{\beta i} - r_{\beta k})}{r_{ik}^4} (\delta_{li} - \delta_{lk}) \right]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Agrupando as Eqs. (4.3) e (4.4), a matriz dinâmica resulta em

$$\begin{aligned} H_{\beta\gamma, lk} = \frac{\partial^2 H}{\partial r_{\beta l} \partial r_{\gamma k}} &= \frac{N\varepsilon_0}{\ln(1 + R^2/r_0^2)} \left[\frac{2r_{\beta k} r_{\gamma k}}{r_0^2 r_k^2 (1 + r_k^2/r_0^2)} \delta_{lk} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\ln(1 + r_k^2/r_0^2)}{r_k^2} \delta_{\beta\gamma} \delta_{lk} - \frac{2r_{\gamma k} r_{\beta k} \ln(1 + r_k^2/r_0^2)}{r_k^4} \delta_{lk} \right] + \\ &\quad + \varepsilon_0 \left[\sum_i \frac{1}{r_{ik}^2} \delta_{\beta\gamma} \delta_{li} - \sum_i \frac{1}{r_{ik}^2} \delta_{\beta\gamma} \delta_{lk} + \right. \\ &\quad \left. -2 \sum_i \frac{(r_{\gamma i} - r_{\gamma k})(r_{\beta i} - r_{\beta k})}{r_{ik}^4} (\delta_{li} - \delta_{lk}) \right]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Em um sistema 2D de partículas clássicas, confinadas em potencial quadrático e interagindo via potencial de Coulomb, existem três autofrequências que são independentes da quantidade de partículas [66]: $\Omega = 0$, $\sqrt{2}$ e $\sqrt{6}$, que correspondem à rotação do sistema em torno do centro de confinamento, ao modo de oscilação (translação) do centro de massa e ao modo de oscilação radial de todas as partículas, respectivamente. O modo de oscilação radial, também é chamado de modo de respiração (*breathing*), que pode ser de compressão ou expansão. Para valores pequenos de N , $\Omega_{\min}$ corresponde ao movimento de rotação entre as camadas, enquanto que para valores mais elevados de N a menor autofrequência está relacionado ao par de excitação vórtice/anti-vórtice [66].

Figura 23 – Espectro de excitação dos modos normais em função do número de partículas na aproximação parabólica $R = 0.5r_0$. As autofrequências, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$, são obtidas através das configurações apresentadas na Fig. 16.

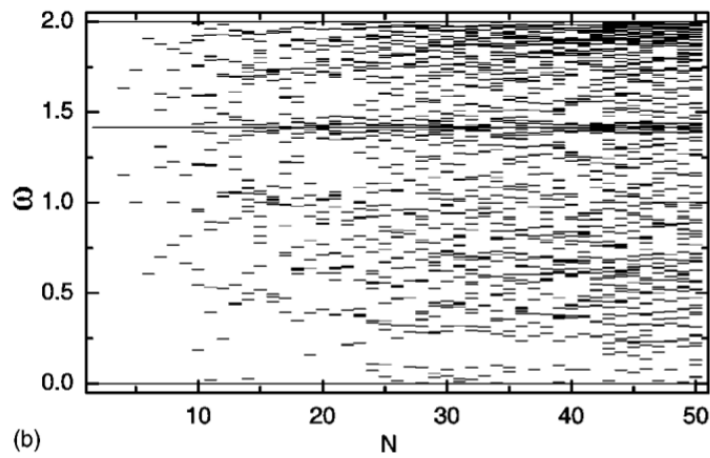


Fonte: O autor (2020)

As autofrequências correspondem a raiz quadrada dos autovalores da matriz dinâmica, expressas em unidades de $\Omega_0 = \sqrt{\varepsilon_0/r_0^2}$. Os autovalores da matriz dinâmica são análogos às constantes elásticas efetivas dos modos dadas pelos autovetores da matriz [101].

Na Fig. 23 apresentamos as autofrequências para $N \leq 50$ quando confinadas em $R = 0.5r_0$, aproximação parabólica. O espectro é bem similar ao apresentando por Partoens e Deo [11] (ver Fig. 24), com interação logarítmica e confinamento parabólico. Normalizamos as autofrequências para a aproximação parabólica por $\sqrt{2.2404N}$ para ficarem consistentes com as apresentadas por Partoens e Deo [ver Fig. 23]. No caso puramente parabólico a maior autofrequência, $\omega = \omega_{max} = 2.0$ (ver Fig. 24), corresponde ao modo de *breathing*, passando a ter um limite superior para as autofrequências. Além disso, a autofrequência associada a translação do centro de massa, $\omega_{CM} = \sqrt{2.0}$ [74]. Destacamos essas duas autofrequências características na Fig. 23 com linhas vermelhas horizontais. Notemos que a densidade espectral apresenta picos, i.e., acúmulos de autofrequências, um pouco abaixo das autofrequências ω_{CM} e ω_{max} , previstas para o caso puramente parabólico. Comparando em termos da aproximação parabólica, a constante elástica é menor quando se afasta do centro, provocando um deslocamento das autofrequências para baixo (ver Fig. 12).

Figura 24 – Autofrequências para $N \leq 50$ partículas, interagindo via potencial logarítmico confinados parabolicamente. Figura extraída da Ref [11].

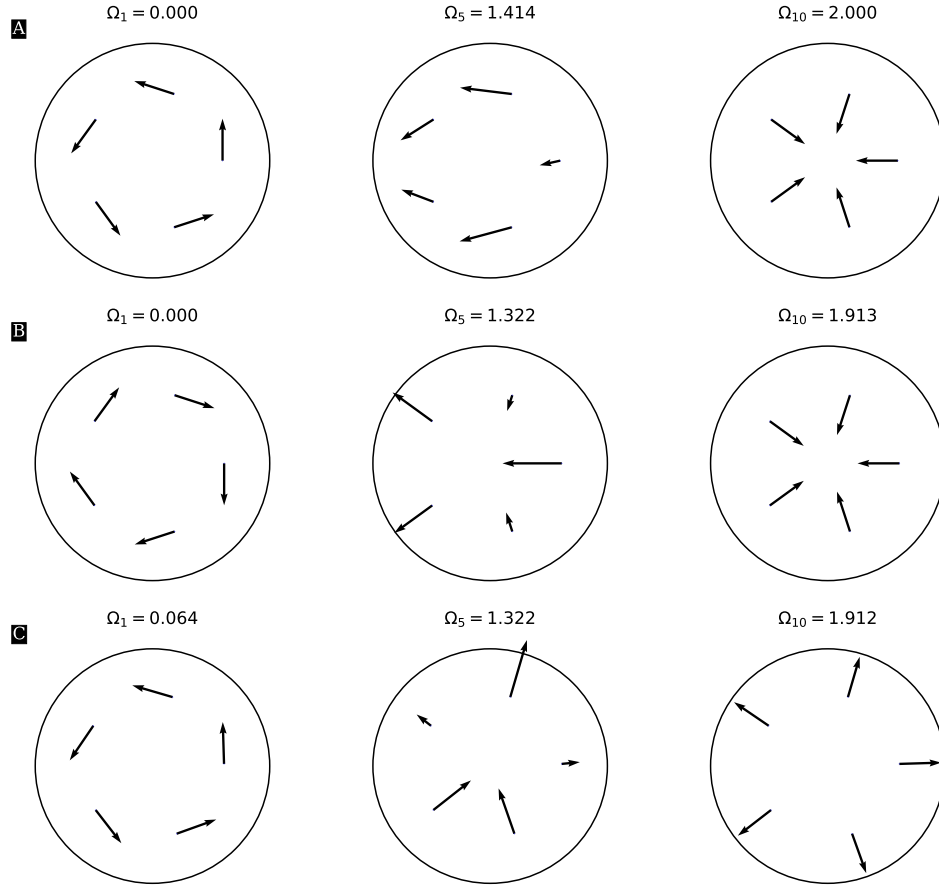


Fonte: Partoens e Deo [11].

Note que, na Fig. 23, a menor autofrequência, Ω_{min} , não corresponde a uma autofrequência nula. No entanto, todas as configurações estão associadas a rotação do sistema em torno do centro de confinamento. Para corroborar com o cálculo das autofrequências, obtemos as autofrequências para algumas configurações analíticas, formando polígonos regulares. Essas autofrequências são obtidas numericamente, através da matriz dinâmica [Eq. 4.5].

Na Fig. 25, apresentamos três autofrequências para as configurações analíticas de um sistema contendo cinco partículas: com confinamento parabólico (A) e conforme (B). Na Fig. 25 (C), apresentamos os mesmos três automodos para a configuração de menor energia, obtida através da dinâmica molecular [ver Fig. 16]. Para as configurações analíticas, a menor autofrequência corresponde ao autovalor nulo, associado à uma rotação pura em torno do centro da amostra. Quando analisamos a maior autofrequência, o modo de *breathing* ocorre apenas no confinamento parabólico, Fig. 25 (A). Apesar de um automodo ocorrer de forma semelhante para as configurações analíticas e potencial de confinamento conforme, Fig. 25(B), a maior autofrequência é menor do que o $\Omega = \omega_{max}$ obtido no confinamento parabólico. Esse modo pode, também, não corresponder a maior autofrequência. Classificamos esses modos de respiração, que não correspondem à autofrequência máxima, como sendo *breathing-like* [11]. Na aproximação parabólica, as autofrequências associadas ao ω_{CM} aparecem de forma degenerada, sendo apresentado apenas um desses automodos, coluna central da Fig. 25. Comparando os resultados das

Figura 25 – Autofrequências para as configurações: (A) analíticas e confinamento parabólico, (B) analíticas e confinamento conforme, $R = 0.5r_0$. Em (C) configuração de menor energia obtida pela dinâmica molecular para $R = 0.5r_0$ [ver Fig. 16]. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$.

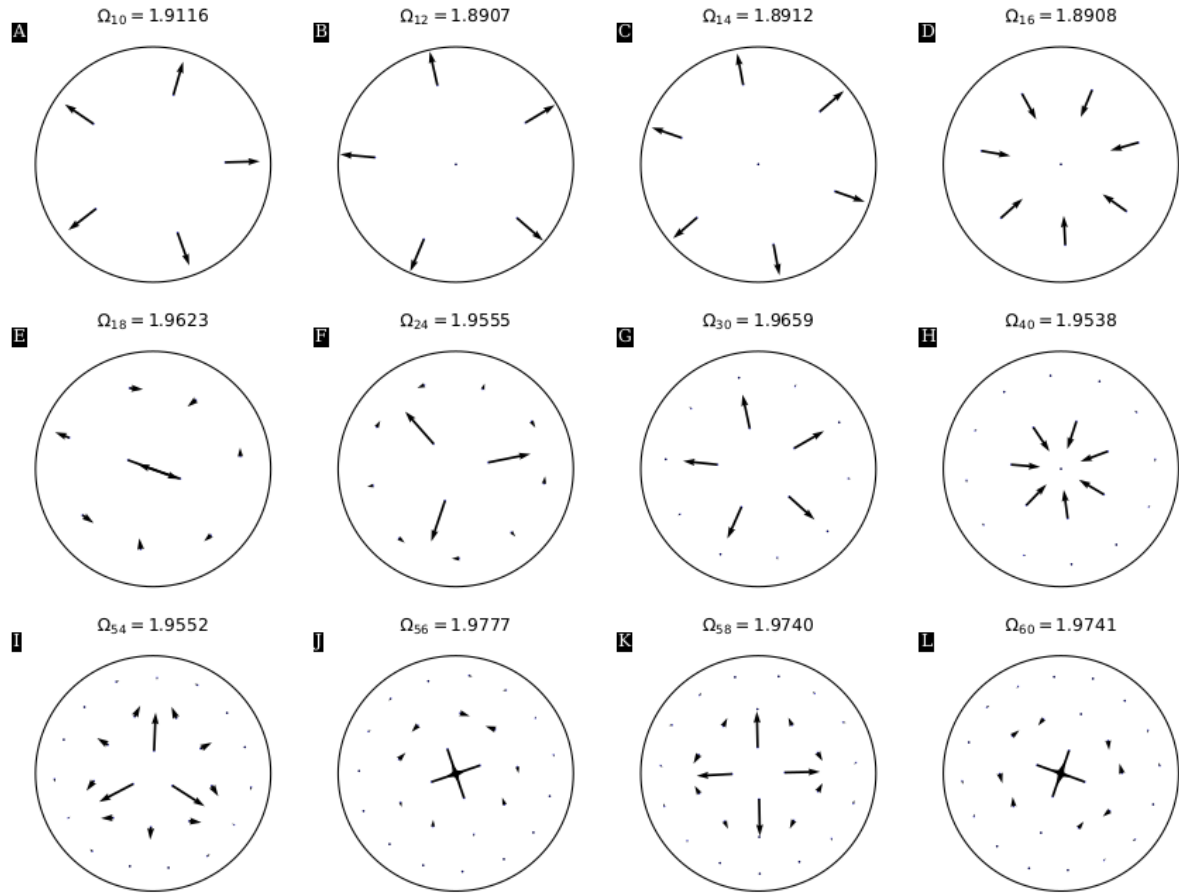


Fonte: O autor (2020)

simulações com os previstos analiticamente, as autofrequências obtidas são próximas dos valores esperados pela aproximação parabólica, $R = 0.5r_0$. Com o aumento do número de partículas, a menor autofrequência tende a se aproximar de $\Omega = 0.0$ (ver Fig. 23).

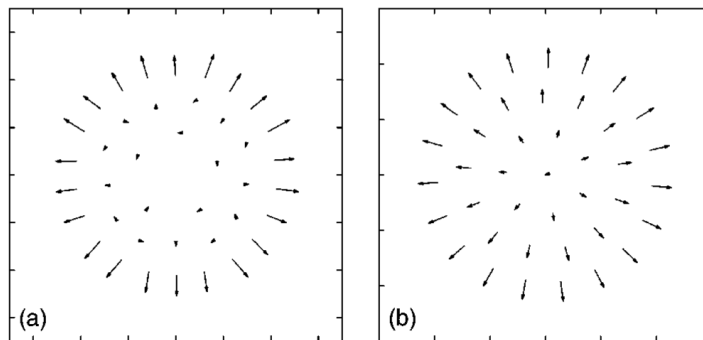
O modo de respiração (*breathing*), que corresponde a um movimento radial e de maior autofrequência, não é um comportamento predominante em nosso sistema. O modo *breathing* comumente observado, i.e., com oscilação radial de todas as partículas, é observado apenas para $N \leq 8$ [Fig. 26], onde obtemos configurações apenas com uma única camada. Diferente do caso puramente parabólico, a maior autofrequência não corresponde ao modo de *breathing*. Nosso sistema passa a apresentar o automodo *breathing-like*, comentado anteriormente.

Figura 26 – Modo de respiração (*breathing*) para $N = 5$ (A), 6 (B), 7 (C), 8 (D), 9 (E), 12 (F), 15 (G), 20 (H), 27 (I), 28 (J), 29 (K), 30 (L); correspondendo a mais alta autofrequência. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$, para $R = 0.5r_0$.



Fonte: O autor (2020)

Figura 27 – (a) O modo *breathing-like* para $N = 40$ correspondente a maior autofrequência para confinamento $\sim r^3$. (b) O modo *breathing* para $N = 40$ e confinamento puramente parabólico. Figura extraída da Ref. [11]



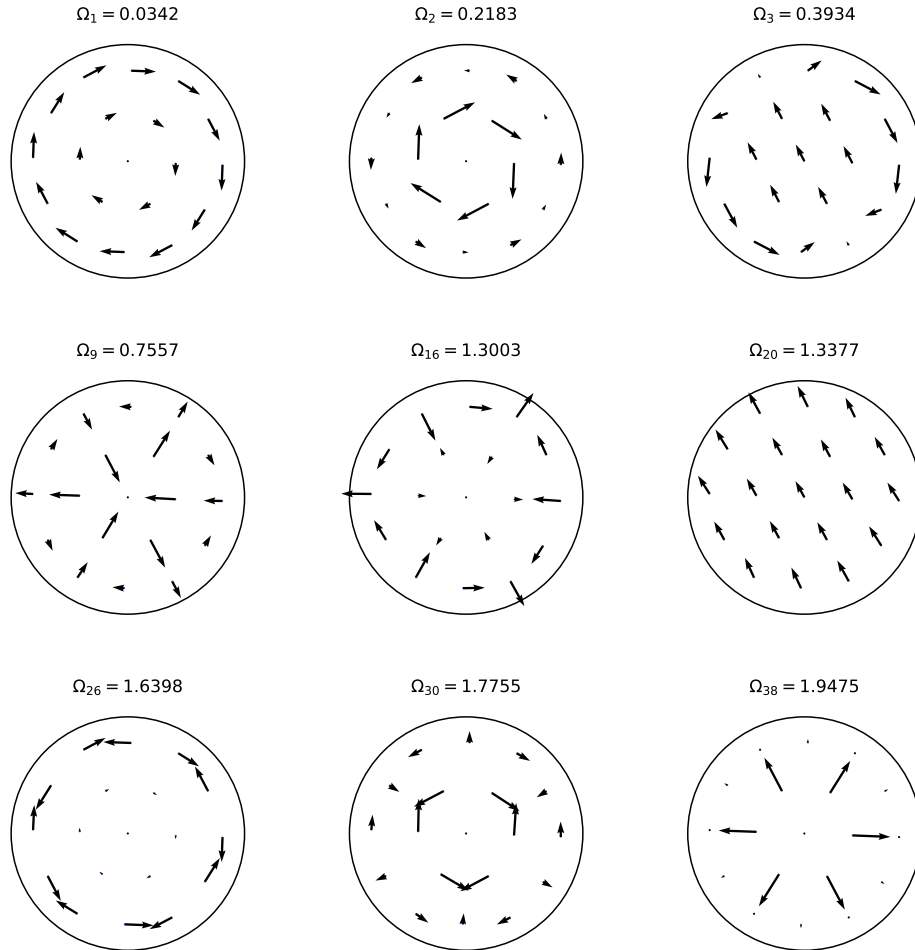
Fonte: Partoens e Deo [11]

Na Fig. 26 apresentamos as maiores autofrequências para diferentes valores N confinadas no potencial aproximadamente parabólico, $R = 0.5r_0$. Quando aumentamos o número de partículas, e consequentemente o número de camadas, a autofrequência mais elevada para cada configuração, não corresponde ao modo de *breathing*, observado no confinamento puramente parabólico. Situação análoga é observada por Partoens e Deo [11] quando submetem partículas interagindo logarithmicamente e confinadas por um potencial $\sim r^3$ [ver Fig. 27]. Note que, em uma breve comparação, os autovetores mais acentuados ocorrem na última camada, enquanto que na nossa aproximação parabólica, $R = 0.5r_0$, ocorre nas camadas mais internas. Para maiores valores de N , diferentes modos elásticos são associados às maiores autofrequências. Sendo assim, a única autofrequência que independe do tipo de interação entre as partículas e potencial de confinamento, é o modo de rotação Ω_{min} . O modo de *breathing-like* ocorre de diferentes maneiras, como será visto mais adiante.

Para exemplificar os diferentes modos normais obtidos, quando confinamos as partículas em um potencial aproximadamente parabólico ($R = 0.5r_0$), escolhemos um sistema altamente simétrico com $N = 19$, distribuídas radialmente em duas camadas (1,6,12) [ver Fig. 16]. Na Fig. 28, o menor e o maior modo elástico correspondem ao estado de rotação e de *breathing-like*, respectivamente. O caso em destaque Ω_{38} , corresponde ao modo de respiração expansivo das camadas mais internas. As autofrequências intermediárias estão relacionadas aos diversos tipos de movimentos, como rotações opostas (Ω_2), convecções (Ω_3 e Ω_9), compressão mista (Ω_{16}), translação (Ω_{20}), rotação mista (Ω_{26} e Ω_{30}). O modo de translação sempre ocorre aos pares, i.e., são dois autovalores associados à translação do centro de massa. Tais resultados são semelhantes aos relatados em sistemas clássicos de partículas, com interação logarithmica ou coulombiana, confinados a um potencial parabólico [11, 66, 101].

Para sistemas maiores, $N \geq 100$, as autofrequências características: rotação, translação e *breathing-like*, apresentam-se de maneira distinta da observada em sistema menores. A menor e a maior autofrequência correspondem aos modos de rotação e de *breathing-like*, atuando nas camadas mais internas, para $R = 0.5r_0$. A quantidade de modos elásticos, condizentes ao modo de translação, aparecem frequentemente aos pares. Os modos normais estão efetivamente associados ao movimento de partículas livres em um potencial resultante gerado pelas demais partículas e pelo potencial de

Figura 28 – Modos elásticos para $N = 19$ (1,6,12) e $R = 0.5r_0$. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de $\Omega_0/\sqrt{2.2404N}$. O menor e maior modo elástico, correspondem ao estado de rotação e compressão, respectivamente. As autofrequências intermediárias estão relacionadas aos diversos tipos de movimentos, como rotações opostas (Ω_2), convecções (Ω_3 e Ω_9), compressão mista (Ω_{16}), translação (Ω_{20}), rotação mista (Ω_{26} e Ω_{30}).



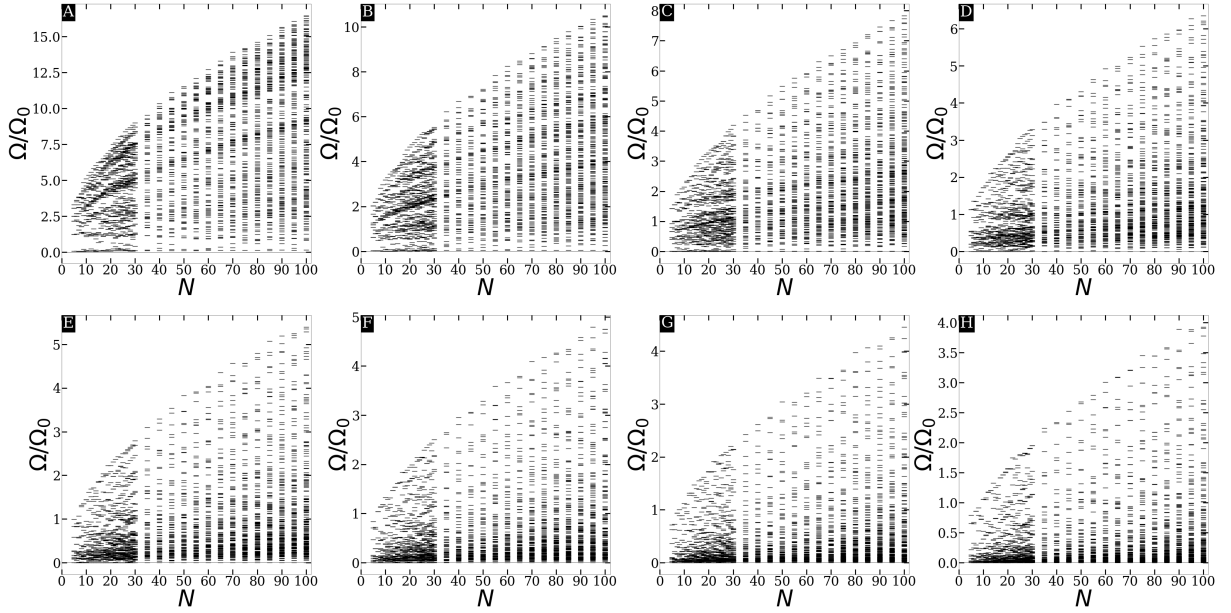
Fonte: O autor (2020)

confinamento do sistema. Ao tentar mover uma partícula da sua posição de equilíbrio estático, forças restauradoras emergem trazendo-a à sua posição de equilíbrio. Ao adicionarmos mais partículas ao sistema, que interagem logaritmicamente, resulta em um aumento na frequência do modo respiratório [11].

4.2 MODOS ELÁSTICOS COM DENSIDADE QUASE-CONFORME

Na seção anterior investigamos os tipos de modos normais encontrados na aproximação parabólica $R = 0.5r_0$. Nessa seção apresentaremos como as autofrequências se comportam com o aumento da região de confinamento. Na Fig. 29 é apresentado o

Figura 29 – Espectro de excitação dos modos normais em função do número de partículas com o aumento da região de confinamento $R = r_0$ (A), $R = 2r_0$ (B), $R = 4r_0$ (C), $R = 8r_0$ (D), $R = 16r_0$ (E), $R = 32r_0$ (F), $R = 64r_0$ (G), $R = 128r_0$ (H).

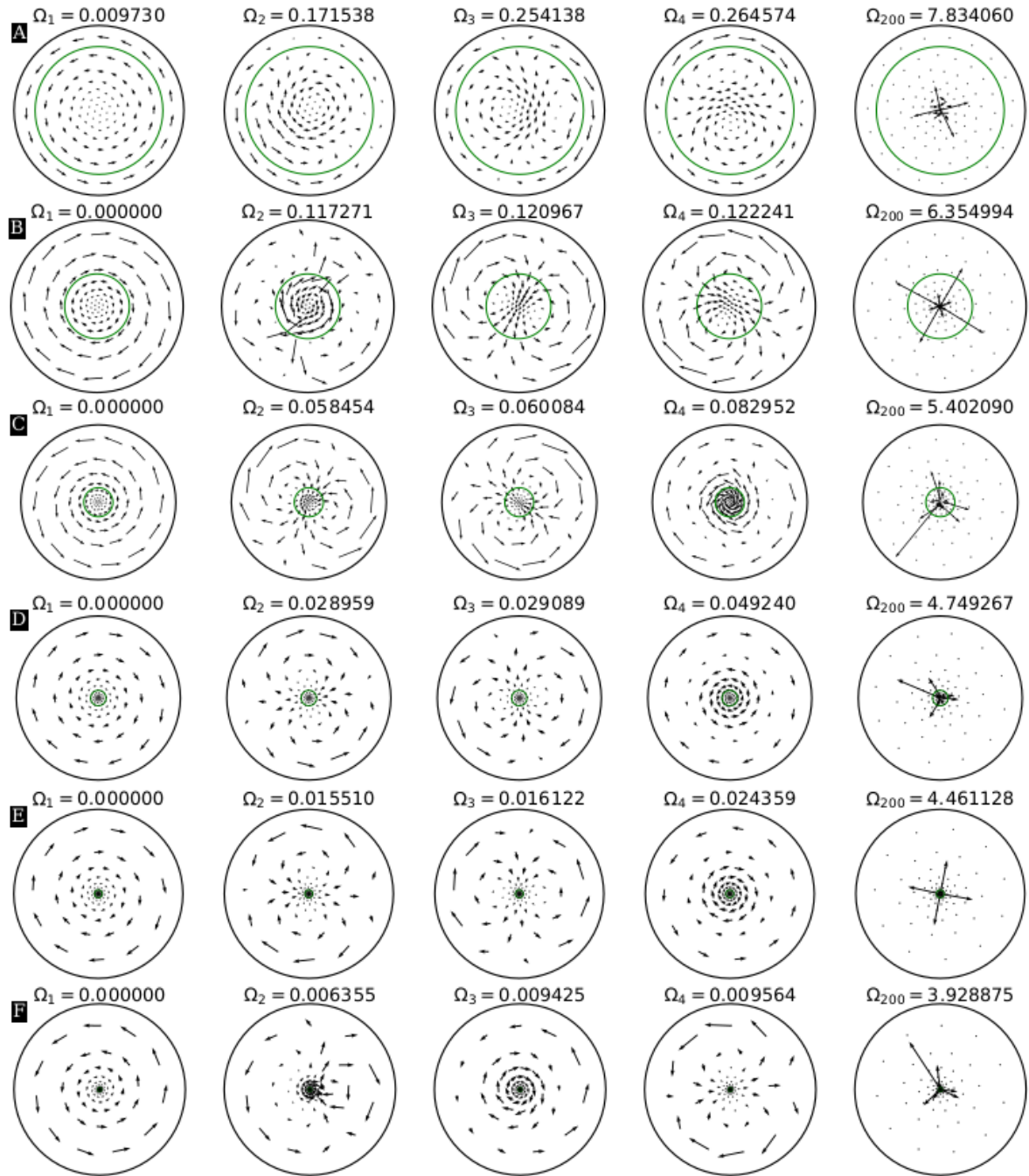


Fonte: O autor (2020)

comportamento das autofrequências em função do aumento da região de confinamento para $R/r_0 = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 . Para valores menores de confinamento, as primeiras autofrequências são mais espaçadas, invertendo esse comportamento com o aumento de R . Acompanhando os valores das autofrequências, para um mesmo valor de N e variando a sua região de confinamento R , temos uma redução no valor da maior autofrequência em função do aumento de R . O modo de respiração (*breathing*), que corresponde à um movimento radial e de maior autofrequência, no potencial puramente parabólico, além do modo de oscilação do centro de massa, não é um comportamento coletivo em nosso sistema. Ou seja, as partículas não apresentam um movimento de translação e respiração global. No confinamento aproximadamente parabólico, $R = 0.5r_0$, já observamos que o modo de *breathing* não ocorre de maneira coletiva, passando a atuar entre as camadas, onde classificamos como *breathing-like*. Com o aumento da conformidade do potencial de confinamento, i.e., $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_{DEC}$ quando $R \gg 0.5r_0$, os modos elásticos correspondentes à translação de todas as partículas, em relação ao centro de massa, não são observados para $R \geq 4r_0$.

Como discutido na seção anterior, cada configuração resulta em autovetores característicos de cada configuração, mas que preservam uma autofrequência correspondente ao modo de rotação em torno do centro da amostra, $\Omega_{min=1}$. Na Fig. 30 mostramos

Figura 30 – Primeiras e mais elevada autofrequências para clusters com $N = 100$ e $R/r_0 = 4$ (A), 8(B), 16(C), 32(D), 64(E) e 128(F). Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 . O círculo verde representa $r = R^*$.



Fonte: O autor (2020)

as quatro primeiras autofrequências, além do modo elástico mais elevado, associado ao modo de respiração, para clusters com $N = 100$ e $R/r_0 = 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 respectivamente. Movimentos semelhantes aos da Fig. 28 estão presentes em sistemas maiores, independente da região de confinamento. Modos de convecções e rotações opostas são comumente observados para qualquer conjunto ($N \geq 6$). Para autovalores $\lambda < 10^{-7}$ consideramos $\lambda = 0.0$, resultando em $\Omega = 0.0$, situações apresentadas nas Figs. 30 (B – F).

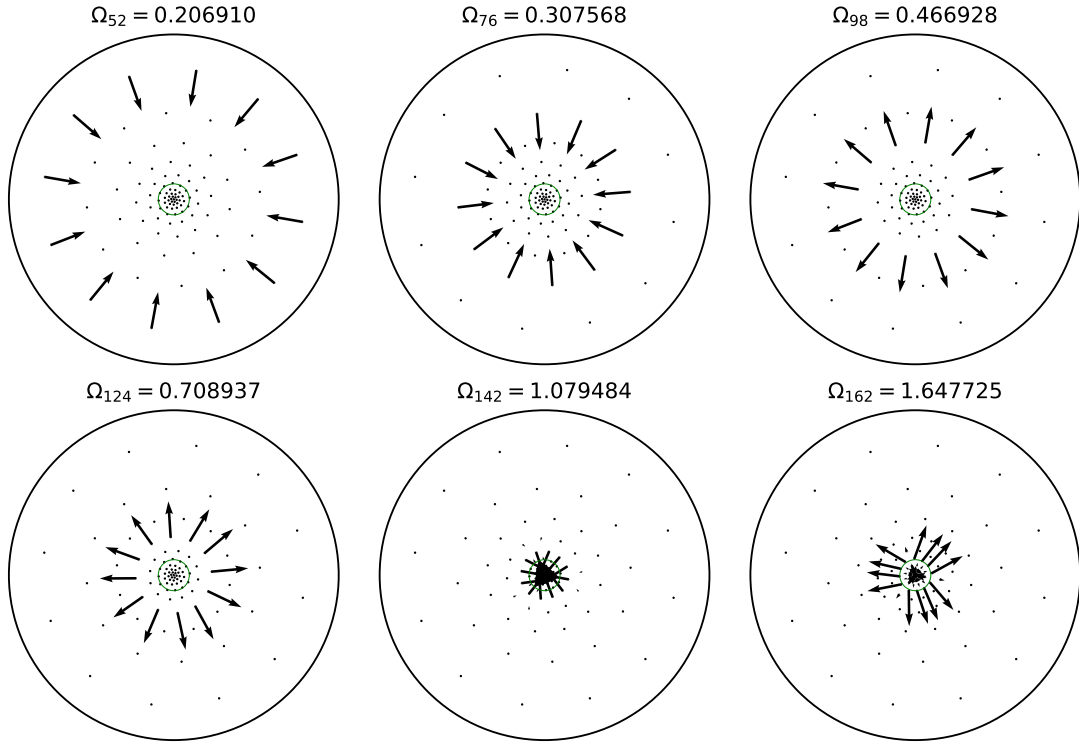
O modo de respiração é observado em diferentes autofrequências e atuando individualmente nas camadas. Na Fig. 31 mostramos esse evento em um amostra com $N = 100$ e $R = 32r_0$. O modo elástico de respiração atua primeiro na camada mais externa ($\Omega_{52} = 0.206910\Omega_0$), e de forma sequencial nas acamadas mais internas. Os autovetores, associados à Ω_{52} , Ω_{76} e Ω_{142} , compactam o cluster, enquanto os demais (Ω_{98} , Ω_{124} e Ω_{162}) favorecem um modo de respiração expansivo. Esses eventos estão presentes nas amostras com confinamento $R \geq 4r_0$. Na Fig. 30(D), a autofrequência mais elevada $\Omega_{200} = 4.749267\Omega_0$, para $N = 100$ e $R = 32r_0$.

Os resultados corroboram com os observados quando partículas interagem de forma logarítmica e são confinadas por um potencial distinto do parabólico [11]. Esses resultados podem ser compreendidos do ponto de vista de uma "constante"elástica do potencial que crescente com r , quando o potencial de confinamento é $\sim r^3$, permanece constate, para $\sim r^2$, e decrescente para o potencial de confinamento conforme [ver Eq. 3.2], proposto nessa tese. Isso resulta em uma inversão do comportamento dos autovetores associados aos modos *breathing-like*. Para $\sim r^3$, a maior autofrequência está associado ao modo de *breathing-like* da camada mais externa, enquanto que para o potencial conforme, corresponde ao modo de *breathing-like* das camadas mais internas [ver Figs. 27 e 31].

4.3 MODOS DE COMPRESSÃO E CISALHAMENTO

Bonsall e Maradudin mostraram que em um sistema infinito 2D [27], dois tipos de ondas são propagadas em um cristal de Wigner: ondas sonoras laterais com dispersão $\Omega \sim \lambda$ e ondas longitudinais do plasma com $\Omega \sim \sqrt{\lambda}$, no limite de longos comprimentos de onda [102]. Essas ondas estão associadas aos modos de compressão e cisalhamento observados em clusters finitos.

Figura 31 – Modo de respiração atuando individualmente nas camadas localizadas em $r \geq R^*$ para $N = 100$ e $R = 32r_0$. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 . O círculo verde representa $r = R^*$.



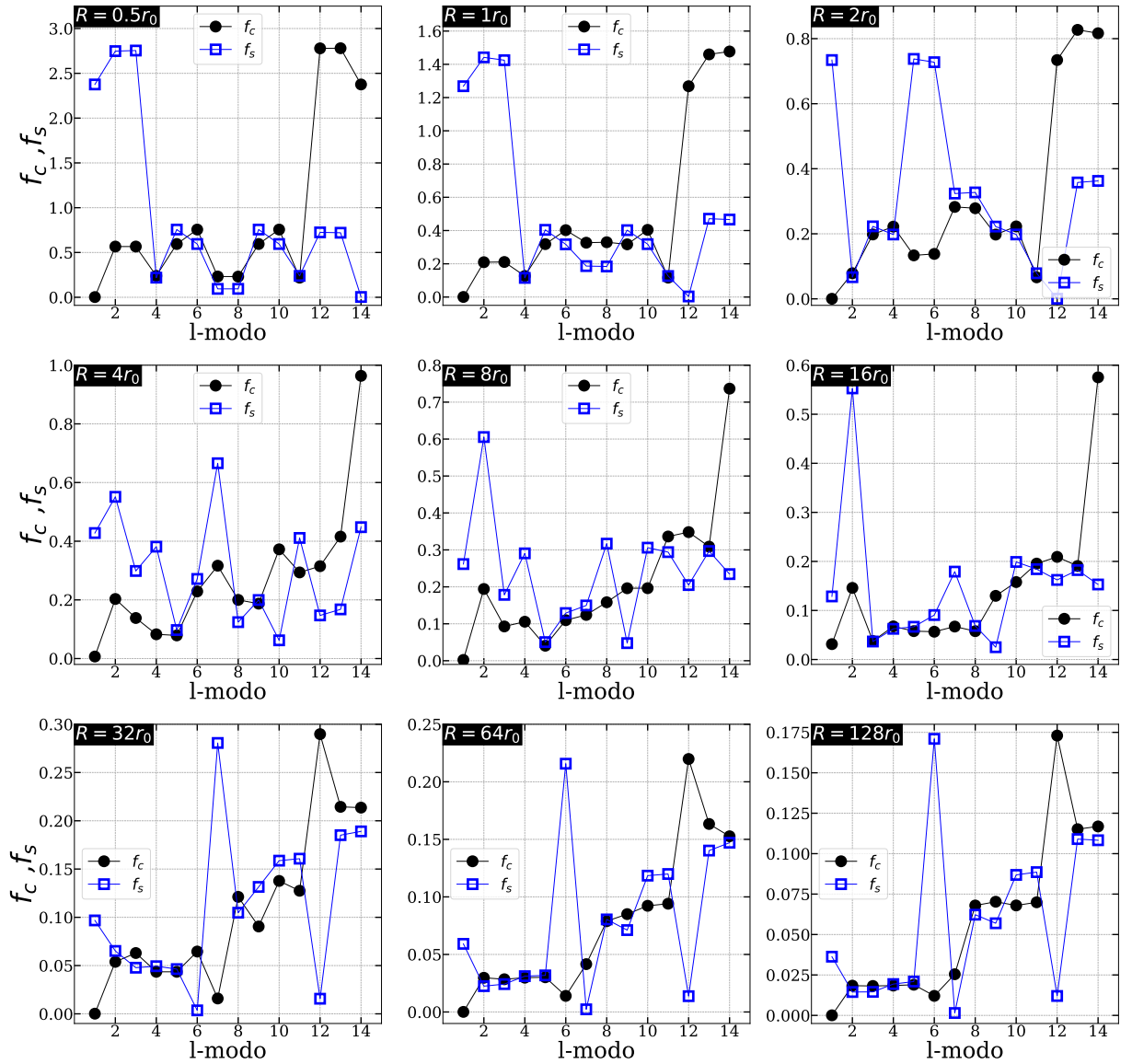
Fonte: O autor (2020)

Em uma rede 2D, o comportamento dos modos elásticos podem ser classificados como modos de cisalhamento ou de compressão. Para caracterizar esses modos, calculamos, respectivamente, a divergência $\nabla \cdot \vec{v}$ e a vorticidade $(\nabla \times \vec{v})_z$ do campo de velocidades. O campo de velocidade é calculado através da interpolação do campo de autovetores obtidos dos autovetores associados ao l -ésimo modo(λ_l) [29, 101]. A interpolação é calculada em um grid quadrado, e o rotacional e divergente do campo de autovetores são calculados numericamente. Um grid com $G^2 = 220 \times 220$ pontos foi escolhido e polinômios cúbicos foram interpolados entre os valores dos autovetores. Os mapas de divergência e vorticidade (rotacional) foram calculados em todos os pontos desta matriz usando

$$f_s(l)^2 = \frac{1}{G^2} \sum_{k=1}^{G^2} |\nabla \times v_{l,k}|^2, \quad (4.6)$$

$$f_c(l)^2 = \frac{1}{G^2} \sum_{k=1}^{G^2} |\nabla \cdot v_{l,k}|^2, \quad (4.7)$$

Figura 32 – Modos de compressão f_c (círculos sólidos) e de cisalhamento f_s (quadrados vazados) para $N = 7$ em função de $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 .

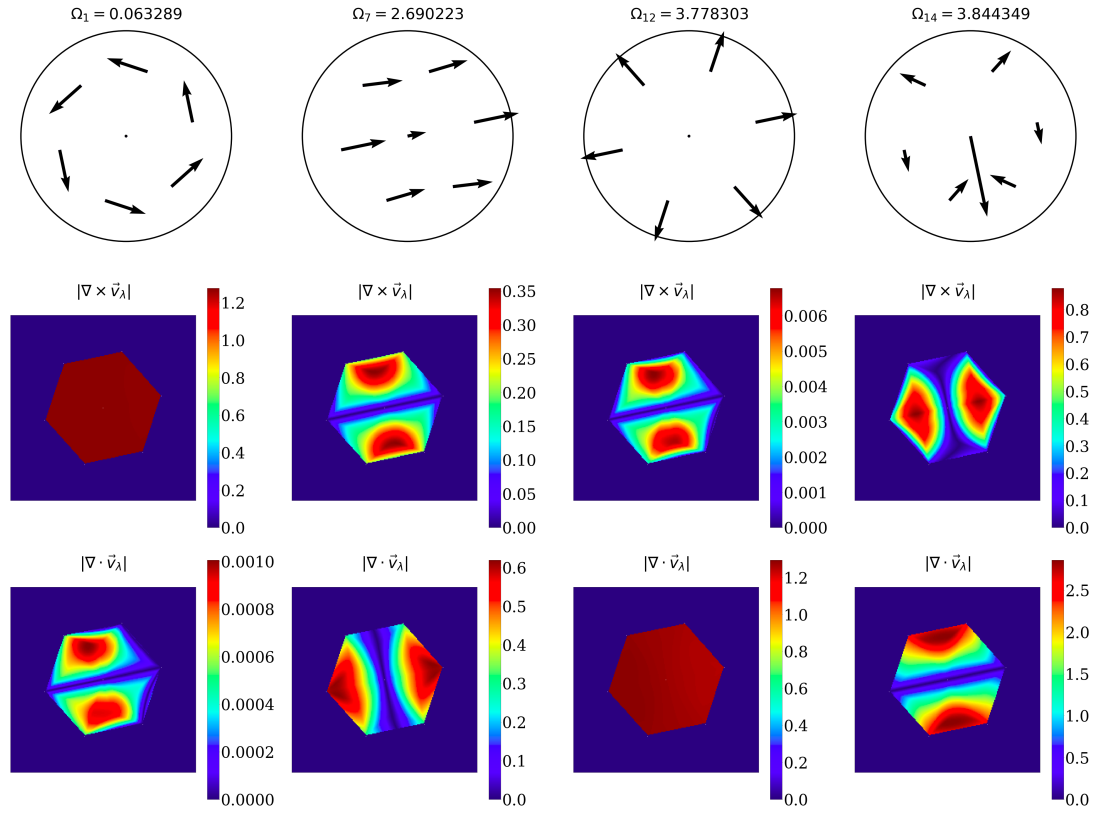


Fonte: O autor (2020)

que descreve como cada modo é semelhante ao modo de cisalhamento (f_s) e compressão (f_c).

Na Fig. 32 mostramos o cálculo de f_s e f_c em função da ordem do automodo para um sistema com 7 partículas e $R = 0.5r_0$ até $128r_0$. As configurações de $N = 7$ e $8r_0 \leq R \leq 128r_0$ podem ser consultadas no Apêndice A. Essas configurações correspondem as de menor energia para cada conjunto (N, R) . Para $R = 0.5r_0$, claramente temos que o modo cisalhamento (compressão) ocorre para os menores (maiores) valores de λ , associado ao l -ésimo modo. Dependência similar é observada experimentalmente em cargas interagindo via potencial de Coulomb (Yukawa) e confinadas por um potencial

Figura 33 – Autovetores e mapa de cores para vorticidade $|(\nabla \times \vec{v})_z|$ e divergente $|\nabla \cdot \vec{v}|$ associados a um sistema com $N = 7$ e $R = r_0$.

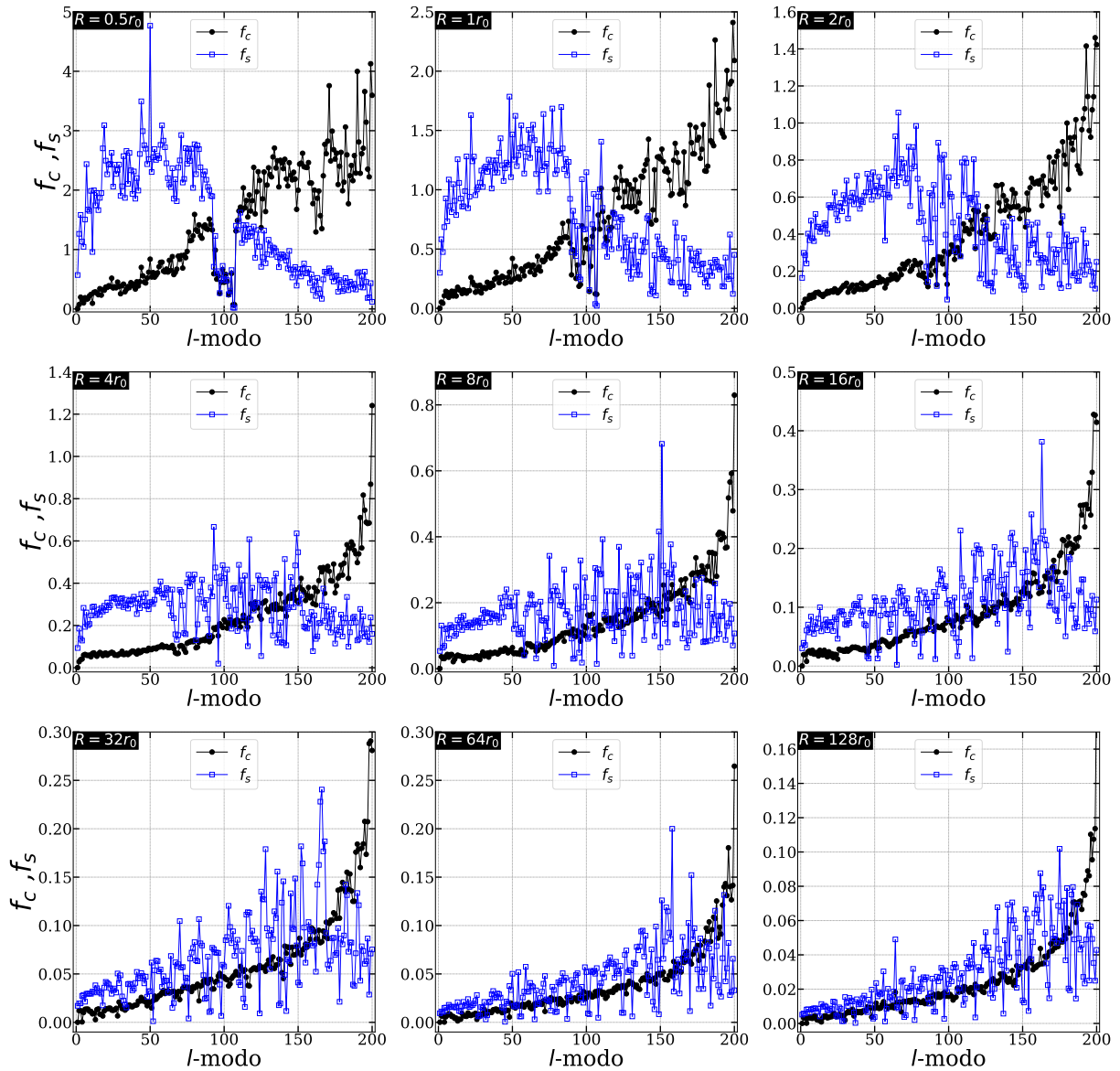


Fonte: O autor (2020)

parabólico [100]. O modo de compressão puro, não envolve nenhum movimento rotacional, logo $\nabla \times \vec{v} = 0$ para esse modo, resultando em $f_s = 0$. Analogamente, o modo de cisalhamento conserva a densidade de partículas e, portanto, $\nabla \cdot \vec{v} = 0$, ocasionando $f_c = 0$. Esse comportamento é observado na Fig. 32 ($R = 0.5r_0$).

Quando o sistema apresenta um modo de translação, $f_c = f_s = 0.0$ desde que não envolva nenhum tipo de movimento relativo. O modo de translação é comumente manifestado por dois modos elásticos degenerados. Em nosso sistema esses modos surgem aos pares, mas são não-degenerados. O modo de translação ocorre quando $l \approx N$. No caso de $N = 7$, esses modos correspondem a $l = 7$ e 8 , para $R/r_0 = 0.5, 1$ e 2 [ver Fig. 32]. Apesar de $f_c(l = 7, 8) \neq f_d(l = 7, 8)$, os modos $f_c(l = 7) \approx f_c(l = 8)$ e $f_s(l = 7) \approx f_s(l = 8)$ caracterizam a existência do modo de translação. Com o aumento da região de confinamento, é possível identificar que o modo de cisalhamento mínimo deixa de ser associado ao modo de respiração Ω_{2N} , visualmente observado em $R = 0.5r_0$. Aumentando a região de confinamento, f_s passa a apresentar mais de um valor de

Figura 34 – Modos de compressão f_c (círculos sólidos) e de cisalhamento f_s (quadrados vazados) para $N = 100$ e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 .



Fonte: O autor (2020)

mínimo, como apresentado em $R/r_0 = 32, 64$ e 128 . Os modos elásticos, correspondentes aos valores de mínimo em f_s , representam as diferentes autofrequências que atuam como modo de respiração individualmente nas camadas [ver Fig. 31].

Na Fig. 33 apresentamos os autovetores no topo e suas respectivas dependências espaciais de $|\nabla \times \vec{v}_\lambda|$ e $|\nabla \cdot \vec{v}_\lambda|$, para um sistema com $N = 7$ e $R = r_0$. O modo $l = 1$ corresponde ao modo de rotação, mostrando o modo de cisalhamento mais acentuado, com $|\nabla \times \vec{v}_\lambda|$ variando de 0 até ~ 0.3 . O oposto acontece para $l = 12$, intensificando o modo de compressão $|\nabla \cdot \vec{v}_\lambda|$. O modo de translação é obtido em $l = 7$ e 8 [ver Fig. 32], e como esperado, não há uma boa definição dos modos de compressão ou cisalhamento,

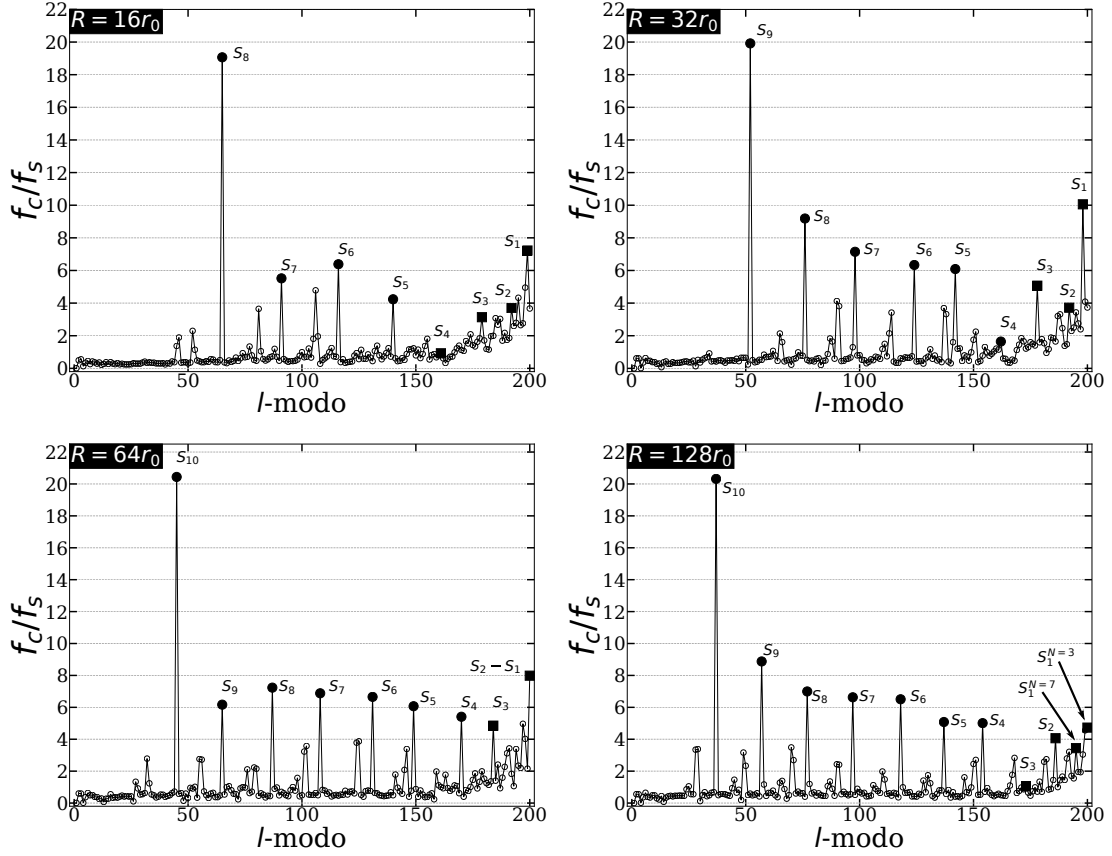
uma vez que $|\nabla \times \vec{v}_\lambda|$ e $|\nabla \cdot \vec{v}_\lambda|$ são relativamente próximos. Observamos também que os autovetores não são paralelos entre si, e não apresentam a mesma magnitude, o que justifica variação das intensidades máximas no mapa de cor. Por fim, apresentamos a dependência de $|\nabla \times \vec{v}_\lambda|$ e $|\nabla \cdot \vec{v}_\lambda|$ para o último autovalor λ_{14} , com um valor de $|\nabla \cdot \vec{v}_\lambda|$ mais pronunciado, já que temos uma inversão de valores entre f_s e f_c com o aumento das autofrequências [ver Fig. 32].

Aumentando o número de partículas e fazendo as mesmas análises em um cluster com $N = 100$, obtemos um comportamento similar ao sistema com $N = 7$. Na Fig. 34 mostramos os modos de compressão f_c e de cisalhamento f_s para os mesmos valores de R . Note que o comportamento de f_c e f_s , para as primeiras regiões de confinamento ($R/r_0 = 0.5, 1, \text{ e } 2$), altera-se quando $l \approx N$. Região onde o modo de translação encontra-se presente. Com o aumento da região de confinamento e do número de partículas, fica claro a existência predominante apenas do modo de rotação, associado ao menor autovalor λ_1 . Com o aumento de R , a distribuição de partículas no cluster torna-se mais estritamente conforme, $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_{DEC}(\mathbf{r})$ [cf. Seç. 1.3]. Havendo uma quantidade de automodos que cresce com N^2 , os modos elásticos que apresentam valores mínimos de $f_s \approx 0.0$ também aumentam.

Para compreender os efeitos entre os modos de compressão e cisalhamento, calculamos a razão f_c/f_s e as consequências observadas em seus autovetores equivalentes. A Fig. 35 mostra f_c/f_s para um sistema com $N = 100$ e $R/r_0 = 16, 32, 64$ e 128 . O modo correspondente a razão f_c/f_s mais elevada corresponde ao modo de respiração e, o menor valor representa a rotação simples em torno do centro da amostra. Com o aumento da região de confinamento, os modos de respiração coincidem com os diversos saltos da razão f_c/f_s e que estão associadas aos modos de respiração que atuam em cada camada, isoladamente. Na Fig. 35 destacamos através dos círculos cheios (quadrados cheios) os automodos que correspondem aos modos de respiração das camadas localizadas em $r \gtrless R^*$ ($r < R^*$).

Para $R = 16r_0$, as partículas são distribuídas em 8 camadas (1, 6, 10, 13, 5×14), com uma partícula no centro da amostra [cf. Fig. 19]. As quatro últimas camadas, que são comensuráveis, estão localizadas na região quase-conforme ($r \geq R^*$). Os modos responsáveis pelo modo de respiração das camadas são $l = 65, 91, 116$ e 140 para as camadas S_8, S_7, S_6 e S_5 , respectivamente. Nas camadas mais internas S_4, S_3 ,

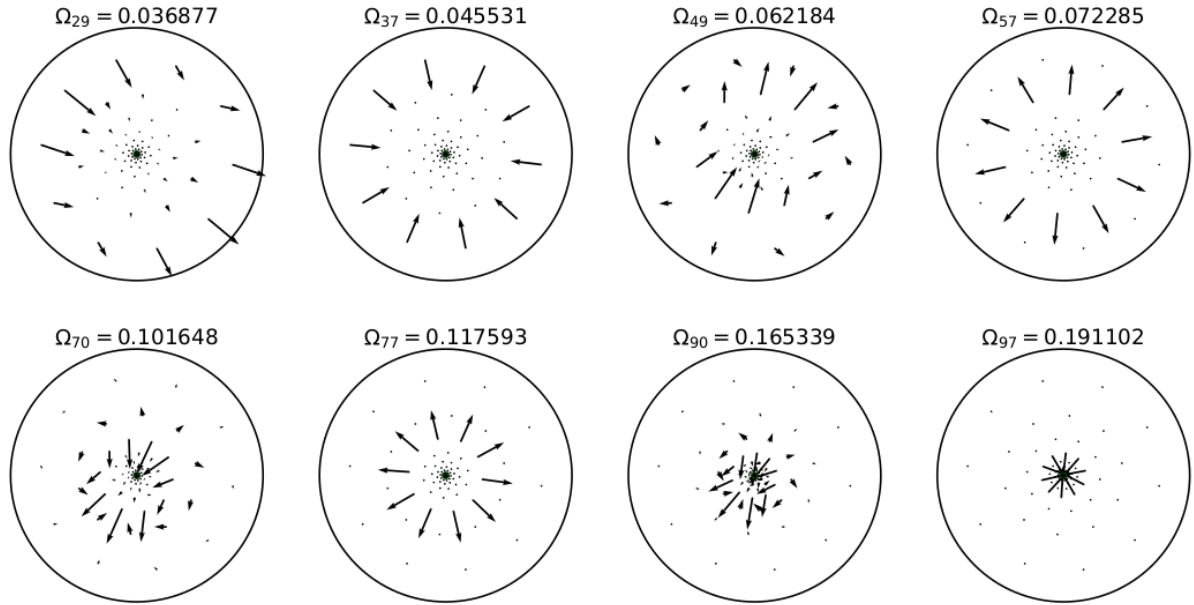
Figura 35 – Razão entre os modos de compressão f_c e de cisalhamento f_s para um sistema com $N = 100$ e $R/r_0 = 16, 32, 64$ e 128 . Em destaque estão os modos *breathing-like* atuando nas camadas destacadas. As camadas que localizadas na região não conforme estão destacadas por um quadrado, enquanto que as camadas da região quase-conforme são destacadas pelo círculo preto.



Fonte: O autor (2020)

S_2 e S_1 , o modo de respiração estão associados aos automodos $l = 161, 179, 192$ e 199 , respectivamente. Em um confinamento com $R = 32r_0$ as partículas apresentam uma configuração $(1, 6, 9, 7 \times 12)$, como sendo a de menor energia, com 7 camadas de 12 partículas cada [cf. Fig. 19]. As últimas seis camadas, $S_4 - S_9$, encontram-se na região quase-conforme. Os automodos que representa o modo de respiração são $l = 52, 76, 98, 124, 142$ e 162 , para as camadas S_9, S_8, S_7, S_6, S_5 e S_4 , e $l = 178, 192$ e 198 , para as camadas S_3, S_2 e S_1 . Aumentando a região de confinamento, permitindo o sistema se acomodar em uma região de $R = 64r_0$, obtemos uma configuração com 10 camadas $(4, 8, 8 \times 11)$. A região não-conforme, $r < R^*$, engloba as 3 primeiras camadas, $S_1 - S_3$, contendo 4, 8 e 11 partículas, respectivamente. Na Fig. 35, verifica-se apenas 9 valores intensificados de f_c/f_s . O modo elástico mais elevado, $l = 200$, é responsável pelo modo de respiração das duas camadas mais internas, contendo 4 e 8 partículas.

Figura 36 – Modo de translação e respiração que atuam em camadas específicas em um sistema com $N = 100$ e $R = 128r_0$. As autofrequências Ω_{37} , Ω_{57} , Ω_{77} e Ω_{97} correspondem ao modo de respiração das camadas S_{10} , S_9 , S_8 e S_7 , respectivamente. As autofrequências Ω_{29} , Ω_{49} , Ω_{70} e Ω_{90} correspondem ao modo de translação que atuam nas camadas S_{10} , S_9 , S_8 e S_7 , antes do modo de respiração ser ativado. Em cada quadro, Ω_l corresponde à autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 .



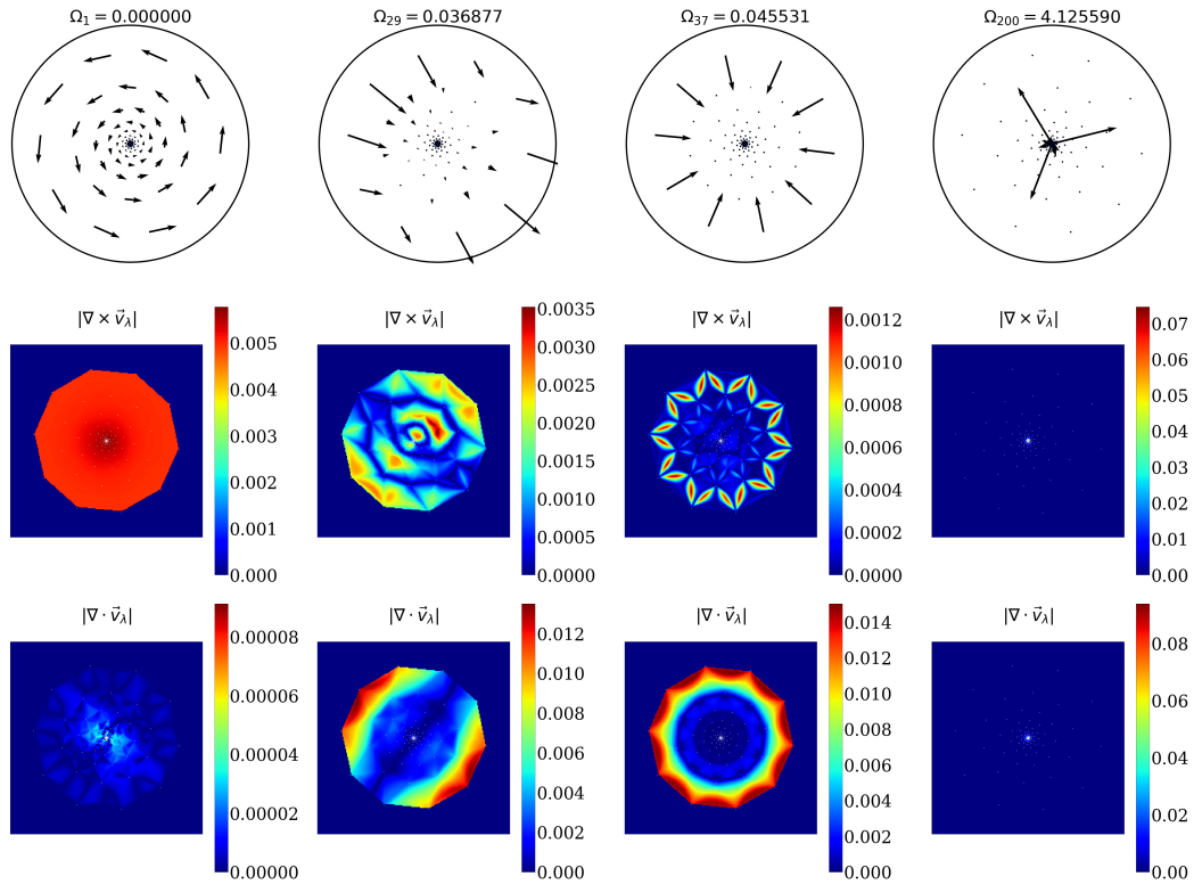
Fonte: O autor (2020)

Assim como em $R = 32r_0$, a 4ª camada (S_4) encontra-se aproximadamente em $r \approx R^*$.

Por fim, para um confinamento com $R = 128r_0$, as 100 partículas apresentam a configuração: $3, 7, 9 \times 10$. As sete últimas camadas estão localizadas na região quase-conforme ($r \geq R^*$). O modo de respiração atuante no conjunto formado por 3 e 7 partículas, são estimulados em $l = 200$ e $l = 195$, respectivamente. Em processos subsequentes, e.g. estabilidade térmica do cluster, enquadraremos esse conjunto constituindo uma camada com 10 partículas, $S_1^{N=7}$ e $S_1^{N=3}$. O menor valor relacionado ao modo de respiração, corresponde a camada mais próxima de R^* , S_3 , com automodo $l = 173$.

Na Fig. 35 saltos menos acentuados da razão f_c/f_s são assistidos. Os autovetores desses modos correspondem a um ensaio de translação da camada que apresentará o modo de respiração logo em seguida. A Fig. 36 mostra a tentativa de translação de algumas camadas para um cluster com $N = 100$ e $R = 128r_0$. Note que o espaçamento entre as partículas não é uniforme. Sendo assim, o deslocamento associado aos autovetores pode ser diferente, se considerados relativamente ao espaçamento entre as partículas.

Figura 37 – Autovetores e mapa de cores para vorticidade $(\nabla \times \vec{v})_z$ e divergente $\nabla \cdot \vec{v}$ associados a um sistema com $N = 100$ e $R = 128r_0$.



Fonte: O autor (2020)

Os modos de respiração para as camadas S_{10} , S_9 , S_8 e S_7 , estão presentes nos automodos $l = 37, 57, 77$ e 97 , respectivamente. O modo de translação para a camada S_{10} ocorrem para os automodos $l = 28$ e 29 , demonstrado pela autofrequência $\Omega_{29} = 0.036877\Omega_0$. Os automodos $l = 49$ e 50 promovem a translação da camada S_9 . Para as camadas S_8 e S_7 , os modos de translação de suas respectivas camadas são $l = (70, 71)$ e $l = (90, 91)$. Essas acontecimentos estão presentes em todas as regiões de confinamento para $r \geq 16r_0$ [ver Fig. 35].

Na Fig. 37 destacamos a vorticidade $(\nabla \times \vec{v})_z$ e divergente $\nabla \cdot \vec{v}$ para quatro autovalores de um sistema com $N = 100$ e $R = 128r_0$. A autofrequência associada ao movimento de rotação em torno do centro da amostra, Ω_1 , apresenta maiores valores $|\nabla \times \vec{v}| \approx 0.006$ no centro da amostra, onde a densidade de partículas é maior. O modo de cisalhamento é evidentemente mais acentuado do que o modo de compressão. A autofrequência $\Omega_{29} = 0.036877\Omega_0$, corresponde ao modo de translação da camada S_{10} ,

discutido anteriormente, com contribuição maior do termo $|\nabla \cdot \vec{v}| \approx 0.012$ que é similar ao movimento de translação [*cf.* Fig. 33]. Assim como em $N = 7$ e $R = r_0$, o modo associado à translação e compressão apresenta $|\nabla \cdot \vec{v}| > |\nabla \times \vec{v}|$, elucidado pelo modo de compressão atuando na camada S_{10} . Por fim, a maior autofrequência $\Omega_{200} = 4.125590\Omega_0$ é responsável pelo modo de respiração das partículas mais internas da configuração $(3, 7, 9 \times 10)$. Os pontos brancos distribuídos no mapa de cor representam as posições das partículas no cluster.

5 ESTABILIDADE TÉRMICA

(...)

Era quase madrugada

Candeeiro queimando

Coração se abrasando

(...)

Braseiro - Juliano Holanda

Transições de fase em sistemas de partículas interagentes apresentam um interesse apreciável em diversas áreas da ciência e tecnologia. O estudo das transições sólido-líquido em sistemas 2D e 3D é de interesse teórico e prático, no entanto, qualitativamente o processo de fusão entre esses dois sistemas são bem distintos. Em sistemas bidimensionais, a estrutura cristalina ou pseudo-cristalina executa um movimento oscilatório harmônico em torno da sua posição de equilíbrio, para temperatura baixas. Com o aumento da temperatura, a amplitude de oscilação das partículas tornam-se cada vez maiores, até que elas passam a se mover livremente, comportando-se como um líquido. O processo ocorre em uma transição contínua, transitando para uma fase “hexática”, mantendo a orientação e, conseqüentemente, derretendo em um fluido isotrópico, continua sendo uma questão estudada [103].

Realizações experimentais típicas, para compreensão das propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas 2D incluem elétrons na superfície do hélio líquido [104], elétrons em pontos quânticos [105], partículas coloidais [106], vórtices em supercondutores [107, 108], cristais de plasma confinados [109]. Sistemas confinados por um potencial simétrico circular 2D, com um número finito de partículas, são tipicamente cristalizados em uma estrutura triangular no centro do potencial de confinamento, apresentando estruturas em camadas com o aumento de N e distância radial [63]. Para um alto número de partículas, essa estruturação ocorre devido à competição entre a simetria triangular e a simetria circular, imposta pelo potencial confinador.

Um dos critérios utilizados para estudar as transições de fusão é o monitoramento da excitação térmica de pares de deslocamentos e disclinações. Por exemplo, na Ref. [110],

Lai e Lin utilizam a Dinâmica Molecular para investigar as excitações de defeitos em sistemas com interações de Coulomb confinadas a um potencial de fundo uniforme. Eles descobriram que os defeitos topológicos intrínsecos próximos à borda do sistema induzem vibrações térmicas anisotrópicas das partículas, levando ao derretimento não uniforme. Ao simular partículas interagindo através do potencial de Coulomb e confinadas a uma armadilha harmônica usando Monte Carlo, Lai e Lin descobriram ainda que o derretimento dos aglomerados de partículas tem início nos defeitos intrínsecos, existentes nas camadas concêntricas mais externas. A região central da estrutura, que é livre de defeitos intrínsecos, apresenta uma temperatura de fusão mais elevada.

Esse capítulo encontra-se organizado em duas seções. Na Seq. 5.1 apresentaremos o mecanismo de análise de estudo ao submetermos algumas configurações, obtidas no Cap. 3, a um ruído térmico aleatório, procedimento inverso ao aplicado para obtenção do estado de menor energia. Na Seq. 5.2, mostramos a estabilidade das estruturas conformes para configurações concêntricas, com $N = 100$, e configurações do tipo quiral e radial.

5.1 GRANDEZAS ANALISADAS

Sistemas 2D, com um número pequeno de partículas, não apresenta um temperatura de transição sólido-líquido bem definida, mas sim uma região onde isso ocorre. Diferentes métodos para identificação dessa faixa de transição foram desenvolvidos. Um deles foi definido por Lindermann, sofrendo modificações posteriormente, onde um critério é estabelecido, para as amplitudes médias das flutuações das partículas em um sistema, que determina a transição sólido-líquido em sistemas bidimensionais [111–114]. Um outro método de análise para derretimento, em clusters 2D, consiste na teoria Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY) [115–117]. As transições estruturais nesta teoria estão associadas ao ordenamento topológico das partículas, onde a transição de sólido para líquido está associada ao desacoplamento de pares de defeitos.

Para caracterizar o processo de derretimento das amostras, estudamos em detalhes a estabilidade das estruturas conformes sob investigação em relação aos defeitos excitados termicamente, bem como à difusão ativada termicamente dos defeitos preexistentes na configuração. Para fornecer estimativas estatisticamente confiáveis da distribuição de defeitos em diferentes temperaturas, consideramos 100 realizações diferentes do ruído térmico de Langevin. As configurações de equilíbrio, obtidas no

processo de minimização descrito no Cap. 3, foram aquecidas lentamente de $T = 0$ até $0.01T_0$ em etapas de $10^{-4}T_0$.

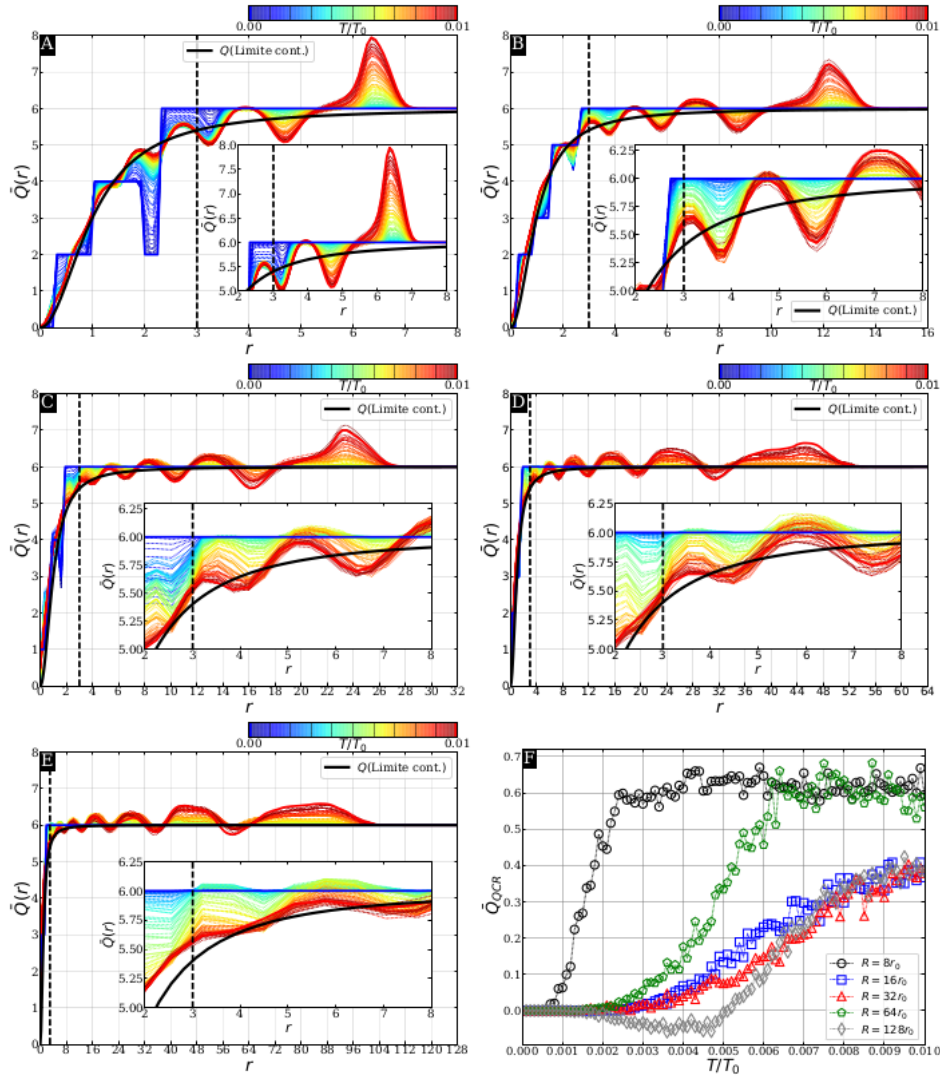
Durante a evolução do sistema, calculamos regularmente a carga topológica cumulativa, dada por $Q(r) = \sum_{r_i < r} q_i$, em que q_i é a carga topológica atribuída à partícula i , conforme definido na Seq. 1.4, e o número total de defeitos (independentemente do sinal) por camada, N_d . Para cada temperatura, essas quantidades foram calculadas como uma média de 6×10^6 MD passos de tempo após um tempo de espera de 4×10^6 passos de tempo, além de aproximadamente 100 realizações independentes do ruído térmico. Essas médias são indicadas por $\bar{Q}(r)$ e $\bar{N}_d$. Além disso, medimos o grau de conformidade das amostras a partir do parâmetro $\bar{Q}_{\text{QCR}} = 6 - \bar{Q}$. Onde $\bar{Q}_{\text{QCR}}$ representa uma média do quão conforme é a configuração. Se o cristal estiver em conformidade nessa região, é esperado que $\bar{Q}_{\text{QCR}}$ seja muito próximo de zero, enquanto que se a topologia for a prevista pela teoria de limite contínuo [Eq. (3.6)], espera-se $\bar{Q}_{\text{QCR}} \simeq 0.6$, já que $Q(R^*) = 5.4$.

5.2 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente escolhemos configurações com $N = 100$ partículas, para diferentes valores de R , variando de $8r_0$ a $128r_0$. Todas essas configurações são do tipo concêntrica, além de não apresentarem defeitos na região quase-conforme. As configurações utilizadas no estudo da estabilidade térmica são apresentadas na Fig. 19, obtidas no processo de minimização descrito no Cap. 3.

Figs. 38(A – E) mostram $\bar{Q}(r)$ para $R/r_0 = 8 - 128$, respectivamente, em diferentes valores de temperatura. O valor esperado para uma carga topológica no limite contínuo [Eq. (3.6)] é representado pela linha preta espessa. A temperatura varia de $T = 0$ (azul) a $0.01T_0$ (vermelho). Para $T = 0$, os defeitos (6 disclinações e possíveis deslocamentos) estão concentrados na região não conforme (delimitada pela linha tracejada vertical em $r = R^*$), resultando em um $Q(r)$ plano por $r \leq R^*$, que contrasta com a previsão do limite contínuo teórico, livre de defeitos. Em temperaturas finitas, porém pequenas ($T \lesssim 0.0005T_0$ para $R = 8r_0$ e $T \lesssim 0.002T_0$ para $R \geq 16r_0$), pode-se observar mudanças na configuração da carga na região não conforme ($r < R^*$), resultante da criação e aniquilação de pares de defeitos. Enquanto isso, a região quase-conforme está essencialmente intacta. À medida que a temperatura aumenta, os defeitos começam a aparecer na região quase-conforme

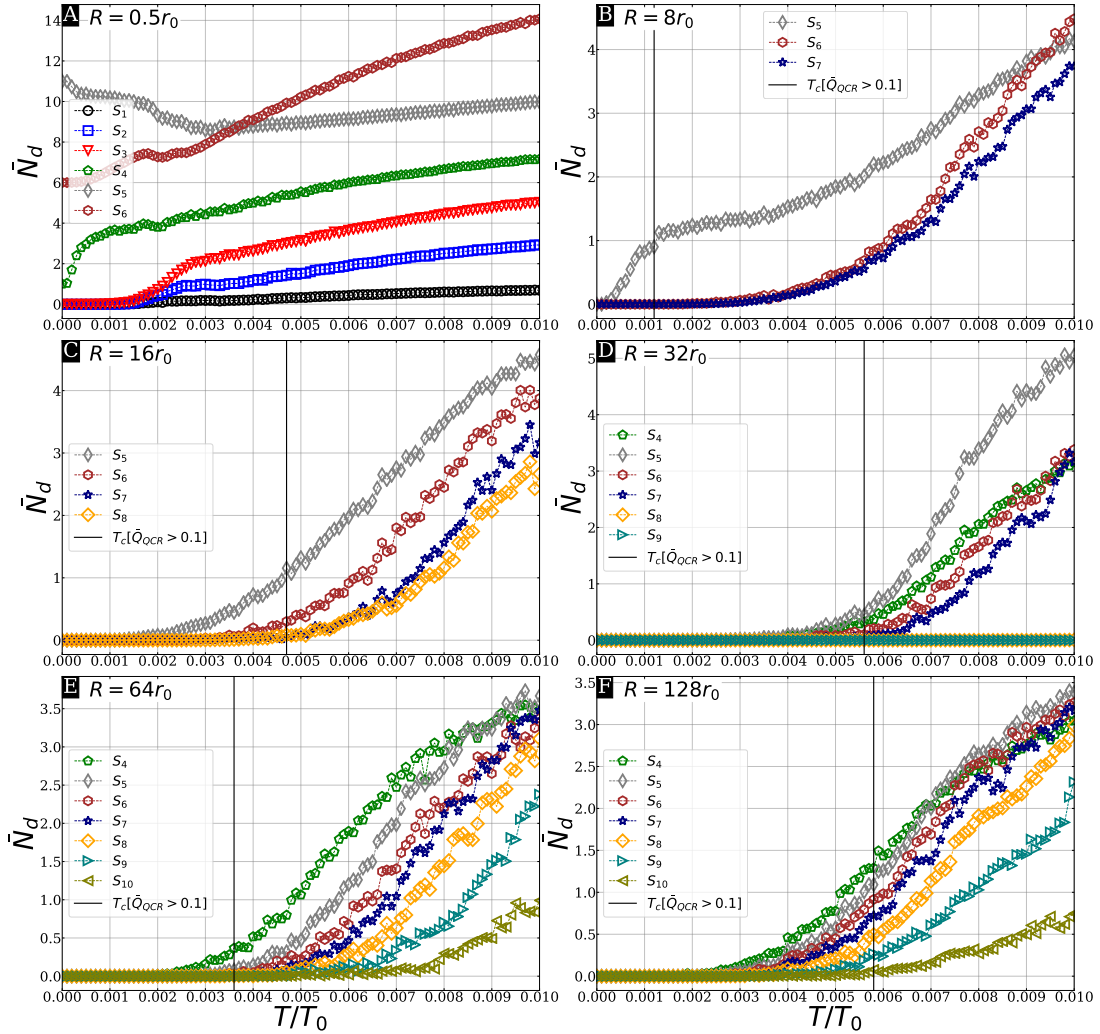
Figura 38 – (A – E) Distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, região próxima de R^* é mostrada na inserção, em função de r para diferentes temperaturas em amostras com: (A) $R = 8r_0$, (B) $R = 16r_0$, (C) $R = 32r_0$, (D) $R = 64r_0$ e (E) $R = 128r_0$. As linha sólida representa o valor esperado no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha vertical pontilhada marca $r = R^*$. As diferentes cores (mapa de cor no topo) representa as diferentes temperaturas que variam de $T = 0$ (azul) to $T/T_0 = 0.01$ (vermelho). (F) Carga topológica líquida $\bar{Q}_{QCR}$ na região quase-conforme, $r \geq R^*$, para R de $8r_0$ até $128r_0$.



Fonte: O autor (2020)

[veja também Figs. 39], primeiro como deslocções termicamente excitadas, produzindo uma pequena oscilação de $\bar{Q}(r)$ cerca de $Q = 6$. Em valores de temperatura ainda mais altos, não apenas as deslocções, mas também a carga líquida tornam-se apreciáveis na região $r > R^*$ e $Q(r)$ torna-se cada vez mais semelhante ao resultado do limite contínuo (linha sólida preta), sinalizando assim a perda da estrutura conforme, caracterizada por um $Q(r)$ plano. Observe que a oscilação observada em $Q(r)$ reflete as deslocções

Figura 39 – Dependência do número médio de defeitos $\bar{N}_d$, em função da temperatura, em cada uma das camadas na região quase-conforme ($r \geq R^*$) de configurações para $N = 100$ e (B) $R = 8r_0$, (C) $R = 16r_0$, (D) $R = 32r_0$, (E) $R = 64r_0$ e (F) $R = 128r_0$. Em (A) mostramos $\bar{N}_d$ para o confinamento aproximadamente parabólico $R = 0.5r_0$. Linhas verticais representam a temperatura de *crossover* T_c em que $\bar{Q}_{QCR} > 0.1$ [veja a Fig. 38(F)].



Fonte: O autor (2020)

radialmente orientadas, com a alternância de cargas positivas e negativas, bem como a discrição da estrutura em camadas, que persiste até a temperatura mais alta estudada.

Como mencionado anteriormente, calculamos a carga topológica líquida na região quase-conforme, $\bar{Q}_{QCR} = 6 - \bar{Q}(R^*)$, em função da temperatura para $R/r_0 = 8, 16, 32, 64$, e 128 [veja a Fig. 38(F)]. Todas essas configurações são concêntricas e sua região quase-conforme está completamente livre de defeitos. Para todos os raios estudados, a carga topológica é de fato zero na região quase-conforme em $T = 0$. Somente acima de uma temperatura finita diferente de zero é que $\bar{Q}_{QCR}$ se torna apreciável. Acima dessa

temperatura, o cristal conforme passa lentamente por uma estrutura amorfa, onde defeitos podem ser encontrados em toda a amostra e a distribuição da carga segue aproximadamente a previsão do limite contínuo.

Definimos a temperatura de *crossover* T_c como o valor da temperatura em que $Q_{QCR} = 0.1$. Observe que, embora Q_{QCR} seja uma medida global, ele é sensível às oscilações locais em $Q(r)$ produzidas por deslocações. Além disso, a influência dessas oscilações depende das posições radiais precisas das camadas próximas a R^* , que mudam com a temperatura. Portanto, nosso critério para a temperatura de *crossover* não deve ser tomado como uma medida precisa, mas como uma estimativa aproximada. Usando esta definição, obtemos $T_c \sim 0.005 - 0.006T_0$ para amostras $R = 16r_0$, $R = 32r_0$ e $R = 128r_0$. No entanto, para as amostras $R = 8r_0$ é consideravelmente menor, $\sim 0.001T_0$; e para $R = 64r_0$ corresponde a um valor intermediário, $\sim 0.0035T_0$. Além dessas diferenças em T_c , em todos os casos, a perda de ordem conforme ocorre com a difusão de uma pequena fração da carga líquida da região central não-conforme da amostra na região quase-conforme. A pequena temperatura de *crossover* observada para $R = 8r_0$ provavelmente está relacionada ao pequeno número de camadas conformes (apenas 3) na região quase-conforme, que são, portanto, mais sensíveis às flutuações na região não-conforme.

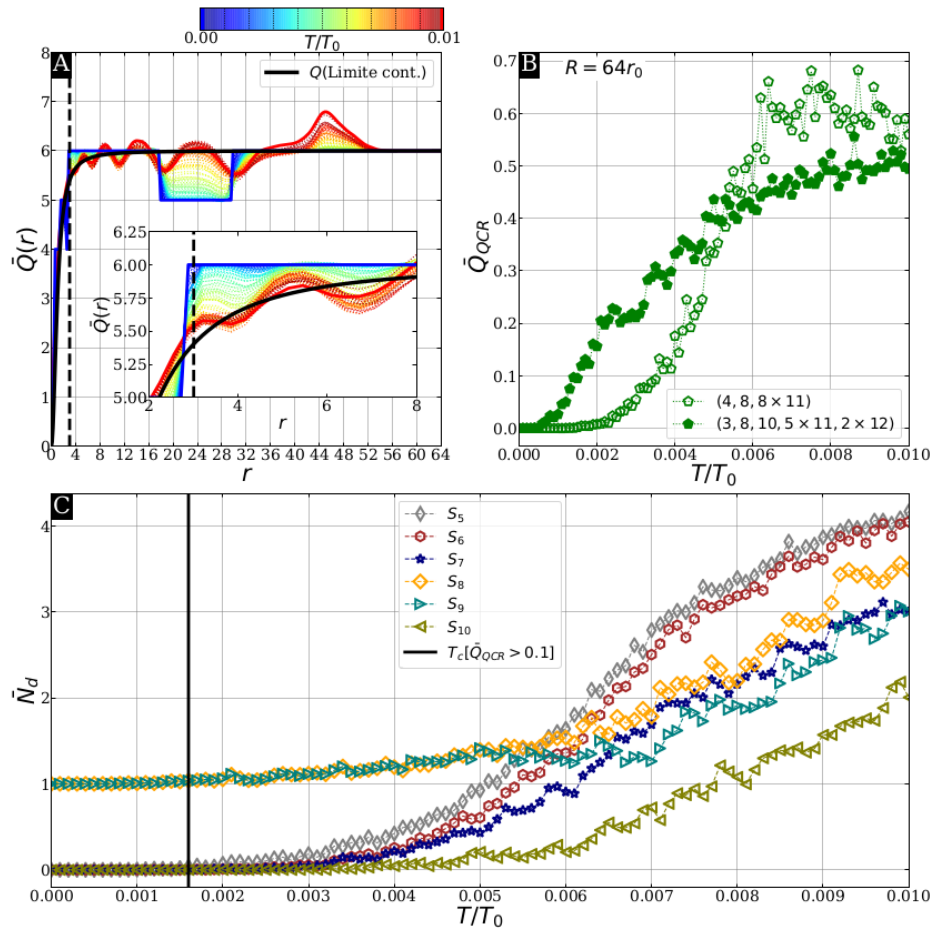
A Fig. 39 mostra o número médio de defeitos por camada para os casos $R/r_0 = 0.5, 8, 16, 32, 64$ e 128 . Essas curvas revelam a nucleação progressiva de defeitos termicamente excitados (deslocações) primeiro nas camadas mais internas e depois se espalhando para as camadas externas à medida que a temperatura aumenta acima de T_c . Para o confinamento $R = 0.5r_0$, Fig. 39(A), esse processo é inverso. Os defeitos estão concentrados nas camadas mais externas [ver Fig. 19] e rapidamente essas camadas ($S_4 - S_6$) apresentam uma variação rápida de $\bar{N}_d$ para temperaturas baixas. Apenas quando $T \approx 0.002T_0$ a estrutura triangular interna começa a ser quebrada, que corresponde à existência de defeitos nas três primeiras camadas. A configuração de $R = 8r_0$ apresenta 7 camadas (12, 10, 14, 4×16) [ver Fig. 19], as três últimas camadas encontram-se na região quase-conforme, com $r_{S_5} \approx 3.3r_0$ em $T = 0$. Nas demais configurações, a primeira camada da região quase-conforme encontra-se em $r/r_0 \approx 3.39, 3.04, 3.02$ e 5.12 , para $R/r_0 = 16, 32, 64$ e 128 , respectivamente. Note que, assim como em $R = 8r_0$, para $R = 16r_0$ [(1, 6, 10, 13, 5×14), ver Fig. 19], o valor no qual

$\bar{N}_d(S_5) > 1$ é aproximadamente $T_c[\bar{Q}_{QCR} > 0.1]$, apresentado nas Figs. 39(B e C).

Para $R = 32r_0$ (1, 5, 10, 7×14) e $R = 64r_0$ (4, 8, 8×11), a primeira camada na região quase-conforme, apresenta uma distância radial $r \approx R^*$. A proliferação de defeitos nos clusters com $R \geq 8r_0$, ocorre do núcleo para a borda da amostra [ver Figs. 39(B – F)]. Na Fig. 39(D), o número de defeitos na camada S_5 supera rapidamente $\bar{N}_d(S_4)$, diferente do que ocorre quando $R = 64r_0$, seguindo um crescimento sequencial, apesar de $S_4 \approx R^*$ em ambos os casos. Em contrapartida, a estrutura formada em $R = 32r_0$ mantém as duas camadas externas livres de defeitos para temperaturas mais elevadas, apresentando uma estrutura possivelmente mais coesa. Em $R = 128r_0$ [Fig. 39(F)], as partículas estão distribuídas em dez camadas (3 – 7, 9×10). De forma análoga, o número de defeitos na região quase-conforme manifesta-se inicialmente nas camadas mais internas, e de forma sequencial às camadas adjacentes. Entre $0.002T_0 \lesssim T \lesssim 0.005T_0$ $Q_{QCR} < 0$, o que mostra um leve aumento da carga topológica na região não-conforme. Concomitantemente, defeitos emergem de forma menos acentuada nas camadas $r > R^*$ e de forma sequencial entre as camadas. Os defeitos topológicos aparecem na região quase-conforme, com um número crescente de defeitos à medida que T aumenta. Note ainda que a carga topológica tende a oscilar em torno do limite esperado para temperaturas mais altas.

Com o intuito de compararmos os efeitos térmicos em amostras de menor energia e configurações metaestáveis, escolhemos a configuração para $R = 64r_0$, que apresenta um crescimento mais repentino da curva $\bar{Q}_{QCR}$ [ver Fig. 38(F)] quando comparado com as demais regiões de confinamento conformes, $R/r_0 = 16, 32$ e 128 . A configuração metaestável analisada também apresenta dez camadas, assim como apresentada na Fig. 19, mas com uma distribuição: (3, 8, 10, 5×11 , 2×12). Essa configuração apresenta uma deslocação em $r > R^*$, observada na Fig. 40(A), que pode corroborar com a quebra antecipada da estrutura conforme da amostra. $\bar{Q}$ alcança o platô $Q = 6$ em $r < R^*$, analogamente aos casos estudados anteriormente. A posição radial dos anéis de partículas são bem distintos da configuração (4, 8, 8×11). Na configuração metaestável, S_4 é a primeira camada comensurável, contendo 11 partículas, localizada em $r \approx 2.56r_0$, e S_5 é a primeira camada na região quase-conforme com $r_{S_5} \approx 4.48r_0$. Quando comparada com a configuração de menor energia, a primeira camada comensurável corresponde a S_3 , com $r_{S_3} \approx 1.8r_0$. Na Fig. 40(B) é possível constatar os efeitos provocados pela comensurabilidade das camadas. A configuração de menor energia, e de maior

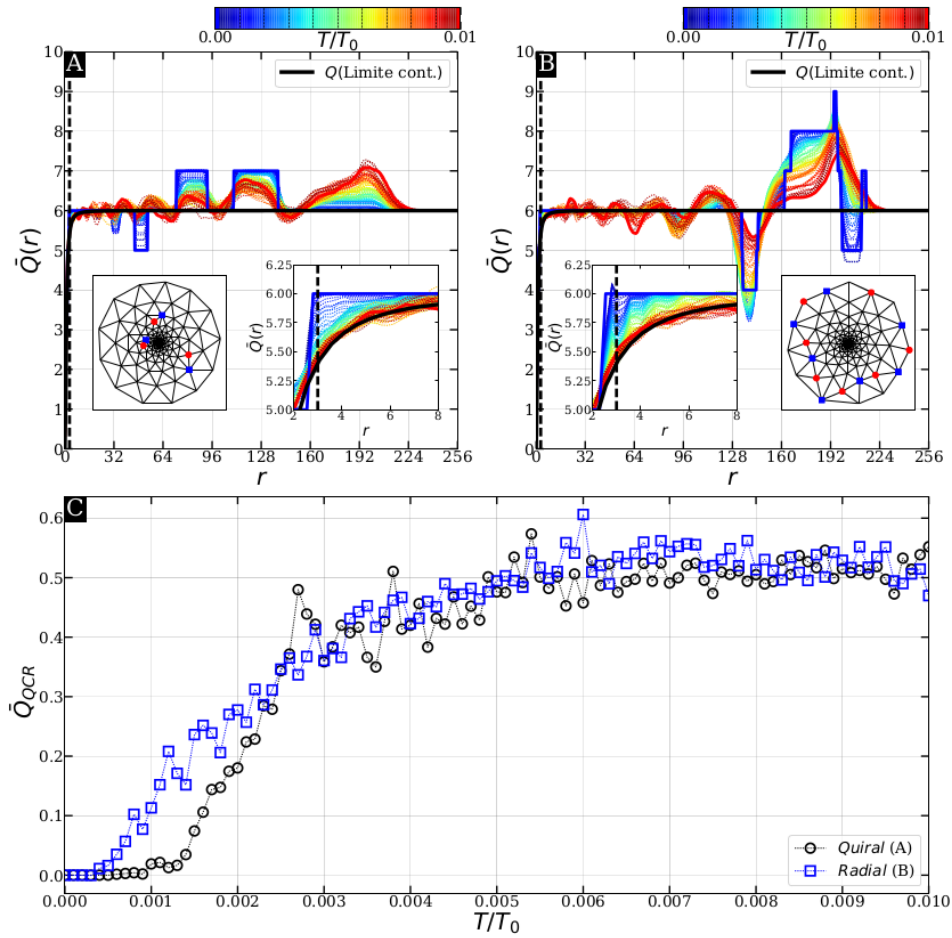
Figura 40 – (A) Distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, região próximo de R^* é mostrada na inserção, em função de r para $R = 64r_0$ com configuração $(3, 8, 10, 5 \times 11, 2 \times 12)$. A linha sólida representa o valor esperado no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha vertical pontilhada marca $r = R^*$. As diferentes cores (mapa de cor no topo) representa as diferentes temperaturas que variam de $T = 0$ (azul) to $T/T_0 = 0.01$ (vermelho). (B) Carga topológica líquida $\bar{Q}_{QCR}$ na região quase-conforme, $r \geq R^*$, para duas configurações obtidas para $R = 64r_0$. A distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, para a configuração $(4, 8, 8 \times 11)$, é apresentada na Fig. 38(D). (C) Dependência do número médio de defeitos em cada uma das camadas na região quase-conforme, em função da temperatura, para configuração $(3, 8, 10, 5 \times 11, 2 \times 12)$. A linha vertical representa a temperatura de *crossover* T_c em que $\bar{Q}_{QCR} > 0.1$ [veja a Fig. 40(B)].



Fonte: O autor (2020)

comensurabilidade, apresenta um valor mais elevado de $T_c[\bar{Q}_{QCR} > 0.1] \approx 0.0016T_0$ (metaestável) e $0.0036T_0$ (estado de menor energia). Independente da configuração analisada, o comportamento de $\bar{Q}_{QCR}(T)$ é semelhante em ambos os casos, podendo está associado à região de confinamento $R = 64r_0$. Na Fig. 40(C) apresentamos a distribuição dos defeitos por camada para a configuração metaestável. Para a configuração específica

Figura 41 – (A) Distribuição radial da carga topológica $\bar{Q}$, região próximo de R^* é mostrada na inserção, em função de r para $R = 256r_0$ para as configurações quiral (A) e radial (B), ambas para $N = 200$ e $R = 256r_0$ (as configurações correspondentes estão representadas na inserção). As linha sólida representa o valor esperado no limite contínuo [Eq. (3.6)]. A linha vertical pontilhada marca $r = R^*$. As diferentes cores (mapa de cor no topo) representa as diferentes temperaturas que variam de $T = 0$ (azul) to $T/T_0 = 0.01$ (vermelho). (C) Carga topológica líquida $\bar{Q}_{QCR}$ na região quase-conforme, $r \geq R^*$, para as duas configurações em estudo. Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Os defeitos internos não são mostrados para melhor visualização.



Fonte: O autor (2020)

com $R = 64r_0$, já existe uma deslocação ocupando as camadas S_8 e S_9 , de modo que $N_d = 1$ para essas camadas em $T = 0$. Observe que, para esta configuração, o número médio de defeitos excitados termicamente nas proximidades de T_c é muito menor do que o das configurações sem defeitos [Figs. 39(B – F)]. Isso sugere que deslocações preexistentes podem ser intimamente relacionadas com a propagação de defeitos na estrutura.

Para investigar de forma mais aprofundada o papel das deslocções preexistentes na estabilidade da estrutura cristalina conforme, também simulamos duas configurações distintas, uma quiral e outra radial, para $N = 200$ e $R = 256r_0$. Conforme discutido no Cap. 3, configurações desses tipos têm deslocções intrínsecas, responsáveis por acomodar a simetria circular da camada mais externa de partículas. Os resultados correspondem à média sobre mais de 30 realizações da força aleatória e são apresentados na Fig. 41. De maneira semelhante à configuração com $N = 100$ e $R = 8r_0$ e $R = 64r_0$ (configuração metaestável, ver Fig. 40), o início da migração de carga para a região quase-conforme ocorre nas temperaturas $T_c \simeq 0.0016T_0$ (quiral) e $T_c \simeq 0.001T_0$ (radial), consideravelmente menor que os valores de T_c observados para as configurações perfeitamente cristalinas ($N = 100$ e $R/r_0 = 16, 32, 64$ e 128) [ver Fig. 41(C)]. Embora a carga topológica do sistema atinja o valor $Q = 6$ para $r < R^*$, a região quase-conforme não é livre de defeitos, mas apresenta carga líquida nula. Nas Figs. 41(A e B) são apresentadas as distribuições radiais da carga topológica $\bar{Q}$ para a configuração quiral e radial, respectivamente. A região próxima de R^* é mostrada em uma das inserções, em função de r . Nas outras inserções, são apresentadas as configurações submetidas ao ruído térmico. Os defeitos internos não são mostrados para melhor visualização. Quadrados azuis e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Esses resultados estão de consonância com os resultados obtidos para $N = 100$ e $R = 64r_0$, onde defeitos preexistentes na região quase-conforme, podem contribuir para antecipar o processo de amorfização dos cristais conformes, considerando o parâmetro $\bar{Q}_{QCR}$. Essas configurações também foram submetidas aos efeitos da tensão de cisalhamento, que serão discutidas no Cap. 6.

6 TENSÃO DE CISALHAMENTO

Veja a folha seca
Que o vento jogou no chão
Mesmo a folha morta
Tem lembrança do verão

Lembrança de folha seca - Mestre Ambrósio

O estudo da resiliência de configurações confinadas em clusters 2D, quando submetidas à uma força angular, é amplamente investigado em discos supercondutores na geometria de Corbino. Em 1911, O. M. Corbino realizou medições de magnetorresistência em diferentes metais, nos quais eram discos em contatos com anéis concêntricos internos e externos [118]. Posicionando o disco em um campo magnético ao longo de seu eixo de simetria, a resistência entre os contatos foi medida em função da campo magnético aplicado. A geometria de Corbino é amplamente estudada em supercondutores para obter informações sobre a dinâmica e auto-organização da matéria.

No contexto de supercondutores mesoscópicos, na geometria de Corbino, uma corrente aplicada cria um gradiente na densidade corrente, introduzindo uma forma motriz de cisalhamento entre os anéis de vórtices. Isso nos permite estudar os vários efeitos dinâmicos relacionados ao movimento angular das partículas, e.g., a transição do regime elástico para o plástico, canalização (*channeling*) [119], atrito por partículas [120], etc. A resposta de vórtices a uma corrente aplicada radialmente em discos supercondutores [121–125] demonstrou a existência de pelo menos duas fases dinâmicas: a fase do corpo rígido para correntes baixas, em que toda a configuração gira como um corpo rígido e, para altas correntes, a fase líquida, onde os vórtices nas camadas adjacentes se desacoplam e a velocidade angular do sistema decai com a distância radial de $1/r^2$.

O estudo da transição do movimento do regime elástico para o plástico, na geometria de Corbino, foi realizado nas Refs [122, 126, 127]. O sistema transita do movimento de corpo rígido para regime plástico, progredindo do plástico para o regime laminar, a partir de sucessivos valores críticos da intensidade da força externa atuante no sistema. Sistemas pequenos, contendo duas e três camadas, foram investigados por Misko e

Peeters [128] em discos de Nióbio. A transição estrutural, observada por Misko e Peeters, quando um vórtice salta da camada externa para mais interna, é semelhante à transição Coster-Kronig em *hollow atoms* [129]. As diferentes fases dinâmicas podem ser induzidas pela não homogeneidade da força externa [121, 122, 125, 127, 130–133]. As transições são identificadas experimentalmente em materiais confinados com *pinning* [121, 132], além de serem teoricamente investigadas na aproximação contínua [127, 131] e numericamente [122, 125, 133]. O regime laminar é observado para maiores valores da intensidade da força externa aplicada [122, 133]. O desacoplamento entre as camadas também foi observada em outros sistemas de partículas, tais como colóides com movimento rotacional [134], além de outras geometrias onde a tensão de cisalhamento é aplicada [135–138].

Esse capítulo é organizado da seguinte maneira. Na Seção 6.1 apresentaremos a modelagem para estudo da tensão de cisalhamento (*Shear Stress*) da amostras. Na Seção 6.2 veremos a resposta à tensão de cisalhamento de amostras concêntricas, quiral e radial, sendo possível acompanhar a migração do movimento de corpo rígido das amostras para o regime laminar. Por fim, na Seção. 6.3 daremos ênfase ao cisalhamento de configurações concêntricas para analisar a fase plástica das amostras e sua dependência com a comensurabilidade e proporcionalidade entre as camadas.

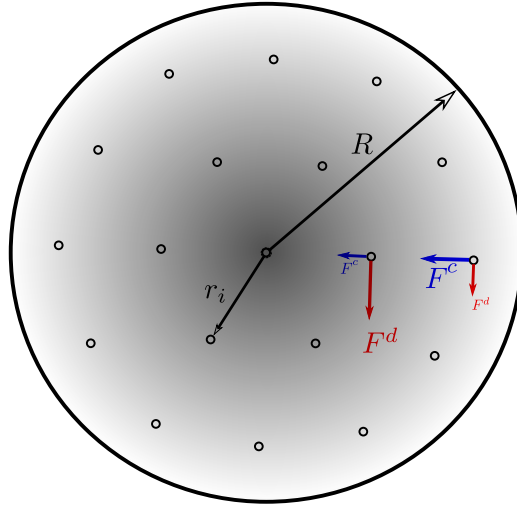
6.1 MODELAGEM DA TENSÃO DE CISALHAMENTO

As camadas discretas que estruturam as configurações observadas anteriormente [cf. 3] influenciam fortemente a dinâmica de partículas. Para entendermos melhor o efeito da comensurabilidade gerada pelo potencial de confinamento, estudaremos como o sistema responde à tensão de cisalhamento produzida por uma força não uniforme azimutal $\mathbf{F}_i^d$, modelada como

$$\mathbf{F}^d = I_0 \begin{cases} \frac{\hat{e}_z \times \mathbf{r}}{r_c^2}, & \text{for } r < r_c, \\ \frac{\hat{e}_z \times \mathbf{r}}{r^2}, & \text{for } r \geq r_c, \end{cases} \quad (6.1)$$

onde $\hat{e}_z$ é o vetor unitário normal ao plano do sistema, r_c é um pequeno raio de corte e I_0 é uma medida da intensidade de cisalhamento multiplicada pela distância

Figura 42 – Mostramos o modelo esquemático da força (F^d em vermelho), descrita pela Eq. (6.1), atuando em uma amostra com 19 partículas. A força de confinamento que atua na i -ésima partícula é destacada por F^c (em azul). A força atua do centro para a borda da amostra com um decaimento $1/r$, representado pelo degradê.



Fonte: O autor (2020)

unitária e coincide com o módulo do torque nas partículas localizado em $r > r_c$. A dependência radial de F^d se assemelha à força de Lorentz que atua nos vórtices em discos supercondutores na chamada geometria de Corbino [121–125]. A tensão de cisalhamento produzida por essa distribuição de força empurra as partículas nas camadas internas mais fortemente do que aquelas nas camadas externas. Portanto, para I_0 baixo o suficiente, as forças pareadas entre partículas prevalecem, com o acionamento externo produzindo deformações elásticas nos aglomerados que giram como um corpo rígido (RB). À medida que I_0 aumenta a tensão de cisalhamento, as rotações das camadas são separadas umas das outras, primeiro para as camadas próximas ao centro. Em seguida, o processo se propaga do centro para a borda. Para valores altos de I_0 , as camadas giram quase de forma independente, com a velocidade média decaindo como $1/r^2$. Esse cenário foi observado experimentalmente [121, 139] e teoricamente [122, 126, 127] para sistemas de vórtices supercondutores na geometria do disco Corbino.

Na Fig. 42 mostramos o modelo esquemático da força F^d (em vermelho), descrito

pela Eq. (6.1), atuando em uma amostra com 19 partículas. A força de confinamento que atua na i -ésima partícula é destacada por $\mathbf{F}^c$ (em azul). Esta força atua do centro para a borda da amostra com módulo que decai com $1/r$, representado pelo degradê. A velocidade angular do sistema ω_{RB} na fase do corpo rígido pode ser determinada exatamente [125] a partir da condição de que o torque total que atua em um sistema fechado é o torque externo total. Retomando à Eq. (2.13), temos

$$\eta \mathbf{v}_i = \mathbf{F}_i^d + \mathbf{F}_i^c + \sum \mathbf{F}_{ij},$$

onde η é o coeficiente de viscosidade do meio, $\mathbf{F}_i^d$ e $\mathbf{F}_i^c$ correspondem a força motriz (*driving force*) e a força de confinamento atuante na i -ésima partícula, $\mathbf{F}_{ij}$ corresponde a força de interação entre as partículas. Calculando o produto vetorial entre $\mathbf{r}_i$ e a equação acima, teremos

$$\eta \mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i = \mathbf{r}_i \times \left(\mathbf{F}_i^d + \mathbf{F}_i^c + \sum \mathbf{F}_{ij} \right). \quad (6.2)$$

Usando

$$\mathbf{v}_i = \omega_i \times \mathbf{r}_i \longrightarrow \omega_i \sim \hat{e}_z$$

$$\mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^c = 0 \longrightarrow \mathbf{F}_i^c \sim \mathbf{r}_i$$

onde ω_i é a velocidade angular da partícula i , podemos reescrever a equação anterior como

$$\begin{aligned} \eta \mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i &= \eta \mathbf{r}_i \times (\omega_i \times \mathbf{r}_i) = \eta r_i^2 \omega_i - \underbrace{\eta (\mathbf{r}_i \cdot \omega_i) \mathbf{r}_i}_{=0} \\ &= \eta r_i^2 \omega_i = \underbrace{\mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^d}_{\mathbf{F}_i^{\tau,d}} + \mathbf{r}_i \times \sum_j \mathbf{F}_{ij}, \end{aligned}$$

onde $\mathbf{F}_i^{\tau,d}$ corresponde ao torque atuante na i -ésima partícula. Considerando as N partículas do cluster, teremos

$$\begin{aligned}
\eta \sum_i^N r_i^2 \omega_i &= \sum_i^N \mathbf{F}_i^{\tau,d} + \underbrace{\sum_{ij} \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{ij}}_{=0} = \sum_i^N \mathbf{F}_i^{\tau,d} \\
&= \sum_{\substack{i \\ r_i < r_c}} \frac{I_0}{r_c^2} \mathbf{r}_i \times (\hat{e}_z \times \mathbf{r}_i) + \sum_{\substack{i \\ r_i \geq r_c}} \frac{I_0}{r_i^2} \mathbf{r}_i \times (\hat{e}_z \times \mathbf{r}_i) \\
&= I_0 \left[\sum_{\substack{j \\ r_j < r_c}}^{N_{nc}} \frac{r_j^2}{r_c^2} \hat{e}_z + \sum_{\substack{j \\ r_j \geq r_c}} \frac{r_j^2}{r_j^2} \hat{e}_z \right] = I_0 \left[\sum_{\substack{j \\ r_j < r_c}}^{N_{nc}} \frac{r_j^2}{r_c^2} + N_{qc} \right] \hat{e}_z \quad (6.3)
\end{aligned}$$

Sendo $\omega_i = \omega_{RB} \hat{e}_z$, para a distribuição de força dada pela Eq. (6.1), obtemos que a velocidade angular de corpo rígido é dada por

$$\omega_{RB} = -\frac{I}{\sum_{i=1}^N r_i^2} \left(\frac{\sum_{j=1}^{N_{nc}} r_j^2}{r_c^2} + N_{qc} \right), \quad (6.4)$$

onde N_{nc} e N_{qc} são o número de partículas em $r < r_c$ e $r \geq r_c$, respectivamente. Sempre que toda a configuração gira como um corpo rígido, cada partícula tem velocidade angular ω_{RB} . A velocidade angular é dada em unidades de $\omega_0 = \varepsilon_0/r_0^2$. Para uma tensão de cisalhamento mais forte, as camadas começam a se dissociar umas das outras e, após o primeiro desacoplamento, as velocidades angulares das camadas podem ser diferentes de ω_{RB} . Esse processo pode ocorrer em estágios, seguindo uma sequência de intensidades de cisalhamento de limite, I_{ck} , com $k = 1, 2, \dots$, nos quais diferentes camadas ou grupos de camadas desacoplam ou reconfiguram, produzindo alterações descontínuas na velocidade angular média das camadas.

Os valores I_{ck} são, portanto, uma medida da resposta do sistema à tensão de cisalhamento externo. Também calculamos o deslocamento quadrado médio $\langle u_r^2 \rangle$,

$$\langle u_r^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2). \quad (6.5)$$

A dissociação de camadas também deixa assinaturas em $\langle u_r^2 \rangle$, uma vez que a passagem de partículas próximas em camadas adjacentes envolve mudanças em suas

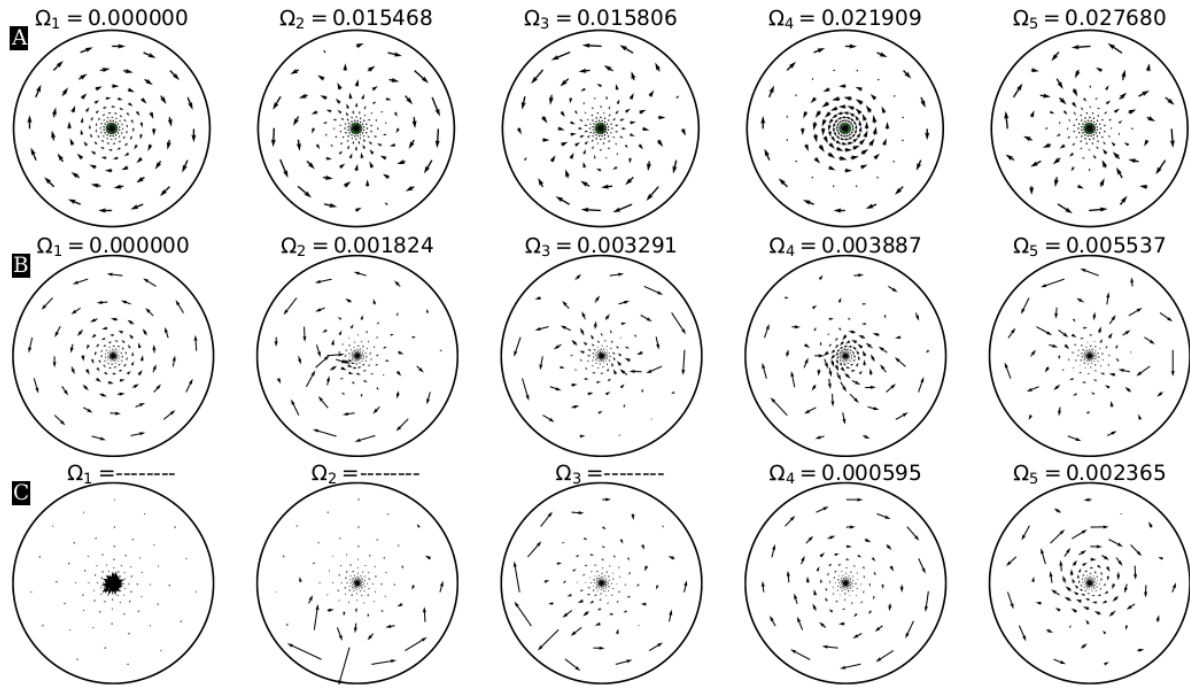
posições radiais. $\langle u_r^2 \rangle$ também pode ser usado para estimar a quantidade de tensão de cisalhamento necessária para interromper a estrutura da camada de uma configuração, ou seja, o valor de I_0 acima do qual as partículas em uma camada se movem para outra camada.

6.2 RESPOSTA A TENSÃO DE CISALHAMENTO DE CONFIGURAÇÕES CONCÊNTRICA, QUIRAL E RADIAL

No Cap. 3 vimos que quando distribuimos as partículas em uma região de confinamento elevada, elas são predominantemente confinadas à região quase-conforme e as configurações podem ser divididas em configurações concêntricas, quirais, radiais e policristalinas [cf. Fig 21]. Para $N = 200$, investigamos a resposta das configurações concêntrica ($R = 64r_0$), quiral ($R = 256r_0$) e radial ($R = 256r_0$) submetidas à tensão de cisalhamento. Na Fig. 43 mostramos as primeiras autofrequências para as configurações concêntricas (A), quiral (B) e radial (C). A menor autofrequência das amostras concêntrica e quiral correspondem ao modo de rotação em torno do centro da amostra. $\Omega_2 = 0.015468\Omega_0$ e $\Omega_3 = 0.015806\Omega_0$ correspondem ao estado de convecção. Para $\Omega_4 = 0.021909\Omega_0$, o estado de rotação inversa é observado, seguido por um outro estado de convecção em Ω_5 . Na amostra quiral, distribuída em uma região com $R = 256r_0$, as autofrequências $\Omega_2 - \Omega_5$ exemplificam um estado de convecção, sendo mais bem definido em $\Omega_5 = 0.005537\Omega_0$. A 5ª autofrequência das configurações concêntrica e quiral, expressa um estado de convecção similar entre si, apesar de $\Omega_5^{conc.} \approx 5\Omega_5^{quiral}$. É importante lembrar que o valor máximo da autofrequência, Ω_{max} , diminui com o aumento de R [cf. Cap. 4]. Para a configuração radial, os três primeiros autovalores são negativos ($\lambda < 0$), classificando a configuração como não estável. A menor autofrequência que corresponde ao modo de rotação ocorre em λ_4 , com $\Omega_4 = 0.000595\Omega_0$. Em Ω_5 , uma tentativa de convecção é observada.

Para essa análise, submetemos as configurações mostradas na Fig. 44(D - F) à força motriz apresentada na Eq. (6.1), com $r_c = R^*$. Para cada valor de I_0 , o sistema foi submetido a, no mínimo, $10^7 dt_0$ [cf. Cap. 3], com um transiente de 40%. Todas as médias são efetuadas no tempo pós-transiente. O menor valor de deslocamento angular corresponde a menor intensidade da força motriz, $I_0 = 5 \times 10^{-4} \varepsilon_0$, com $\Delta\theta \approx 0.25\text{rad}$ para as partículas na extremidade do cluster; e o maior valor de $\Delta\theta$ corresponde a

Figura 43 – Primeiras autofrequências para clusters com $N = 200$ e $R/r_0 = 64$ (A) e 256(B e C). Em cada quadro, Ω_l corresponde a autofrequência associada ao l -ésimo modo elástico, em unidades de Ω_0 .

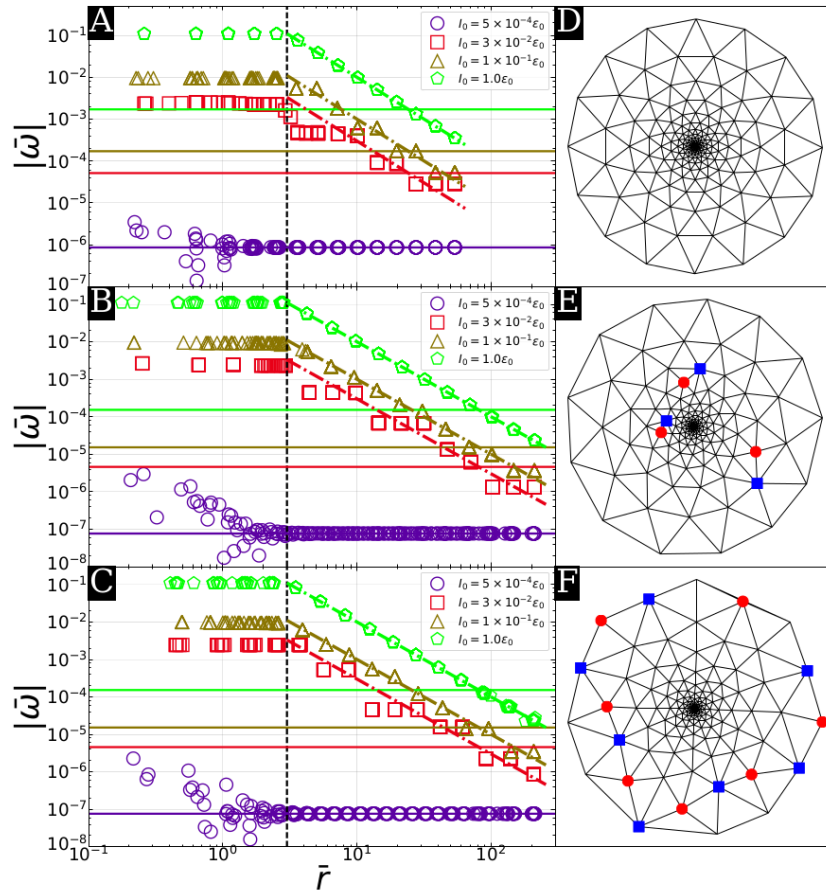


Fonte: O autor (2020)

$I_0 = 1.0\varepsilon_0$, com $\Delta\theta \gg 2\pi\text{rad}$, para as partículas mais próximas da origem.

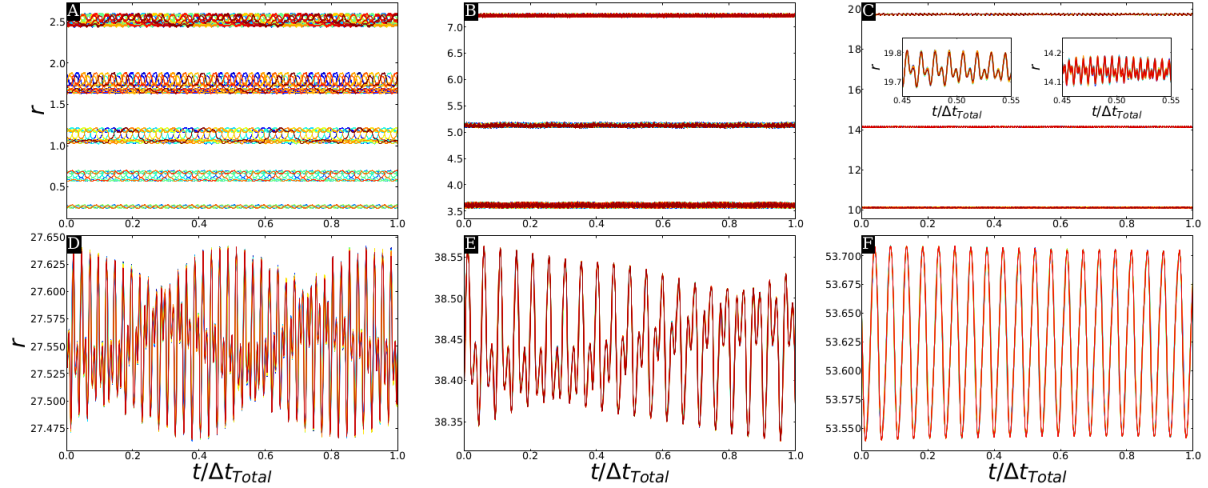
As velocidades angulares médias, em função das posições radiais médias, das partículas são mostradas na Fig. 44 para quatro valores diferentes de I_0 ao longo de 3 décadas. Todas as três configurações apresentam aspectos semelhantes. A rotação de corpo rígido é observada na região quase-conforme (à direita da linha vertical tracejada, que representa $r = R^*$) para $I_0 = 5 \times 10^{-4}\varepsilon_0$. Enquanto isso, na região não-conforme $r < R^*$, as velocidades angulares médias das partículas parecem indicar que muitos rearranjos estão ocorrendo. Deve-se notar que as configurações quirais ou radiais se tornam configurações concêntricas antes que as camadas na região quase-conforme sejam desacopladas, ou seja, as configurações ainda estão em rotação de corpo rígido. Para o valor mais alto $I_0 = 1.0\varepsilon_0$, todas as três configurações estão em regime de movimento laminar, onde as interações entre partículas são sobrepujadas pela força motriz e as partículas giram com velocidades angulares $\sim 1/r^2$. As configurações quirais e radiais, nos dois valores intermediários de I_0 , já se reconfiguraram em configurações concêntricas, cujas camadas têm aproximadamente o mesmo número de partículas. Eles já mostram a rotação desacoplada das camadas, que seguem aproximadamente,

Figura 44 – Módulo da velocidade angular em função da posição radial média das partículas (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$ e (C) $R = 256r_0$, nas respectivas configurações concêntricas (D), quiral (E), e radial (F), destacadas no lado direito. Essas configurações são submetidas a quatro intensidades da forças motriz $I_0/\varepsilon_0 = 5 \times 10^{-4}$, 3×10^{-2} , 1×10^{-1} , e 1.0. As linhas horizontais e tracejadas sólidas representam, respectivamente, a velocidade angular calculada do corpo rígido ω_{RB} e a dependência esperada de $1/r^2$ da velocidade angular para partículas no regime de movimento laminar. As marcas de linhas tracejadas verticais dividem as regiões não conformes (esquerda) e quase-conformes (direita). Quadrado azul sólido e círculos vermelhos representam os defeitos topológicos -1 e $+1$, respectivamente. Defeitos no interior dos clusters não são mostrados para melhor visualização.



Fonte: F.C.O. Silva *et al.* [10]

Figura 45 – Dependência temporal da posição radial r para a configuração mostrada na Fig. 44(D), com $N = 200$, $R = 64r_0$ e $I_0 = 1.0\varepsilon_0$. Os quadros estão correlacionados com as velocidades angulares apresentadas na Fig. 46, e.g., (A) com Fig. 46(A), (B) com Fig. 46(B), e assim sucessivamente.

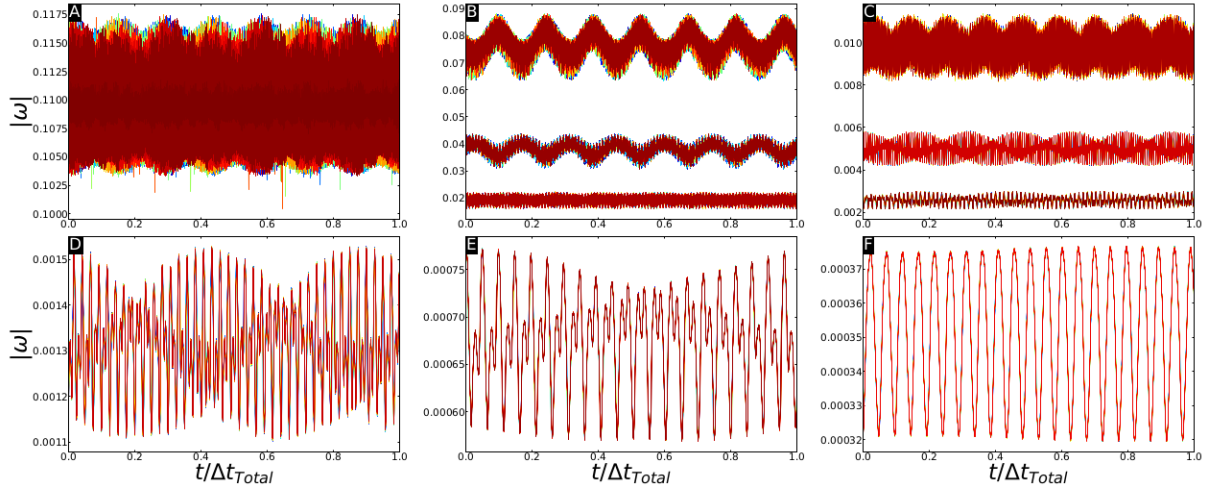


Fonte: O autor (2020)

embora não totalmente, a dependência do movimento laminar de $\bar{r}$. Para $I_0 = 0.03\varepsilon_0$, existem platôs na dependência da velocidade angular em relação às posições radiais médias, o que indica que as configurações são divididas em grupos de camadas que giram na mesma velocidade angular, mas separados um do outro. Para o valor mais alto $I_0 = 0.1\varepsilon_0$, esses grupos rígidos de camadas se reorganizam em grupos menores. Nesse processo, algumas camadas que foram dissociadas anteriormente em $I = 0.03\varepsilon_0$ são acopladas novamente quando a $I = 0.1\varepsilon_0$.

Nas Figs. (45 e 46) ilustramos o comportamento da posição radial e velocidade angular ω para a configuração com $N = 200$ e $R = 64r_0$ [ver Fig. 44(D)] em função do tempo pós-transiente. A Fig. 45(A) mostra a posição radial das partículas com $r < r_c = R^*$, situação em que $\mathbf{F}^d$ cresce linearmente com r . As partículas formam camadas bem definidas, representadas pelas linhas de diferentes cores. O movimento de corpo rígido pode ser observado na Fig. 44(A), com as partículas rotacionando com a mesma velocidade $|\bar{\omega}|$ para $r < R^*$. Nas Figs. 45(B e C), três camadas são formadas entre os intervalos $R^* \leq r \leq 9r_0$ e $10r_0 \leq r \leq 20r_0$, respectivamente. Quanto mais próximo do centro da amostra, maior é o módulo da velocidade angular da camada. A camada com $r \approx 3.6r_0$ [Fig. 45(B)] apresenta $|\bar{\omega}| \approx 0.08\omega_0$ [Fig. 46(B)]. No quadro (B), camada com maior distância radial apresenta uma velocidade $|\omega| \approx 0.02\omega_0$. Do mesmo modo, para a camada localizada em $r \approx 10r_0$, temos $|\bar{\omega}| \approx 0.01\omega_0$. Em Fig. 45(C) mostramos

Figura 46 – Dependência temporal da velocidade angular $|\omega|$ para a configuração mostrada na Fig. 44(D), com $N = 200$, $R = 64r_0$ e $I_0 = 1.0\varepsilon_0$. Os quadros estão correlacionados com as posições radiais apresentadas na Fig. 45, e.g., (A) com Fig. 45(A), (B) com Fig. 45(B), e assim sucessivamente.



Fonte: O autor (2020)

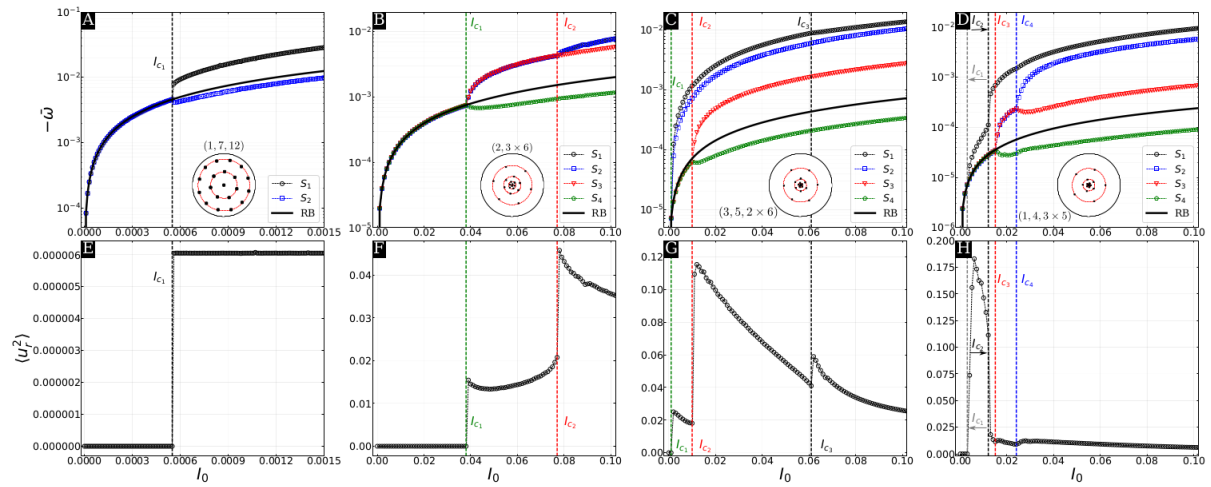
inserções de duas camadas distintas, com $\bar{r} \approx 19.75r_0$ e $\bar{r} \approx 14.05r_0$. Observe que a posição radial das partículas sofre uma leve alteração, mudando seu comportamento em função do tempo, mas mantendo sua camada estruturada. As Figs. 45(D - E) apresenta o comportamento radial das três últimas camadas, respectivamente.

6.3 FASE PLÁSTICA DE CONFIGURAÇÕES CONCÊNTRICAS

Como mostrado anteriormente, as configurações quirais e radiais decaem para as concêntricas na fase de rotação de corpo rígido. Concentraremos nossa atenção na resposta ao cisalhamento de configurações concêntricas para uma análise mais detalhada da fase plástica. Devido ao alto grau de comensurabilidade observado em configurações concêntricas para grandes regiões de confinamento R , esses sistemas oferecem a oportunidade de estudar as possíveis fases dinâmicas de muitas camadas proporcionais rotativas. Tais fases devem ser comparadas com as observadas para sistemas de aglomerados com distribuição de partículas aproximadamente homogênea, cujas camadas são tipicamente incomensuráveis ou fracamente proporcionais.

Para melhor comparação, vamos estudar a resposta ao cisalhamento para três valores distintos de partículas: $N = 20$, 30 e 100. Na Fig. 47 mostramos as velocidades angulares médias das camadas $\bar{\omega}$ e o deslocamento radial quadrado médio das partículas $\langle u_r^2 \rangle$ em função de I_0 para as distribuições (1, 7, 12), (2, 3 × 6), (3, 5, 2 × 6) e (1, 4, 3 × 5)

Figura 47 – Velocidades angulares médias $\bar{\omega}$ (primeira linha) e o deslocamento médio quadrático $\langle u_r^2 \rangle$ (segunda linha) em função de I_0 (intensidade do torque produzido pela força externa) para configurações com $N = 20$ e $R = 0.5r_0$ [(A) e (E)], $R = 16r_0$ [(B) e (F)], $R = 32r_0$ [(C) e (G)], e $64r_0$ [(D) e (H)]. As respectivas configurações para $I_0 = 0$ – com posições das partículas representadas por pontos e círculos vermelhos para ajudar a identificar as camadas – são mostradas nas inserções. S_j é o rótulo da j^{th} camada, enquanto que a linha sólida destaca a velocidade angular do corpo rígido (RB). Para baixos I_0 todas as configurações rotacionam como corpo rígido. À medida que I_0 aumenta, as camadas começam a se separar e as linhas pontilhadas verticais indicam os valores I_{ck} em que camadas desacoplam.



Fonte: O autor (2020)

com $R/r_0 = 0.5, 16, 32$ e 64 , respectivamente. Para baixos valores de I_0 , todas as configurações giram como um corpo rígido, uma vez que a velocidade angular média $\bar{\omega}_k$ de cada k -ésima camadas (indicada por S_k) é igual para a calculada ω_{RB} [Eq. (6.4)] até I_{c1} . Para I_0 mais altos, todas as configurações passam por uma sequência de transições de desacoplamento inter-camada, que dependem das distâncias entre os camadas e se são proporcionais ou não.

A configuração (1, 7, 12), está representada no inserção da Fig. 47(A). Todas as partículas estão na região não-conforme, com um espaço entre as camadas $\Delta r \approx 0.2$. As camadas S_1 e S_2 são não comensuráveis, desacoplando-se em $I_{c1} \approx 55 \cdot 10^{-5} \varepsilon_0$. Esse desacoplamento é verificado também na descontinuidade do valor de $\langle u_r^2 \rangle$, Fig. 48(E). No intervalo de movimento de corpo rígido $\langle u_r^2 \rangle = 0$. Na Fig. 47(B) as 20 partículas são confinadas em uma região com $R = 16r_0$, distribuídas em quatro camadas (2, 3 x 6) [inserção da Fig. 47(B)]. A primeira camada a sofrer os efeitos da força externa é a S_4 , desacoplando das camadas mais internas, $S_1 - S_3$, em $I_{c1} \approx 0.038 \varepsilon_0$. Quando $I_0 \approx 0.077 \varepsilon_0$,

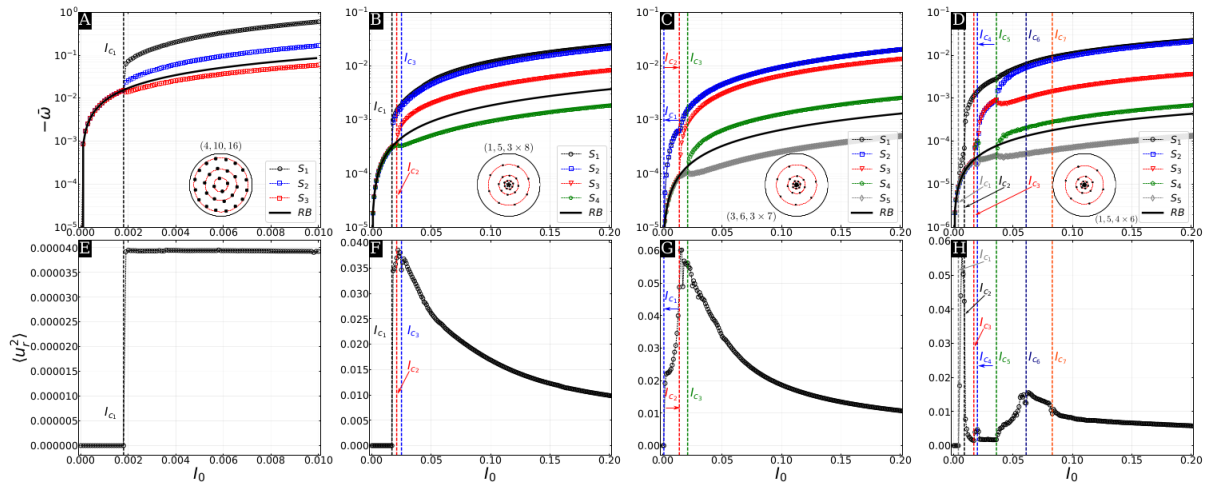
a segunda camada comensurável, S_3 , desacopla das camadas S_1 e S_2 . As camadas S_1 e S_2 são proporcionais e estão confinadas na região não-conforme, $r < r_c = R^*$. De forma semelhante ao confinamento com $R = 16r_0$, para $R = 32r_0$ as partículas também estão distribuídas em quatro camadas (3, 5, 6, 6) [inserção da Fig. 47(C)], com S_1 e S_2 em $r < R^*$. No entanto, as duas primeiras camadas se desacoplam rapidamente quando $I_0 \approx 0.001\varepsilon_0$. A distância entre as camadas S_1 e S_2 , nos confinamentos $R = 16r_0$ e $R = 32r_0$, é aproximadamente $\Delta r_{S_2-S_1} \approx 1.4r_0$. O acelerado desacoplamento do conjunto $S_1 - S_2$ está correlacionado com a não comensurabilidade entre elas em $R = 32r_0$. As camadas S_3 e S_4 , contendo 6 partículas cada, permanecem rotacionando com $|\omega| \approx \omega_{RB}$ até $I_0 \approx 0.01\varepsilon_0$, quando ocorre o desacoplamento. Note que, em Fig. 47(G) os valores críticos de I_0 apresentam uma descontinuidade na dependência do deslocamento médio quadrático que não está associada ao desacoplamento entre as camadas, $I_0 \approx 0.061\varepsilon_0$. Esse valor crítico estão associados a uma redução da amplitude radial das camadas.

Para a última região de confinamento avaliada $R = 64r_0$, mantendo fixo $N = 20$, as partículas estão distribuídas também em quatro camadas (1, 4, 5, 5, 5) [inserção da Fig. 47(D)], contendo uma partícula na origem. Para essa distribuição, apenas a primeira camada encontra-se na região não-conforme e rapidamente se desacopla das demais quando $I_0 \approx 0.003\varepsilon_0$. As camadas comensuráveis, $S_2 - S_4$, permanecem acopladas até $I_{c3} \approx 0.015\varepsilon_0$, quando S_4 passa a rotacionar livremente. Antes de I_{c3} , ω_{S_1} sofre um aumento que reduz a intensidade de $\langle u_r^2 \rangle$ em $I_{c2} \approx 0.012\varepsilon_0$. Para $I_{c4} \approx 0.024\varepsilon_0$, as duas camadas intermediárias se desacoplam.

Analogamente ao caso anterior, na Fig. 48 apresentamos as velocidades angulares médias das camadas $\bar{\omega}$ e o deslocamento radial quadrado médio das partículas $\langle u_r^2 \rangle$ em função de I_0 para sistemas com $N = 30$ e $R/r_0 = 0.5, 16, 32$ e 64 . Do mesmo modo a situação apresentada para $N = 20$ [Fig. 47], até I_{c1} , todas as configurações giram como um corpo rígido, passando por uma sequência de transições de desacoplamento com o aumento de I_0 .

Para confinamento aproximadamente parabólico $R = 0.5r_0$, as partículas estão distribuídas em três camadas (4, 10, 16) [inserção da Fig. 48(A)], apresentando um denominador comum entre si. O desacoplamento entre as camadas ocorre simultaneamente em $I_{c1} \approx 18 \times 10^{-4}$. Comparando o resultado apresentado para $N = 20$ e confinamento com $R = 0.5r_0$, a amostra altamente não-comensurável apresenta-se mais sensível aos

Figura 48 – Velocidades angulares médias $\bar{\omega}$ (primeira linha) e o deslocamento médio quadrático $\langle u_r^2 \rangle$ (segunda linha) em função de I_0 (intensidade do torque produzido pela força externa) para configurações com $N = 30$ e $R = 0.5r_0$ [(A) e (E)], $R = 16r_0$ [(B) e (F)], $R = 32r_0$ [(C) e (G)], e $64r_0$ [(D) e (H)]. As respectivas configurações para $I_0 = 0$ – com posições das partículas representadas por pontos e círculos vermelhos para ajudar a identificar as camadas – são mostradas nas inserções. S_j é o rótulo da j -ésima camada, enquanto que a linha sólida destaca a velocidade angular do corpo rígido (RB). Para baixos I_0 todas as configurações rotacionam como corpo rígido. À medida que I_0 aumenta, as camadas começam a se separar e as linhas pontilhadas verticais indicam os valores I_{ck} em que camadas desacoplam.



Fonte: O autor (2020)

efeitos produzido por $\mathbf{F}^d$. Na Fig. 48(B), as partículas são distribuídas em quatro camadas (1, 5, 8, 8, 8) [ver inserção da Fig. 48(B)], com uma partícula no centro da amostra. As camadas S_1 e S_2 estão na região não-conforme, apresentando o desacoplamento das demais em $I_{c1} \approx 0.017\epsilon_0$. Nessa configuração, temos uma sequência de valores críticos, $I_{c2} \approx 0.021\epsilon_0$ corresponde ao desacoplamento entre as camadas S_3 e S_4 , que rotacionavam com ω_{RB} . Quando ocorre o desacoplamento das camadas S_1 e S_2 , eles passam a rotacionar com velocidades próximas $|\omega_{S1}| \approx |\omega_{S2}|$ até $I_0 \approx 0.025\epsilon_0 = I_{c3}$. Apesar das velocidades $|\omega_{S1}|$ e $|\omega_{S2}|$ permanecerem próximas para $I_0 > I_{c3}$, o momento de maior distinção entre elas é observado no comportamento de $\langle u_r^2 \rangle$ [Fig. 48(F)].

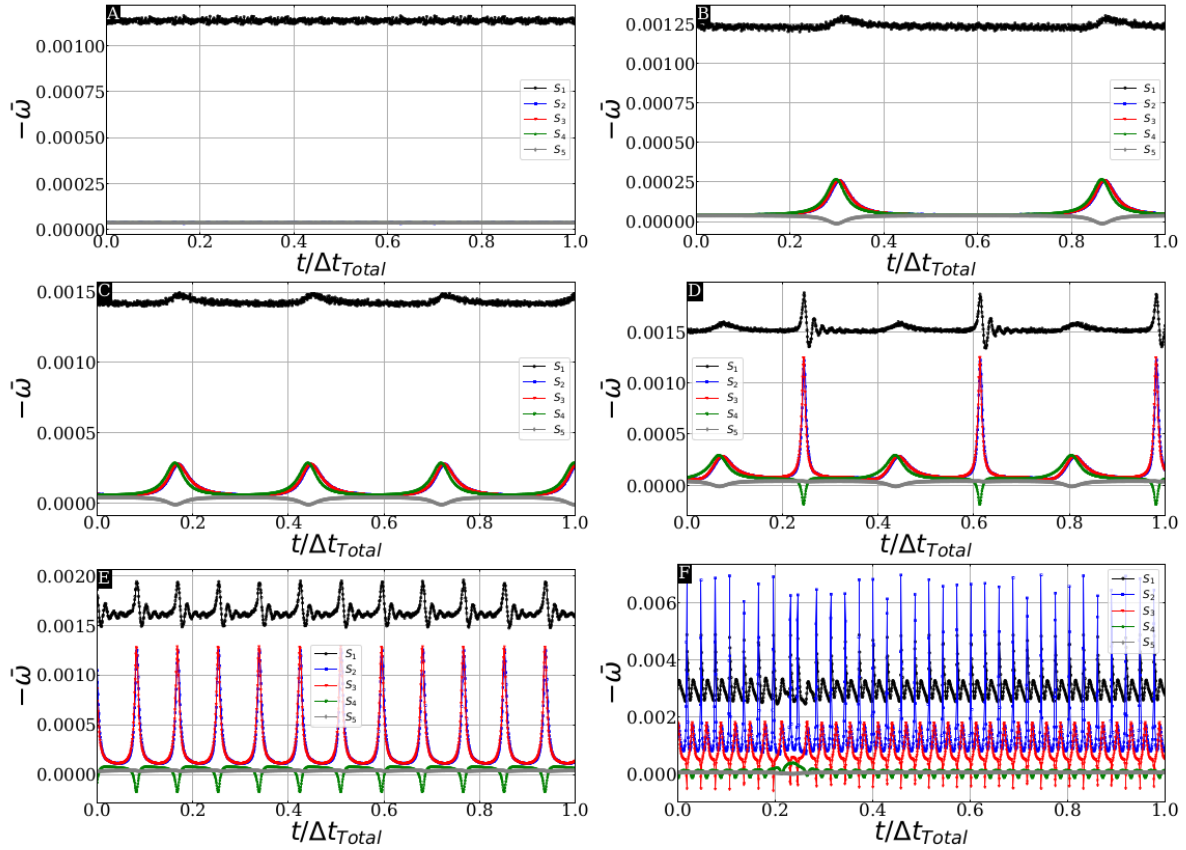
Para $R = 32r_0$, as partículas são distribuídas em cinco camadas (3, 6, 7, 7, 7), com as três camadas comensuráveis na região quase-conforme. De forma semelhante ao apresentado com $N = 20$ e $R = 16r_0$, as camadas localizadas na região não-conforme desacoplam-se das demais rapidamente, $I_{c1} \approx 0.001\epsilon_0$. As duas primeiras camadas, S_1 ($N_{S1} = 3$) e S_2 ($N_{S2} = 6$) permanecem acopladas para altos valores de I_0 , assim como o

caso apresentado na Fig. 47(B). A camada intermediária, S_3 , localizada em $r \approx 3.85r_0$, rotaciona livremente para $I_0 \approx 0.014\varepsilon_0 = I_{c2}$. As camadas mais externas permanecem com seu movimento de corpo rígido, $|\omega_{S_4}| = |\omega_{S_5}| \approx \omega_{RB}$, até $I_{c3} \approx 0.021\varepsilon_0$. Para valores mais elevados de I_0 , a camadas ficam mais coesas, observada pelo comportamento decrescente de $\langle u_r^2 \rangle$ [Fig. 48(G)]. Por fim, para $R = 64r_0$, as 30 partículas são distribuídas em 5 camadas (1, 5, 6, 6, 6), uma delas posicionada na origem [ver inserção da Fig. 48(D)]. A camada contendo 5 partículas, desacopla das camadas comensuráveis quando $I_0 \approx 0.004\varepsilon_0$. Em $I_{c2} \approx 0.009\varepsilon_0$, a camada S_1 sofre um aumento na velocidade angular, semelhante ao apresentado no conjunto $N = 20$ e $R = 64r_0$. Durante um breve intervalo de I_0 , $0.0017\varepsilon_0 \approx I_{c3} \leq I_0 \leq I_{c4} \approx 0.020\varepsilon_0$, as camadas comensuráveis formam dois grupos: $S_2 - S_4$ e S_5 , esta última rotacionando desacoplada das demais. No entanto, para $I_0 > I_{c4}$, ocorre um reacoplamento entre as camadas S_4 e S_5 , já observado na Seção 6.2. As camadas comensuráveis não rotacionam com uma velocidade angular ω_{RB} para $I_0 > I_{c3}$. As cinco camadas encontram-se totalmente desacopladas quando $I_0 > I_{c5} \approx 0.036\varepsilon_0$. Embora as camadas já rotacionassem livremente, observamos mais dois valores críticos: $I_{c6} \approx 0.061\varepsilon_0$ e $I_{c7} \approx 0.083\varepsilon_0$ associados a uma redução descontínua de $\langle u_r^2 \rangle$. Em todas as configurações mostradas nesse seção, o número de partículas nas camadas são preservados.

Para exemplificar o processo de desacoplamento entre as camadas, tomamos como exemplo a configuração com 30 partículas e $R = 64r_0$, Figs. 48(D e H), distribuídas em cinco camadas (1, 5, 4×6). Na Fig. 49(A) as quatro camadas comensuráveis encontram-se acopladas até $I_0 = I_{c3}$, enquanto que S_1 rotaciona livremente para $I_0 > I_{c1} \approx 0.004\varepsilon_0$. Na Fig. 49 (B e C) as camadas S_1 e S_5 rotacionam livremente, enquanto $S_2 - S_4$ estão acopladas [ver Fig. 48(D)]. No interlavo $I_{c4} < I_0 \leq I_{c5} \approx 0.036\varepsilon_0$, as camadas $S_2 - S_3$ e $S_4 - S_5$ permanecem acopladas, explicitado nas Figs. 49(D - E). Em Fig. 49(F), $I_0 \approx 0.036\varepsilon_0$ apresenta o desacoplamento de todas as cinco camadas.

Como última análise, consideramos uma amostra contendo $N = 100$ partículas, todas concêntricas e com um maior número de camadas. A Fig. 50 mostra as velocidades angulares médias da camada $\bar{\omega}$ e o deslocamento radial quadrado médio das partículas $\langle u_r^2 \rangle$ em função de I_0 para as configurações (2, 8, 14, 20, 25, 31), (1, 6, 10, 13, 5×14) e (1, 5, 10, 7×12) com $R/r_0 = 0, 5, 16$ e 32, respectivamente. Para I_0 baixo, todas as configurações, assim como mostrado anteriormente, giram como um corpo rígido,

Figura 49 – Dependência temporal da velocidade ω_{S_j} para a configuração (1, 5, 4 $\times$ 6) e $R = 64r_0$. O tempo está normalizado pelo tempo total da janela de captura. Cada quadro representa um valor de I_0 : 0.017 ε_0 (A), 0.018 ε_0 (B), 0.020 ε_0 (C), 0.021 ε_0 (D), 0.022 ε_0 (E) e 0.037 ε_0 (F). Ver Fig. 48(D e H).

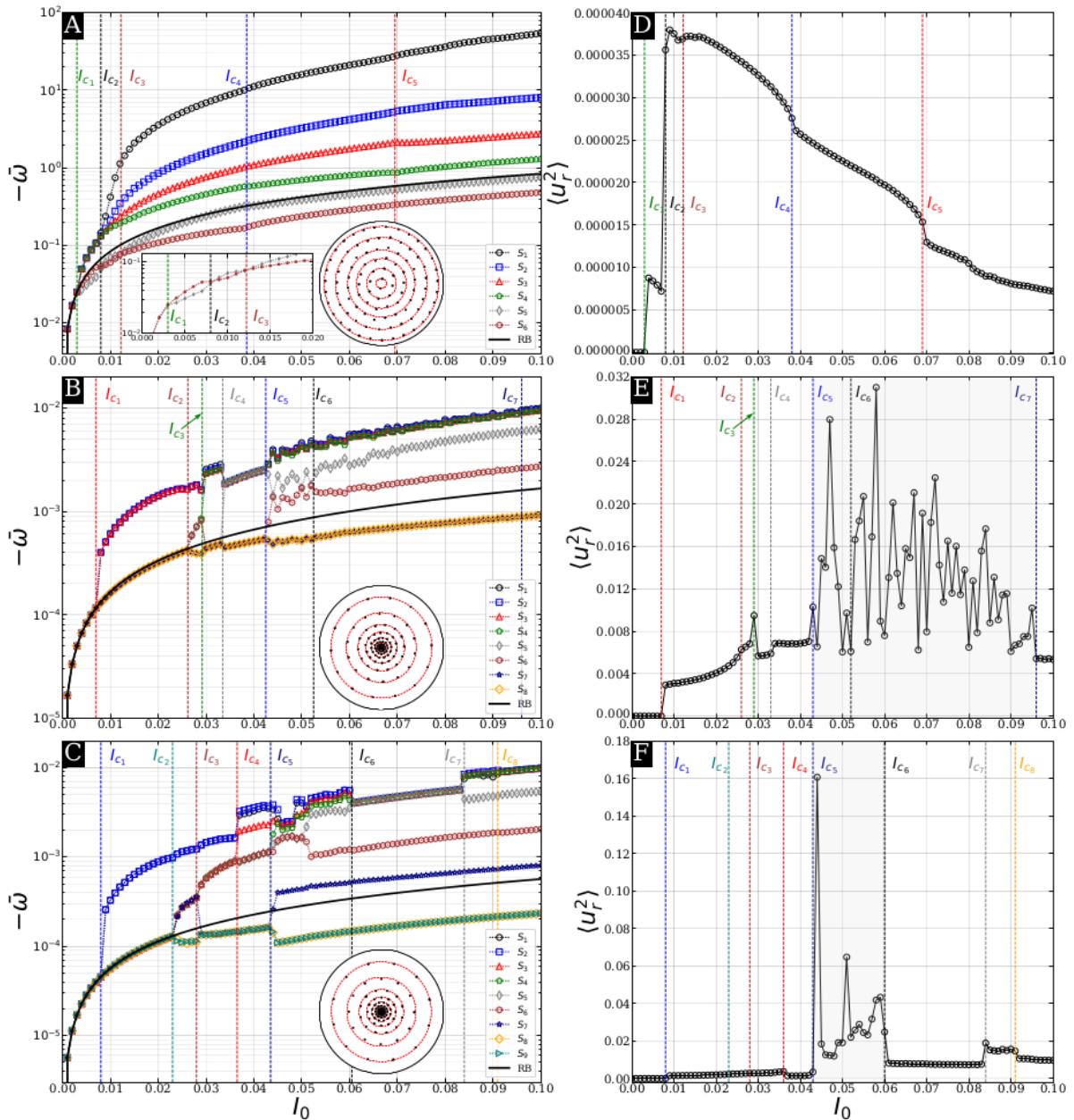


Fonte: O autor (2020)

uma vez que a velocidade angular média $\bar{\omega}_k$ de cada k -ésima camadas (indicada por S_k) é igual para a calculada ω_{RB} [Eq. (6.4)] até $I_0 = I_{c1}$. Para I_0 mais altos, todas as configurações passam por uma sequência de transições de desacoplamento inter-camada, que dependem das distâncias entre as camadas e se são proporcionais ou não.

A configuração (2, 8, 14, 20, 25, 31) está representada na inserção da Fig. 50(A). Como $R = 0.5r_0$, todas as partículas estão na região não-conforme e o espaçamento entre partículas é aproximadamente constante. Essa configuração possui o segundo, terceiro e quarta camadas proporcionais a primeira camada, enquanto o última camada é incomensurável a todos os outras. As camadas proporcionais são fortemente acopladas, o que resulta em maior atrito entre as camadas. Portanto, uma tensão de cisalhamento maior é necessária para desacoplar as camadas proporcionais uma da outra, quando

Figura 50 – Velocidades angulares médias $\bar{\omega}$ (esquerda) e o deslocamento médio quadrático $\langle u_r^2 \rangle$ (direita) em função de I_0 (intensidade do torque produzido pela força externa) para configurações com $R = 0.5r_0$ [(A) e (D)], $R = 16r_0$ [(B) e (E)], e $R = 32r_0$ [(C) e (F)]. As respectivas configurações para $I_0 = 0$ – com posições das partículas representadas por pontos e círculos vermelhos para ajudar a identificar as camadas – são mostradas nas inserções. S_j é o rótulo da j -ésima camada, enquanto que a linha sólida destaca a velocidade angular do corpo rígido (RB). Para baixos I_0 todas as configurações rotacionam como corpo rígido. À medida que I_0 aumenta, as camadas começam a se separar e as linhas pontilhadas verticais indicam os valores I_{ck} em que camadas desacoplam. (A) A segunda inserção mostra uma ampliação da região em torno da primeira corrente de desacoplamento, acima da qual a configuração deixa de girar como um corpo rígido.



Fonte: F.C.O. Silva *et al.* [10]

comparadas com as incomensuráveis. Isso pode ser observado na Fig. 50(A) em que nas duas últimas camadas e nas camadas internas as velocidades angulares médias se desacoplam e se distanciam do comportamento para $\omega_{RB}(I_0)$ para $I_0 > I_{c1} \approx 0.003\varepsilon_0$. As quatro camadas internas permanecem em movimento acopladas uma a outra por $I_{c1} < I_0 < I_{c2} \approx 0.008\varepsilon_0$ e giram como quatro camadas dissociadas para $I_0 > I_{c2}$.

As velocidades angulares das camadas S_5 e S_6 , $\bar{\omega}_5$ e $\bar{\omega}_6$ são mostradas para $I_0 \leq 0.020\varepsilon_0$ em uma das inserções da Fig. 50(A). As duas camadas se movem juntas antes de I_{c1} . Em cada um dos intervalos $I_{c1} < I_0 < I_{c2}$, $I_{c2} < I_0 < I_{c3}$ e $I_0 > I_{c3} \approx 0.012\varepsilon_0$, $\bar{\omega}_5$ e $\bar{\omega}_6$ se alternam em quem é maior. A dinâmica não convencional experimentada por essas duas camadas resulta em $|\bar{\omega}_6| > |\bar{\omega}_5|$ por $I_{c1} < I_0 < I_{c2}$, mesmo com a força motriz maior em S_5 do que em S_6 . Um efeito semelhante foi relatado para a dinâmica de camadas de vórtice em um disco supercondutor na geometria de Corbino [140, 141]. Observe que aqui isso acontece enquanto as quatro camadas internas se movem com a mesma velocidade angular. Depois que as camadas internas se separam, $|\bar{\omega}_5|$ se torna maior que $|\bar{\omega}_6|$ conforme o esperado.

Clusters confinados a R maiores aumentam a região quase-conforme acessível para as partículas, o que frequentemente resulta em camadas proporcionais. Isso pode ser visto na configuração (1, 6, 10, 13, 5×14) para $I_0 = 0$ e tamanho $R/r_0 = 16$ representado na inserção da Fig. 50 (B), assim como observado para $N = 20$ e 30, apresentado anteriormente. Nesta amostra, o limite $r = R^*$ entre as regiões não conformes e quase conformes fica entre duas camadas proporcionais, S_4 e S_5 . A rotação de corpo rígido ocorre para I_0 até $I_{c1} \approx 0.007\varepsilon_0$, com todo o sistema girando com velocidade angular ω_{RB} [Fig. 50(B)] e $\langle u_r^2 \rangle = 0$ dentro desse intervalo. Esse valor de I_{c1} é mais do que duas vezes maior que o valor da configuração anterior com $R/r_0 = 0.5$. $\langle u_r^2 \rangle$ tem um salto em $I_0 = I_{c1}$. Por $I_{c1} < I_0 < I_{c2} \approx 0.026\varepsilon_0$ dois grupos de camadas giram com duas velocidades angulares diferentes: as três primeiras camadas incomensuráveis internas giram acopladas umas às outras, mas dissociadas do outro grupo de camadas comensuráveis. As duas camadas externas desacoplam da quarta, quinta e sexta camadas em $I_0 = I_{c2}$ e três grupos de camadas giram com diferentes velocidades angulares por $I_{c2} < I_0 < I_{c3} \approx 0.029\varepsilon_0$. $\langle u_r^2 \rangle$ aumenta monotonicamente de I_{c1} para $I_{c3} \approx 0.029\varepsilon_0$.

$\langle u_r^2 \rangle$ tem um pico em torno de I_{c3} . Isso resulta de uma redistribuição de partículas nas camadas, onde o número de partículas na primeira camada aumenta de 6 para 7,

enquanto diminui de 14 para 13 na quarta camada. A configuração se torna (1, 7, 10, 2×13 , 4×14) por $I_{c3} < I_0 < I_{c4} \approx 0.033\varepsilon_0$ e dois grupos desacoplados de camadas giram com duas velocidades angulares diferentes, em vez de três grupos na faixa anterior de I_0 . Um grupo é composto pelas quatro camadas internas, enquanto o outro das quatro camadas externas. Observe também que a mudança no número de partículas dentro das camadas modifica também as posições radiais médias das camadas. Outra descontinuidade no deslocamento radial médio aparece em $I_0 = I_{c4}$, devido a outro rearranjo da camada com o sistema retornando à distribuição inicial de partículas (1, 6, 10, 13, 5×14). Isso ocorre concomitantemente com o quinta camada dissociando-se do grupo externo de camadas girando juntas e unindo-se ao grupo composto pelas camadas internas. Para $I_{c4} < I_0 < I_{c5}$, o sistema ainda gira dividido nesses dois grupos de camadas acopladas com duas velocidades angulares diferentes.

Fig. 50(E) mostra, até $I_0 = I_{c5}$, $\langle u_r^2 \rangle$ como uma função suave de I_0 com descontinuidades em I_{c1} , I_{c2} , I_{c3} , I_{c4} e I_{c5} . Além disso, para $I_{c3} < I_0 < I_{c5}$, $\langle u_r^2 \rangle$ é aproximadamente constante por partes. No entanto, para $I_{c5} < I_0 < I_{c7} \approx 0.096\varepsilon_0$, a dependência de $\langle u_r^2 \rangle$ em I_0 se torna irregular com muitas descontinuidades aparentemente aleatórias [parte de fundo cinza da Fig. 50 (E)]. Além disso, após o desacoplamento de S_5 e S_6 dos grupos interno e externo de camadas em $I_0 = I_{c5}$, $\bar{\omega}$ de todas as camadas, apresentam flutuações não desprezíveis. Esse comportamento é devido à migração intermitente de partículas de uma camada para outra durante a janela do tempo de aquisição para cada valor de I_0 . Essa migração, que pode ocorrer mais de uma vez nessa janela de tempo, significa que o número de partículas nas camadas não é estritamente conservado. Além disso, uma vez que o número de partículas muda em uma camada, a posição radial das partículas nessa camada também muda, o que afeta as posições radiais de outras camadas. A velocidade angular média das camadas - calculada a partir das velocidades angulares das partículas dentro de uma determinada faixa radial predefinida - varia abruptamente quando ocorre uma migração de partículas. Portanto, a migração de partículas entre as camadas resulta tanto no comportamento errático de $\langle u_r^2 \rangle$ quanto nas flutuações da dependência média de velocidade angular da camada em I_0 . Para $I_{c5} < I_0 < I_{c6} \approx 0.052\varepsilon_0$, apenas as três camadas externas, contendo 14 partículas cada, têm o número de partículas preservadas. Para $I_{c6} < I_0 < I_{c7}$, apenas as quatro camadas externas, também contendo 14 partículas cada, têm um número constante de partículas.

Para $I_0 > I_{c7} \langle u_r^2 \rangle$ torna-se uma função suave de I_0 novamente, uma vez que a migração de partículas cessa entre as camadas e o sistema retorna ao $(1, 7, 10, 2 \times 13, 4 \times 14)$ configuração.

Finalmente estudamos a configuração $(1, 5, 10, 7 \times 12)$, que possui nove camadas e tamanho $R = 32r_0$. Esta configuração está representada na inserção da Fig. 50 (C) para $I_0 = 0$. A quarta e a quinta camadas - contendo 12 partículas cada - são as camadas mais próximas antes e depois de R^* . Como mostrado nas Figs. 50 (C) e (F), toda a configuração gira como um corpo rígido por $I_0 < I_{c1} \approx 0.008\varepsilon_0$. Observe que esse valor I_{c1} é semelhante ao da configuração com $R = 16r_0$ e muito maior do que aquele com $R = 0.5r_0$. Para $I_{c1} < I_0 < I_{c2} \approx 0.023\varepsilon_0$, as duas camadas internas proporcionais giram juntas com uma velocidade angular média muito mais alta que as sete camadas externas, que também giram como uma. Para $I_{c2} < I_0 < I_{c3} \approx 0.028\varepsilon_0$, o último grupo de camadas se divide em dois grupos, um formado pelas duas camadas externas e o outro pelas camadas da terceira à sétima, e o sistema comporta-se como três camadas espessas que giram com diferentes velocidades angulares. Por $I_{c3} < I_0 < I_{c4} \approx 0.036\varepsilon_0$, a sétima camada desacopla-se da rotação do grupo do meio e acopla-se às duas camadas externas. O sistema continua a girar como três grupos de camadas, embora com uma composição diferente da anterior. Em $I_0 = I_{c4}$, a configuração muda para $(1, 6, 10, 11, 6 \times 12)$. Como consequência, a terceira camada deixa de ser proporcional às demais e se separa do grupo formado pelas camadas intermediárias. Além disso, a primeira e a segunda camadas tornam-se incomensuráveis. Em vez de girar como um grupo, as três camadas internas desacoplaram para $I_{c4} < I_0 < I_{c5} \approx 0.043\varepsilon_0$, enquanto ainda existem dois grupos de camadas externas girando com duas velocidades angulares diferentes.

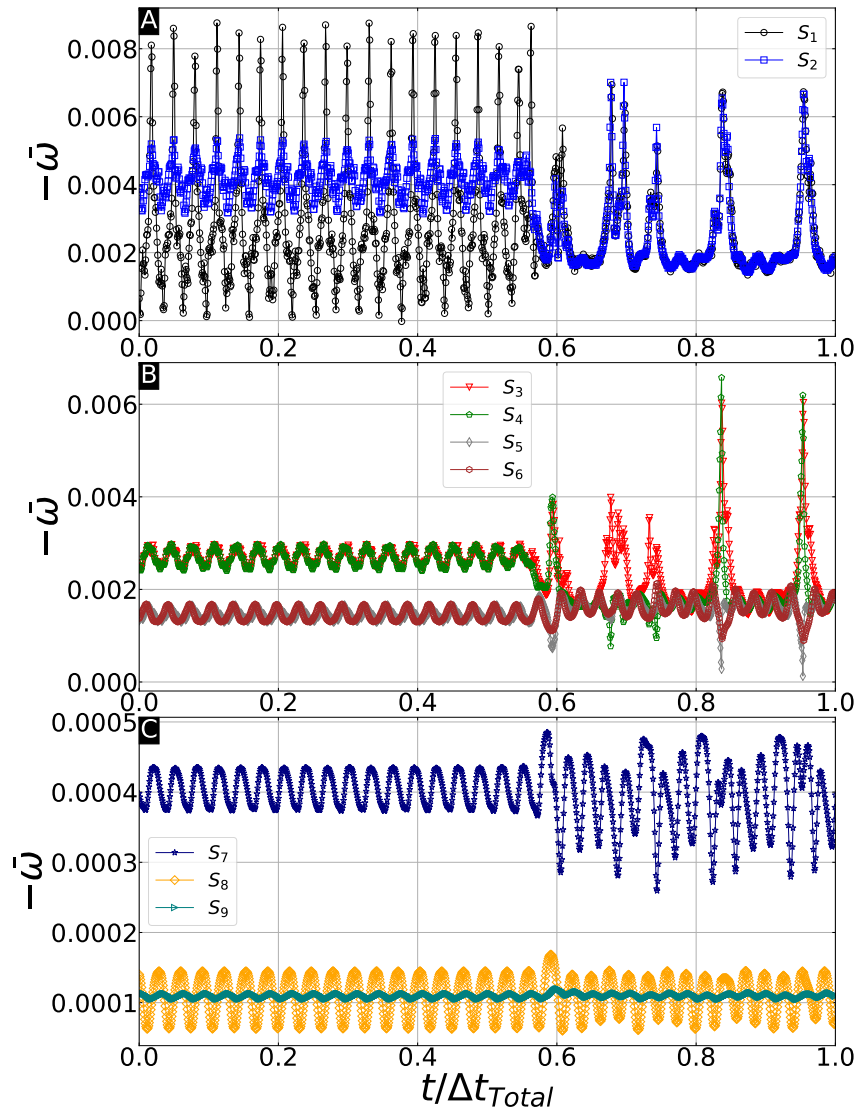
Para $0 < I_0 < I_{c5}$, $\langle u_r^2 \rangle$ é uma função suave, com saltos em I_{c1} , I_{c2} , I_{c3} e I_{c4} , como visto na Fig. 50 (F). No entanto, como aconteceu com o tamanho $R = 16r_0$, ocorre um número não constante de partículas em algumas camadas por $I_{c5} < I_0 < I_{c6} \approx 0.060\varepsilon_0$, o que resulta em uma comportamento irregular de $\langle u_r^2 \rangle$ em função de I_0 . A migração de partículas é observada para todas as cinco camadas internas, enquanto dois grupos, compostos pela sexta e sétima camadas com 13 partículas cada, e pela oitava e nona camadas com 12 partículas cada, giram separadamente. À medida que I_0 aumenta acima de I_{c6} , vemos rearranjos das camadas, juntamente com uma tendência da partícula no centro de vagar até que finalmente se junte à primeira camada e

nenhuma partícula fique no centro. Para $I_{c6} < I_0 < I_{c7} \approx 0.084\epsilon_0$, o sistema alterna entre (1, 4, 9, 3×12 , 2×13 , 2×12) e as configurações (5, 9, 3×12 , 2×13 , 2×12). As duas camadas externas permanecem se movendo juntas, enquanto a sexta e a sétima camadas giram separadamente e desacopladas de todas as outras. Por outro lado, as cinco camadas internas giram com velocidades angulares médias muito semelhantes. Além disso, $\langle u_r^2 \rangle$ torna-se uma função suave de I_0 novamente. Acima de I_{c7} , a quinta camada começa a girar com uma velocidade angular bem mais baixa do que as quatro primeiras camadas. Essa propriedade apresentada pela quinta camada está relacionada ao fato de que a configuração se torna (5, 9, 11, 12, 3×13 , 2×12), com o cinco partículas na primeira camada que visitam a região central, por $I_{c7} < I_0 < I_{c8} \approx 0.091\epsilon_0$. Para $I_0 > I_{c8}$, o sistema apresenta um arranjo mais proporcional das camadas (4, 9, 2×12 , 3×13 , 2×12).

A Fig. 51 mostra o momento no qual ocorre uma migração de partículas entre camadas adjacentes. Cada quadro representa um conjunto de camadas que rotacionam de forma inicialmente acopladas. As camadas são agrupadas em cinco conjuntos: $S_1 - S_2(A)$, $S_3 - S_4(B)$, $S_5 - S_6(B)$, $S_7(C)$ e $S_8 - S_9(C)$. Quando $t/\Delta t_{Total} \approx 0.58$ uma migração de partículas é observadas nas camadas mais internas. Na Fig. 52, fica visível a migração entre as quatro primeiras camadas. Note que, as camadas mais externas são sensíveis à essa migração, visualmente observada na camada com $r \approx 4.8r_0$, além de ser constatado na dependência temporal da velocidade angular das camadas [ver Fig. 51]. Essas migrações, provocam um comportamento errático em $\langle u_r^2 \rangle$.

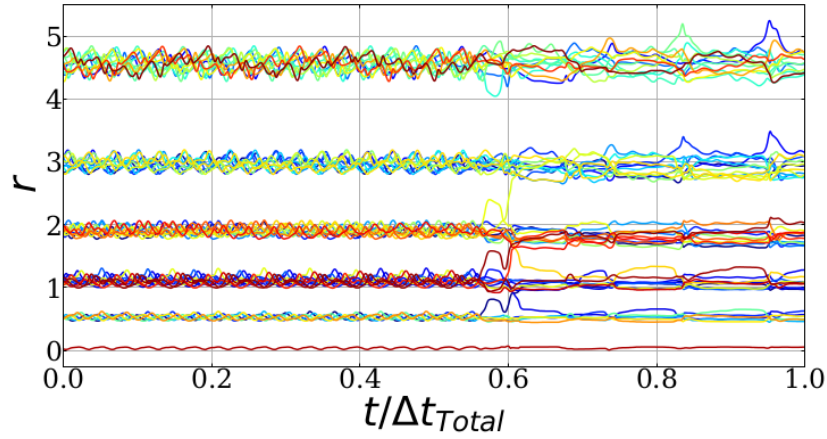
Das amostras estudadas, observamos os regimes esperados para baixa e alta tensão de cisalhamento, respectivamente, rotação rígida do corpo e fluxo laminar, caracterizados por rotações quase independentes da concha. Além disso, a transição da rotação rígida do corpo para o fluxo laminar ocorre em diferentes estágios, que ocorrem sequencialmente. Primeiro, após a quebra da rotação do corpo rígido, a configuração é dividida em grupos de camadas acopladas, com cada grupo girando com uma velocidade angular diferente. Várias outras dissociações de camadas podem ocorrer sem alterações no número de partículas por camada. Segundo, para maior tensão de cisalhamento, as oscilações radiais das partículas se tornam grandes o suficiente para promover uma mudança no número de partículas em cada camada. No entanto, após esse rearranjo de partículas, as camadas giram sem nenhuma modificação adicional no número de partículas. A rotação das camadas nesse estágio é semelhante à anterior,

Figura 51 – Dependência temporal da velocidade ω_{S_j} para a configuração com $N = 100$, $R = 32r_0$ e $I_0 = 0.045\varepsilon_0$. O tempo está normalizado pelo tempo total da janela de captura. As camadas são agrupadas em cinco conjuntos: $S_1 - S_2$ (A), $S_3 - S_4$ (B), $S_5 - S_6$ (B), S_7 (C) e $S_8 - S_9$ (C).



Fonte: O autor (2020)

Figura 52 – Dependência temporal da posição radial r_i para a configuração com $N = 100$, $R = 32r_0$ e $I_0 = 0.045\varepsilon_0$. O tempo está normalizado pelo tempo total da janela de captura. As linhas de diferentes cores representam as partículas.



Fonte: O autor (2020)

com grupos de camadas girando juntas, mas cada grupo separado dos outros. Terceiro, para uma tensão de cisalhamento ainda maior, a migração intermitente de partículas entre as camadas começa a ocorrer e o número de partículas em algumas camadas deixa de ser constante durante o movimento do sistema. Nesses casos, o deslocamento radial de partículas pode ser tão grande que não temos mais camadas bem definidas. À medida que a tensão de cisalhamento aumenta ainda mais, as partículas se tornam menos suscetíveis ao movimento radial devido ao impulso de cisalhamento externo muito mais forte em comparação com as interações entre partículas. Por I_0 muito mais altos do que os mostrados aqui, cada camada se separa da outra e ocorre o movimento rotacional laminar, onde a velocidade angular média varia com a posição média das partículas como $\bar{\omega} \sim 1/r^2$.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

ah! se eu pudesse
só por um segundo
rever os portões do mundo
que os avós criaram.

Vale do Jucá - Siba e Fuloresta

Neste trabalho, demonstramos que um sistema 2D de partículas interagindo logaritmicamente, confinado a um potencial externo projetado adequadamente, pode cristalizar em configurações não homogêneas altamente ordenadas, caracterizadas por linhas cristalinas em espiral. O potencial confinante foi projetado para acomodar um perfil de densidade $n(r) \propto 1/(r^2 + r_0^2)$ no limite do contínuo, permitindo assim investigar densidades aproximadamente uniformes para raios de cluster $R < r_0$, para densidades altamente não uniformes, por $R \gg r_0$. Dependendo da intensidade do potencial confinante, o conjunto de linhas espirais cristalinas principais pode ser: (i) quiral, com quiralidade geral para dextrógiro ou levógiro, ou (ii) não quiral, com duas linhas cristalinas principais em espiral de quiralidade oposta e uma terceira consistindo em círculos concêntricos ou linhas radiais.

Observamos que, para $R > 8r_0$, as partículas cristalizam em diferentes estruturas não uniformes altamente ordenadas, isto é, cristais conformes. Para tamanhos moderados de aglomerados, as configurações típicas são do tipo concêntrico, nas quais um dos principais eixos cristalinos é um círculo. Para tamanhos de sistema maiores e número de partículas, outras configurações, como radial e quiral, aparecem com mais frequência. Em todas essas configurações, dois ou todos os três principais eixos cristalinos são espirais logarítmicas. Embora todas as configurações concêntricas sejam essencialmente livres de defeitos, as configurações espiral e radial geralmente apresentam defeitos topológicos e limites de grão em sua região de *bulk* para acomodar a simetria do confinamento. Definimos como policristais todas as configurações com mais de dois domínios cristalinos com diferentes orientações da rede hexagonal na região conforme. A orientação β da estrutura hexagonal, no plano w , está intimamente relacionada ao tipo

de espirais que aparecem no cristal conforme. Enquanto para configurações concêntricas e radiais β está bem definida, as configurações quirais podem, em princípio, assumir qualquer valor no intervalo $0 < |\beta| < 30^\circ$.

A distribuição das orientações θ das ligações vizinhas mais próximas no plano w em relação ao eixo u , $P(\theta)$, evidencia uma certa preferência na orientação β das linhas da rede no plano w para configurações quirais. Isso implica em uma seletividade da taxa de enrolamento em espiral b no plano físico z . As amostras quirais observadas com mais frequência, apresentam uma taxa de enrolamento $b \approx \tan(\pm 17^\circ) = \pm 0.306$. No geral, concêntricas corresponderam a 62.1% das configurações encontradas em nossas simulações, as quirais representaram 24.6%, os policristais 7.8% e as configurações radiais apareceram 5.6% das vezes.

Em contraste com os clusters homogêneos, como os encontrados em confinamentos harmônicos, a carga topológica induzida pela geometria é concentrada no núcleo da configuração, enquanto o restante do cristal está quase livre de defeitos. Uma característica comum de todas as configurações conformes discutidas anteriormente, é que sua carga topológica intrínseca está concentrada perto do centro da amostra na região não conforme $r < R^*$, seja como isolado $q = +1$ disclinações ou uma sequência de cargas. A carga intrínseca nas configurações conformes está sempre concentrada perto do centro da amostra. No entanto, distribuições de carga neutra podem aparecer na região conforme, especialmente para grandes valores de R e N .

Analizamos os modos elásticos de sistemas confinados para diversos valores de R . Para isso, a matriz dinâmica foi calculada a partir de configurações (meta)estáveis, alcançadas através do processo de *annealing*, obtendo seus autovalores e autovetores. As configurações estáveis apresentam automodo de rotação em torno do centro de confinamento, associado ao menor autovalor. Na aproximação parabólica ($R = 0.5r_0$), os modos de oscilação (translação) do centro de massa e de oscilação radial, chamado de modo de respiração (*breathing*), são semelhantes aos relatados em sistemas clássicos de partículas, com interação logarítmica ou Coulomb, confinados a um potencial parabólico. O modo de translação são comumente observados aos pares, i.e., são dois autovalores associados à translação do centro de massa. Aumentando a região de confinamento, $R > 0.5r_0$, os modos de translação e de respiração, são observados de formas distintas, quando comparado com o confinamento aproximadamente parabólico. O modo de respiração,

além do modo de oscilação do centro de massa, não são comportamentos coletivos em nosso sistema. Como o aumento da conformidade do potencial de confinamento, i.e., $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_{DEC}$ quando $R \gg 0.5r_0$, o modo elástico correspondente à translação de todas as partículas não é observado para $R \geq 4r_0$, e o modo de respiração é observado em diferentes autofrequências e atuando individualmente nas camadas. A atuação do modo *breathing* pode ser acompanhada analisando a razão entre os modos de compressão (f_c) e cisalhamento (f_s), f_c/f_s , onde os diversos saltos da razão estão associados aos modos de respiração que atuam em cada camada, isoladamente. Os resultados podem ser compreendidos do ponto de vista de uma "constante" elástica do potencial que cresce com r , quando o potencial de confinamento é $\sim r^3$, permanece constante, para $\sim r^2$, e decrescente para o potencial de confinamento conforme.

Avaliamos a estabilidade desses cristais em relação à excitação térmica de defeitos topológicos, bem como à difusão de defeitos preexistentes. A estrutura conforme dos cristais é resiliente a flutuações térmicas até uma temperatura limite. No caso de configurações concêntricas (livres de defeitos), acima do limiar, o cristal perde a ordem global e passa por um processo progressivo de amorfização, à medida que a carga topológica difunde-se da região não-conforme ($R < R^*$) para a região quase-conforme ($R \geq R^*$). As deslocções (neutras) são excitadas termicamente, também do centro para a borda. Para configurações quirais e radiais, os limites de grãos presentes nessas estruturas também funcionam como fontes de defeitos, contribuindo para uma amorfização mais homogênea da estrutura. Esses resultados são consistentes com o conceito geral de pré-fundição em defeitos de cristal [142–144].

Finalmente, analisamos a resposta dos clusters à tensão de cisalhamento produzida por uma distribuição de força não uniforme e comparamos os resultados com o comportamento mais conhecido dos clusters homogêneos. Todas as configurações apresentam uma fase elástica de rotação do corpo rígido para pequeno cisalhamento. Em particular, as configurações radiais e quirais conformes decaem para configurações concêntricas na fase de corpo rígido. Portanto, quando a fase de corpo rígido termina, dando lugar à fase de plástica, todas as configurações são concêntricas, sendo as conformes caracterizadas por uma estrutura de camada altamente comensurável. Essa comensurabilidade leva a uma sequência de ramificação das velocidades angulares das camadas, correspondendo a múltiplos desacoplamentos e reconfigurações das camadas,

em uma escala muito maior que a observada na amostra homogênea. O desacoplamento entre as camadas é verificado também na descontinuidade do valor de $\langle u_r^2 \rangle$.

Este trabalho oferece uma importante compreensão para o processo de cristalização e da estabilidade de cristais conformes bidimensionais, com alta densidade próximo da origem. Naturalmente, uma extensão desse nosso estudo é aprofundar o conhecimento quando aplicamos o ruído térmico ao sistema, para ir além da fase amorfa apresentada no Cap. 5. Além disso, planejamos investigar a cristalização, modos elásticos e estabilidades (térmica e elástica), para outros tipos de interação interpartícula, tais como Coulomb e Yukawa, mantendo a mesma densidade de distribuição.

REFERÊNCIAS

- [1] Creation Arts, “Sacred geometry in nature and life,” (2020), acessado dia: 13 jun. 2020.
- [2] S. Douady and Y. Couder, Phys. Rev. Lett. **68**, 2098 (1992).
- [3] R. M. de Menezes, *Nonuniform vortex distributions in superconductors: from critical state to conformal crystals*, Master’s thesis, Universidade Federal de Pernambuco, Departamento de Física, Curso de Pós-Graduação em Física, Recife (2017).
- [4] F. Rothen and P. Pierański, Phys. Rev. E **53**, 2828 (1996).
- [5] R. M. Menezes, E. Sardella, L. R. E. Cabral, and C. C. de Souza Silva, Journal of Physics: Condensed Matter **31**, 175402 (2019).
- [6] W. Drenckhan, D. Weaire, and S. Cox, European journal of physics **25**, 429 (2004).
- [7] V. Soni, L. R. Gómez, and W. T. M. Irvine, Phys. Rev. X **8**, 011039 (2018).
- [8] B. Delaunay *et al.*, Izv. Akad. Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskii i Estestvennyka Nauk **7**, 1 (1934).
- [9] P. Kim, Nature materials **9**, 792 (2010).
- [10] F. C. O. Silva, R. M. Menezes, L. R. E. Cabral, and C. C. de Souza Silva, Journal of Physics: Condensed Matter **32**, 505401 (2020).
- [11] B. Partoens and P. S. Deo, Phys. Rev. B **69**, 245415 (2004).
- [12] C. Kuhlemeier, Trends in Plant Science **12**, 143 (2007).
- [13] C. Kuhlemeier, Current Biology **27**, R882 (2017).
- [14] R. Jean, *Phyllotaxis: A Systemic Study in Plant Morphogenesis*, Phyllotaxis: A Systemic Study in Plant Morphogenesis (Cambridge University Press, 2009).
- [15] A. Newell and M. Pennybacker, Procedia IUTAM **9**, 86 (2013), iUTAM Symposium on Understanding Common Aspects of Extreme Events in Fluids.

- [16] F. Rothen, P. Pieranski, N. Rivier, and A. Joyet, *European Journal of Physics* **14**, 227 (1993).
- [17] S. Douady and Y. Couder, *Journal of Theoretical Biology* **178**, 255 (1996).
- [18] S. Douady and Y. Couder, *Journal of Theoretical Biology* **178**, 275 (1996).
- [19] S. Douady and Y. Couder, *Journal of Theoretical Biology* **178**, 295 (1996).
- [20] R. Menezes and C. Silva, *Scientific Reports* **7** (2017), 10.1038/s41598-017-12807-4.
- [21] K. W. Wojciechowski and J. Klos, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **29**, 3963 (1996).
- [22] A. Mughal and M. A. Moore, *Phys. Rev. E* **76**, 011606 (2007).
- [23] J. Brown and R. Churchill, *Fourier Series and Boundary Value Problems* (McGraw Hill, 1989).
- [24] A. Mughal and D. Weaire, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **465**, 219 (2009).
- [25] R. Jean, *Mathematical Approach to Pattern and Form in Plant Growth*, Wiley-Interscience publication (Wiley, 1984).
- [26] L. E. Reichl, *A modern course in statistical physics, 3rd Edition* (Wiley, Weinheim, 2009).
- [27] L. Bonsall and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).
- [28] V. Natsik and S. Smirnov, *Low Temperature Physics* **39**, 534 (2013).
- [29] M. Kong, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **67**, 021608 (2003).
- [30] W. Irvine, V. Vitelli, and P. Chaikin, *Nature* **468**, 947 (2010).
- [31] Z. Yao and M. Olvera de la Cruz, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 115503 (2013).
- [32] H. S. Seung and D. R. Nelson, *Phys. Rev. A* **38**, 1005 (1988).
- [33] A. Pérez-Garrido, M. J. W. Dodgson, and M. A. Moore, *Phys. Rev. B* **56**, 3640 (1997).

- [34] V. Vitelli, J. B. Lucks, and D. R. Nelson, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **103**, 12323 (2006).
- [35] A. Bausch, M. J. Bowick, A. Cacciuto, A. Dinsmore, M. Hsu, D. Nelson, M. Nikolaides, A. Travesset, and D. Weitz, *Science* **299**, 1716 (2003).
- [36] P. Chaikin and T. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2000).
- [37] I. Muševič, *Liquid crystal colloids* (Springer, 2017).
- [38] A. A. Koulakov and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **57**, 2352 (1998).
- [39] M. Moshe, I. Levin, H. Aharoni, R. Kupferman, and E. Sharon, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **112**, 10873 (2015).
- [40] D. Nelson, T. Piran, and S. Weinberg, *Statistical mechanics of membranes and surfaces* (World Scientific, 2004).
- [41] M. do Carmo, *Geometria Riemanniana*, Escola de geometria diferencial (Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 1979).
- [42] J. Bartik, J. Rickman, and K. Todd, *Pioneer Programmer: Jean Jennings Bartik and the Computer that Changed the World* (Truman State University Press, 2013).
- [43] G. DA SILVA BRITO and I. DA PURIFICAÇÃO, *Educação e Novas Tecnologias* (IBPEX).
- [44] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, Computational science (Elsevier Science, 2001).
- [45] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd ed. (Cambridge University Press, USA, 2004).
- [46] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *The Journal of Chemical Physics* **21**, 1087 (1953).
- [47] N. Metropolis and S. Ulam, *Journal of the American Statistical Association* **44**, 335 (1949), pMID: 18139350.
- [48] A. Rahman, *Phys. Rev.* **136**, A405 (1964).

-
- [49] S. Salinas, *Introdução a Física Estatística Vol. 09* (EDUSP, 1997).
- [50] K. Nelissen, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **69**, 046605 (2004).
- [51] J. Hansen and I. McDonald, *Theory of Simple Liquids: with Applications to Soft Matter* (Elsevier Science, 2013).
- [52] K. Huang, *Statistical mechanics* (Wiley, 1987).
- [53] F. Ercolessi, Spring college in computational physics, ICTP, Trieste **19** (1997).
- [54] L. Verlet, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).
- [55] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*, 3rd ed. (Cambridge University Press, USA, 2007).
- [56] D. C. Rapaport and D. C. R. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation* (Cambridge university press, 2004).
- [57] D. S. Lemons and A. Gythiel, *American Journal of Physics* **65**, 1079–1081 (1997), <https://doi.org/10.1119/1.18725>.
- [58] M. Bixon and R. Zwanzig, *Phys. Rev.* **187**, 267 (1969).
- [59] H. Mori, *Progress of theoretical physics* **33**, 423 (1965).
- [60] S. Hassani, *Mathematical Methods: For Students of Physics and Related Fields*, Undergraduate Texts in Contemporary Physics (Springer New York, 2013).
- [61] A. Jeffrey and D. Zwillinger, *Table of Integrals, Series, and Products* (Elsevier Science, 2007).
- [62] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Applied mathematics series (Dover Publications, 1965).
- [63] V. M. Bedanov and F. m. c. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **49**, 2667 (1994).
- [64] M. Djebli, M. Issaad, and L. Rouaiguia, *Physics of Plasmas* **17**, 033704 (2010).

- [65] W. P. Ferreira, F. F. Munarin, K. Nelissen, R. N. Costa Filho, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *Phys. Rev. E* **72**, 021406 (2005).
- [66] V. A. Schweigert and F. m. c. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995).
- [67] W. P. Ferreira, F. F. Munarin, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Journal of Physics: Condensed Matter* **18**, 9385 (2006).
- [68] H. Baumgartner, H. Kählert, V. Golobnychiy, C. Henning, S. Käding, A. Melzer, and M. Bonitz, *Contributions to Plasma Physics* **47**, 281 (2007).
- [69] Minghui Kong, W. P. Ferreira, B. Partoens, and F. M. Peeters, *IEEE Transactions on Plasma Science* **32**, 569 (2004).
- [70] L. Cândido, J.-P. Rino, N. Studart, and F. M. Peeters, *Journal of Physics: Condensed Matter* **10**, 11627 (1998).
- [71] P. C. N. Pereira, F. C. O. Silva, and S. W. S. Apolinario, *New Journal of Physics* **15**, 093004 (2013).
- [72] A. Bessaa and M. Djebli, *Physics of Plasmas* **23**, 113703 (2016).
- [73] Y.-J. Lai and L. I, *Phys. Rev. E* **60**, 4743 (1999).
- [74] B. Partoens and F. M. Peeters, *Journal of Physics: Condensed Matter* **9**, 5383 (1997).
- [75] R. M. Jungmann, P. C. N. Pereira, and S. W. S. Apolinario, *Journal of Physics: Condensed Matter* **30**, 465402 (2018).
- [76] L. Q. C. Campos and S. W. S. Apolinario, *Phys. Rev. E* **91**, 012305 (2015).
- [77] L. Q. Costa Campos, S. W. S. Apolinario, and H. Löwen, *Phys. Rev. E* **88**, 042313 (2013).
- [78] L. Q. Costa Campos, C. C. de Souza Silva, and S. W. S. Apolinario, *Phys. Rev. E* **86**, 051402 (2012).
- [79] X. B. Xu, Z. H. Wang, X. N. Xu, G. Y. Fang, and M. Gu, *The Journal of Chemical Physics* **152**, 054906 (2020).
- [80] M. S. Jean and C. Guthmann, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 13653 (2002).

-
- [81] M. Saint Jean, C. Even, and C. Guthmann, *EPL (Europhysics Letters)* **55**, 45 (2001).
- [82] P. Cheung, M. Choi, and P. Hui, *Solid State Communications* **103**, 357 (1997").
- [83] S. S. d. Moraes, D. A. Coimbra, J. R. d. Sousa, and H. O. d. Frota, *Brazilian Journal of Physics* **34**, 408 (2004).
- [84] M. Kong, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **65**, 046602 (2002).
- [85] R. C. Gann, S. Chakravarty, and G. V. Chester, *Phys. Rev. B* **20**, 326 (1979).
- [86] M. Kong, B. Partoens, and F. M. Peeters, *New Journal of Physics* **5**, 23 (2003).
- [87] Huang Pinshane Y., Ruiz-Vargas Carlos S., van der Zande Arend M., Whitney William S., Levendorf Mark P., Kevek Joshua W., Garg Shivank, Alden Jonathan S., Hustedt Caleb J., Zhu Ye, Park Jiwoong, McEuen Paul L., and Muller David A., *Nature* **469**, 389 (2011).
- [88] P. Hirvonen, Z. Fan, M. M. Ervasti, A. Harju, K. R. Elder, and T. Ala-Nissila, *Scientific Reports* **7**, 1 (2017).
- [89] V. R. Coffman and J. P. Sethna, *Phys. Rev. B* **77**, 144111 (2008).
- [90] J. Wang, C. F. Mbah, T. Przybilla, B. A. Zubiri, E. Spiecker, M. Engel, and N. Vogel, *Nature communications* **9**, 1 (2018).
- [91] C. Negri, A. L. Sellerio, S. Zapperi, and M. C. Miguel, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **112**, 14545 (2015).
- [92] P. Lipowsky, M. J. Bowick, J. H. Meinke, D. R. Nelson, and A. R. Bausch, *Nature materials* **4**, 407—411 (2005).
- [93] R. E. Guerra, C. P. Kelleher, A. D. Hollingsworth, and P. M. Chaikin, *Nature* **554**, 346 (2018).
- [94] S. Biswas, M. Grant, I. Samajdar, A. Haldar, and A. Sain, *Scientific reports* **3**, 2728 (2013).
- [95] K. Kim, Z. Lee, W. Regan, C. Kisielowski, M. Crommie, and A. Zettl, *ACS nano* **5**, 2142 (2011).

- [96] J. M. Carlsson, L. M. Ghiringhelli, and A. Fasolino, Phys. Rev. B **84**, 165423 (2011).
- [97] Y.-J. Lai and L. I, Phys. Rev. E **60**, 4743 (1999).
- [98] L. R. E. Cabral, B. J. Baelus, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **70**, 144523 (2004).
- [99] M. Kong, B. Partoens, A. Matulis, and F. M. Peeters, Phys. Rev. E **69**, 036412 (2004).
- [100] A. Melzer, Phys. Rev. E **67**, 016411 (2003).
- [101] L. R. E. Cabral and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **70**, 214522 (2004).
- [102] R. S. Crandall, Phys. Rev. A **8**, 2136 (1973).
- [103] E. Andrei, *Two-Dimensional Electron Systems: on Helium and other Cryogenic Substrates*, Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures (Springer Netherlands, 2012) pp. 17–32.
- [104] C. C. Grimes and G. Adams, Phys. Rev. Lett. **42**, 795 (1979).
- [105] R. Ashoori, Nature **379**, 413 (1996).
- [106] M. Golosovsky, Y. Saado, and D. Davidov, Phys. Rev. E **65**, 061405 (2002).
- [107] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, Rev. Mod. Phys. **66**, 1125 (1994).
- [108] A. Geim, I. Grigorieva, S. Dubonos, J. Lok, J. Maan, A. Filippov, and F. Peeters, Nature **390**, 259 (1997).
- [109] J. H. Chu and L. I, Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
- [110] Y.-J. Lai and L. I, Phys. Rev. E **64**, 015601 (2001).
- [111] F. A. Lindemann, Phys. Z **11**, 609 (1910).
- [112] P. Dillmann, G. Maret, and P. Keim, Journal of Physics: Condensed Matter **24**, 464118 (2012).
- [113] Solid State Communications **54**, 725 (1985).
- [114] V. Bedanov, G. Gadiyak, and Y. Lozovik, Physics Letters A **109**, 289 (1985).
- [115] B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).

- [116] D. R. Nelson and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **19**, 2457 (1979).
- [117] A. P. Young, *Phys. Rev. B* **19**, 1855 (1979).
- [118] D. A. Kleinman and A. L. Schawlow, *Journal of Applied Physics* **31**, 2176 (1960), <https://doi.org/10.1063/1.1735520>.
- [119] R. Besseling, P. H. Kes, T. Dröse, and V. M. Vinokur, *New Journal of Physics* **7**, 71 (2005).
- [120] A. Maeda, Y. Inoue, H. Kitano, S. Savel'ev, S. Okayasu, I. Tsukada, and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 077001 (2005).
- [121] D. López, W. K. Kwok, H. Safar, R. J. Olsson, A. M. Petrean, L. Paulius, and G. W. Crabtree, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1277 (1999).
- [122] Miguel M. -Carmen and Zapperi Stefano, *Nature Materials* **2**, 477 (2003).
- [123] N. S. Lin, V. R. Misko, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **81**, 134504 (2010).
- [124] B. R. de Aquino, L. R. Cabral, C. C. de Souza Silva, J. A. Aguiar, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, *Physica C: Superconductivity* **479**, 115 (2012), proceedings of VORTEX VII Conference.
- [125] L. Cabral, B. Aquino, C. Silva, M. Milošević, and F. Peeters, *Phys. Rev. B* **93**, 014515 (2016).
- [126] Y. Paltiel, E. Zeldov, Y. Myasoedov, M. L. Rappaport, G. Jung, S. Bhattacharya, M. J. Higgins, Z. L. Xiao, E. Y. Andrei, P. L. Gammel, and D. J. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3712 (2000).
- [127] P. Benetatos and M. C. Marchetti, *Phys. Rev. B* **65**, 134517 (2002).
- [128] V. R. Misko and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **74**, 174507 (2006).
- [129] D. Coster and R. d. L. Kronig, *Physica* **2**, 13 (1935).
- [130] G. W. Crabtree, *Nature materials* **2**, 435 (2003).
- [131] A. Furukawa and Y. Nisikawa, *Phys. Rev. B* **73**, 064511 (2006).
- [132] S. Okuma, Y. Yamazaki, and N. Kokubo, *Phys. Rev. B* **80**, 220501 (2009).

- [133] M.-C. Miguel, A. Mughal, and S. Zapperi, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 245501 (2011).
- [134] I. Buttinoni, Z. A. Zell, T. M. Squires, and L. Isa, *Soft Matter* **11**, 8313 (2015).
- [135] C. Bairnsfather, C. J. O. Reichhardt, and C. Reichhardt, *EPL (Europhysics Letters)* **94**, 18001 (2011).
- [136] A. Libál, B. M. Csíki, C. J. O. Reichhardt, and C. Reichhardt, *Phys. Rev. E* **87**, 022308 (2013).
- [137] C. Reichhardt and C. J. O. Reichhardt, *Phys. Rev. B* **84**, 174208 (2011).
- [138] C. Reichhardt, C. Bairnsfather, and C. J. Olson Reichhardt, *Phys. Rev. E* **83**, 061404 (2011).
- [139] Crabtree G. W., Lopez D., Kwok W. K., Safar H., and Paulius L. M., *Journal of Low Temperature Physics* **117**, 1313 (1999).
- [140] N. S. Lin, V. R. Misko, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 197003 (2009).
- [141] V. Misko, N. Lin, and F. Peeters, *Physica C: Superconductivity* **470**, 939 (2010), vortex Matter in Nanostructured Superconductors.
- [142] J. Q. Broughton and G. H. Gilmer, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2692 (1986).
- [143] A. M. Alsayed, M. F. Islam, J. Zhang, P. J. Collings, and A. G. Yodh, *Science* **309**, 1207 (2005).
- [144] K. Zhang, G. M. Stocks, and J. Zhong, *Nanotechnology* **18**, 285703 (2007).

APÊNDICE A – OUTRAS CONFIGURAÇÕES DE MENOR ENERGIA

No Cap. 3 mostramos as propriedades estruturais e estáticas de estados (meta) estáveis para $N = 5 \sim 100$ e $R/r_0 = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 . Além das configurações para clusters pequenos, estados com valores maiores de N também foram apresentados. Nesse apêndice, apresentaremos outras configurações de estado fundamental e metaestáveis para diferentes condições de confinamento R e N . Para valores $N > 100$, podemos classificá-las apenas como metaestáveis, pois o número de repetições não pode garantir que o estado fundamental foi alcançado.

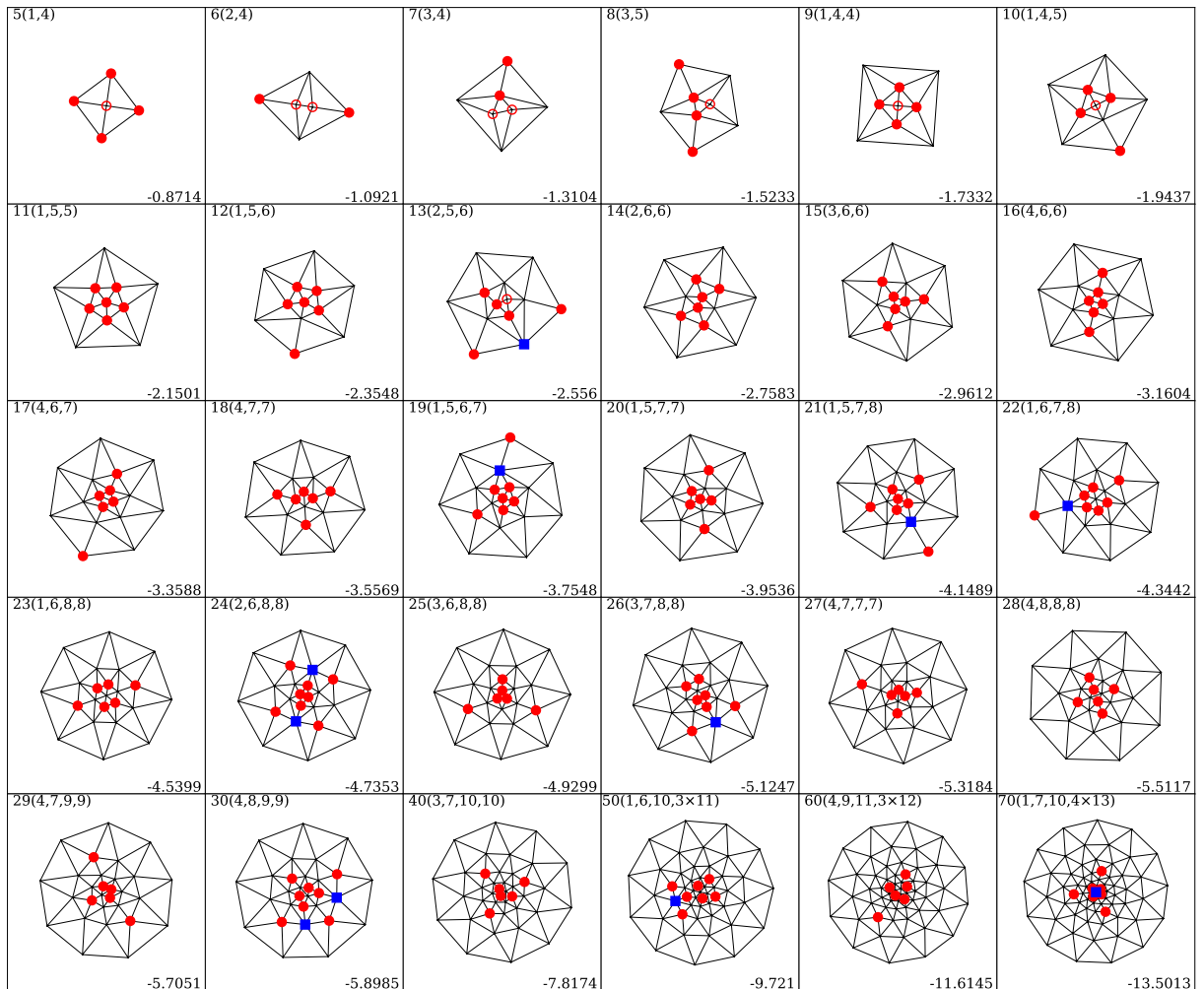
Com o aumento do sistema, seja pelo número de partículas e/ou região de confinamento, a barreira de energia associada aos diferentes estados alcançados é muito baixa, o que gera uma variedade de configurações possíveis para um mesmo conjunto de (N, R) [ver Fig. 21]. O processo de *annealing* foi realizado para N de 100 até 1000 partículas e $R/r_0 = 8, 16, 32, 64, 128$ e 256 . Quatro tipos de estruturas cristalinas são encontradas em nossas simulações, classificadas como concêntricas, quirais, radiais e policristalinas. Os cristais concêntricos apresentam camadas circulares de partículas contendo o mesmo número de partículas que mapeiam no plano- w com linhas verticais. Os outros dois grupos de eixos cristalinos de alta simetria mapeiam em w como linhas retas inclinadas em relação a u . Portanto, esses eixos são espirais logarítmicas, semelhantes aos vistos na Fig. 13 (F). As configurações quiral e radial assemelham-se às redes quirais e radiais teóricas mostradas na Fig. 13 (I) e (H), respectivamente. No caso quiral, todos os três eixos cristalinos mapeiam linhas retas inclinadas, portanto todos são espirais logarítmicas. Para configurações radiais, semelhante ao caso concêntrico, apenas dois eixos são espirais logarítmicas, mapeadas como linhas retas inclinadas em w . As linhas radiais aparecem em linhas quase horizontais. Embora todas as configurações concêntricas sejam encontradas na forma de domínio único, as configurações espirais e radiais normalmente apresentam um domínio concêntrico próximo à borda do cluster. Uma transição similar de uma rede localmente hexagonal para conchas externas circulares também é observada em aglomerados confinados em armadilhas harmônicas [38, 86]. Essa transição decorre do fato de que as partículas próximas à borda da amostra são menos influenciadas pela interação entre partículas, sendo mais propensas a seguir

a simetria circular imposta pelo confinamento. Definimos como policristais todas as configurações com mais de dois domínios cristalinos com diferentes orientações da rede hexagonal na região conforme.

Nas configurações apresentadas, os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azuis (vermelhos). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Quando as configurações são mapeadas no espaço- w , após aplicação da Eq. (1.44b), são mostrados em (D-F), quando apresentados. A linha tracejada vertical preta representa R^* . Nas legendas (A-C), os defeitos profundos no interior dos clusters não são mostrados para melhor visualização. Para as configurações dos estados fundamentais para $N < 100$, no canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster.

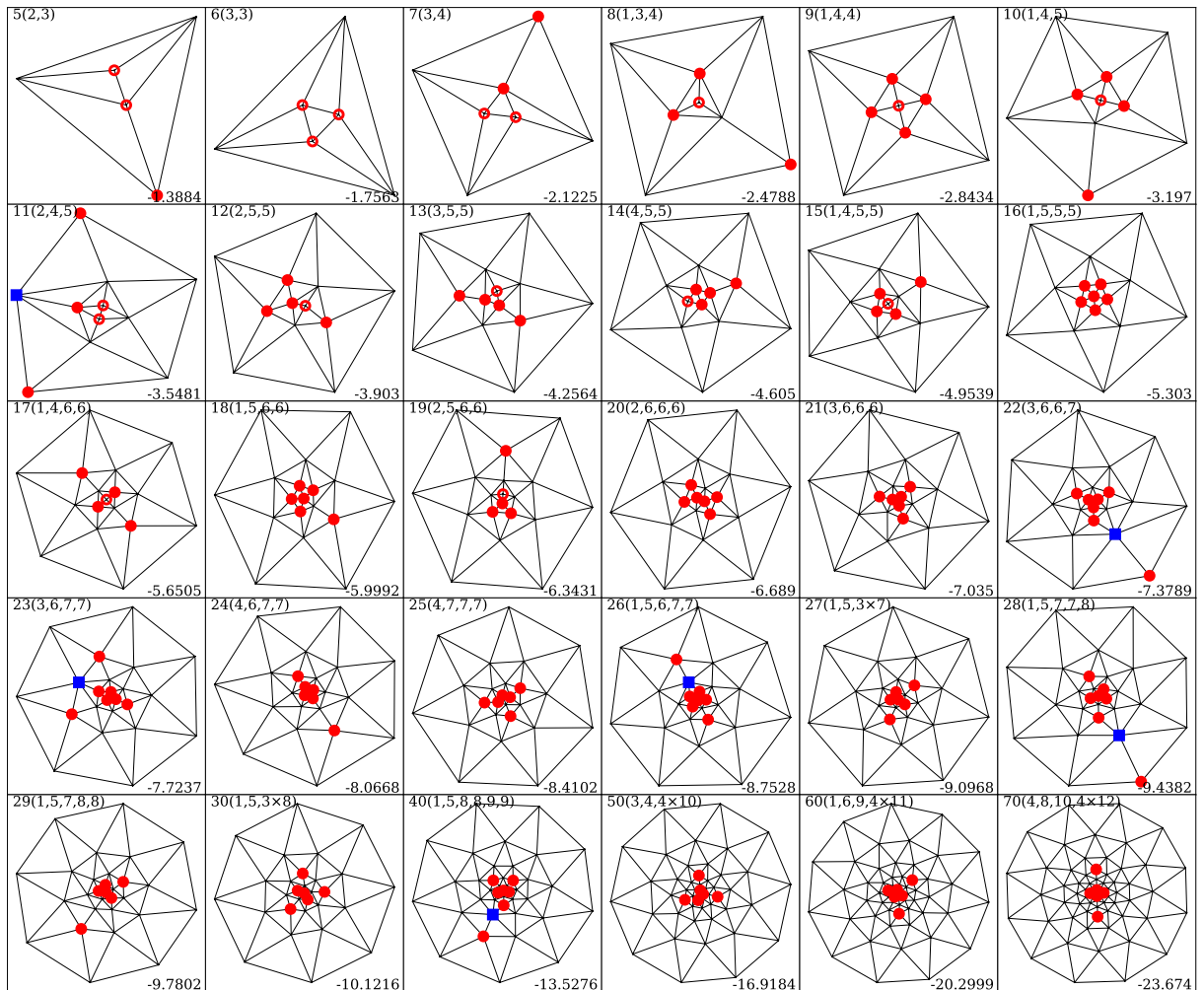
Apresentamos sequencialmente os estados fundamentais para $N < 100$ com confinamentos $R/r_0 = 8, 16, 32, 64$ e 128 . Quando comparado com os estados fundamentais da aproximação parabólica $R = 0.5r_0$ (ver Fig. 16), as estruturas de polígonos regulares são mantidas para valores maiores de N . Defeitos topológicos do tipo $q = +2$ aparecem frequentemente para baixos valores de N . Com o aumento da região de confinamento, as configurações estáveis são compostas por camadas comensuráveis e seu preenchimento parte do interior para borda da amostra, podendo ser verificado acompanhando a distribuição das partículas. A medida que N aumenta os polígonos aproximam-se cada vez mais de estruturas circulares bem definidas.

Figura 53 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $(R = 8r_0)$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q > 0$ ($q < 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



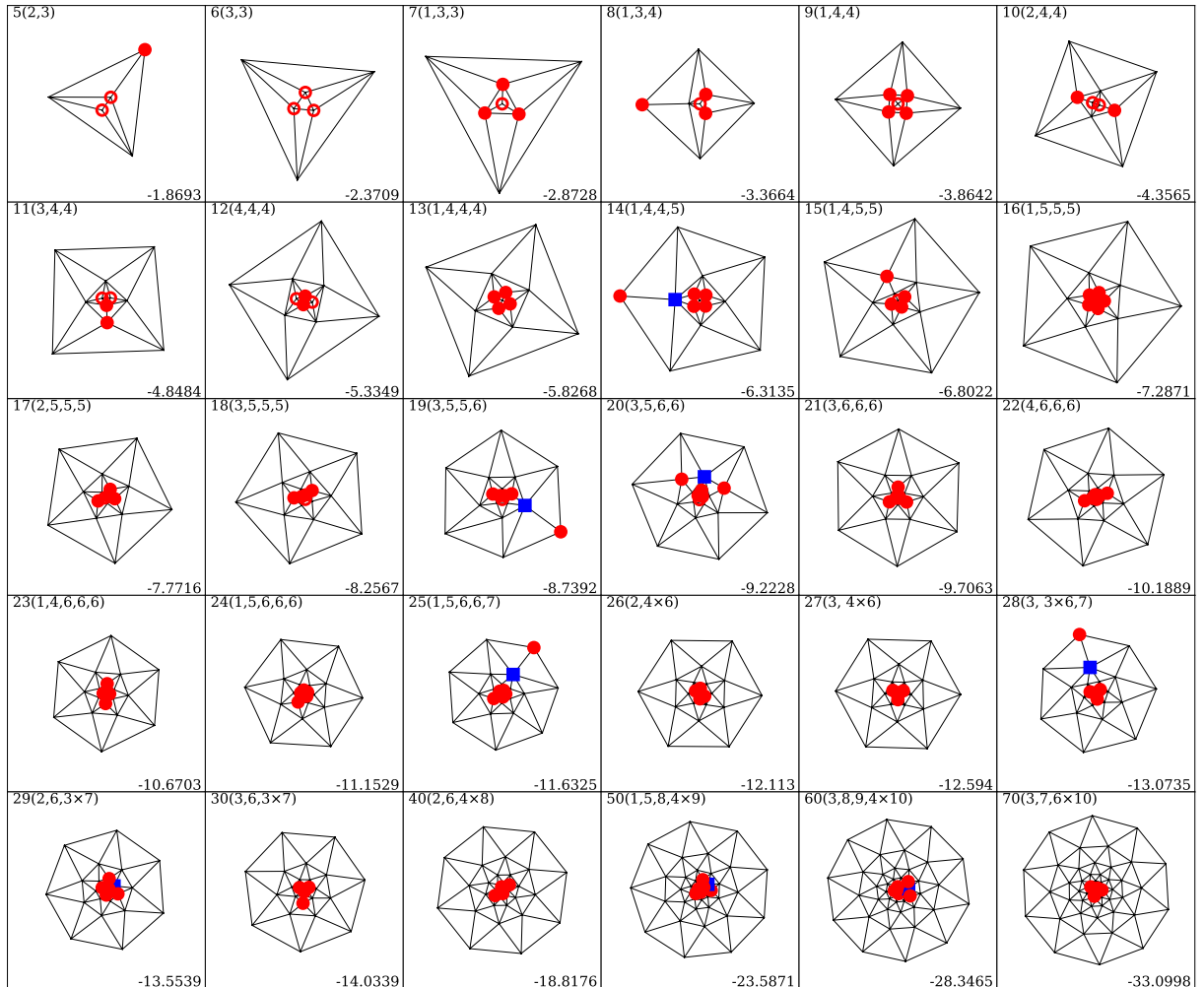
Fonte: O autor (2020)

Figura 54 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 16r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito, listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios(vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



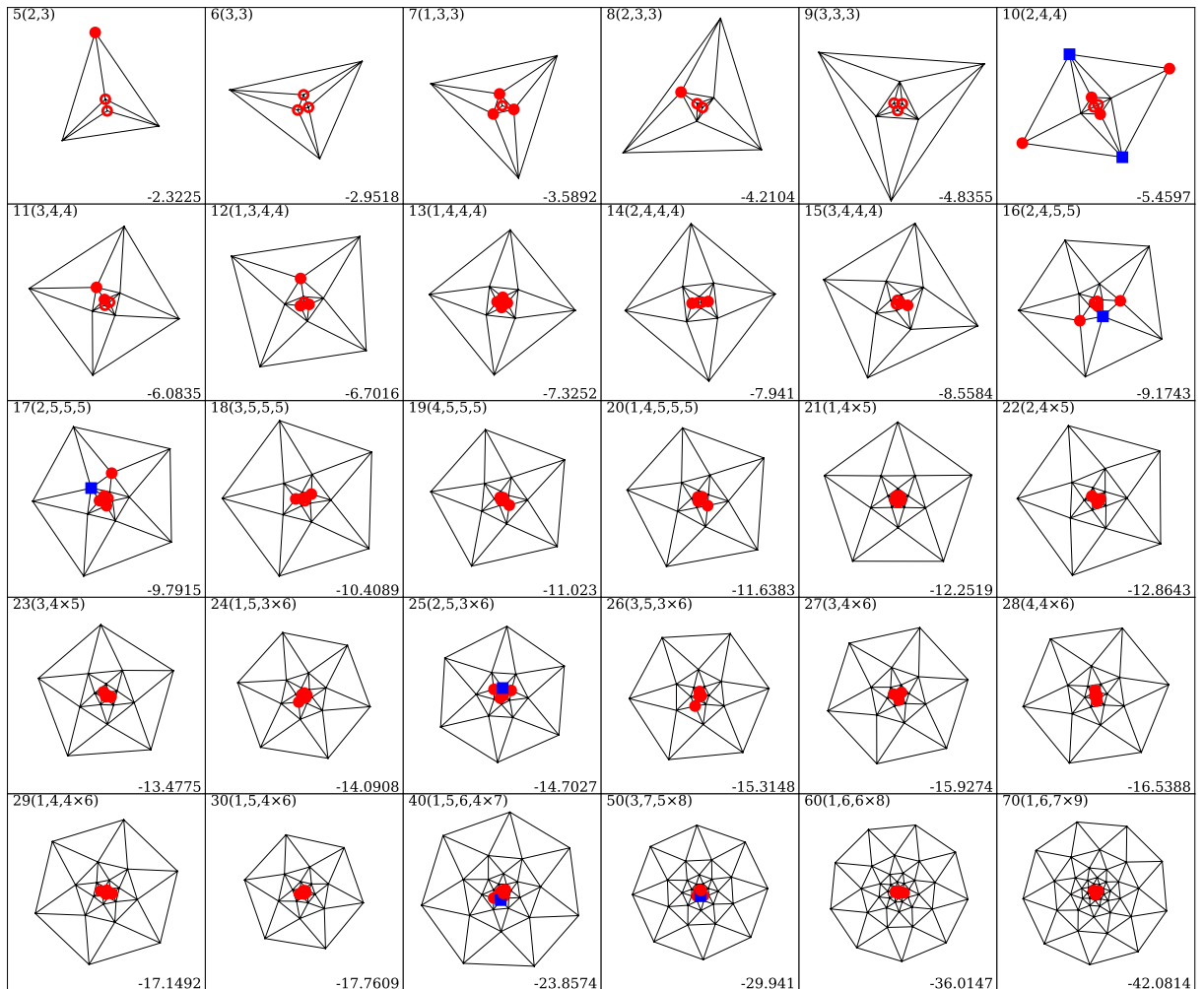
Fonte: O autor (2020)

Figura 55 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 32r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



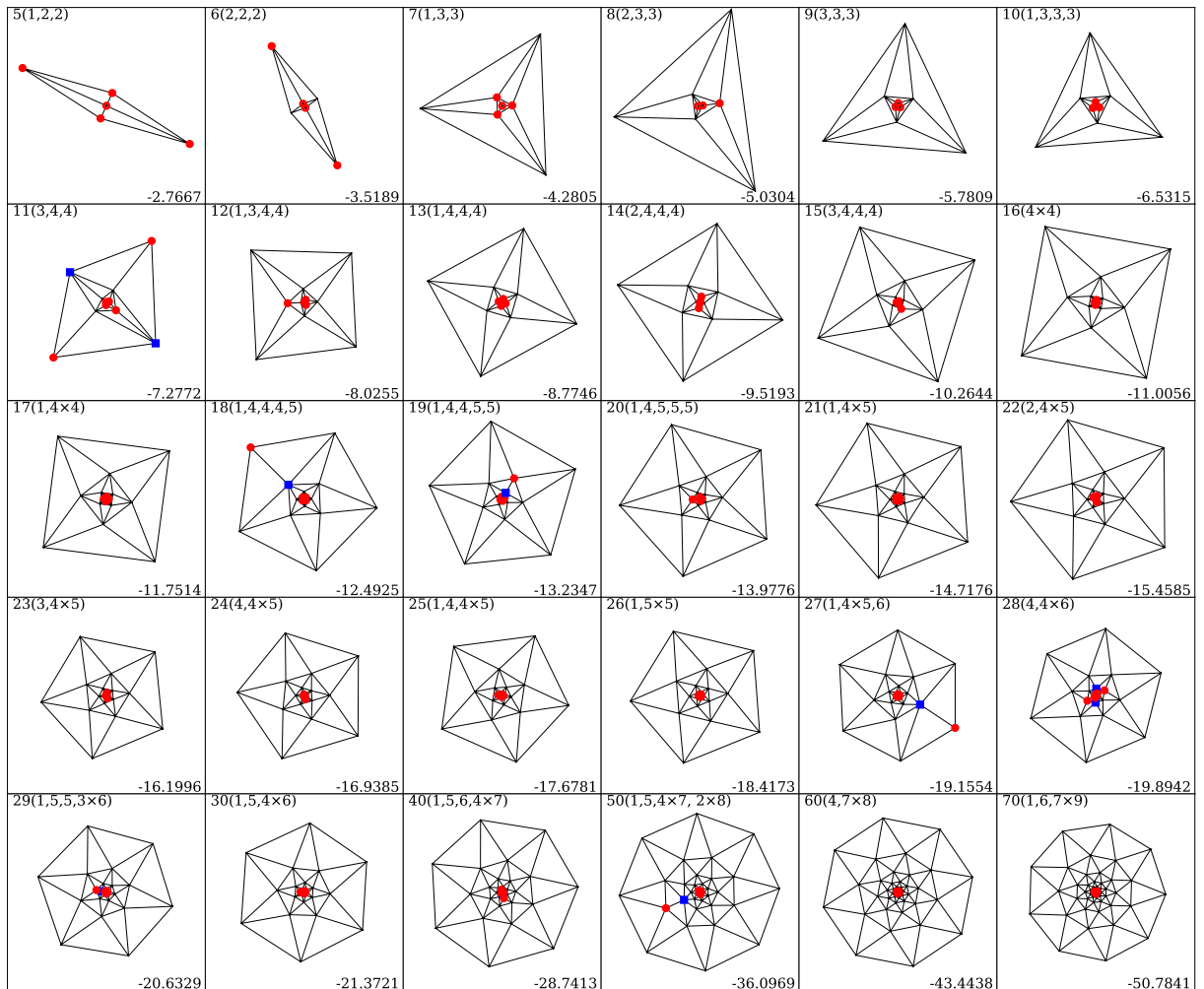
Fonte: O autor (2020)

Figura 56 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 64r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



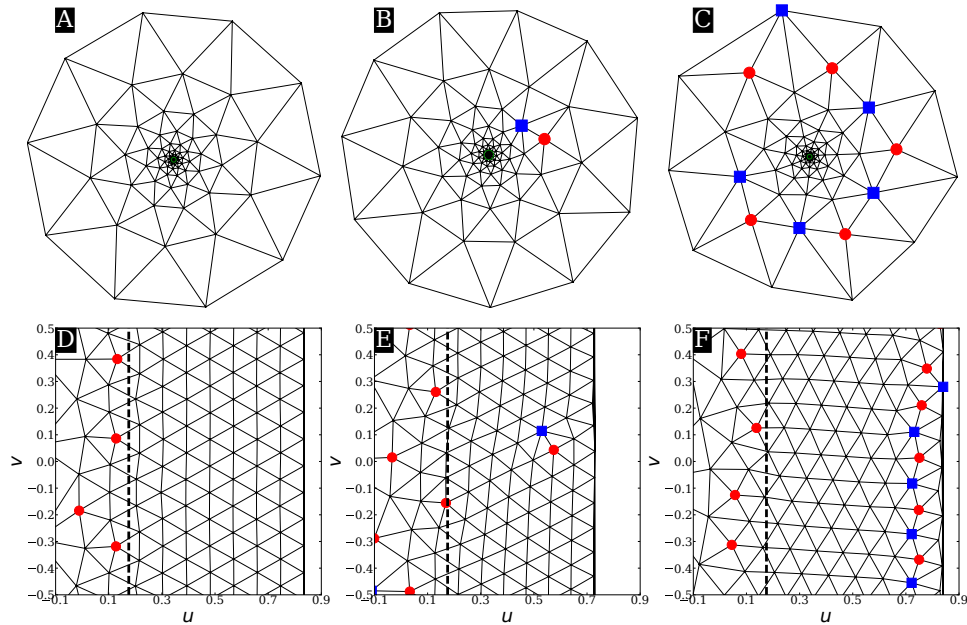
Fonte: O autor (2020)

Figura 57 – Estado de menor energia típico para diferentes valores de N com interações logarítmicas e confinada por um potencial com $R = 128r_0$. No canto superior esquerdo, apresentamos a distribuição radial das partículas formando camadas. A energia por partícula está no canto inferior direito listada abaixo de cada cluster. Os defeitos topológicos $q < 0$ ($q > 0$) são representados pelos quadrados (círculos) azul (vermelho). Símbolos cheios (vazados) correspondem a $|q| = 1$ ($|q| = 2$). Denotamos $(N_1, N_2, \dots, p \times N_c)$, onde N_k é o número de partículas na k -ésima camada e $p \times N_c$ significa p camadas contendo N_c partículas cada.



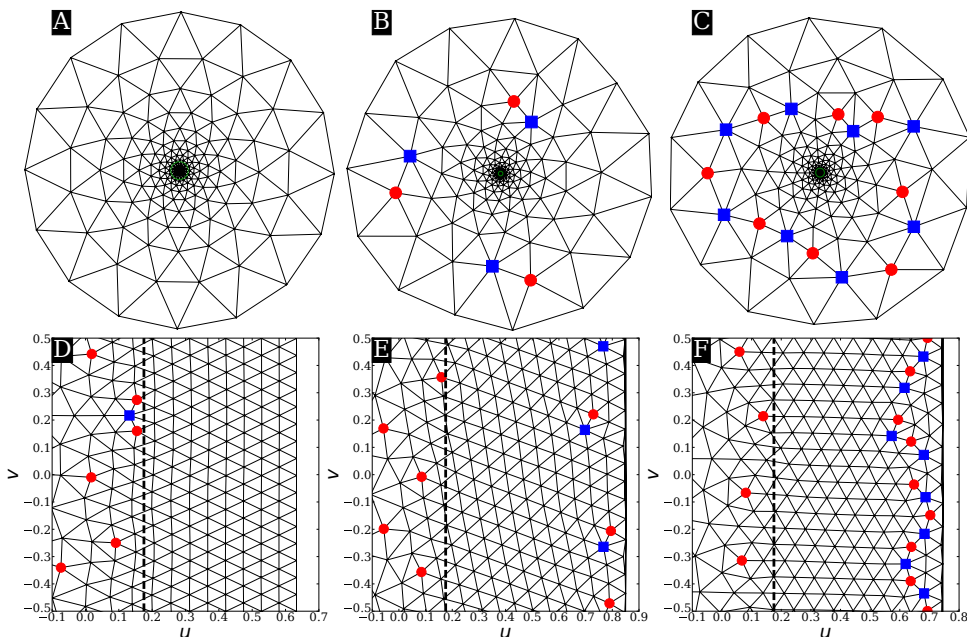
Fonte: O autor (2020)

Figura 58 – Exemplos de configurações com $N = 100$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 256r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e radial.



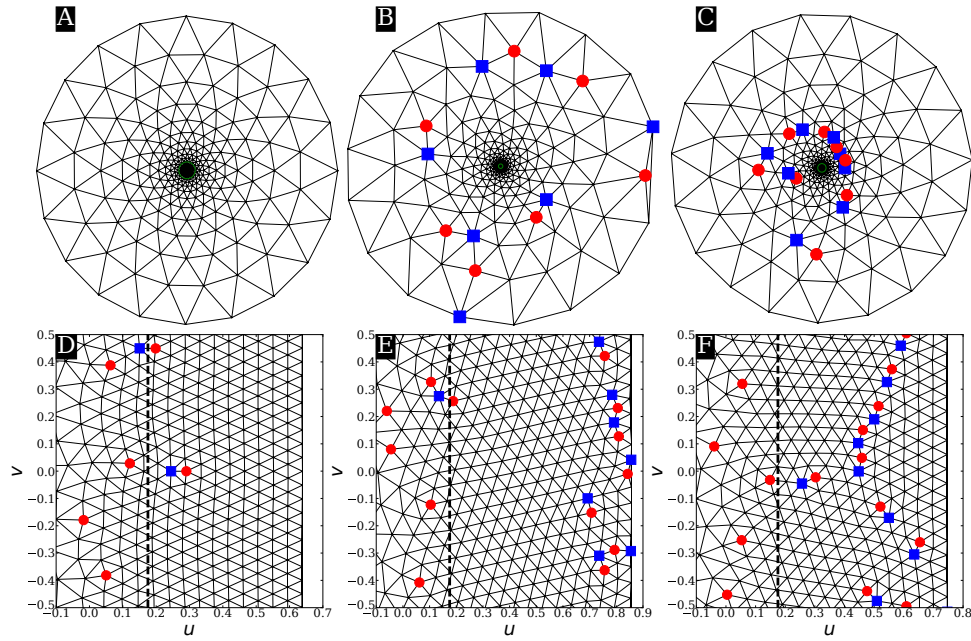
Fonte: O autor (2020)

Figura 59 – Exemplos de configurações com $N = 200$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e radial.



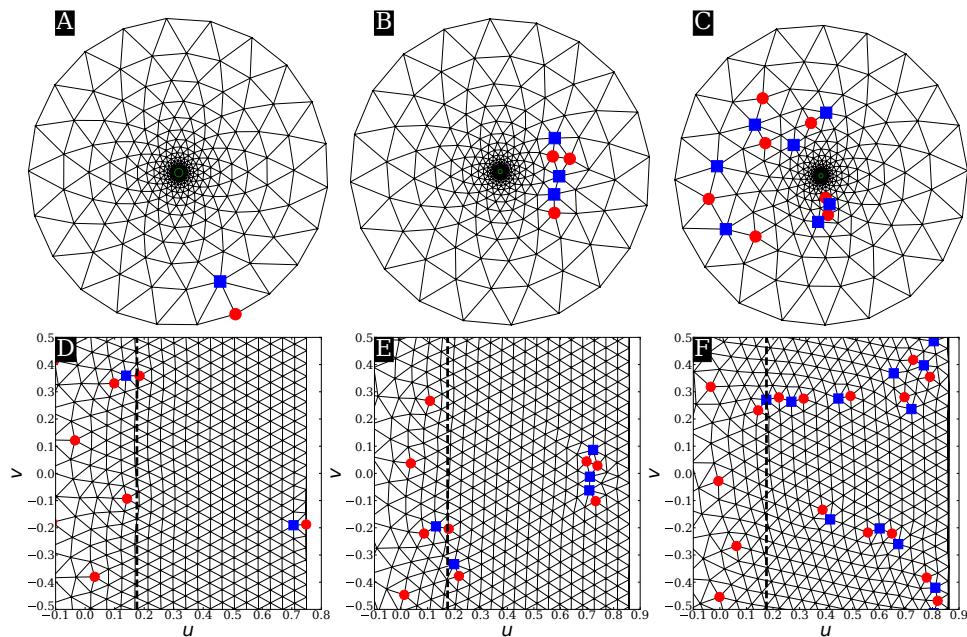
Fonte: O autor (2020)

Figura 60 – Exemplos de configurações com $N = 300$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



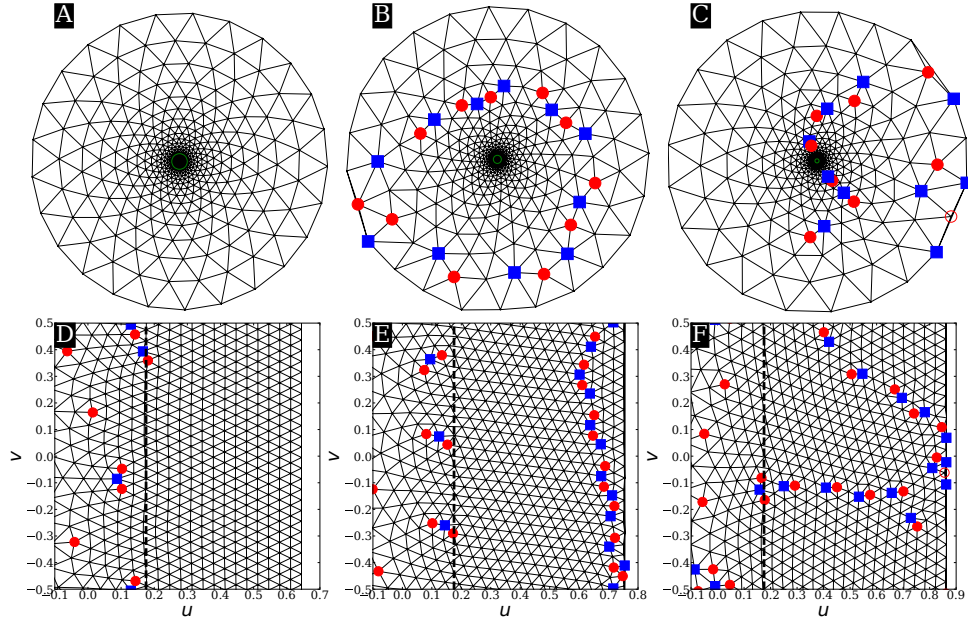
Fonte: O autor (2020)

Figura 61 – Exemplos de configurações com $N = 400$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 128r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



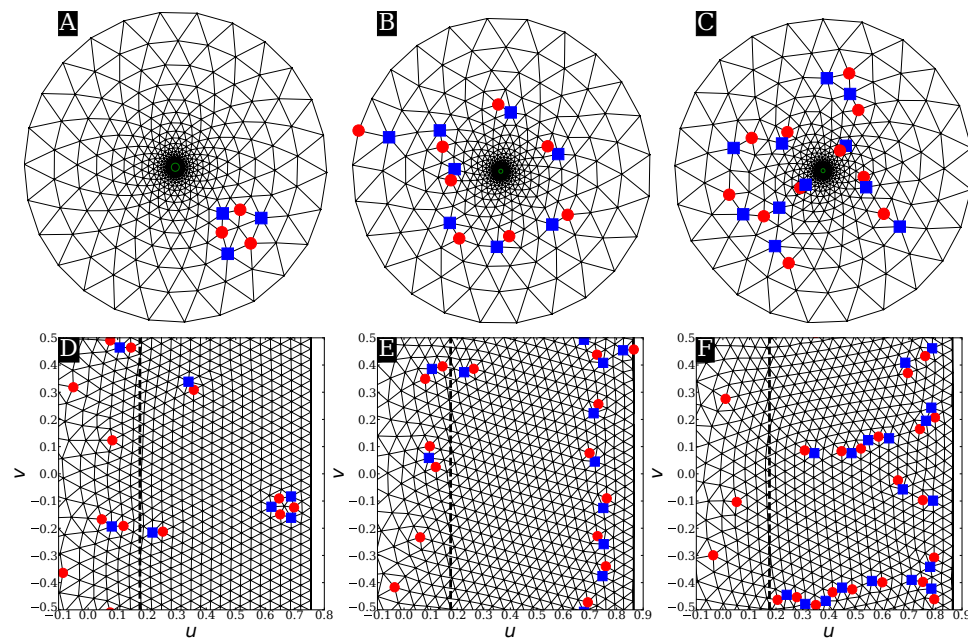
Fonte: O autor (2020)

Figura 62 – Exemplos de configurações com $N = 500$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



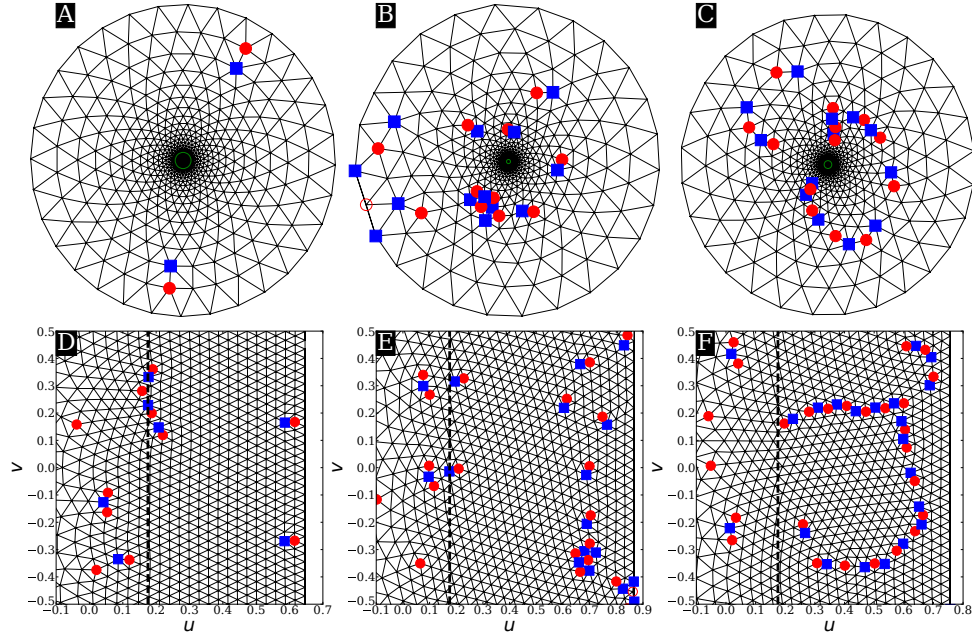
Fonte: O autor (2020)

Figura 63 – Exemplos de configurações com $N = 600$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 128r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



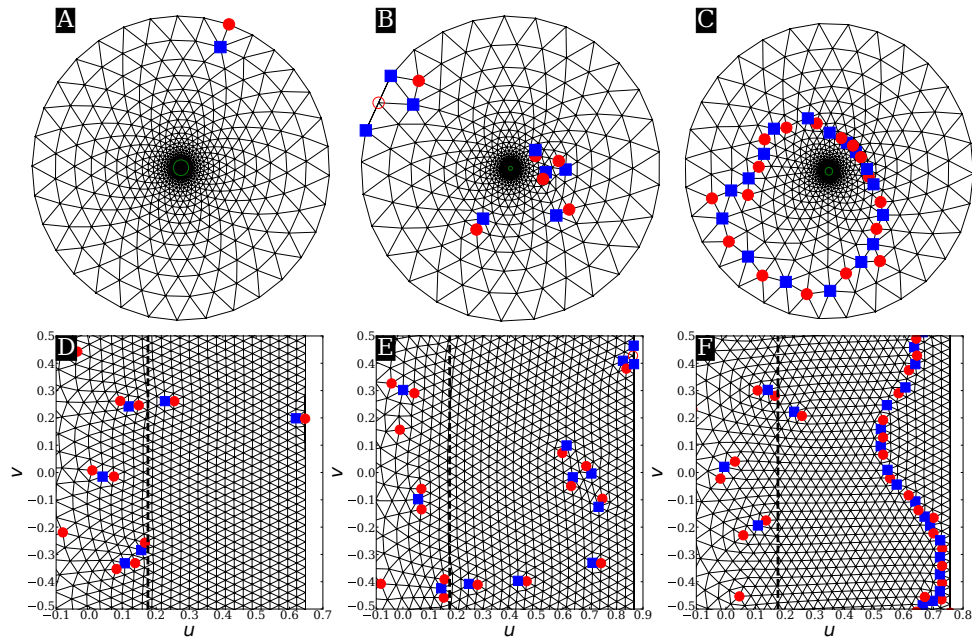
Fonte: O autor (2020)

Figura 64 – Exemplos de configurações com $N = 700$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



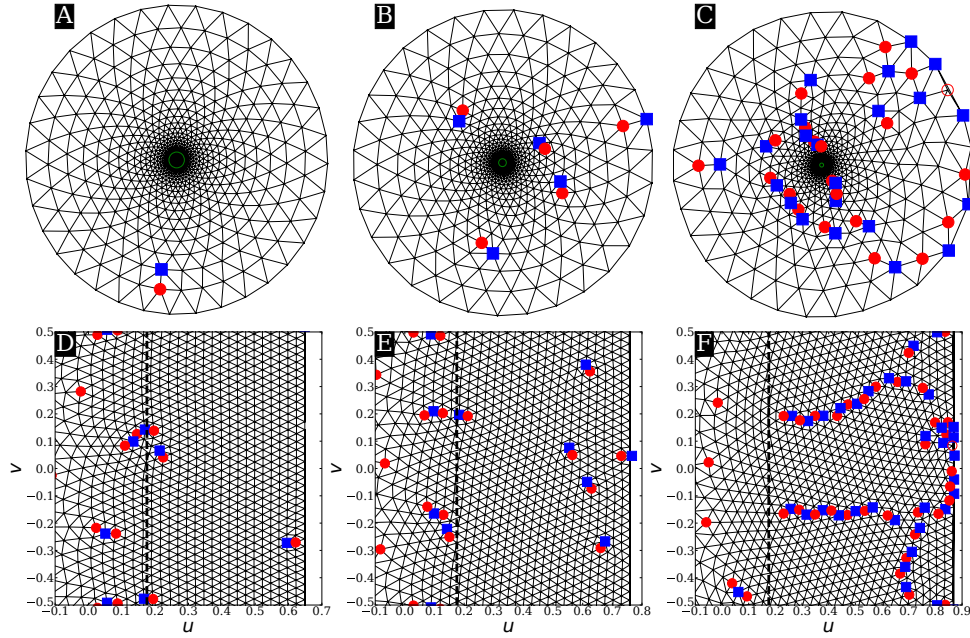
Fonte: O autor (2020)

Figura 65 – Exemplos de configurações com $N = 800$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 256r_0$, (C) $R = 128r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e radial.



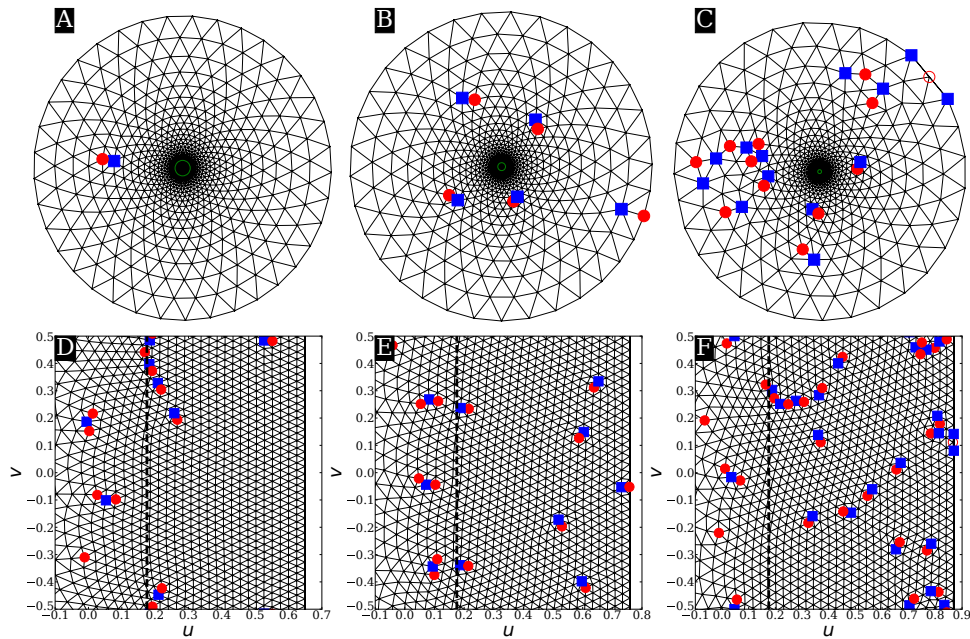
Fonte: O autor (2020)

Figura 66 – Exemplos de configurações com $N = 900$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



Fonte: O autor (2020)

Figura 67 – Exemplos de configurações com $N = 1000$ obtidos depois do processo de *annealing* para condições iniciais aleatórias para (A) $R = 64r_0$, (B) $R = 128r_0$, (C) $R = 256r_0$. Classificadas, respectivamente, como: concêntrica, quiral e policristal.



Fonte: O autor (2020)

APÊNDICE B – ARTIGO PUBLICADO

IOP Publishing

Journal of Physics: Condensed Matter

J. Phys.: Condens. Matter **32** (2020) 505401 (15pp)<https://doi.org/10.1088/1361-648X/abb0a7>

Formation and stability of conformal spirals in confined 2D crystals

Fillipe C O Silva^{1,2}, Raí M Menezes¹, Leonardo R E Cabral¹ 
and Clécio C de Souza Silva^{1,3} 

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Cidade Universitária, 50670-901, Recife-PE, Brazil

² Instituto Federal do Sertão Pernambucano, Centro, 56302-100, Petrolina-PE, Brazil

E-mail: clecio.cssilva@ufpe.br

Received 21 May 2020, revised 9 August 2020

Accepted for publication 19 August 2020

Published 23 September 2020



CrossMark

Abstract

We investigate the ground-state and dynamical properties of nonuniform two-dimensional (2D) clusters of long-range interacting particles. We demonstrate that, when the confining external potential is designed to produce an approximate $1/r^2$ density profile, the particles crystallize into highly ordered structures featuring spiral crystalline lines. Despite the strong inhomogeneity of the observed configurations, most of them are characterized by small density of topological defects, typical of conformal crystals, and the net topological charge induced by the simply-connected geometry of the system is concentrated near the cluster center. These crystals are shown to be robust with respect to thermal fluctuations up to a certain threshold temperature, above which the net charge is progressively redistributed from the center to the rest of the system and the topological order is lost. The crystals are also resilient to the shear stress produced by a small nonuniform azimuthal force field, rotating as a rigid body (RB). For larger forces, topological defects proliferate and the RB rotation gives place to plastic flow.

Keywords: conformal crystals, cluster stability, phase transitions, spirals in crystals, topological defects, 2D clusters

(Some figures may appear in colour only in the online journal)