



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Emerson José Freitas da Silva

**Padrões filotáticos e efeitos de interações de três corpos em agregados
coulombianos**

Recife

2023

Emerson José Freitas da Silva

Padrões filotáticos e efeitos de interações de três corpos em agregados coulombianos

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 (a): Clécio Clemente de Souza Silva

Recife

2023

Catálogo na fonte
Bibliotecária Nataly Soares Leite Moro, CRB4-1722

S586p Silva, Emerson José Freitas da
Padrões filotáticos e efeitos de interações de três corpos em agregados
Coulombianos / Emerson José Freitas da Silva. – 2023.
112 f.: il., fig.

Orientador: Clécio Clemente de Souza Silva.
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN, Física,
Recife, 2023.
Inclui referências e apêndice.

1. Física da matéria condensada e de materiais. 2. Cristais conformes. 3.
Partículas clássicas interagentes. 4. Interações de três corpos. I. Silva, Clécio
Clemente de Souza (orientador). II. Título.

530.41

CDD (23. ed.)

UFPE- CCEN 2023 - 159

EMERSON JOSÉ FREITAS DA SILVA

**PADRÕES FILOTÁTICOS E EFEITOS DE INTERAÇÕES DE TRÊS CORPOS EM
AGREGADOS COULOMBIANOS**

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: 30/08/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Clécio Clemente de Souza Silva
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Profa. Dra. Azadeh Mohammadi
Examinadora Interna
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Leonardo Ribeiro Eulálio Cabral
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Andrey Chaves
Examinador Externo
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Enzo Granato
Examinador Externo
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

Este trabalho é dedicado, em primeiro lugar, a todas as pessoas que perderam suas vidas durante nossa batalha contra a terrível pandemia da covid-19.

Dedico também ao meu filho, Gabriel Viana de Carvalho Freitas, a minha esposa, Danielle, que sempre me deu o apoio necessário para que esse projeto conseguisse chegar ao fim e por ao nosso pet Floquinho que acompanhou minha trajetória no doutorado.

Dedico ao meu pai, Aldemir José da Silva e em lembrança das minhas mães Lourdes Gabriel Freitas, Lindinalva José da Silva e Lindalva José da Silva.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço ao professor Clécio Clemente, por sua paciência, boa orientação e disposição para realizar pesquisa científica em Física. Agradeço também ao professor Leonardo Cabral, por todos os ensinamentos e cobranças por uma boa escrita em trabalhos acadêmicos, ensinamentos que seguirão comigo na minha trajetória científica.

Destaco meus colegas da turma da Licenciatura em Física da UFPE (2011): Thais Feliciano, Lyllian Santos, Elizael, Wellington Pedro e o parceiro da capoeira Tony. Mando um salve aos colegas de grupo: José Ferreira (o cara do acesso remoto), Raí Menezes (aquele que produz por osmose), Daniel Canavello (e seu travesseiro de reunião), Juan, Fernando, Matheus Valença (novo organizador do lab.), Rubens Henrique (o cara da ciência de rua) e Fillipe César (o professor temido). Agradecimento especial aos amigos: Felipe Octávio (o Sequela), Júlio (concurseiro do celular), Aldo Mendonça (o Motoculturista dos B.O.), Harrison Douglas (o Patão) e meus irmãos Wemerson Souza (Shunrei dos sete picos) e Wellington Moreira (o general). Agradeço ao Departamento de Física e aos órgãos de fomento por fornecerem o suporte necessário aos pós-graduandos no desenvolvimento de pesquisas científicas.

RESUMO

Apresentamos nessa tese um estudo sobre a estabilidade mecânica de sistemas de partículas clássicas interagentes confinadas por potenciais circularmente simétricos. Primeiramente, consideramos o problema de partículas coulombianas armadilhadas por um potencial que reproduz dois comportamentos de interesse: para pequenas distâncias, o potencial se comporta como um poço harmônico, enquanto que, para longas distâncias, o potencial é especialmente desenhado para produzir um perfil de densidade não uniforme mapeada por uma transformação conforme. O caso harmônico com interação de pares já foi exaustivamente investigado na literatura, especialmente no contexto de um problema clássico de Thomsom, sendo caracterizado por distribuições de partículas essencialmente uniformes e pela existência de certos números mágicos, nos quais as partículas formam estruturas mais estáveis. Já o caso conforme, tem sido investigado apenas recentemente, no contexto de partículas magnéticas confinadas, vórtices supercondutores e skyrmions magnéticos. As propriedades das estruturas conformes encontradas ainda não são completamente entendidas. Em nosso trabalho com partículas de Coulomb, obtivemos configurações de equilíbrio em $T = 0$ a partir de simulações de sistemas com número de partículas variado. De todas as configurações encontradas algumas chamam atenção pela estrutura simétrica e repetitiva que se assemelham a padrões filotáticos encontrados em algumas espécies de plantas, tais como padrões em camadas comensuráveis (decussada, tricussada, etc.) e padrões espirais. Observamos que as configurações comensuráveis dominam o diagrama de fases quando se aumenta o grau de conformidade do potencial. Analisamos em detalhes as propriedades espectrais dos modos elásticos para diferentes intensidades de confinamento conforme assim como mudanças estruturais entre as configurações comensuráveis. Posteriormente realizamos um trabalho colaborativo em que aplicamos a análise dos modos elásticos buscando compreender como os efeitos das interações de três corpos afetam a estrutura e estabilidade mecânica de sistemas de partículas clássicas 2D confinadas harmonicamente. Analisamos através do espectro de autofrequências quais modos são mais facilmente excitados nas proximidades das transições estruturais e de compactação. Um forte aumento ocorre nas autofrequências quando o sistema sofre compactação e nas transições estruturais ocorrem algumas mudanças descontínuas. Estudamos a metaestabilidade de algumas configurações a partir do comportamento da frequência mais baixa diferente de zero, assim como os modos associados a essa frequência.

Palavras-chave: física da matéria condensada e de materiais; cristais conformes; partículas clássicas interagentes; interações de três corpos.

ABSTRACT

In this thesis, we present a study on the mechanical stability of interacting classical particle systems confined by circularly symmetric potentials. First, we consider the problem of Coulomb particles trapped by a potential that reproduces two behaviors of interest: for small distances, the potential behaves like a harmonic well, while, for long distances, the potential is specially designed to produce a non-uniform density profile mapped by a conformal transformation. The harmonic case with pair interaction has already been exhaustively investigated in the literature, especially in the context of a classic Thomson problem, being characterized by essentially uniform distributions of particles and by the existence of certain magic numbers, in which particles form more stable structures. The conformal case has only recently been investigated in the context of confined magnetic particles, superconducting vortices and magnetic skyrmions. The properties of the found conformal structures are still not completely understood. In our work with Coulomb particles, we obtained equilibrium configurations at $T = 0$ from simulations of systems with varied number of particles. Of all the configurations found, some stand out due to their symmetrical and repetitive structure, which resemble phyllotactic patterns found in some plant species, such as patterns in commensurable layers (decussate, tricussate, etc.) and spiral patterns. We observe that the commensurable configurations dominate the phase diagram when the degree of conformity of the potential is increased. We analyze in detail the spectral properties of the elastic modes for different intensities of conformal confinement as well as structural changes between the measurable configurations. Subsequently, we carried out a collaborative work in which we applied elastic mode analysis in order to understand how the effects of three-body interactions affect the structure and mechanical stability of classical 2D harmonically confined particle systems. We analyzed through the eigenfrequency spectrum which modes are more easily excited near the structural and compaction transitions. A strong increase occurs in eigenfrequencies when the system undergoes compaction and in structural transitions some discontinuous changes occur. We studied the metastability of some configurations from the behavior of the lowest non-zero frequency, as well as the modes associated with this frequency.

Keywords: physics of condensed matter and materials; conformal crystals; interacting classical particles; three-body interactions.

LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 1 – Figura ilustrando a estrutura de camadas para sistemas com diferentes valores de N na primeira e quarta colunas. Na segunda e quinta coluna temos a estrutura de camada (N_0, N_1, \dots) encontradas por (PARTOENS; PEETERS, 1997) pelo modelo de Thomson. Nas colunas três e seis são mostradas as estruturas de camadas obtidas por (BEDANOV; PEETERS, 1994) pelo método de Monte Carlo. Note que, em geral, os resultados são idênticos, embora em alguns casos o resultado obtido pelo modelo de Thomson é diferente do Monte Carlo, como o caso $N = 11$.</p>	21
<p>Figura 2 – Número máximo de elétrons por camadas (ou anéis) em função de: a) Potência n do confinamento; b) Potência n' da interação.</p>	22
<p>Figura 3 – Comparação entre as energias das configurações metaestáveis para $N = 19$. Nas inserções os autores mostram as configurações para diferentes valores de κ e em d) mostra o raio da camada mais externa do aglomerado em função do parâmetro κ.</p>	24
<p>Figura 4 – Na figura da esquerda (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003) apresentam o espectro de autofrequências dos modos normais em função de κ enquanto que na direita mostram a LNF em função de κ e alguns automodos nas inserções correspondendo a modos de vórtice/antivórtice em (a) e (c), rotação intercamada em (b) e translação em (d).</p>	25
<p>Figura 5 – Gráfico dos modos de compressão e cisalhamento derivados dos autovetores associados a cada modo normal. Os autovetores apresentam sentidos dos movimentos que podem ser mensurados a partir das grandezas Ψ_r e Ψ_d para cisalhamento e compressão respectivamente. Em (a) temos interações do tipo Coulomb puro ($\kappa = 0$), em (b) o parâmetro de blindagem para interações do tipo Yukawa é $\kappa = 1$.</p>	25
<p>Figura 6 – Aparato experimental de microesferas em plasma complexo em (a) e algumas configurações em (b).</p>	26
<p>Figura 7 – Em (a) tem-se o movimento das três partículas durante o intervalo de um minuto. Em (b) estão representados os modos normais obtidos e em (c) é mostrado a densidade de potência espectral.</p>	27

Figura 8 – Em (a) tem-se a região experimental onde estão posicionados os três colóides. Em (b) é mostrado um mapa de contorno do potencial de dois corpos e (c) mostra a diferença da energia total e a contribuição de dois corpos. Os valores positivos na escala em (c) estão indicando que alguma energia em excesso existe e os autores consideram que seja uma contribuição de muitos corpos.	28
Figura 9 – Representação esquemática da filotaxia alterna-espiral. Em (a) estão representadas as folhas no caule e uma numeração foi atribuída para identificação dos nós consecutivos. Em (b) temos uma visão superior do caule; (c) mostra a separação angular entre duas folhas de nós consecutivos e em (d) temos a representação de (b) de forma mais simplificada, onde considera-se as folhas como esferas e a distância radial indica a profundidade de cada esfera.	29
Figura 10 – Fotografias das configurações de equilíbrio de gotas de ferrofluido adicionadas no aparato plano. Um campo magnético perpendicular ao plano induz o movimento das gotas para as bordas. Em (a) temos as três primeiras gotas formando um ângulo de 180 graus. Em (b) vemos a formação da espiral generativa com ângulo φ entre duas gotas consecutivas. Em (c) temos outra forma de descrição das espirais, onde temos cinco espirais em uma direção e oito no sentido oposto, esses números são termos consecutivos da sequência de <i>Fibonacci</i>	30
Figura 11 – Filotaxia verticilada em (a) e suas representações planificadas: (b) com as folhas e em (c) representação simplificada onde as folhas são substituídas por esferas e a profundidade é representada pelos raios dos círculos.	31
Figura 12 – Exemplos de flores verticiladas para dois gêneros de Ranunculaceae, Anemone e Eranthis analisadas por (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020). Ilustramos os padrões (a) Decussada, (b) Tricussada, (c) Tetracussada e (d) Pentacussada.	32
Figura 13 – Simetrias possíveis em padrões filotáticos. Em (a) tem-se a simetria de reflexão pura, (b) translação pura, (c) rotação pura, (d) Saca-rolhas (rotação + translação e (e) reflexão deslizante (reflexão + translação).	33
Figura 14 – Classificação das simetrias presentes nas filotaxias alternada e verticilada.	34
Figura 15 – Configuração de equilíbrio para $N = 3$ e interação coulombiana. Os modos normais estão representados com suas autofrequências na ordem crescente.	40

Figura 16 – Figura contendo o espectro das autofrequências em função do número de partículas do sistema em (a), e a densidade de estados em (b). As partículas estão aprisionadas por um confinamento harmônico e interagem por um potencial de pares coulombiano.	41
Figura 17 – Decomposição em modos de compressão e cisalhamento dos automodos do sistema com $N = 200$ partículas coulombianas confinadas por um potencial harmônico. As grandezas Ψ_r e Ψ_d fornecem uma estimativa do movimento rotacional (cisalhamento) e radial (compressão) dos modos normais, respectivamente. Perceba que esse resultado é idêntico ao apresentado na Fig. 5(a), extraída da referência (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003).	43
Figura 18 – Regiões nos planos z (esquerda) e w (direita). A função analítica $f(z)$ transforma elementos de $\Gamma(z)$ em elementos de $\Gamma(w)$	44
Figura 19 – Dois exemplos de redes hexagonais no espaço w , em (a) temos uma rede concêntrica e em (b) uma rede radial.	46
Figura 20 – Representação dos tipos de redes nos planos w e z . As redes são: concêntricas(A e F), quiral-direita(B e G), radial(C e H), quiral-esquerda (D e I). Em (E) tem-se um mapa indicando os valores do ângulo β que forma os tipos de redes.	47
Figura 21 – Gráfico do potencial de três corpos em função da distância $R = \sqrt{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2}$ para alguns valores de k_3 e ξ . As distâncias estão definidas em unidades de r_0 e o potencial está denotado por U_{3b}	49
Figura 22 – Gráficos de grandezas em função do parâmetro de três corpos para o caso $N = 3$. Em a) Temos o raio da camada formada pelo triângulo equilátero representado pelas linhas sólidas e as estrelas representando dados simulados para o caso Logarítmico, em b) mostramos a energia por partícula, E/N , para os três tipos de interação de pares. Em c) temos o deslocamento generalizado em função de k_3	52
Figura 23 – Energia do sistema com $N = 3$ partículas e interação logarítmica para $k_2 = 3$ e diferentes valores de k_3 . A energia apresenta um único mínimo para $k_3 = 7$ e dois mínimos para os casos com $k_3 = \{12, 14\}$. Para o maior valor de k_3 o mínimo que surge se torna global.	54

Figura 24 – Mapa de calor das soluções de equilíbrio no plano (k_2, k_3) para o caso $N = 3$ interagindo por potencial de pares logarítmico. O mapa apresenta dois estados de solução única (configurações compactadas e não compactadas), além de uma região de biestabilidade que contém os dois tipos de solução.	55
Figura 25 – Espectro das autofrequências para o aglomerado com $N = 3$ interagindo por potencial de pares logarítmico em duas situações: a) $k_2 = 1.0$ e b) $k_2 = 2.0$. Na parte inferior temos o deslocamento generalizado para as duas situações.	56
Figura 26 – Energia e raio em função de k_3 para os aglomerados com número de partículas $N = [3 - 8]$ com interação de pares logarítmica.	58
Figura 27 – Menor frequência não nula (LNF) para o aglomerado com $N = 5$ e interação entre pares logarítmica para $k_2 = 1.2$, com seus autovetores associados. As curvas da LNF dos estados metaestáveis em cores mais claras.	59
Figura 28 – Gráficos da energia em função do raio R da camada para o sistema com $N = 8$ partículas: (a) com confinamento e (b) sem confinamento. Perceba que um mínimo local surge em (b) para valores de $k_3 > 0.70$ (cores mais avermelhadas), indicando uma possível autosustentabilidade do aglomerado mesmo sem confinamento externo.	60
Figura 29 – Curvas de máxima suscetibilidade no plano (N, k_3) para os três tipos de interação de pares. Os pontos vazados/preenchidos representam compactação suave/abrupta.	61
Figura 30 – Densidade de partículas em (a) e Deslocamento generalizado em (b) em função do número de partículas para os três tipos de interação de pares e valor de $k_3 = 0.3$.	62
Figura 31 – Configuração para o número mágico $N = 19$ em função de k_3 para os três tipos de interação de pares, (a) Logaritmo, (b) Coulomb e (c) Yukawa.	63
Figura 32 – Espectro dos modos normais do número mágico $N = 19$ em função de k_3 para o potencial de interação de pares coulombiano.	64
Figura 33 – Gráfico comparativo da força e potencial parabólico e conforme. Na inserção superior mostramos o erro percentual na força conforme com relação ao caso parabólico.	71

- Figura 34 – Configurações de equilíbrio na aproximação harmônica $\mathcal{R} = 0.3$ para sistemas com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 70$. Os aglomerados foram representados por linhas que conectam as partículas vizinhas. Partículas que possuem número de vizinhos iguais a $\{5, 6, 7\}$ estão representadas por círculos vermelhos, sem representação e quadrados azuis respectivamente. Na parte superior esquerda de cada quadro está denotado o número de partículas e entre parênteses tem-se a estrutura de camadas da configuração. Na região inferior direita temos a energia da configuração. 74
- Figura 35 – Espectro das autofrequências das configurações com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$. A figura do lado direito corresponde à densidade de estados das autofrequências para os casos harmônico e quase harmônico. 75
- Figura 36 – Número de partículas acumulado em função da distância radial para um aglomerado com $N = 100$ partículas e parâmetro de confinamento $\mathcal{R} = 64$. Na inserção temos o aglomerado com número de partículas $N = 100$ no plano (x, y) 76
- Figura 37 – Configurações obtidas para confinamento conforme. O número de partículas varia entre $N = [5, 10]$ e a região de confinamento é de $\mathcal{R} = [1, 512]$ 78
- Figura 38 – Configurações cujo mapeamento exhibe redes concêntrica, radial e quiral. A linha superior é a representação no espaço z e a linha de baixo as respectivas configurações no espaço w 79
- Figura 39 – Diagrama de fases de todas as configurações obtidas para $\mathcal{R} \in [1, 512]$, onde das 260 configurações simuladas 100 são . Registramos as quantidades: 22 *Decussada*, 45 *Tricussada*, 29 *Tetracussada* e 4 *Pentacussada*. Representamos as configurações sem classificação com a cor branca (sem preenchimento), enquanto que as configurações verticiladas são preenchidas com o número de partículas por camada, N_s . As configurações radiais/-concêntricas foram representadas pela cor azul/vermelho. Representamos as configurações completas pelas cores mais intensas, enquanto que as configurações incompletas são representadas pela tonalidade mais clara. 80
- Figura 40 – Comparação entre as energias das configurações idealizadas $(0, 5)$ e $(1, 4)$ para diferentes graus de anarmonicidade \mathcal{R} do potencial confinador. Na inserção mostramos a diferença de energia entre o quadrado centrado e o pentágono. 82

Figura 41 – Em (a) temos uma triangulação de Delaunay da configuração com $N = 21$ partículas (pontos pretos) na região $\mathcal{R} = 128$ formando um padrão do tipo Tricussada. (b) Gráfico da distância radial das partículas em função do ângulo azimutal. Em (c) mostramos a configuração Tricussada no espaço conforme cuja rede é do tipo radial. Em (d) utilizamos a periodicidade da variável angular para agrupar as partículas de cada espiral a fim de obter os coeficientes da reta de ajuste. Com os coeficientes da reta representamos as espirais em (a), (b) e (c), além das retas de ajuste em (d).	83
Figura 42 – Configurações Configurações Verticiladas Completas (CVC) com suas respectivas curvas espirais obtidas pela regressão linear no espaço conforme. Todas as configurações correspondem ao confinamento com $\mathcal{R} = 32$, onde temos estruturas Decussada ($N = 8$), Tricussada ($N = 18$), Tetracussada ($N = 13$) e Pentacussada ($N = 16$).	85
Figura 43 – Histograma do parâmetro q calculado para todas as configurações CVC encontradas. As linhas verticais indicam os valores das redes hexagonais concêntrica (azul) e radial (verde).	86
Figura 44 – Espectro de autofrequências dos modos normais para sistemas com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$ e diferentes valores de \mathcal{R} . Destacamos as autofrequências do aglomerado com $N = 21$ partículas para $\mathcal{R} = 128$ e $\mathcal{R} = 256$	86
Figura 45 – Esquerda: Espectro de autofrequências dos modos normais para sistemas com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$, $\mathcal{R} = 128$ e $\mathcal{R} = 256$. Direita: Quatro autovetores com maior autofrequência Ω . A e B representam as configurações Tricussada ($\mathcal{R} = 128$) e Tetracussada ($\mathcal{R} = 256$) respectivamente.	87
Figura 46 – Gráfico da menor frequência não nula (LNF) em função do número de partículas para o confinamento $\mathcal{R} = 128$. Inserções com alguns autovetores mostram o tipo de movimento coletivo associado.	89
Figura 47 – Representação esquemática de uma configuração em quartetos.	91
Figura 48 – Raio das camadas de uma configuração decussada gerada para diferentes parâmetros q da espiral.	94

Figura 49 – Gráfico de grandezas em função do parâmetro \mathcal{R} . Em (a) temos a distancia radial de cada partícula, onde a curva preta indica uma configuração CVC com $N_s = 2$ até o limite superior próximo de $\mathcal{R} = 339$ (limite superior da região III). Similarmente temos as distancias radiais para a configuração CVC com $N_s = 3$ permanecendo na região III até seu limite inferior $\mathcal{R} = 79.5$. Cada região foi representada com configurações ilustrativas associadas como pode ser visto em (b). Mostramos em (b) um parâmetro que permitiu identificar os limites superior (para as duplas) e inferior (para os trios) e consequentemente a região de coexistência entre as fases.	96
Figura 50 – Mostramos em (a) o gráfico da energia por partícula em função do parâmetro \mathcal{R} para resultados de simulação (linhas preta e vermelha) e do modelo CVC (linhas verde e magenta). As linhas tracejadas verticais na cor azul delimita a região de coexistência das fases decussada ($0,5 \times 2$) e tricussada ($1,3 \times 3$). Na inserção mostramos a diferença de energia entre as configurações e a menor energia entre as duas fases. A linha tracejada vertical cinza separa as regiões em que as fases decussada e tricussada são energeticamente mais favoráveis, ou seja, antes da linha a fase decussada é de menor energia, enquanto que na região à direita da linha a fase tricussada é a fase de menor energia. Em (b) representamos o espectro das autofrequências (ω) das fases simuladas nas respectivas regiões em que são energeticamente mais favoráveis, ou seja, antes da linha cinza temos a fase decussada e após a linha cinza temos a fase tricussada.	97
Figura 51 – Menor frequência não nula Lowest Non zero Frequency (LNF) em função do parâmetro \mathcal{R} . O modo mais baixo sofre um decaimento indicando que a configuração está sofrendo uma mudança estrutural. Nas inserções apresentamos os autovetores associados para alguns valores de \mathcal{R} . As linhas tracejadas cinzas indicam as transições estruturais e as linhas na cor azul delimitam a região de coexistência das fases CVC (Decussada e Tricussada).	98
Figura 52 – Configurações para $N \in [11, 15]$	109
Figura 53 – Configurações para $N \in [16, 20]$	110
Figura 54 – Configurações para $N \in [21, 25]$	111
Figura 55 – Configurações para $N \in [26, 30]$	112

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CV	Configurações Verticiladas
CVC	Configurações Verticiladas Completas
CVI	Configurações Verticiladas Incompletas
DOS	Densidade de Estados
LNf	Lowest Non zero Frequency
MD	Matriz Dinâmica
MNV	Modos Normais de Vibração

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	AGLOMERADOS DE PARTÍCULAS CLÁSSICAS E O PROBLEMA DE THOMSON	20
1.2	PADRÕES FILOTÁTICOS NA NATUREZA	28
1.3	ORGANIZAÇÃO DA TESE	34
2	TEORIA DOS MODOS NORMAIS E MAPEAMENTO CONFORME	35
2.1	<i>PROPRIEDADES MECÂNICAS DE SISTEMAS CONFINADOS HARMONICAMENTE</i>	39
2.1.1	Modos elásticos e simetria do confinamento	39
2.1.2	Sistemas grandes	41
2.2	<i>MAPEAMENTO CONFORME PARA DENSIDADE NÃO UNIFORME</i>	43
3	EFEITOS DE TRÊS CORPOS NAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ESPECTRAIS DE AGLOMERADOS DE COULOMB CONFINADOS	48
3.1	POTENCIAL DE TRÊS CORPOS E SUAS CONTRIBUIÇÕES PARA A MATRIZ DINÂMICA	48
3.2	SISTEMAS COM UMA ÚNICA CAMADA	51
3.2.1	Transição de compactação para pequenos aglomerados	53
3.2.2	Transições estruturais e autosustentabilidade	57
3.3	SISTEMAS COM MÚLTIPLAS CAMADAS	60
3.3.1	Estabilidade de configurações mágicas	62
4	AGLOMERADOS COM DENSIDADES NÃO UNIFORMES	66
4.1	CÁLCULO DO POTENCIAL CONFINADOR E MATRIZ DINÂMICA	66
4.1.1	Confinamento com interação tipo Coulomb	68
4.1.2	<i>Matriz dinâmica para confinamento conforme coulombiano</i>	70
4.1.3	<i>Confinamento com interação do tipo Yukawa</i>	72
4.2	<i>RESULTADOS PARA APROXIMAÇÃO HARMÔNICA</i>	73
4.3	<i>CONFINAMENTO CONFORME ($\mathcal{R} > 0.3$)</i>	76
4.3.1	<i>Sistemas com uma camada</i>	81
4.3.2	<i>Configurações Verticiladas Completas</i>	82

4.4	<i>MODELO DE CONFIGURAÇÕES VERTICILADAS COMPLETAS</i>	89
4.4.1	Modelando as configurações hexagonais	93
4.5	<i>TRANSIÇÃO DE FASE ESTRUTURAL ENTRE CONFIGURAÇÕES FILO- TÁTICAS COMPLETAS</i>	94
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	101
	REFERÊNCIAS	103
	APÊNDICE A – CONFIGURAÇÕES OBTIDAS PARA CONFINA- MENTO CONFORME DE PARTÍCULAS COU- LOMBIANAS	109

1 INTRODUÇÃO

Ninguém ouviu, um soluçar de dor no canto do Brasil. Um lamento triste sempre ecoou, desde que o índio guerreiro foi pro cativo e de lá cantou: Negrotoô, um canto de revolta pelos ares, do quilombo dos palmares, onde se refugiou, ...

letra: Paulo César Pinheiro,
eternizada por Clara Nunes

Aglomerados de partículas clássicas confinadas em duas dimensões podem ser encontrados em vários sistemas físicos. Nos casos em que essas partículas são elétrons podemos ter comportamentos distintos com relação a razão entre as energias cinética e potencial do aglomerado. Wigner (WIGNER, 1934) mostrou que elétrons em um sistema tridimensional podem se equilibrar em posições ordenadas para certos valores da densidade e temperatura, ou seja, alta densidade e baixa temperatura. A estrutura eletrônica dos elétrons no regime clássico é afetada por efeitos de correlação quando a energia de interação coulombiana é da ordem da energia cinética do sistema e a importância da interação depende do parâmetro $\Gamma \equiv \frac{\langle E_{pot} \rangle}{\langle E_{cin} \rangle}$, em que o comportamento segue diferentes regimes. A média da energia cinética está relacionada com a temperatura do sistema e pode ser aproximada por $\langle E_c \rangle \approx k_B T$, enquanto que a energia potencial é dada por $\langle E_p \rangle \approx e^2 \langle 1/r \rangle$. Se o sistema apresenta alta temperatura, então a energia cinética domina o comportamento (PEETERS, 1997), pois $\Gamma < 1$ e o sistema se comporta como um gás de férmions. Quando $1 < \Gamma < 100$ existe uma correlação entre os elétrons e o sistema se comporta como um líquido e quando $\Gamma > 100$ significa que o sistema apresenta baixa temperatura e alta densidade de tal modo que uma forte correlação elétron-elétron domina o sistema levando-o a um estado ordenado, também conhecido como cristal de Wigner. Outros sistemas também exibem esse tipo de ordenamento, como os elétrons no interior de pontos quânticos sob campo magnético (REIMANN; MANNINEN, 2002), elétrons suspensos em superfície de hélio líquido (GRIMES; ADAMS, 1979), cristais em plasma confinado (CHU; LIN, 1994), suspensão coloidal (BUBECK et al., 1999), vórtices em supercondutores mesoscópicos

(CARLSTRÖM; GARAUD; BABAEV, 2011), (WOLF et al., 2017). Embora sejam sistemas diferentes, algumas propriedades são comuns nesses sistemas devido ao ordenamento que assumem.

Algumas dessas propriedades serão apresentadas na próxima seção com o objetivo de ganharmos familiaridade e podermos comparar com os resultados desenvolvidos em nossa pesquisa, apresentados nos capítulos 3 e 4. Em seguida discutiremos outro tipo de ordenamento que ocorre principalmente em plantas e servirá como base para a classificação das estruturas obtidas no capítulo 4.

1.1 AGLOMERADOS DE PARTÍCULAS CLÁSSICAS E O PROBLEMA DE THOMSON

Partículas repulsivas aprisionadas para formar aglomerados clássicos tem sido objeto de estudo teórico e experimental a bastante tempo. O conhecimento acumulado sobre esses sistemas encontra interseções com o estudo das distribuições de elétrons no átomo do modelo "pudim de ameixas" de Thomson (THOMSON, 1904). Resultados utilizando o modelo de Thomson foram obtidos por (PARTOENS; PEETERS, 1997) com objetivo de compará-los com resultados de simulações de Monte Carlo para um sistema de partículas coulombianas confinadas por potencial harmônico (BEDANOV; PEETERS, 1994).

Dado um número de partículas, N , (PARTOENS; PEETERS, 1997) distribuíram as partículas em camadas, onde cada camada m continha uma quantidade de partículas N_m . A estrutura de camadas do aglomerado é comumente representada pela notação (N_0, N_1, \dots) , sendo N_1, N_2, \dots os números de partículas nas camadas 1, 2, \dots , respectivamente e N_0 representa o número de partículas no centro, podendo ser $N_0 = 1$ ($N_0 = 0$) se existir (ou não) partícula central. A soma das quantidades de partículas de todas as camadas corresponde ao número total de partículas no sistema, ou seja, $N = N_0 + N_1 + \dots$. Para cada camada existe um número máximo de partículas de tal forma que acrescentar partículas além da quantidade máxima permitida torna a configuração instável. Nas configurações estáveis as N partículas se estabilizam em posições de equilíbrio de tal forma que, pequenas perturbações provocam oscilações coletivas com mesma frequência, ω , em torno das posições de equilíbrio. Esses movimentos são chamados de Modos Normais de Vibração (MNV) do sistema e para partículas confinadas por potencial com simetria radial, o modo normal com frequência nula ($\omega = 0$) corresponde ao modo de rotação de corpo rígido.

Considerando isso (PARTOENS; PEETERS, 1997) determinaram as configurações de equilíbrio através desse critério dos modos normais e o modelo reproduziu de maneira satisfatória

as estruturas de camadas encontradas por (BEDANOV; PEETERS, 1994). Mostramos na Fig. 1 o comparativo entre as estruturas de camadas obtidas por (PARTOENS; PEETERS, 1997) e (BEDANOV; PEETERS, 1994) para diferentes quantidades de partículas N . Algumas configura-

Figura 1 – Figura ilustrando a estrutura de camadas para sistemas com diferentes valores de N na primeira e quarta colunas. Na segunda e quinta coluna temos a estrutura de camada (N_0, N_1, \dots) encontradas por (PARTOENS; PEETERS, 1997) pelo modelo de Thomson. Nas colunas três e seis são mostradas as estruturas de camadas obtidas por (BEDANOV; PEETERS, 1994) pelo método de Monte Carlo. Note que, em geral, os resultados são idênticos, embora em alguns casos o resultado obtido pelo modelo de Thomson é diferente do Monte Carlo, como o caso $N = 11$.

N	Thomson	Monte Carlo	N	Thomson	Monte Carlo
1	1	1	26	3, 9, 14	3, 9, 14
2	2	2	27	4, 9, 14	4, 9, 14
3	3	3	28	4, 10, 14	4, 10, 14
4	4	4	29	5, 10, 14	5, 10, 14
5	5	5	30	5, 10, 15	5, 10, 15
6	1, 5	1, 5	31	5, 11, 15	5, 11, 15
7	1, 6	1, 6	32	1, 5, 11, 15	1, 5, 11, 15
8	1, 7	1, 7	33	1, 6, 11, 15	1, 6, 11, 15
9	2, 7	2, 7	34	1, 6, 12, 15	1, 6, 12, 15
10	2, 8	2, 8	35	1, 6, 12, 16	1, 6, 12, 16
11	2, 9	3, 8	36	1, 7, 12, 16	1, 6, 12, 17
12	3, 9	3, 9	37	2, 7, 12, 16	1, 7, 12, 17
13	4, 9	4, 9	38	2, 7, 13, 16	1, 7, 13, 17
14	4, 10	4, 10	39	2, 8, 13, 16	2, 7, 13, 17
15	5, 10	5, 10	40	2, 8, 13, 17	2, 8, 13, 17
16	5, 11	1, 5, 10	41	2, 9, 13, 17	2, 8, 14, 17
17	1, 5, 11	1, 6, 10	42	3, 9, 13, 17	3, 8, 14, 17
18	1, 6, 11	1, 6, 11	43	3, 9, 14, 17	3, 9, 14, 17
19	1, 6, 12	1, 6, 12	44	4, 9, 14, 17	3, 9, 14, 18
20	1, 7, 12	1, 7, 12	45	4, 9, 14, 18	3, 9, 15, 18
21	2, 7, 12	1, 7, 13	46	4, 10, 14, 18	4, 9, 15, 18
22	2, 7, 13	2, 8, 12	47	5, 10, 14, 18	4, 10, 15, 18
23	2, 8, 13	2, 8, 13	48	5, 10, 15, 18	4, 10, 15, 19
24	2, 9, 13	3, 8, 13	49	5, 11, 15, 18	4, 10, 15, 20
25	3, 9, 13	3, 9, 13	50	1, 5, 11, 15, 18	4, 10, 16, 20

Fonte: Adaptado de (PARTOENS; PEETERS, 1997)

rações embora não correspondam ao resultado "exato" são configurações metaestáveis, pois são estáveis mecanicamente, mas sua energia é maior que o estado de energia mais baixa (ou estado fundamental).

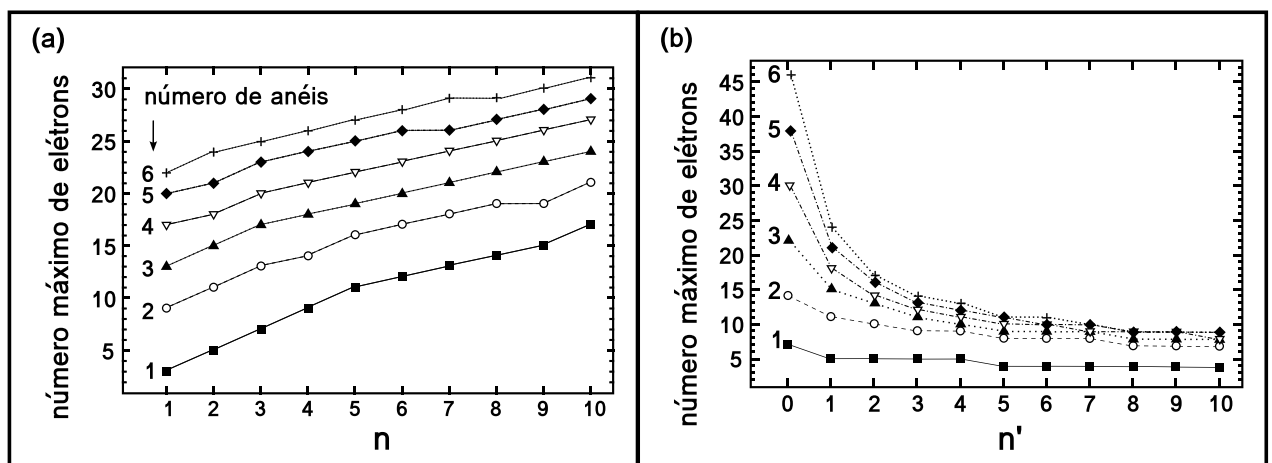
Para generalizar o modelo de Thomson, (PARTOENS; PEETERS, 1997) assumem leis de potência, r^n e $1/r^{n'}$, para os potenciais de confinamento e de interação, respectivamente. O

hamiltoniano para esses potenciais se torna, portanto

$$H \propto \sum_i r_i^n + \sum_{j>i} r_{ij}^{-n'} \quad (1.1)$$

Observaram com esse modelo mais geral que somente no caso harmônico ($n = 2$) a estabilidade das configurações não depende da velocidade de rotação de corpo rígido, além de identificarem que o número de elétrons nas camadas aumenta proporcionalmente com n e inversamente com n'^1 , como pode ser visto nas Figs. 2(a) e 2(b), respectivamente.

Figura 2 – Número máximo de elétrons por camadas (ou anéis) em função de: a) Potência n do confinamento; b) Potência n' da interação.



Fonte: Adaptado de (PARTOENS; PEETERS, 1997)

Ainda conseguiram identificar que três modos² são independentes da quantidade de partículas do aglomerado para o caso harmônico e que o modo com autofrequência nula é consequência da simetria axial do sistema. Perceberam que o modo de respiração possui autofrequência dependente do tipo de interação, ou seja, $\omega_{respiração} = \sqrt{2(2 + n')}$. Observe que mesmo esse modelo "superado" no contexto da descrição da estrutura atômica, ele é um bom modelo dentro do regime de partículas clássicas confinadas, mostrando com isso que o conhecimento científico não é descartado simplesmente, mas sim aprimorado por modelos e teorias que além de reproduzir os resultados já conhecidos, explica questões em aberto pelo modelo anterior, possibilitando assim uma falseabilidade e verificação dessas novas respostas fornecidas pelo modelo atual. Outro detalhe importante é a relevância do critério de estabilidade que utilizou o conceito de MNV. No contexto de sistemas contínuos as propriedades dinâmicas do sistema são obtidas pelo estudo dos espectros das ondas propagadas no meio, para sistemas

¹ Os autores associaram $n' = 0$ ao potencial de interação logarítmico.

² Modos associados aos movimentos coletivos de rotação de corpo rígido, translação e respiração.

finitos e discretos essas propriedades são capturadas pelos MNV do sistema e representam uma ferramenta de análise muito relevante.

Embora muitas investigações desses sistemas de partículas interagentes foram realizadas considerando vários tipos de confinamento, sem dúvidas o caso harmônico foi o mais explorado uma vez que computacionalmente seja mais simples de implementá-lo e fisicamente ele é uma boa aproximação para o potencial de Coulomb gerado por uma carga positiva, Ze , deslocada perpendicularmente do plano dos elétrons 2D (sistema modelo para átomos clássicos bidimensionais) (FERREIRA; PEETERS; FARIAS, 2003). Um dos trabalhos mais relevantes no contexto dos modos normais de partículas coulombianas em confinamento parabólico foi realizado por (SCHWEIGERT; PEETERS, 1995), onde constataram que os aglomerados que se organizavam em camadas comensuráveis³ (também conhecidos como números mágicos) seriam mais estáveis em relação à rotação intercamadas, pois sua menor frequência não nula, LNF, assume valores maiores para aglomerados parcialmente⁴ ou totalmente comensuráveis. Vários resultados relevantes foram obtidos, como o espectro de frequência dos MNV, Densidade de Estados (DOS), temperatura de derretimento dentre outras propriedades. Investigações envolvendo sistemas que possuem alcances de interação menores também foram realizados. (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003) estudaram partículas com interação de pares do tipo Yukawa, ou Coulomb blindado, onde o hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \sum_i r_i^2 + \sum_{j>i} \frac{e^{-\kappa r_{ij}}}{r_{ij}}, \quad (1.2)$$

e o parâmetro $\kappa = 1/\lambda_D$ tem dimensão de inverso de distância estando associado a um comprimento de alcance do potencial λ_D . Note que se $\kappa = 0$ o comprimento característico seria "infinito" que corresponde ao caso Coulomb puro. (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003) avaliaram algumas propriedades sobre fusão e defeitos induzidos pela geometria em função de κ e verificaram que aumentar κ transforma a configuração de camadas concêntricas em uma rede de Wigner (WIGNER, 1934) como pode ser visto na Fig. 3(c). (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003) também apresentaram uma tabela do tipo *Mendeleev* para diferentes valores do parâmetro κ , onde algumas configurações não mudam sua estrutura com a diminuição do intervalo de interação (aumento de κ). Um destaque para os sistemas com poucas partículas $N \leq 8$ que mantém sua estrutura de camada única independente de κ . Em particular, o caso

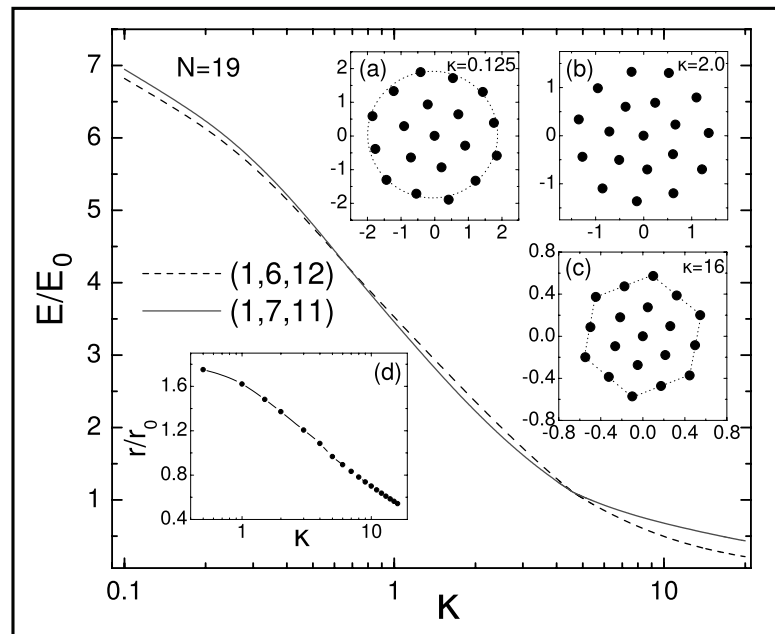
³ Configurações que possuem quantidade de partículas nas camadas externas como um múltiplo inteiro da camada interna.

⁴ Algumas configurações podem ser parcialmente comensuráveis quando alguma camada intermediária não é um múltiplo da camada interna.

$N = 5$ sempre se mantém como pentágono para diversos tipos de confinamento ou interação, diferentemente dos casos $N = 6, 7, 8$ que se organizam como hexágono, heptágono e octógono respectivamente para confinamento do tipo parede dura (KONG et al., 2004).

O caso $N = 19$, que é um número mágico, sofre transição estrutural entre os arranjos $(1, 6, 12) \rightarrow (1, 7, 11)$ (ver inserções na Fig. 3), onde a configuração incomensurável $(1, 7, 11)$ se torna o estado de menor energia em um intervalo de valores de κ como pode ser visto na Fig. 3. Também avaliaram o espectro de frequências do caso $N = 19$, mostrando o aumento das

Figura 3 – Comparação entre as energias das configurações metaestáveis para $N = 19$. Nas inserções os autores mostram as configurações para diferentes valores de κ e em d) mostra o raio da camada mais externa do aglomerado em função do parâmetro κ .

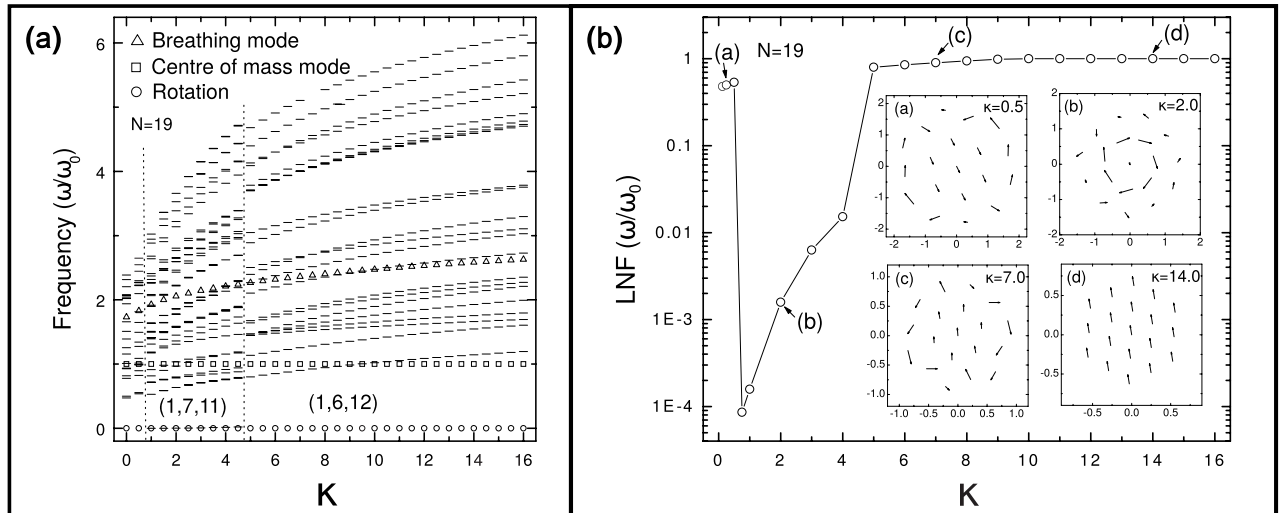


Fonte: Adaptado de (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003)

frequências dos modos normais com o aumento de κ e os valores onde ocorrem as transições estruturais (Fig. 4-esquerda). Perceba que os modos de rotação pura e translação não são afetados pela mudança de κ , mas a frequência do modo de respiração aumenta, uma vez que a redução do tamanho do aglomerado, na Fig. 3(d), promove estruturas mais compactas e mais difíceis de serem excitadas como pode ser visto na Fig. 4(a).

A LNF foi mostrada na Fig. 4-direita, assim como os autovetores associados, tendo como movimento coletivo de pares vórtice/antivórtice para o número "mágico" $(1, 6, 12)$ (a) e (c), rotação intercadas para a configuração incomensurável $(1, 7, 11)$ (b) e translação em (d). Uma queda considerável na LNF ocorre devido à mudança estrutural, indicando uma maior estabilidade da configuração comensurável em relação às rotações intercadas. Nota-

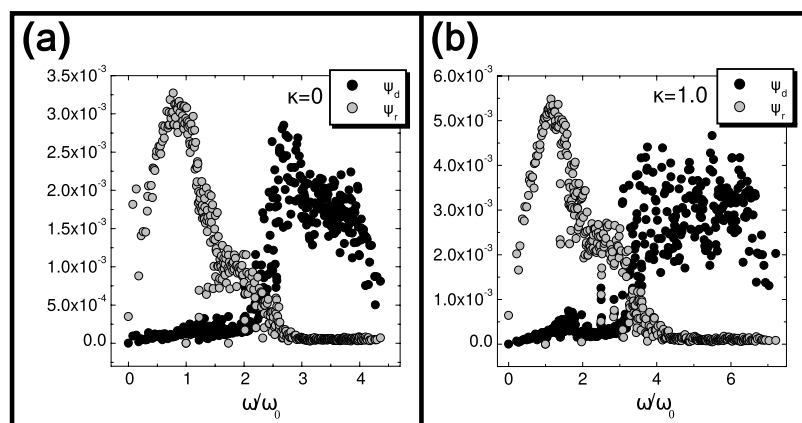
Figura 4 – Na figura da esquerda (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003) apresentam o espectro de autofrequências dos modos normais em função de κ enquanto que na direita mostram a LNF em função de κ e alguns automodos nas inserções correspondendo a modos de vórtice/antivórtice em (a) e (c), rotação intercamada em (b) e translação em (d).



Fonte: Adaptado de (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003)

ram também que o espectro das autofrequências possui duas regiões, uma com as menores autofrequências correspondendo aos modos com maior movimento de cisalhamento das camadas e na região de maiores frequências com modos do tipo compressivos (ver Fig. 5).

Figura 5 – Gráfico dos modos de compressão e cisalhamento derivados dos autovetores associados a cada modo normal. Os autovetores apresentam sentidos dos movimentos que podem ser mensurados a partir das grandezas Ψ_r e Ψ_d para cisalhamento e compressão respectivamente. Em (a) temos interações do tipo Coulomb puro ($\kappa = 0$), em (b) o parâmetro de blindagem para interações do tipo Yukawa é $\kappa = 1$.



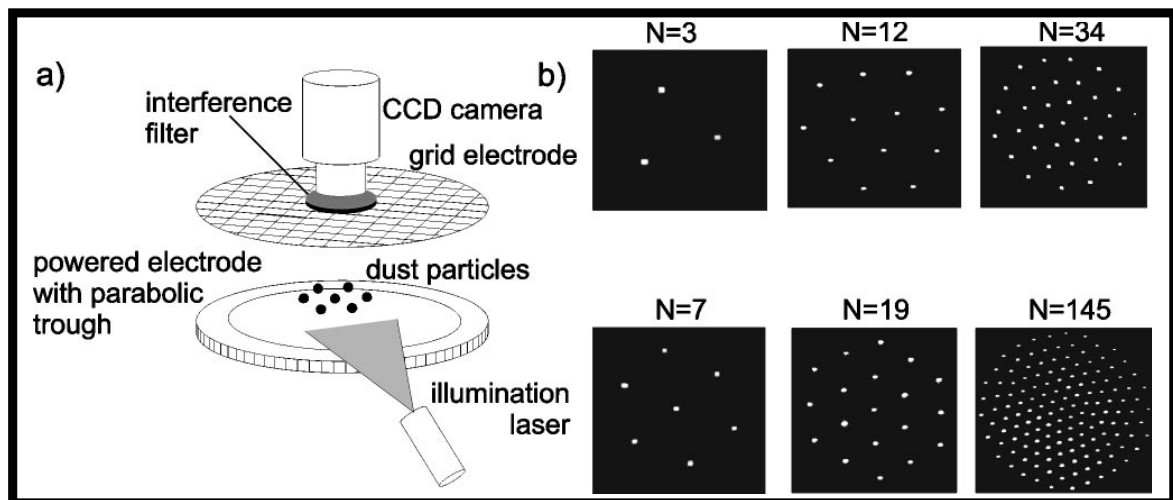
Fonte: Adaptado de (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003)

Realizações experimentais também se dedicaram na investigação das estruturas (JUAN et al., 1998) e das propriedades dinâmicas de aglomerados de poeira de Coulomb através de estímulos no modo de rotação intercamada para os aglomerados com $N = 19, 20$ partículas

(KLINDWORTH et al., 2000) e também por excitações no modo de respiração e no modo antisimétrico (MELZER; KLINDWORTH; PIEL, 2001) para sistemas com $N = 3, 4, 7$ partículas.

Análises simultâneas dos modos normais a partir do movimento browniano térmico de microesferas em plasma complexo foram realizadas por (MELZER, 2003) para diferentes quantidades de partículas variando entre $N = 3$ e 145. O aparato experimental está representado na Fig. 6(a) e algumas configurações são mostradas na Fig. 6(b).

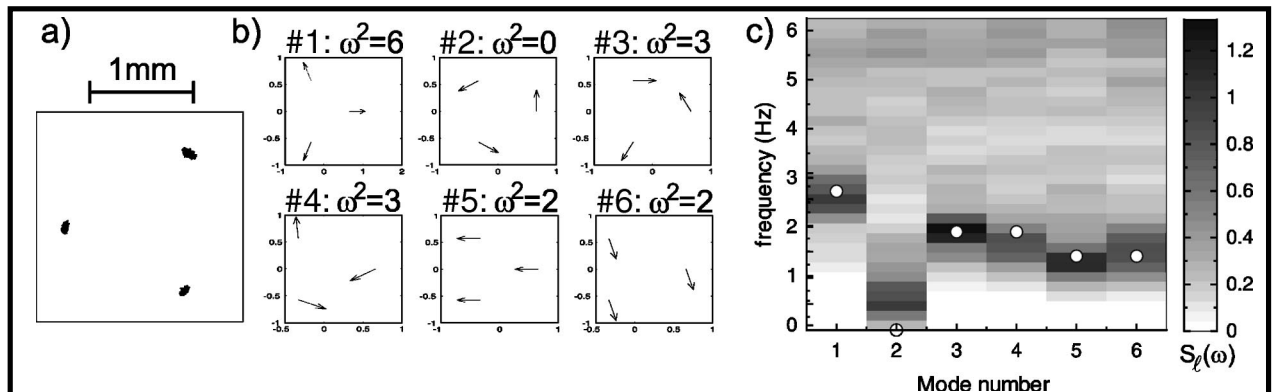
Figura 6 – Aparato experimental de microesferas em plasma complexo em (a) e algumas configurações em (b).



Fonte: Adaptado de (MELZER, 2003)

Estudaram sistemas com diferentes quantidades de partículas e diferentes arranjos de camadas submetidas a descargas variadas no aparato experimental. Para o caso simples com $N = 3$ partículas obtiveram os modos normais do sistema, representados na Fig. 7(b). A técnica experimental empregada permitiu avaliar todos os modos normais possíveis e compararam as frequências dos seis modos com a densidade de potência espectral, mostrando boa concordância, ver 7(c). Na Fig. 7(a) é mostrado a trajetória das partículas durante um intervalo de tempo de um minuto, onde tem-se as partículas oscilando em torno de suas posições de equilíbrio. Verificaram vários dos resultados discutidos anteriormente, como por exemplo, uma maior estabilidade da configuração "mágica", (1, 6, 12), que exibe maior frequência em comparação com a configuração metaestável (1, 7, 11). Concluíram também que o princípio da equipartição da energia era satisfeito devido à energia de um modo ser distribuída uniformemente entre os modos e que as temperaturas obtidas através das energias dos modos elásticos variava entre $300K$ e $3000K$. Conseguiram descrever as interações através de um potencial de Yukawa com parâmetro κ entre 0 e 2 e uma carga $Z = 11000$ cargas elementares - con-

Figura 7 – Em (a) tem-se o movimento das três partículas durante o intervalo de um minuto. Em (b) estão representados os modos normais obtidos e em (c) é mostrado a densidade de potência espectral.

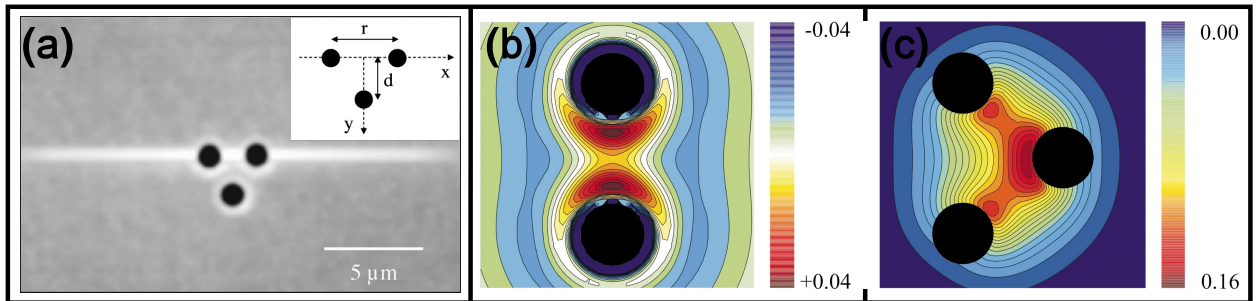


Fonte: Adaptado de (MELZER, 2003)

siderando um potencial confinador gerado por Z cargas positivas no centro do confinamento (FERREIRA; PEETERS; FARIAS, 2003). Os resultados estão em acordo com medições anteriores (MELZER; KLINDWORTH; PIEL, 2001) e com resultados numéricos (SCHWEIGERT; PEETERS, 1995) já conhecidos na literatura.

Outros sistemas que podem ser descritos por interações do tipo Yukawa são os sistemas coloidais, uma vez que cada partícula coloidal possui ao seu redor uma nuvem de íons com cargas opostas que equilibram a carga central (LEVIN, 2002). Entretanto, verificou-se experimentalmente que a descrição do sistema considerando apenas o modelo de interação de pares não era suficiente para descrever certas propriedades do sistema. Em 2004 (DOBNIKAR et al., 2004) realizaram medições experimentais com um sistema contendo apenas três colóides (Fig. 8-esquerda) e aferiram as contribuições de dois e três corpos na energia (ver Fig. 8-direita). Mostraram que o sistema possui uma repulsão compatível com interações do tipo Yukawa e que a diferença positiva entre a energia total do sistema e a energia devido à soma das interações de pares (ver Fig. 8-(a)) correspondia a contribuições de três corpos como está representado na Fig. 8-(b). Esses aglomerados coloidais são excelentes "laboratórios" para estudo de interações de muitos corpos, pois apresentam uma possibilidade de anulação das contribuições de ordem mais alta pelo aumento da concentração de sais no sistema ou por aparatos de campo rotativo (YAKOVLEV et al., 2022), sendo importantes para o estudo de sistemas quânticos com alta interação (HAMMER; NOGGA; SCHWENK, 2013), aglomerados de vórtices supercondutores (CARLSTRÖM; GARAUD; BABAEV, 2011; WOLF et al., 2017), auto-organização na quimiotaxia do pinguim (ZAMPETAKI et al., 2021) e propriedades de interfaces líquidas (PIENIAZEK; TAINTER; SKINNER, 2011). Recentemente (LIPPY; BLAND; BATALLER, 2021) mostraram que existe uma

Figura 8 – Em (a) tem-se a região experimental onde estão posicionados os três colóides. Em (b) é mostrado um mapa de contorno do potencial de dois corpos e (c) mostra a diferença da energia total e a contribuição de dois corpos. Os valores positivos na escala em (c) estão indicando que alguma energia em excesso existe e os autores consideram que seja uma contribuição de muitos corpos.



Fonte: Adaptado de (DOBNIKAR et al., 2004)

forte contribuição de três corpos em ilhas de Wigner constituída de esferas metálicas no topo de placas metálicas condutoras. Entretanto, ainda é necessário investigar o impacto dos termos de muitos corpos tanto na estrutura como nas propriedades dinâmicas desses aglomerados de Coulomb em comparação com os resultados já conhecidos.

Em nosso trabalho sobre cristais de Coulomb, encontramos algumas estruturas que se organizam em padrões muito próximos aos padrões filotáticos encontrados em plantas. Por esse motivo, vamos apresentar na próxima seção alguns conceitos básicos e resultados conhecidos da área.

1.2 PADRÕES FILOTÁTICOS NA NATUREZA

Uma importante característica visual que é encontrada em plantas é o ordenamento de suas folhas ou outros elementos constituintes da planta. A forma como muitas plantas organizam suas folhas ao redor do caule exhibe certas regularidades que relembram os tipos de ordenamento cristalino dos sólidos. A filotaxia é um ramo da morfologia vegetal encarregado de investigar os padrões de organização das folhas nos caules (ADLER; BARABE; JEAN, 1997), embora também se estenda para outras partes da planta como as flores. Buscando otimizar a captação de luz solar e conseqüentemente melhorar o processo de fotossíntese, surge uma grande variedade na forma e distribuição das folhas dos caules, uma vez que o número de folhas por nó, assim como o ângulo formado pelas folhas de nós consecutivos são características importantes para classificar o padrão filotático. Os padrões de organização das plantas encontrados na natureza podem ser resumidos nas seguintes filotaxias: *alterna*, *oposta*, *gemina*, *verticilada*, *fasciculada*, sendo a *alterna* e *oposta* as mais frequentes na filotaxia foliar (EDSON-CHAVES; SANTOS;

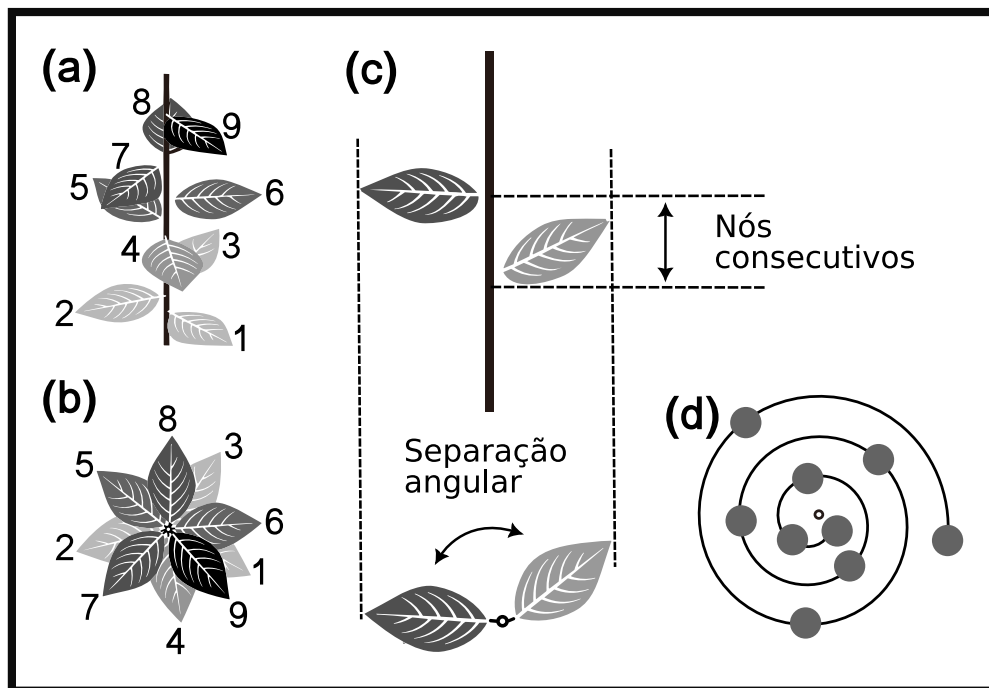
OLIVEIRA, 2021). Alguns estudos introduziram modelos teóricos com objetivo de explicar a geração desses padrões, em sua maioria focados na filotaxia alterna para os padrões espirais e dísticos (SNOW; SNOW, 1962; MITCHISON, 1977; ROBERTS, 1977; LEVITOV, 1991; DOUADY; COUDER, 1992; ADLER; BARABE; JEAN, 1997; MEINHARDT; KOCH; BERNASCONI, 1998). A característica principal da filotaxia alterna é a formação de uma única folha em cada nó Fig. 9(a) com separação angular fixa. Dentre os tipos alternos o mais comum é o que exibe separação angular entre nós consecutivos Fig. 9(c) de aproximadamente $\Phi = 2\pi(2 - \tau) \approx 137.5^\circ$, onde $\tau = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$. Esse número é conhecido como razão de ouro e está associado à sequência de Fibonacci

$$F = \{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, \dots\}, \quad (1.3)$$

$$F_k = F_{k-1} + F_{k-2}; \quad k \geq 3 \quad (1.4)$$

$$F_1 = F_2 = 1. \quad (1.5)$$

Figura 9 – Representação esquemática da filotaxia alterna-espiral. Em (a) estão representadas as folhas no caule e uma numeração foi atribuída para identificação dos nós consecutivos. Em (b) temos uma visão superior do caule; (c) mostra a separação angular entre duas folhas de nós consecutivos e em (d) temos a representação de (b) de forma mais simplificada, onde considera-se as folhas como esferas e a distância radial indica a profundidade de cada esfera.

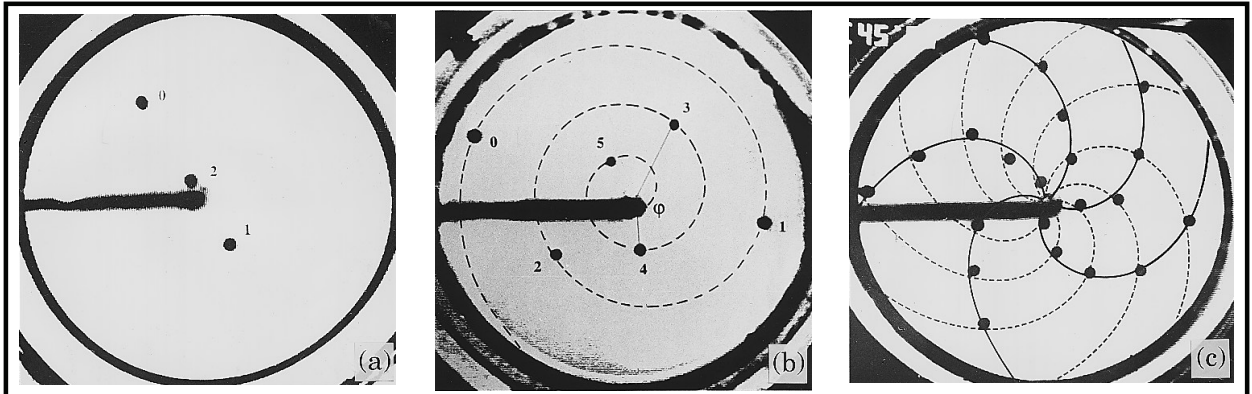


Fonte: Adaptado de (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020)

Esse tipo de ordenamento já foi obtido em um sistema físico através do estudo realizado por (DOUADY; COUDER, 1992) que considerou um processo dinâmico na formação/estabilização

de gotas de ferrofluido em um aparato metálico submetido a um campo magnético perpendicular. Perceba que uma espiral está conectando as partículas na Fig. 10(b). Essa espiral é

Figura 10 – Fotografias das configurações de equilíbrio de gotas de ferrofluido adicionadas no aparato plano. Um campo magnético perpendicular ao plano induz o movimento das gotas para as bordas. Em (a) temos as três primeiras gotas formando um ângulo de 180 graus. Em (b) vemos a formação da espiral generativa com ângulo φ entre duas gotas consecutivas. Em (c) temos outra forma de descrição das espirais, onde temos cinco espirais em uma direção e oito no sentido oposto, esses números são termos consecutivos da sequência de *Fibonacci*.



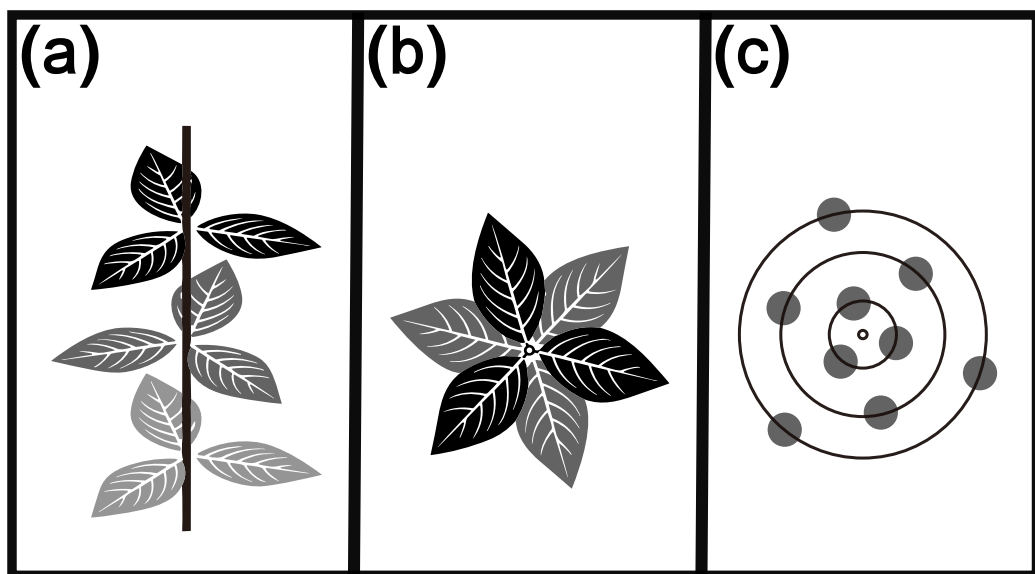
Fonte: Adaptado de (DOUADY; COUDER, 1992)

conhecida como *espiral generativa*. Se observarmos a Fig. 9(a) por uma vista superior teremos um conjunto de folhas amontoadas (ver Fig. 9(b)), mas podemos simplificar a representação se considerarmos as folhas como pequenas esferas e a profundidade de cada folha(ou nó) será indicada por uma distância radial, ou seja, quanto mais afastada uma esfera estiver, mais abaixo ela estará no caule. Traçando uma curva entre as esferas para raios consecutivos (ou nós consecutivos) teremos a *espiral generativa* formada (ver Fig. 9(d)).

Outra maneira de descrever o ordenamento consiste na definição de dois grupos de espirais em sentidos opostos (THOMAS, 1975), formada pelos vizinhos mais próximos (ou de contato). A quantidade de espirais(ou parasticias) de cada grupo é denotada por i e j , sendo esses dois números em geral dois termos sucessivos da série de Fibonacci (Eq. 1.3). Essa descrição é mostrada na Fig. 10(c), onde temos cinco espirais no sentido anti-horário e oito no sentido horário, correspondendo assim aos índices $(i, j) = (5, 8)$, que são o quinto e sexto elementos da sequência na Eq. 1.3. Além dos resultados experimentais apresentados por *Douady* e *Couder* também elaboraram modelos matemáticos (DOUADY; COUDER, 1996a) baseados no conceito de existência de um campo inibitório decorrente de alguma interação repulsiva, física ou química, entre os primórdios foliares com foco na filotaxia alterna. Esses modelos foram estendidos posteriormente para incluir a filotaxia verticilada (do inglês, Whorled) (GREEN, 1992; DOUADY; COUDER, 1996b; YOTSUMOTO, 1993; SMITH et al., 2006). Esses padrões verticilados

são frequentemente encontrados em flores ou nos órgãos florais (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020; TURNER et al., 2023), onde em cada nó se formam dois ou mais folhas em diferentes direções (ver Fig. 11a). Na Fig. 11(b) temos uma visão superior do caule e na Fig. 11(c) mostramos a representação simplificada como discutimos anteriormente para o padrão espiral. Note que as folhas formam círculos concêntricos contendo em cada círculo a quantidade de folhas do nó (ou a merosidade para flores).

Figura 11 – Filotaxia verticilada em (a) e suas representações planificadas: (b) com as folhas e em (c) representação simplificada onde as folhas são substituídas por esferas e a profundidade é representada pelos raios dos círculos.



Fonte: Adaptado de (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020)

As flores possuem uma estrutura complexa, mas alguns constituintes são agrupados em estruturas específicas; uma delas é o conjunto de pétalas e sépalas que são denominadas de Perianto. Os elementos do perianto seguem em geral um dos padrões (espiral ou verticilados), embora também ocorra coexistência das filotaxias no interior das flores. Uma investigação dessa coexistência entre esses dois tipos de filotaxia do perianto (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020) foi realizada, em que os autores estudaram teoricamente a relação entre a merosidade (número de órgãos do perianto) e a separação angular (característica importante para filotaxia espiral). O estudo analisou as flores verticiladas e espirais com diferentes números de tépalas⁵ em dois gêneros de Ranunculaceae, *Anemone* e *Eranthis*, por estimativas. Destacamos algumas estruturas relatadas em (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020) na Fig. 12 que servirão de referência

⁵ Em botânica, tépala é cada uma das peças florais que, não sendo pétala nem sépala, constituem o perianto de numerosas monocotiledôneas. Também pode ser definido como uma unidade ou segmento dos periantos nos quais não estão claramente diferenciados a corola e o cálice, como na tulipa e na cebola. Fonte: <<https://pt.wikipedia.org/wiki/T%C3%A9pala>>

para resultados encontrados em nosso trabalho. Na Fig. 12 temos os padrões denominados

Figura 12 – Exemplos de flores verticiladas para dois gêneros de Ranunculaceae, *Anemone* e *Eranthis* analisadas por (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020). Ilustramos os padrões (a) Decussada, (b) Tricussada, (c) Tetracussada e (d) Pentacussada.



Fonte: Adaptado de (KITAZAWA; FUJIMOTO, 2020)

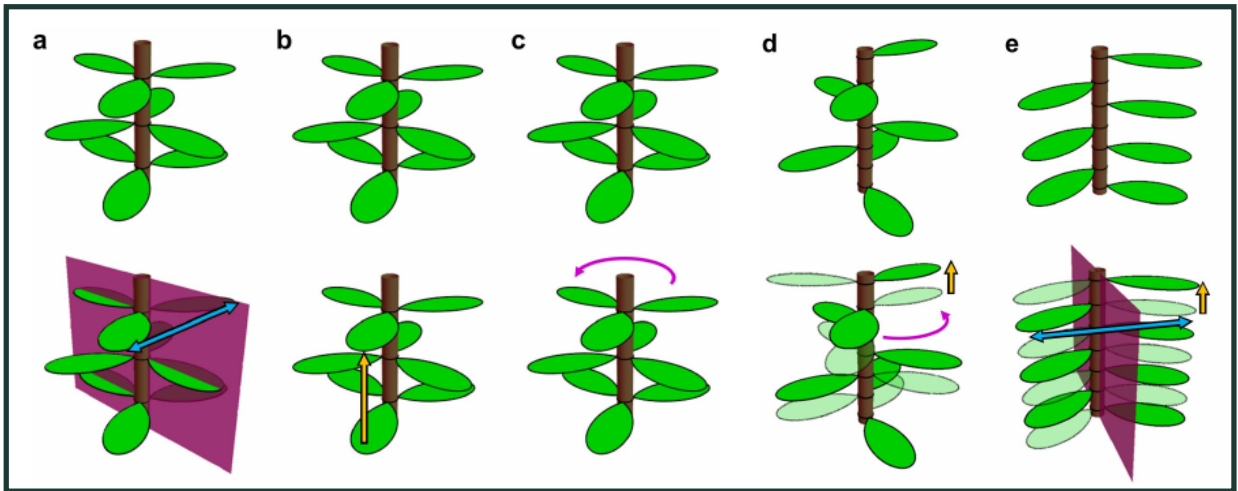
verticilados, embora alguns autores considerem a estrutura da Fig. 12(a) pertencente a filotaxia oposta (EDSON-CHAVES; SANTOS; OLIVEIRA, 2021), pois os constituintes se agrupam aos pares separados por um ângulo, $\theta = 180^\circ$, em planos distintos. Neste caso, são denominadas de filotaxia oposta cruzada, pois as folhas pertencem a dois planos ortogonais se olharmos por uma vista superior. Os padrões filotáticos podem apresentar várias simetrias, essas simetrias indicam propriedades abstratas desses padrões. Analisar as transições possíveis entre tipos de filotaxia a partir da teoria de grupo pode fornecer uma abordagem mais genérica e talvez mais completa. (YONEKURA; SUGIYAMA, 2021) realizaram um estudo da simetria e transição entre as filotaxias encontradas na natureza a partir da teoria de grupos, concentrando maior interesse na transição entre os grupos de simetria das filotaxias mais simétricas para a filotaxia *orixate* (menos simétrica), representando assim o processo de quebra de simetria.

Elencaram as principais simetrias que ocorrem em padrões filotáticos, representadas na Fig. 13, sendo reflexão(a), translação(b), rotação(c), saca-rolhas(d) e reflexão deslizante(e).

A classificação das filotaxias foi realizada considerando os grupos PP, PC, NC e GN que representam as seguintes simetrias:

- $PP(k, m) \rightarrow$ reflexão, rotação de $\frac{2\pi}{k}$, translação por m-nós e suas combinações;

Figura 13 – Simetrias possíveis em padrões filotáticos. Em (a) tem-se a simetria de reflexão pura, (b) translação pura, (c) rotação pura, (d) Saca-rolhas (rotação + translação e (e) reflexão deslizante (reflexão + translação).

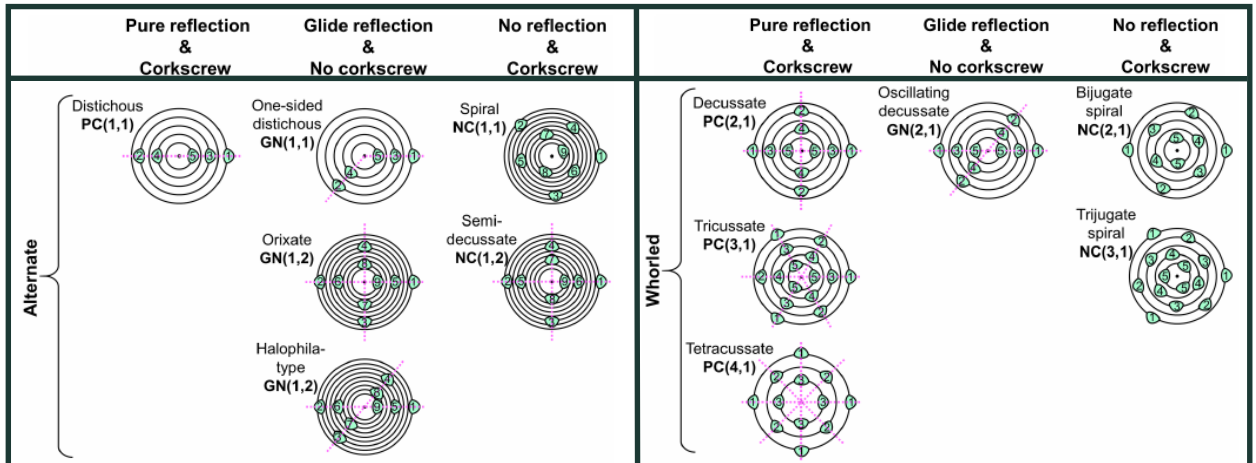


Fonte: Adaptado de (YONEKURA; SUGIYAMA, 2021)

- $PC(k, m) \rightarrow$ reflexão, saca-rolhas por m nós (translada m nós e rotaciona uma vez) e suas combinações;
- $NC(k, m) \rightarrow$ rotação de $\frac{2\pi}{k}$, saca-rolhas por m nós (translada m nós e rotaciona uma vez) e suas combinações;
- $GN(k, m) \rightarrow$ rotação de $\frac{2\pi}{k}$, reflexão-deslizante por m nós (translada m nós e reflete uma vez) e suas combinações;

Os autores resumiram as simetrias dos tipos de filotaxia alternada e verticilada como pode ser visto na Fig. 14.

Figura 14 – Classificação das simetrias presentes nas filotaxias alternada e verticilada.



Fonte: Adaptado de (YONEKURA; SUGIYAMA, 2021)

1.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE

No capítulo seguinte apresentaremos os fundamentos da teoria dos modos normais e obteremos alguns resultados conhecidos na literatura. Em seguida discutiremos a aplicação do mapeamento conforme em sistemas de partículas 2D. No terceiro capítulo apresentaremos os resultados associados ao sistema com interação de três corpos e no quarto capítulo apresentaremos os resultados envolvendo nosso estudo sobre os clusters coulombianos em confinamento conforme. Nossas conclusões e perspectivas se encontram no capítulo 5. No apêndice A mostramos as configurações simuladas para confinamento conforme discutidas no capítulo 4.

2 TEORIA DOS MODOS NORMAIS E MAPEAMENTO CONFORME

Não foi sempre dito que preto
 não tem vez? Então olha o
 castelo e não foi você quem fez
 ...

Racionais MC's

Apresentaremos nesse capítulo os principais conceitos que são comumente utilizados na descrição das propriedades mecânicas de sistemas de partículas clássicas confinadas. Abordaremos primeiramente uma descrição dos modos normais com base na referência (LEMOS, 2007), extendendo a discussão para um sistema de partículas confinado harmonicamente e interagindo com potencial de pares apenas. Analisaremos os automodos do caso harmônico como pano de fundo para fixarmos uma imagem mínima das propriedades mecânicas obtidas pelo estudo da estabilidade linear. Em seguida calcularemos as contribuições de três corpos para a Matriz Dinâmica (MD) considerando um modelo gaussiano atrativo para a interação de três corpos. Por fim, obteremos a MD quando o sistema consiste de um aglomerado de partículas coulombianas confinadas por um potencial projetado para reproduzir um perfil de densidade não uniforme que forma um cristal conforme.

Considerando um sistema conservativo com n graus de liberdade, podemos escrever sua lagrangiana em termos das coordenadas generalizadas q_1, \dots, q_n como

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^n M_{k\ell} \dot{q}_k \dot{q}_\ell - V(q_1, \dots, q_n) \quad (2.1)$$

onde $M_{k\ell} = M_{\ell k} \equiv \sum_i m_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\ell}$, \dot{q}_k é a k -ésima velocidade generalizada. Diz-se que uma configuração $q^{(0)} \equiv (q_1^{(0)}, \dots, q_n^{(0)})$ é de equilíbrio se

$$\left(\frac{\partial V}{\partial q_k} \right)_{q^{(0)}} = 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (2.2)$$

Podemos definir o deslocamento em relação à configuração de equilíbrio pelas novas variáveis

η_k

$$\eta_k \equiv q_k - q_k^{(0)}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (2.3)$$

sendo os deslocamentos η_k pequenos desvios da configuração de equilíbrio. Deste modo, podemos expandir o potencial em torno de $q^{(0)}$. Até segunda ordem em q , teremos

$$V(q_1, \dots, q_n) = V(q^{(0)}) + \sum_k \left(\frac{\partial V}{\partial q_k} \right)_{q^{(0)}} \eta_k + \frac{1}{2} \sum_{k\ell} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_\ell} \right)_{q^{(0)}} \eta_k \eta_\ell + \dots \quad (2.4)$$

Como estamos assumindo a condição de equilíbrio, então o segundo termo é nulo por definição e ficamos com a equação para o potencial na aproximação harmônica

$$V(q_1, \dots, q_n) = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{k\ell} V_{k\ell} \eta_k \eta_\ell \quad (2.5)$$

onde define-se as constantes $V_0 \equiv V(q^{(0)})$ e

$$V_{k\ell} = V_{\ell k} \equiv \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_\ell} \right)_{q^{(0)}}. \quad (2.6)$$

Sendo a configuração $q^{(0)}$ uma configuração de equilíbrio, então $V(q^{(0)})$ deve ser o valor mínimo do potencial e qualquer deslocamento só pode provocar um aumento do mesmo. Logo, $q^{(0)}$ é um ponto de equilíbrio estável se

$$\sum_{k\ell} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_k \partial q_\ell} \right)_{q^{(0)}} \eta_k \eta_\ell > 0 \quad \forall (\eta_1, \dots, \eta_n) \neq (0, \dots, 0). \quad (2.7)$$

Considerando a expansão até segunda ordem na lagrangiana (Eq. 2.1) do sistema, então

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell=1}^n T_{k\ell} \dot{\eta}_k \dot{\eta}_\ell - \frac{1}{2} \sum_{k\ell} V_{k\ell} \eta_k \eta_\ell, \quad (2.8)$$

onde descartamos V_0 , pois constantes não afetam as lagrangianas e $T_{k\ell} \equiv M_{k\ell}(q^{(0)})$. O cálculo das equações de Lagrange resulta nas seguintes equações de movimento para osciladores acoplados

$$\sum_k T_{jk} \ddot{\eta}_k + \sum_k V_{jk} \eta_k = 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.9)$$

A busca por soluções complexas $z_k(t) = z_k^{(0)} e^{i\omega t}$ para as equações de lagrange (2.9) onde todos os deslocamentos vibram com a mesma frequência ω resulta na equação característica

$$\sum_k (V_{jk} - \omega^2 T_{jk}) z_k^{(0)} = 0, \quad (2.10)$$

que só admite solução não-trivial $z_k^{(0)} \neq 0$ quando o determinante da equação matricial $(\mathbf{V} - \omega^2 \mathbf{T})$ for nulo, ou seja,

$$\det(\mathbf{V} - \omega^2 \mathbf{T}) = 0, \quad (2.11)$$

com as seguintes matrizes $\mathbf{V} \equiv (V_{jk})$, $\mathbf{T} \equiv (T_{jk})$ e $\mathbf{z}^{(0)} \equiv (z_1^{(0)}, \dots, z_n^{(0)})$.

Essa equação algébrica de grau n na variável ω^2 possui n raízes positivas ω_s , com $s = \{1, 2, \dots, n\}$, denominadas de frequências características do sistema. No contexto de sistemas de partículas bidimensionais, um sistema com N partículas possui $n = 2N$ graus de liberdade com coordenadas generalizadas $q = \{x_1, x_2, \dots, x_N, y_1, y_2, \dots, y_N\}$, para as partículas posicionadas nas posições $\vec{r}_i \equiv x_i^\theta \hat{e}_\theta$, onde x_i^θ é a coordenada θ da partícula i e o vetor \hat{e}_θ é o vetor unitário da direção $\theta = \{x, y\}$. Estando essas partículas submetidas aos potenciais de confinamento, interação de pares e de três corpos $V = V_1 + V_2 + V_3$, sua matriz dinâmica² fica escrita como

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta;pl} \equiv \frac{\partial^2 V}{\partial x_p^\alpha \partial x_\ell^\beta} = \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2 + \mathcal{D}_3, \quad (2.12)$$

onde as matrizes associadas aos potenciais externo e de interação de dois e três corpos são dadas por

$$\mathcal{D}_1 \equiv \frac{\partial^2 V_1}{\partial x_p^\alpha \partial x_\ell^\beta} \quad (2.13)$$

$$\mathcal{D}_2 \equiv \frac{\partial^2 V_2}{\partial x_p^\alpha \partial x_\ell^\beta} \quad (2.14)$$

$$\mathcal{D}_3 \equiv \frac{\partial^2 V_3}{\partial x_p^\alpha \partial x_\ell^\beta}. \quad (2.15)$$

Estamos interessados em três tipos de interação de dois corpos repulsivas³ que dependem das distâncias entre os pares de partículas $r_{ij} \equiv |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$

$$V_2 = k_2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} u_2; \quad (2.16)$$

$$u_2 = \left\{ \begin{array}{ll} -\ln(r_{ij}), & \text{logarítmico} \\ \frac{e^{-\kappa r_{ij}}}{r_{ij}}, & \text{Yukawa} \\ \frac{1}{r_{ij}}, & \text{Coulomb} \end{array} \right\}, \quad (2.17)$$

Vamos calcular os elementos da {MD para os três potenciais de interesse e iniciaremos com o caso logarítmico. Para facilitar a avaliação das derivadas no cálculo da {MD utilizaremos as expressões a seguir

¹ Na notação de *Einstein* expressões com índices repetidos indicam uma soma nesse índice no seu intervalo de variação.

² Usaremos a notação mais simplificada para representar a derivada: $\frac{\partial f}{\partial x_i^\theta} \equiv (\partial_{\theta i})f$, pois nossa variável de interesse é explicitada pelo parâmetro θ e não pelo x . Por exemplo: Se $\theta = 1$, então $x_i^1 = x_i$ é a coordenada x da partícula i e se $\theta = 2$, $x_i^2 = y_i$ seria a coordenada y da partícula i .

³ Note que o potencial de Yukawa (ou Coulomb blindado) converge para o coulomb se $\kappa \rightarrow 0$.

$$\partial_{\beta\ell} (\vec{r}_i \cdot \vec{r}_i) = 2x_i^\beta \delta_{i\ell} \quad (2.18)$$

$$\partial_{\beta\ell} r_{ij} = \frac{\Delta_{\beta ij}}{r_{ij}} \Gamma_{\ell ij} \quad (2.19)$$

$$\Delta_{\beta ij} \equiv x_i^\beta - x_j^\beta \quad (2.20)$$

$$\Gamma_{pij} \equiv \delta_{pi} - \delta_{pj} \quad (2.21)$$

Calculando para o caso logarítmico:

$$\mathcal{D}_2 = k_2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} \partial_{\alpha p} \partial_{\beta\ell} u_2 = k_2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} \partial_{\alpha p} \partial_{\beta\ell} [-\ln(r_{ij})].$$

Aplicando a regra da cadeia e a expressão 2.19

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha p} \partial_{\beta\ell} u_2 &= -\partial_{\alpha p} \left[\frac{\partial_{\beta\ell} r_{ij}}{r_{ij}} \right] \\ &= -\partial_{\alpha p} \left[\frac{\Gamma_{\ell ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} \right] \\ &= -\frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{\ell ij}}{r_{ij}^2} \left[\frac{2\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} - \delta^{\alpha\beta} \right], \end{aligned}$$

os elementos da matriz de dois corpos do caso logarítmico se tornam,

$$(\mathcal{D}_2)_{p\ell}^{\alpha\beta} = k_2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} \frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{\ell ij}}{r_{ij}^2} \left[\frac{2\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} - \delta^{\alpha\beta} \right]. \quad (2.22)$$

Para o caso Yukawa/Coulomb temos $u_2 = \exp(-\kappa r_{ij})/r_{ij}$, logo

$$\partial_{\alpha p} \partial_{\beta\ell} u_2 = \partial_{\alpha p} \partial_{\beta\ell} \left[\frac{\exp(-\kappa r_{ij})}{r_{ij}} \right] \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} &= \partial_{\alpha p} \left[\frac{1}{r_{ij}^2} (r_{ij} \partial_{\beta\ell} \exp(-\kappa r_{ij}) - \exp(-\kappa r_{ij}) \partial_{\beta\ell} r_{ij}) \right] \\ &= \partial_{\alpha p} \left[\frac{-\exp(-\kappa r_{ij})}{r_{ij}^2} (\kappa r_{ij} + 1) \partial_{\beta\ell} r_{ij} \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Aplicando novamente a regra da cadeia e as expressões das derivadas, os elementos da matriz de dois corpos do caso Yukawa/Coulomb⁴ ficam

$$(\mathcal{D}_2)_{p\ell}^{\alpha\beta} = k_2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} \frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{\ell ij}}{r_{ij}^2} \left[\frac{\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} (3 + 3\kappa r_{ij} + \kappa^2 r_{ij}^2) - \delta^{\alpha\beta} (1 + \kappa r_{ij}) \right] u_2. \quad (2.25)$$

Podemos denotar a contribuição de dois corpos para a {MD de maneira mais padronizada

$$(\mathcal{D}_2)_{p\ell}^{\alpha\beta} = k_2 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} \frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{\ell ij}}{r_{ij}^2} B_{ij}^{\alpha\beta} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} B_{ij}^{\alpha\beta}(I) &= (1 - I) \left[\frac{2\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} - \delta^{\alpha\beta} \right] + \\ &+ I \left[\frac{\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} (3 + 3\kappa r_{ij} + \kappa^2 r_{ij}^2) - \delta^{\alpha\beta} (1 + \kappa r_{ij}) \right] u_2, \end{aligned} \quad (2.27)$$

⁴ Para Coulomb basta substituir $\kappa = 0$.

o parâmetro I vale zero se a interação for logarítmica e 1 se for interação de Yukawa/Coulomb.

Na próxima seção consideraremos o potencial harmônico para confinar as partículas e analisaremos algumas propriedades dinâmicas desse sistema.

2.1 PROPRIEDADES MECÂNICAS DE SISTEMAS CONFINADOS HARMONICAMENTE

O potencial confinador harmônico é isotrópico e depende apenas do quadrado das distâncias radiais das partículas

$$V_1 = \frac{k_1}{2} \sum_{i=1}^N u_i = \frac{k_1}{2} \sum_{i=1}^N r_i^2. \quad (2.28)$$

Nesse caso o termo de confinamento para a matriz dinâmica é dado por,

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}_1)_{p\ell}^{\alpha\beta} &= \frac{k_1}{2} \partial_{\alpha p} \sum_{i=1}^N \partial_{\beta \ell} r_i^2 = \frac{k_1}{2} \partial_{\alpha p} \left(2 \sum_{i=1}^N \delta_{i\ell} x_i^\beta \right) = \frac{k_1}{2} \partial_{\alpha p} (2x_\ell^\beta) \\ &= k_1 \delta_{p\ell} \delta^{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (2.29)$$

A matriz dinâmica para o sistema de partículas confinadas harmonicamente e interagindo com potencial de pares é dada por:

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta;p\ell} = k_1 A_{p\ell}^{\alpha\beta} \delta_{k\ell} + \frac{k_2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{\ell ij}}{r_{ij}^2} B_{ij}^{\alpha\beta} \quad (2.30)$$

$$A_{p\ell}^{\alpha\beta} = \delta^{\alpha\beta} \delta_{p\ell} \quad (2.31)$$

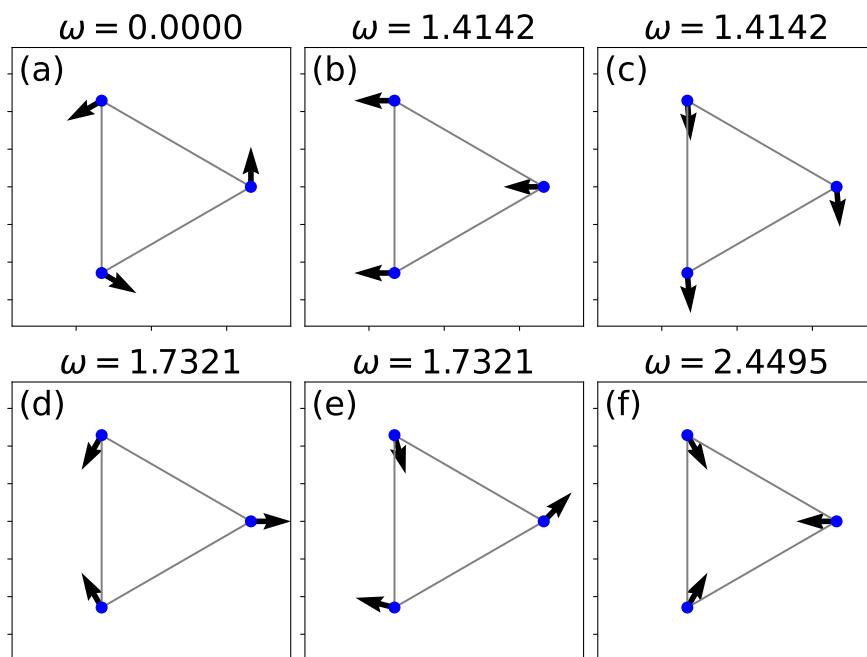
$$\begin{aligned} B_{ij}^{\alpha\beta}(I) &= (1 - I) \left[\frac{2\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} - \delta^{\alpha\beta} \right] + \\ &+ I \left[\frac{\Delta_{\alpha ij} \Delta_{\beta ij}}{r_{ij}^2} \left(3 + 3\kappa r_{ij} + \kappa^2 r_{ij}^2 \right) - \delta^{\alpha\beta} (1 + \kappa r_{ij}) \right] u_2. \end{aligned}$$

2.1.1 Modos elásticos e simetria do confinamento

A MD obtida anteriormente nos permite calcular os modos normais de vibração do sistema. Esses modos estão associados aos movimentos coletivos das partículas vibrando em torno da configuração de equilíbrio com frequências características, ou seja, cada modo elástico possui uma frequência bem determinada e conseqüentemente uma quantidade de energia necessária para a realização do movimento vibracional do sistema. Os modos normais são obtidos por diagonalização da MD, onde os autovalores λ resultantes da diagonalização estão associados as frequências de vibração do sistema, ou seja, $\lambda = m\omega^2$, sendo m a massa das partículas idênticas e ω a frequência característica de vibração. Para auxiliar nossa discussão utilizaremos

como base o caso com $N = 3$ partículas que é relativamente simples, mas que representa uma boa base para comparação quando discutirmos os efeitos de três corpos posteriormente. A configuração de equilíbrio desse sistema confinado harmonicamente é um triângulo equilátero com as partículas ocupando os vértices do mesmo. Os modos normais obtidos pela diagonalização da MD estão representados na Fig. 15. Os modos elásticos nas Figs. 15(a) e (c) são

Figura 15 – Configuração de equilíbrio para $N = 3$ e interação coulombiana. Os modos normais estão representados com suas autofrequências na ordem crescente.



Fonte: O autor.

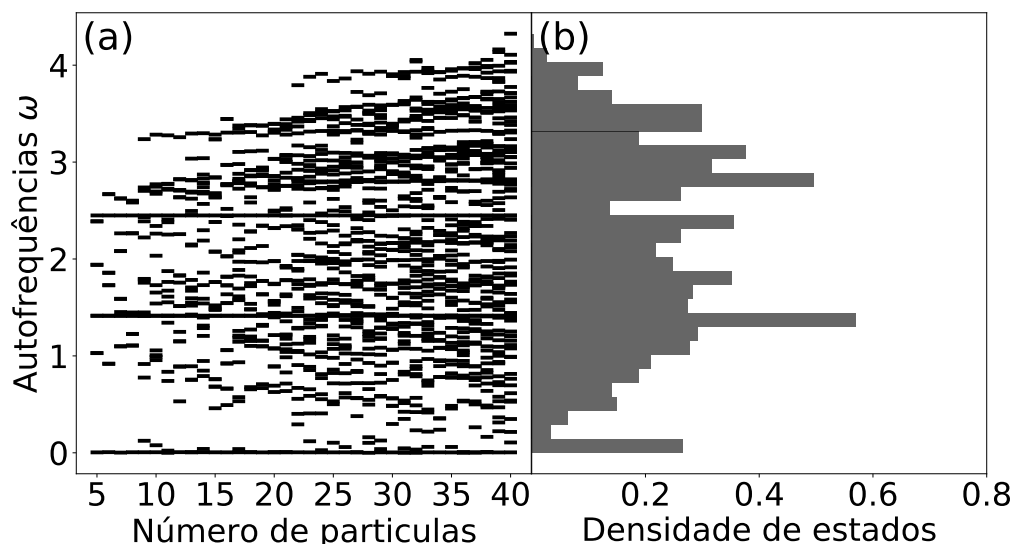
movimentos vibracionais que explicitam a simetria radial do potencial. O primeiro, conhecido como modo de rotação, é um movimento em que todas as partículas giram em torno do centro do potencial confinador sem alterar a distancia radial das partículas, ou seja, o sistema muda de uma configuração de equilíbrio estável para outra que também é estável e para tal não necessita de energia externa para realizá-la. Os modos da Fig. (15(b) e (c) são conhecidos como modos de translação (ou de centro de massa), onde todas as partículas se deslocam no mesmo sentido do centro de massa. A esse modo é necessário fornecer uma quantidade de energia, pois as distancias radiais das partículas serão modificadas, mas a disposição configuracional permanecerá a mesma de tal forma que a contribuição na energia de interação do sistema não se modifica, pois as distancias relativas se manterão constantes. Note que esse modo é degenerado, pois existe duas direções ortogonais (nesse caso) que promovem o mesmo

movimento coletivo que preserva a estrutura do sistema. Os dois próximos modos também são degenerados, mas promovem movimentos que alteram a estrutura triangular do sistema e por esse motivo possui autofrequência mais alta que o modo de translação e rotação. Por fim temos o modo de respiração (ou breathing do inglês) que consiste de movimentos radiais de todas as partículas num mesmo sentido. Embora esse modo seja o de maior frequência para esse caso, sistemas com mais partículas coulombianas possuem outros modos com maior frequência que o de respiração, diferentemente de partículas que interagem por potencial do tipo logarítmico (seu automodo mais energético é o de respiração).

2.1.2 Sistemas grandes

À medida que aumentamos o número de partículas do sistema também aumentamos quantidade de modos normais, ou seja, para N partículas teremos $2N$ automodos. Uma maneira de extrair informação mais completa das frequências é representar num gráfico todas as frequências de cada modo elástico em função do número de partículas como na Fig. 16(a). Podemos

Figura 16 – Figura contendo o espectro das autofrequências em função do número de partículas do sistema em (a), e a densidade de estados em (b). As partículas estão aprisionadas por um confinamento harmônico e interagem por um potencial de pares coulombiano.



Fonte: O autor

destacar na Fig. 16(a) as três autofrequências associadas aos modos de rotação de corpo rígido, centro de massa e respiração cujos valores são $\omega_{rot} = 0$, $\omega_{CM} = \sqrt{2}$ e $\omega_{res} = \sqrt{6}$ respectivamente. Representamos a DOS na Fig. 16(b), pois a DOS nos mostra a fração de modos

existentes em um intervalo de frequências. Note que o modo de translação exibe um pico maior que os modos de rotação e respiração como já esperado, pois o mesmo é degenerado.

Embora os gráficos da Fig. 16 nos forneçam informações relevantes sobre a quantidades de modos e em quais faixas de autofrequências eles ocorrem, não conseguimos saber como se dá o movimento coletivo das partículas. Como já vimos pro caso com $N = 3$ essa informação é obtida com os autovetores associados aos modos elásticos. Entretanto os autovetores nos mostram informações de um único modo normal e não sobre o comportamento global dos modos. Uma maneira de tentar compreender os tipos de movimentos coletivos dos modos elásticos é feita quantificando o movimento rotacional e radial do sistema e essas contribuições rotacionais e radiais são chamadas de modos de compressão e cisalhamento do sistema. As grandezas que permitem mensurar essas contribuições são definidas como:

$$\psi_d(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi_{d,i}^2(k), \quad (2.32)$$

$$\psi_r(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi_{r,i}^2(k). \quad (2.33)$$

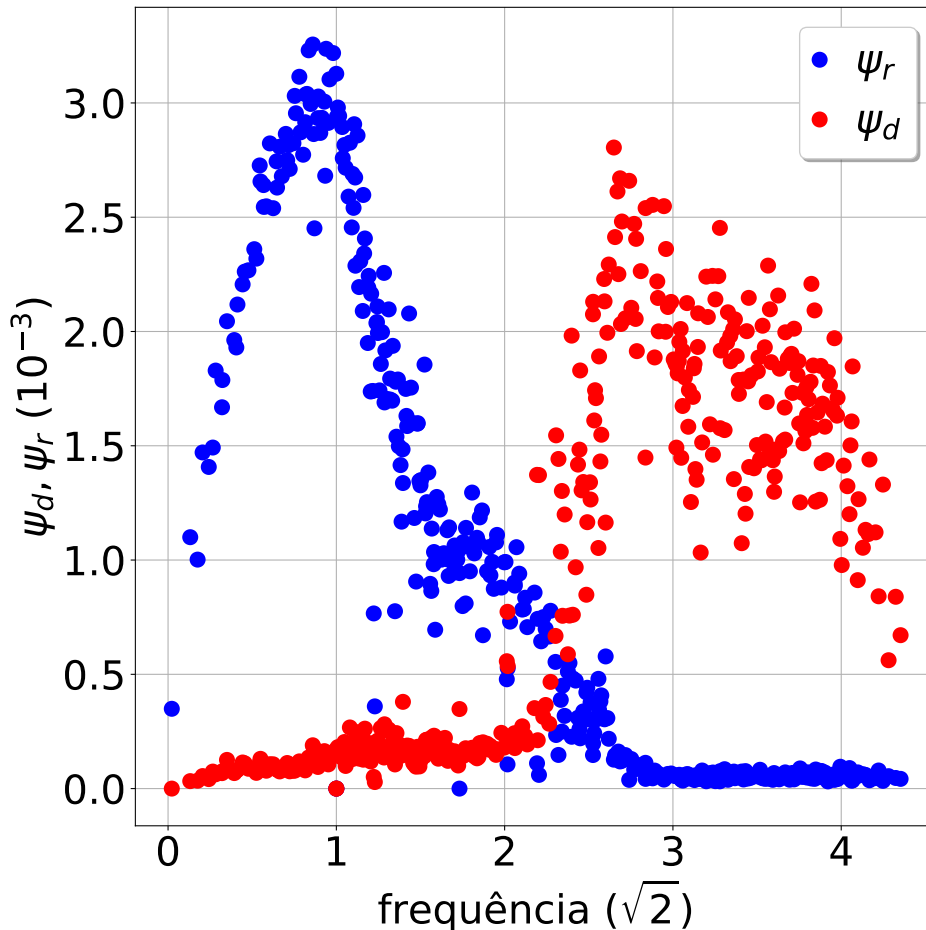
Os valores $\psi_{d,i}(k)$ e $\psi_{r,i}(k)$ para a i -ésima partícula são obtidos pela mensuração da divergência e rotacional do campo de autovetores associados ao k -ésimo modo elástico e podem ser escritos como (SCHWEIGERT; PEETERS, 1995)

$$\psi_{d,i}(k) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{\vec{s}_{im} \cdot \vec{A}_{im}(k)}{s_{im}^2}, \quad (2.34)$$

$$\psi_{r,i}(k) = \frac{1}{M} \left| \sum_{m=1}^M \frac{\vec{s}_{im} \times \vec{A}_{im}(k)}{s_{im}^2} \right|, \quad (2.35)$$

onde $\vec{s}_{im} \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_m$ representa o vetor separação entre as posições das partículas e $\vec{A}_{im}(k) \equiv \vec{A}_i - \vec{A}_m$ é o vetor separação dos autovetores associados ao k -ésimo modo elástico das partículas vizinhas (m) à i -ésima partícula. Ilustramos na Fig. 18 a decomposição dos modos em suas contribuições de cisalhamento e compressão. Percebe-se que os modos com frequências menores exibem uma fração maior de cisalhamento, enquanto que os modos de mais alta energia estão associados aos movimentos mais compressivos. Esse caso é consistente com o obtido por (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003).

Figura 17 – Decomposição em modos de compressão e cisalhamento dos automodos do sistema com $N = 200$ partículas coulombianas confinadas por um potencial harmônico. As grandezas Ψ_r e Ψ_d fornecem uma estimativa do movimento rotacional (cisalhamento) e radial (compressão) dos modos normais, respectivamente. Perceba que esse resultado é idêntico ao apresentado na Fig. 5(a), extraída da referência (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003).



Fonte: O autor.

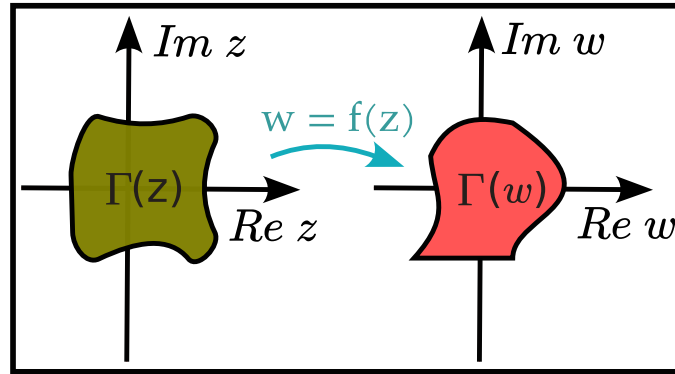
2.2 MAPEAMENTO CONFORME PARA DENSIDADE NÃO UNIFORME

Mapeamento conforme é uma ferramenta muito útil no tratamento de fluidos incompressíveis 2D ou problemas de contorno em eletromagnetismo. Aplicações já foram realizadas envolvendo esferas de aço magnetizadas sob campos de força (ROTHEN et al., 1993; ROTHEN; PIERAŃSKI, 1996), espumas de ferrofluido em campos magnéticos (ELIAS et al., 1999) ou mapas conformes com espumas 2D (DRENCKHAN; WEAIRE; COX, 2004) e recentemente com skyrmions (SOUZA et al., 2023). Utilizaremos o mapeamento conforme para obtenção do potencial confinador no capítulo 4, então descreveremos a seguir os fundamentos desse tipo de transformação em análise complexa.

Considere uma função complexa de argumento complexo que mapeia regiões $\Gamma(z)$ do plano

z em regiões $\Gamma(w)$ no plano w . Quaisquer elementos dos planos z e w são representados como $z = x + iy$ e $w = f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, sendo x, y as partes real e imaginária de z e u, v as partes real e imaginária de w . A derivada da função $f(z)$ é definida como

Figura 18 – Regiões nos planos z (esquerda) e w (direita). A função analítica $f(z)$ transforma elementos de $\Gamma(z)$ em elementos de $\Gamma(w)$.



Fonte: O autor.

$$\frac{df}{dz} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z},$$

essa derivada só estará bem definida na vizinhança de z se o limite for único para qualquer caminho que torne $\Delta z \rightarrow 0$. Se a função $f(z)$ satisfaz as condições de *Cauchy-Riemann* em um domínio $\Gamma(z)$, então ela é diferenciável nessa região. As condições são

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (2.37)$$

Funções que possuem derivadas em todos os pontos de um certo domínio são denominadas analíticas nesse domínio, e essas funções satisfazem as condições de *Cauchy-Riemann* Eqs. (2.36, 2.37) (BROWN; CHURCHILL, 2015). Assumindo que a função $f(z)$ seja analítica em um certo domínio $\Gamma(z)$ e que sua derivada seja não nula nesse domínio, então a função $f(z)$ mapeia os pontos do plano z no plano w e possui duas propriedades importantes:

- O ângulo θ formado por duas curvas em $\Gamma(z)$ que se cruzam é preservado pela transformação $w = f(z)$ (BROWN; CHURCHILL, 2015);
- Se a função $f(z)$ satisfaz a equação de Laplace em z , então a equação de Laplace no plano w também será satisfeita, ou seja, se $\nabla_z^2 f(z) = 0 \Rightarrow \nabla_w^2 f[z(w)] = 0$.

A transformação $w = f(z)$ é conhecida como transformação conforme, pois os ângulos são preservados pela transformação. Aplicações desse tipo de mapeamento vem sendo realizadas recentemente em vórtices supercondutores (MENEZES; SILVA, 2017; MENEZES et al., 2019) e partículas clássicas interagentes (SILVA et al., 2020) com objetivo de produzir um perfil de densidade $n_z = ar^\alpha$ não uniforme. O mapeamento considerado pertence ao conjunto de transformações

$$z = cw^{\frac{2}{\alpha+2}}, \text{ se } \alpha \neq -2, \quad (2.38)$$

$$z = e^{cw}, \text{ se } \alpha = -2, \quad (2.39)$$

satisfazendo a equação de Laplace

$$\nabla^2 \ln(n_z) = 0. \quad (2.40)$$

Para os vórtices supercondutores (MENEZES; SILVA, 2017; MENEZES et al., 2019) abordaram o mapeamento com $\alpha \neq -2$. No sistema de partículas clássicas com interação logarítmica (SILVA et al., 2020) adotaram o perfil com $\alpha = -2$, ou seja, o centro do potencial fica altamente denso, enquanto que nas regiões mais afastadas as partículas ficam mais afastadas obedecendo a relação $n_z(r) = \frac{a}{r^2}$.

A organização das partículas clássicas no espaço conforme w forma uma rede hexagonal. Então podemos extrair algumas informações sobre os tipos de redes formadas em w com base no mapeamento dado pela Eq. 2.39, ou a sua inversa $w = f(z) = \frac{1}{c} \ln(z)$. Nesse caso temos as partes real e imaginária de w como

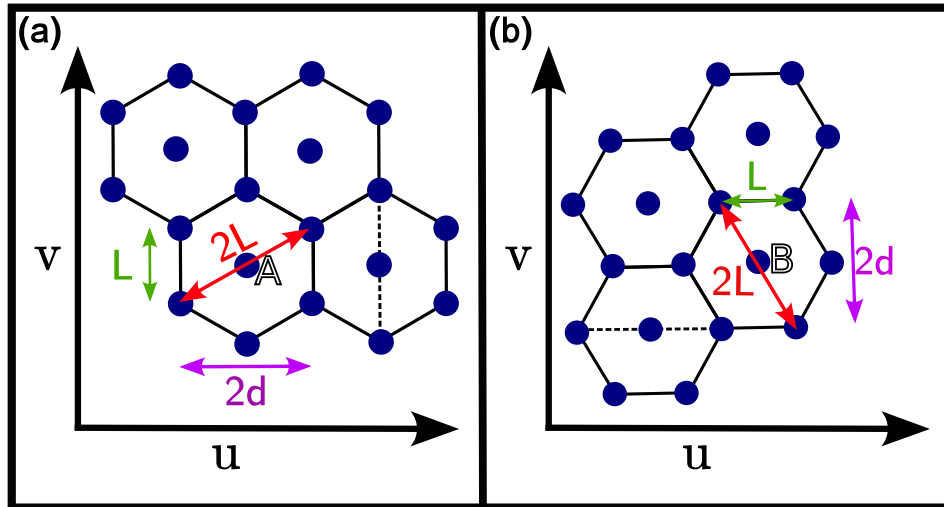
$$u(x, y) = \frac{\ln(r)}{c} \quad (2.41)$$

$$v(x, y) = \frac{\phi}{c} \quad (2.42)$$

Primeiramente devemos notar que as redes hexagonais da Fig. 19 apresentam eixos principais em direções diferentes. Em (a) as partículas mais próximas de A são partículas de camadas diferentes, exceto as duas que estão acima e abaixo dela. Isso significa que as linhas que ligam as partículas verticalmente representam círculos no plano z , pois cada reta vertical está associada a um valor de raio.

Essas redes são denominadas *concêntricas*. Em (b) temos os primeiros vizinhos da partícula B pertencentes a camadas distintas e as retas horizontais que ligam as partículas possuem um mesmo valor para $v = \phi/c$, ou seja, no plano z elas pertencem a direção radial cujo

Figura 19 – Dois exemplos de redes hexagonais no espaço w , em (a) temos uma rede concêntrica e em (b) uma rede radial.



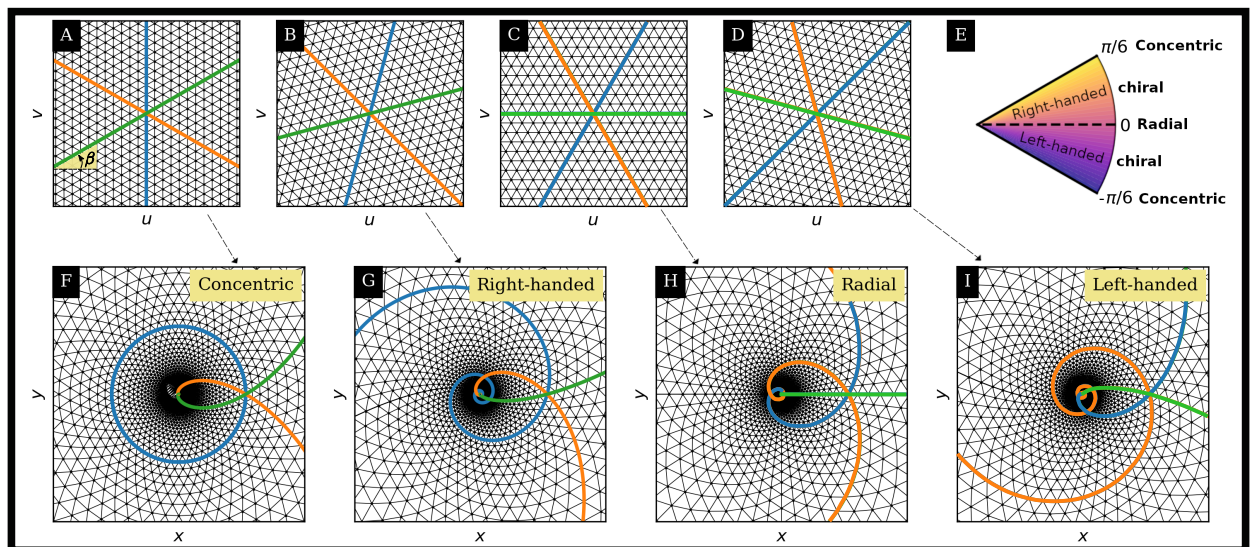
Fonte: O autor.

ângulo azimutal vale ϕ . Essas redes são chamadas de radiais. Os eixos principais (direções que conectam os primeiros vizinhos) podem ajudar a distinguir o tipo de rede, pois na rede radial (b) um dos eixos forma um ângulo $\beta = 0$ com a direção u , enquanto que a rede concêntrica (a) forma um ângulo $\beta = \frac{\pi}{6}$. Outros dois tipos de redes podem ser formadas se rotacionarmos a rede radial (b) por um ângulo menor que $\pi/6$ no sentido horário ou anti-horário, chamadas de redes quirais. Um resumo desses quatro tipos de redes está representado na Fig. 20, sendo as redes no plano w : concêntrica (A), quiral-direita (B), radial (C) e quiral-esquerda (D) com suas representações no plano z mostradas em (F), (G), (H) e (I). Em (E) tem-se um pequeno mapa ilustrando os valores de β que forma os tipos distintos de redes.

Apresentamos aqui alguns dos conceitos que serão utilizados no estudo dos modos normais dos aglomerados confinados harmonicamente com interação de três corpos e nos aglomerados confinados por potencial confinador conforme. No próximo capítulo abordaremos o problema com interação de três corpos e no capítulo 4 apresentaremos os resultados para confinamento conforme.

⁵ β é definido como o menor ângulo formado entre um dos eixos principais e o eixo u .

Figura 20 – Representação dos tipos de redes nos planos w e z . As redes são: concêntricas(A e F), quiral-direita(B e G), radial(C e H), quiral-esquerda (D e I). Em (E) tem-se um mapa indicando os valores do ângulo β que forma os tipos de redes.



Fonte: Adaptado de (SILVA et al., 2020).

3 EFEITOS DE TRÊS CORPOS NAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ESPECTRAIS DE AGLOMERADOS DE COULOMB CONFINADOS

... Este samba
 Que é misto de maracatu
 É samba de preto velho
 Samba de preto tu ...

Jorge Ben Jor

Nesse capítulo apresentaremos os resultados para sistemas de partículas clássicas confinadas harmonicamente, com interação de pares repulsiva e interação de três corpos atrativa. Utilizaremos as interações de pares logarítmica, coulombiana e de Yukawa, que são interações típicas em sistemas coloidais, vórtices supercondutores ou elétrons em pontos quânticos. Para a interação de três corpos utilizaremos o modelo gaussiano apresentado na próxima seção.

É importante ressaltar que minha contribuição para esse trabalho se delimitou no cálculo e análise dos modos normais a partir das configurações de equilíbrio de estados estáveis e metaestáveis obtidas pelo colega de laboratório *Matheus Valença*. O trabalho de colaboração entre os autores possibilitou a conclusão e publicação do artigo intitulado: *Structural phases of classical 2D clusters with competing two-body and three-body interactions* (CORREIA et al., 2023).

Nas seções seguintes apresentaremos o modelo de interação de pares adotado nesse trabalho e deduziremos a contribuição desse termo para a MD do sistema. Em seguida discutiremos o sistema mais simples possível para o estudo da interação de três corpos. Esse sistema possui apenas três partículas e, embora seja simples, fornece uma riqueza física que auxiliará no entendimento de sistemas maiores e mais complexos posteriormente. Analisaremos algumas propriedades estruturais e dinâmicas através dos modos normais do sistema, tanto para aglomerados pequenos, como para os sistemas maiores.

3.1 POTENCIAL DE TRÊS CORPOS E SUAS CONTRIBUIÇÕES PARA A MATRIZ DINÂMICA

Agora que já conhecemos algumas propriedades sobre a estabilidade linear de sistemas de partículas clássicas com interação de pares e confinadas em poço harmônico (cap. 2)

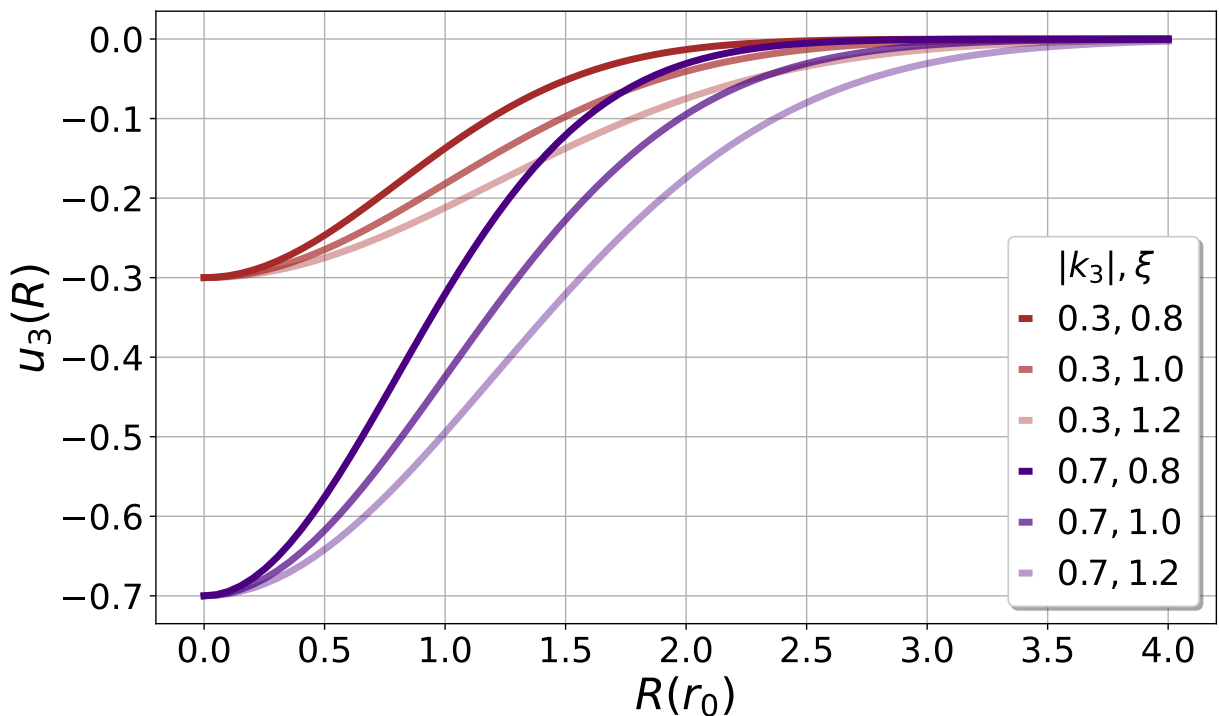
podemos considerar um modelo de interação de três corpos e avaliar as contribuições ou mudanças provocadas no sistema por essa nova interação. Nosso interesse aqui não é explorar de maneira geral as diversas formas de descrever um potencial de interação de três corpos, mas sim focar em um modelo específico de interação atrativa de curto alcance competindo com o potencial repulsivo de dois corpos. O modelo adotado é uma representação gaussiana que leva em consideração as distâncias entre as partículas, ou seja

$$V_3 \equiv -k_3 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N u_3(r_i, r_j, r_k) \quad (3.1)$$

$$u_3(r_i, r_j, r_k) = \exp\left(-\frac{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2}{2\xi^2}\right). \quad (3.2)$$

A intensidade da interação de três corpos é controlada pelo parâmetro k_3 e o comprimento ξ indica a largura da curva gaussiana para o potencial. Podemos ver na Fig. 21 a dependência do potencial de três corpos em função da distância $R = \sqrt{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2}$ para alguns valores de intensidade k_3 e de largura da gaussiana (ou alcance da interação de três corpos).

Figura 21 – Gráfico do potencial de três corpos em função da distância $R = \sqrt{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2}$ para alguns valores de k_3 e ξ . As distâncias estão definidas em unidades de r_0 e o potencial está denotado por U_{3b} .



Fonte: O autor.

Para estudar as propriedades mecânicas desse sistema devemos determinar a contribuição

de três corpos \mathcal{D}_3 (Eq. 2.15) na MD, portanto

$$\mathcal{D}_3 = \partial_{\alpha p} \partial_{\beta \ell} V_3 = -k_3 \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N \partial_{\alpha p} \partial_{\beta \ell} u_3.$$

Realizando a primeira derivação e aplicando a regra da cadeia na exponencial, teremos

$$\begin{aligned} \partial_{\beta \ell} u_3 &= u_3 \partial_{\beta \ell} \left(-\frac{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2}{2\xi^2} \right) \\ &= -\frac{u_3}{2\xi^2} \partial_{\beta \ell} (r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2) \\ &= -\frac{u_3}{\xi^2} [r_{ij} (\partial_{\beta \ell} r_{ij}) + r_{ik} (\partial_{\beta \ell} r_{ik}) + r_{jk} (\partial_{\beta \ell} r_{jk})]. \end{aligned}$$

Note que as derivadas nos parênteses são análogas a Eq.2.19 ($\partial_{\beta \ell} r_{ij} = \frac{\Delta_{\beta ij}}{r_{ij}} \Gamma_{lij}$), assim podemos substituí-las e encontrar

$$\partial_{\beta \ell} u_3 = -\frac{u_3}{\xi^2} [\Gamma_{lij} \Delta_{\beta ij} + \Gamma_{lik} \Delta_{\beta ik} + \Gamma_{ljk} \Delta_{\beta jk}]. \quad (3.3)$$

Prosseguindo no cálculo da derivada em relação a x_p^α , utilizamos a regra do produto da derivação em que um dos termos é a mesma exponencial u_3 que calculamos anteriormente na Eq. 3.3, mas tomando o cuidado de substituir $\ell \rightarrow p$ e $\beta \rightarrow \alpha$, logo

$$\partial_{\alpha p} \partial_{\beta \ell} u_3 = -\frac{1}{\xi^2} [(\Gamma_{lij} \Delta_{\beta ij} + \Gamma_{lik} \Delta_{\beta ik} + \Gamma_{ljk} \Delta_{\beta jk}) \partial_{\alpha p} u_3 + u_3 \partial_{\alpha p} (\Gamma_{lij} \Delta_{\beta ij} + \Gamma_{lik} \Delta_{\beta ik} + \Gamma_{ljk} \Delta_{\beta jk})].$$

As derivadas dos termos se tornam,

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha p} [\Gamma_{lij} \Delta_{\beta ij} + \Gamma_{lik} \Delta_{\beta ik} + \Gamma_{ljk} \Delta_{\beta jk}] &= \delta_{\alpha \beta} [\Gamma_{lij} \Gamma_{pij} + \Gamma_{lik} \Gamma_{pik} + \Gamma_{ljk} \Gamma_{pjk}] \\ \partial_{\alpha p} u_3 &= -\frac{u_3}{\xi^2} [\Gamma_{pij} \Delta_{\alpha ij} + \Gamma_{pik} \Delta_{\alpha ik} + \Gamma_{pjk} \Delta_{\alpha jk}]. \end{aligned}$$

Agrupando todos os termos e representando-os por $\partial_{\alpha p} \partial_{\beta \ell} u_3 = T_{ijk;p\ell}^{\alpha\beta}$, teremos

$$\begin{aligned} T_{ijk;p\ell}^{\alpha\beta} &= u_3 \delta^{\alpha\beta} (\Gamma_{lij} \Gamma_{pij} + \Gamma_{lik} \Gamma_{pik} + \Gamma_{ljk} \Gamma_{pjk}) + \\ &-\frac{u_3}{\xi^2} (\Gamma_{pij} \Delta_{\alpha ij} + \Gamma_{pik} \Delta_{\alpha ik} + \Gamma_{pjk} \Delta_{\alpha jk}) (\Gamma_{lij} \Delta_{\beta ij} + \Gamma_{lik} \Delta_{\beta ik} + \Gamma_{ljk} \Delta_{\beta jk}), \end{aligned} \quad (3.4)$$

de modo que a contribuição de três corpos para a MD é dada pelos elementos de matriz

$$(\mathcal{D}_3)_{p\ell}^{\alpha\beta} = \frac{k_3}{\xi^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N T_{ijk;p\ell}^{\alpha\beta}. \quad (3.5)$$

A MD do sistema com interação de pares e de três corpos em poço harmônico pode ser escrita como

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta;pl} = k_1 A_{pl}^{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \left[k_2 \frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{lij}}{r_{ij}^2} B_{ij}^{\alpha\beta}(I) + \frac{k_3}{3\xi^2} \sum_{\substack{k \neq j \\ k \neq i}}^N T_{ijk;pl}^{\alpha\beta} \right], \quad (3.6)$$

onde os termos $A_{pl}^{\alpha\beta}$, $B_{ij}^{\alpha\beta}(I)$ e $T_{ijk;pl}^{\alpha\beta}$ são descritos pelas Eqs. (2.31, 2.27 e 3.4) respectivamente.

Com a MD do sistema podemos calcular os modos normais a partir das configurações de equilíbrio obtidos por simulação numérica. Na próxima seção vamos analisar alguns resultados para o sistema contendo apenas $N = 3$ partículas.

3.2 SISTEMAS COM UMA ÚNICA CAMADA

Como vimos no capítulo 2 os aglomerados contendo três partículas se cristalizam formando um triângulo equilátero posicionadas a uma distancia R do centro do potencial confinador, resultado da competição entre o confinamento e o potencial de interação de dois corpos. Uma primeira comparação seria avaliarmos as mudanças promovidas na configuração com relação ao raio da camada e a energia total em função do parametro de três corpos k_3 . A energia desse caso particular pode ser escrita como

$$\mathcal{U} = \frac{k_1}{2} \sum_{i=1}^3 r_i^2 + k_2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j>i} u_2 - k_3 e^{-\mathcal{S}} \quad (3.7)$$

onde u_2 representa o potencial de pares e $\mathcal{S} \equiv \frac{r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2}{2}$ e $\xi \equiv 1$. Nesse caso esperamos que o termo de três corpos contribua para a aproximação das partículas e assim reduza o tamanho do anel ao qual o triângulo esteja inscrito. Uma vez que a configuração esteja em equilíbrio estável, então a força total na i -ésima partícula deve ser nula. Portanto podemos calcular o raio da camada impondo que a força seja nula, ou seja

$$\vec{F}_i = -k_1 \vec{r}_i - 3k_3 e^{-\mathcal{S}} (\vec{r}_i - \vec{r}_*) + k_2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \frac{A(r_{ij})}{r_{ij}^2} \vec{r}_{ij} = 0. \quad (3.8)$$

Aqui, \vec{r}_* é o vetor posição do centro de massa da configuração e $A(r)$ é definido como

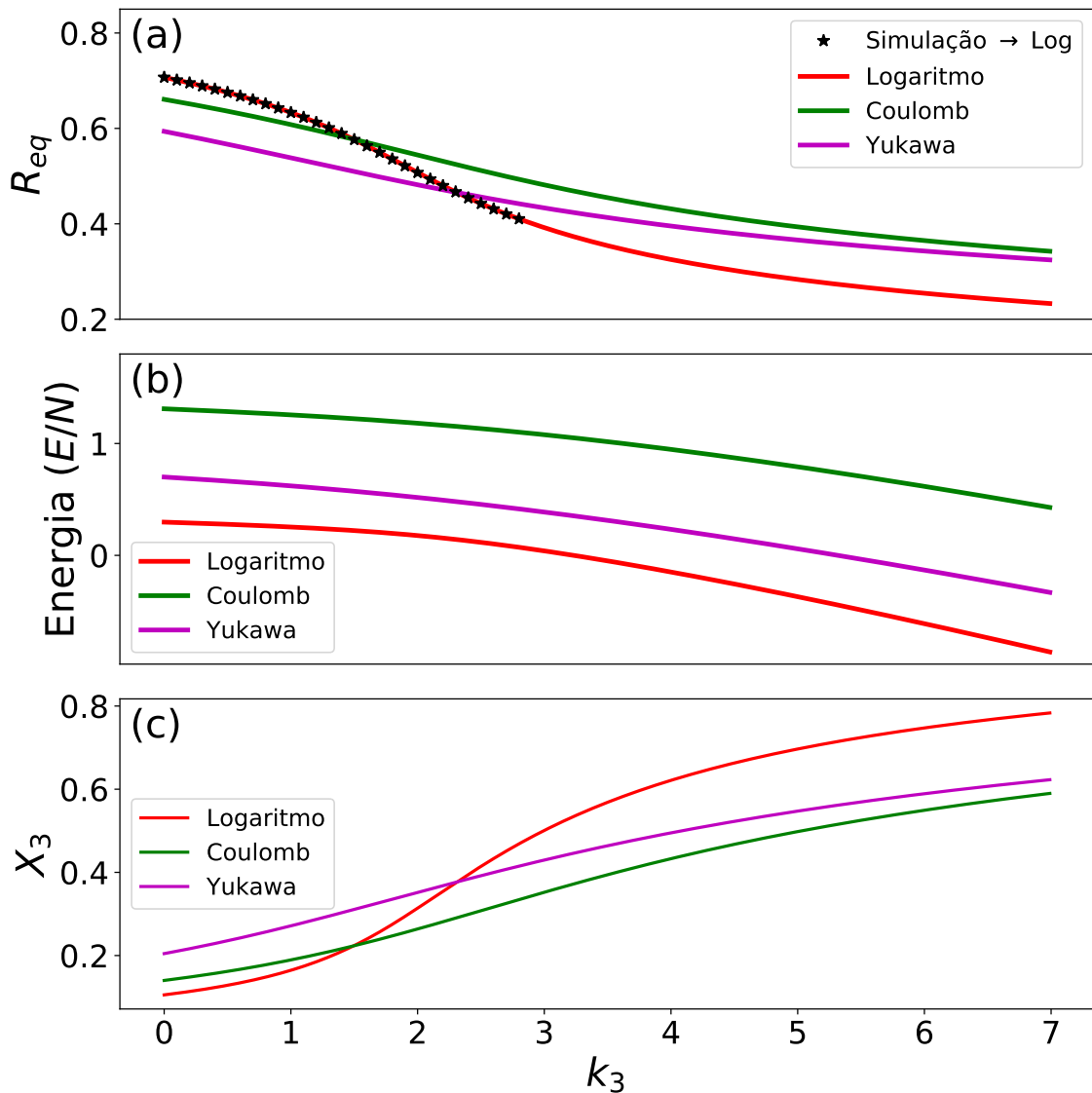
$$A(r) = \left\{ \begin{array}{ll} 1, & \text{para } V_2 = -\ln r, \\ (1 + \kappa r) V_2(r), & \text{para } V_2 = \frac{e^{-\kappa r}}{r}. \end{array} \right\} \quad (3.9)$$

Reagrupando os termos da Eq. 3.8 chega-se a seguinte equação transcendental para o raio de equilíbrio em função da distância radial $r = \sqrt{3}R$

$$f(r) = \frac{2\mathcal{S}}{3} \left(k_3 e^{-S} + \frac{k_1}{3} \right) - k_2 \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ para } V_2 = -\ln r, \\ (1 + \kappa r) V_2(r), \text{ para } V_2(r) = \frac{e^{-\kappa r}}{r}. \end{array} \right\} \quad (3.10)$$

Calculamos as raízes da Eq. 3.10 para os três tipos de interação de pares com $k_2 = 1$ em função de k_3 e mostramos a dependência dos raios dos aglomerados na Fig. 22(a). Na Fig. 22(b) temos a energia total da configuração de equilíbrio em função de k_3 . Temos

Figura 22 – Gráficos de grandezas em função do parâmetro de três corpos para o caso $N = 3$. Em a) Temos o raio da camada formada pelo triângulo equilátero representado pelas linhas sólidas e as estrelas representando dados simulados para o caso Logarítmico, em b) mostramos a energia por partícula, E/N , para os três tipos de interação de pares. Em c) temos o deslocamento generalizado em função de k_3 .



Fonte: O autor.

um decaimento suave tanto na energia como no tamanho dos aglomerados à medida em

que aumentamos a contribuição de três corpos, sendo esse um dos efeitos notáveis que o sistema com três partículas exibe. A compactação do sistema pode acontecer de duas formas: Compactação suave ou abrupta à medida em que aumenta-se k_3 . Se utilizarmos o formalismo de Gibbs da termodinâmica, podemos compreender melhor a contribuição de três corpos, uma vez que identificamos a força de três corpos como uma força generalizada e seu deslocamento associado representando a taxa de variação da energia em função do parâmetro dessa força . Ou seja,

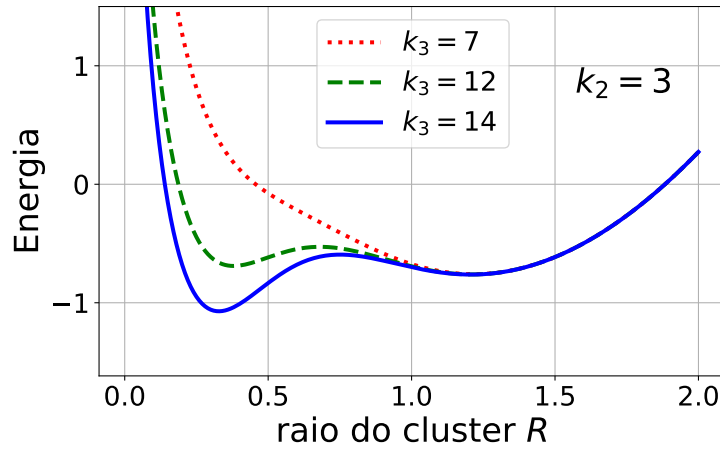
$$X_3 \equiv -\frac{\partial \mathcal{U}_{min}}{\partial k_3}. \quad (3.11)$$

O estado de equilíbrio do sistema também depende da intensidade do termo de três corpos e X_3 nos fornece uma medida dessa relevância. Mostramos a dependência de X_3 em função de k_3 para o triângulo equilátero na Fig. 22(c) para os três tipos de interação. Como podemos perceber o deslocamento X_3 também varia suavemente conforme o sistema se compacta, mas dependendo da intensidade do termo de dois corpos esse efeito pode ter uma relevância mais sensível com relação ao valor de k_3 , conforme veremos a seguir.

3.2.1 Transição de compactação para pequenos aglomerados

Como discutido anteriormente o sistema com três partículas reduz seu tamanho com o aumento do parâmetro k_3 de forma suave ou abrupta, dependendo da intensidade do termo de dois corpos. O que acontece é o surgimento de um segundo mínimo de energia que pode se transformar no mínimo global dependendo do conjunto de parâmetros (k_2, k_3) . Podemos visualizar esse processo na Fig. 23, onde mostramos a energia do triângulo equilátero com interação logarítmica em função do raio da camada para três valores distintos de k_3 e $k_2 = 3$ estando fixo. Perceba a criação do segundo mínimo com o aumento do termo de três corpos e , para a maior intensidade de k_3 , o mínimo se torna global, ou seja, o estado de menor energia deixa de ser o aglomerado com raio nas proximidades de $R \approx 1.25$ e se torna $R \approx 0.25$. Embora o sistema contendo apenas três partículas seja o mais simples dos casos envolvendo as interações de três corpos , ele exibe comportamentos bastante interessantes e seria difícil tratar cada caso isoladamente. Por outro lado podemos aferir os tipos de soluções da Eq. 3.10 com o auxílio do deslocamento generalizado X_3 que assume valores menores para soluções não compactadas e valores maiores quando o sistema prefere sua forma compacta. Mesmo sendo um guia indicativo dos tipos de soluções, X_3 não revela de maneira exata os limites dos

Figura 23 – Energia do sistema com $N = 3$ partículas e interação logarítmica para $k_2 = 3$ e diferentes valores de k_3 . A energia apresenta um único mínimo para $k_3 = 7$ e dois mínimos para os casos com $k_3 = \{12, 14\}$. Para o maior valor de k_3 o mínimo que surge se torna global.



Fonte: O autor.

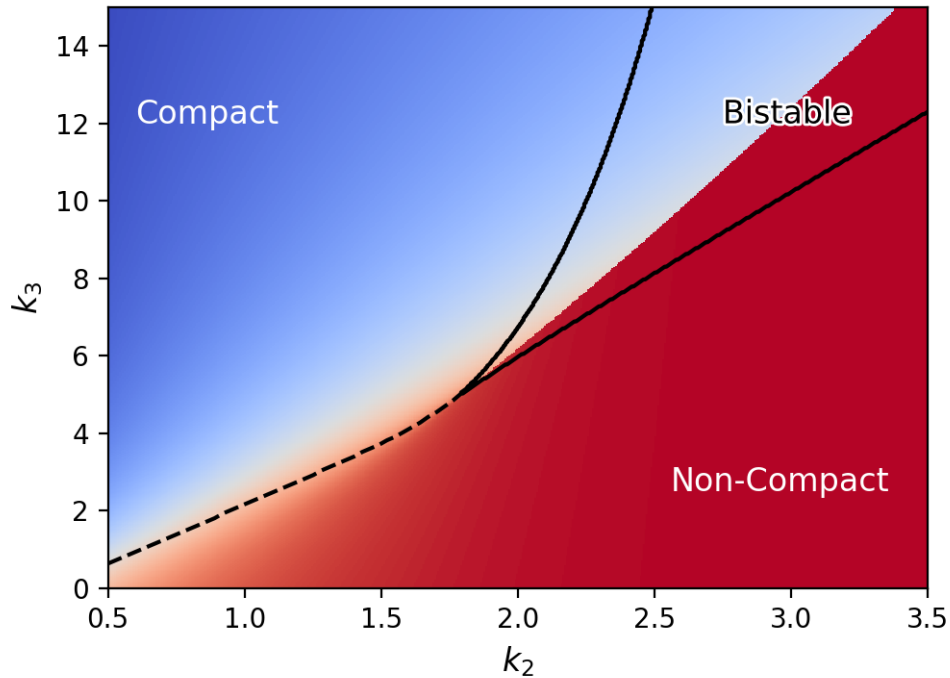
parâmetros k_2 e k_3 para os quais o sistema prefere um dos estados. Conseguimos obter essas regiões através da suscetibilidade, definida por

$$\chi_3 \equiv \frac{\partial X_3}{\partial k_3}. \quad (3.12)$$

Particularmente para o caso logarítmico, mostramos na Fig. 24 um mapa de calor associado à grandeza X_3 no espaço de parâmetros (k_2, k_3) quando $k_1 = 2.0$, onde são mostradas as regiões em que os tipos de soluções, compactadas e não compactadas, dominam o estado preferencial do sistema. A tonalidade avermelhada indica valores baixos correspondendo às soluções não compactadas e azul para valores mais altos com as soluções dos aglomerados compactados. Note também a região de biestabilidade delimitada pelas linhas sólidas. Na região de coexistência das soluções temos uma fronteira entre os dois estados bem definida, enquanto que fora dessa região é mais difícil percebê-la, sendo necessário recorrer ao valor máximo da suscetibilidade (linha tracejada) como separador das fases.

O mapa da Fig. 24 nos fornece uma visão de como o sistema poderia se comportar à medida em que percorremos o espaço de parâmetros com interação logarítmica. Podemos então investigar a estabilidade mecânica desse sistema fixando o parâmetro k_2 e percorrendo o termo de três corpos, por exemplo. Duas regiões que se comportam de maneiras distintas podem ser escolhidas, como $k_2 = 1.0$ e $k_2 = 2.0$, onde ocorrem transições de compactação suave e abrupta, respectivamente. Mostramos na Fig. 25 o espectro dos modos normais em função de k_3 para os dois casos $k_2 = 1$ e $k_2 = 2$ e seus respectivos autovetores são destacados nas inserções. Temos na Fig. 25(a) a situação de compactação suave para $k_2 = 1.0$, como

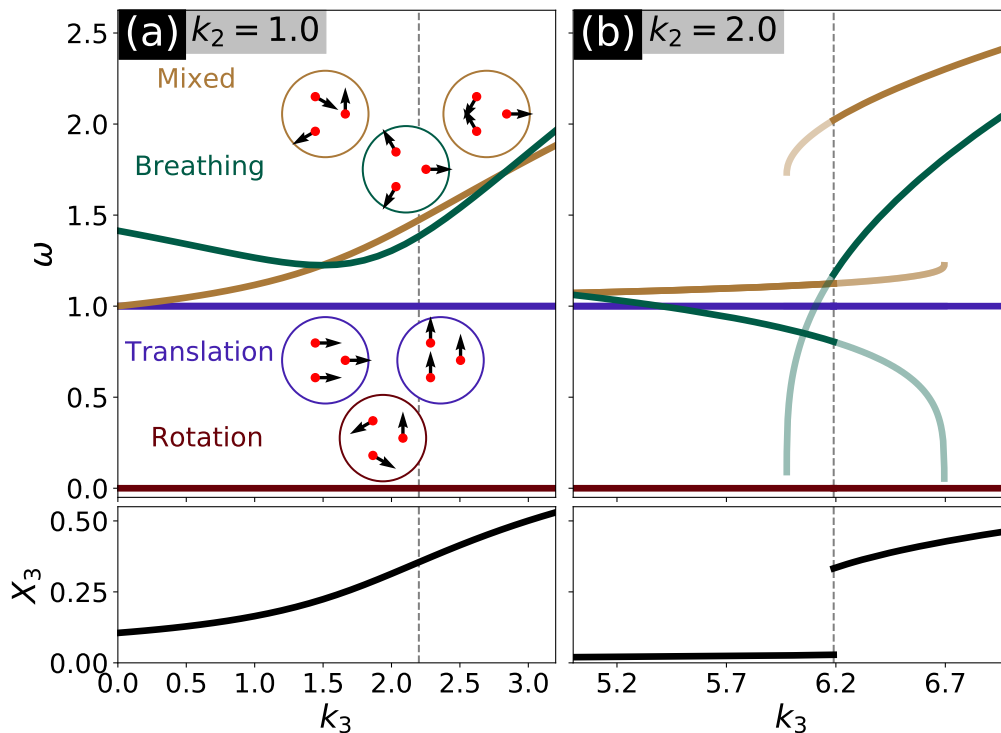
Figura 24 – Mapa de calor das soluções de equilíbrio no plano (k_2, k_3) para o caso $N = 3$ interagindo por potencial de pares logarítmico. O mapa apresenta dois estados de solução única (configurações compactadas e não compactadas), além de uma região de biestabilidade que contém os dois tipos de solução.



Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

pode ser visto no gráfico de X_3 em função de k_3 (parte inferior esquerda). Perceba que os modos de rotação de corpo rígido ($\omega = 0$) e translação ($\omega = 1$) não sofrem mudanças com a variação de k_3 , pois são modos envolvendo o movimento do centro de massa do sistema (sem movimento relativo entre as partículas) como esperado. As principais mudanças ocorrem nos modos misto e de respiração (ou do inglês Mixed e Breathing), respectivamente. A linha tracejada vertical corresponde ao valor máximo da suscetibilidade e indica o valor de k_3 em que o aglomerado reduz seu tamanho de maneira menos acelerada. Para interações de pares logarítmicas e confinamento harmônico é bem conhecido que o modo de respiração (do inglês, Breathing) está associado à maior autofrequência do espectro (PARTOENS; PEETERS, 1997), como vimos no cap. 1. Entretanto, percebemos uma suavização desse modo em uma faixa da intensidade de k_3 , indicando que esse modo de vibração pode ser excitado com menos energia dependendo do valor do parâmetro k_3 , embora esse modo volte a aumentar sua autofrequência para maiores intensidades do termo de três corpos, sendo o mais elevado quando $k_3 \geq 3$. A menor frequência não nula (LNF) corresponde ao modo de translação em todo intervalo mostrado na Fig. 25(a), devido a forte estabilidade estrutural dessa configuração

Figura 25 – Espectro das autofrequências para o aglomerado com $N = 3$ interagindo por potencial de pares logarítmico em duas situações: a) $k_2 = 1.0$ e b) $k_2 = 2.0$. Na parte inferior temos o deslocamento generalizado para as duas situações.



Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

não compactada, conforme percebemos anteriormente no mapa da Fig. 24, onde a região de separação entre as fases não apresenta de forma clara essa divisão entre as fases.

Quando a intensidade da interação de pares é mais elevada encontramos um comportamento mais brusco nos modos normais da Fig. 25(b). Nesse caso temos a coexistência de duas fases, uma compactada e outra não compactada, sendo as cores menos intensas associadas às configurações metaestáveis e as cores mais intensas os modos da configuração de menor energia. Observe que o padrão de cores indica os mesmos tipos de modos discutidos no caso anterior, mas aqui ocorre um salto brusco entre os modos da configuração não compactada (antes da linha tracejada com $k_3 \approx 6.2$) e do estado compactado (após a linha tracejada). Essa transição abrupta também é capturada pelo gráfico de X_3 que mostra um salto descontínuo, mostrando uma maior relevância do termo de três corpos para o estado de equilíbrio do sistema. Perceba agora que a LNF corresponde a modos elásticos distintos em regiões diferentes de k_3 e seu comportamento é de decaimento conforme a configuração metaestável sobrevive (linhas mais claras). A configuração não compactada encontra seu limite de estabilidade nas proximidades de $k_3 \approx 6.7$, região essa que mostra uma tendência de valores negativos

para a frequência desse modo e a configuração compactada persiste no sentido inverso nas proximidades de $k_3 \approx 6.0$.

O comportamento de compactação abrupta também é observado para os outros tipos de interação de pares e sistemas maiores, onde o comportamento dos modos normais permanece qualitativamente idêntico à nossa discussão anterior. Discutiremos a seguir outro tipo de transição presente em sistemas maiores de tal modo que a análise da LNF nos fornecerá informações sobre a estabilidade mecânica do sistema assim como discutido para o caso $N = 3$.

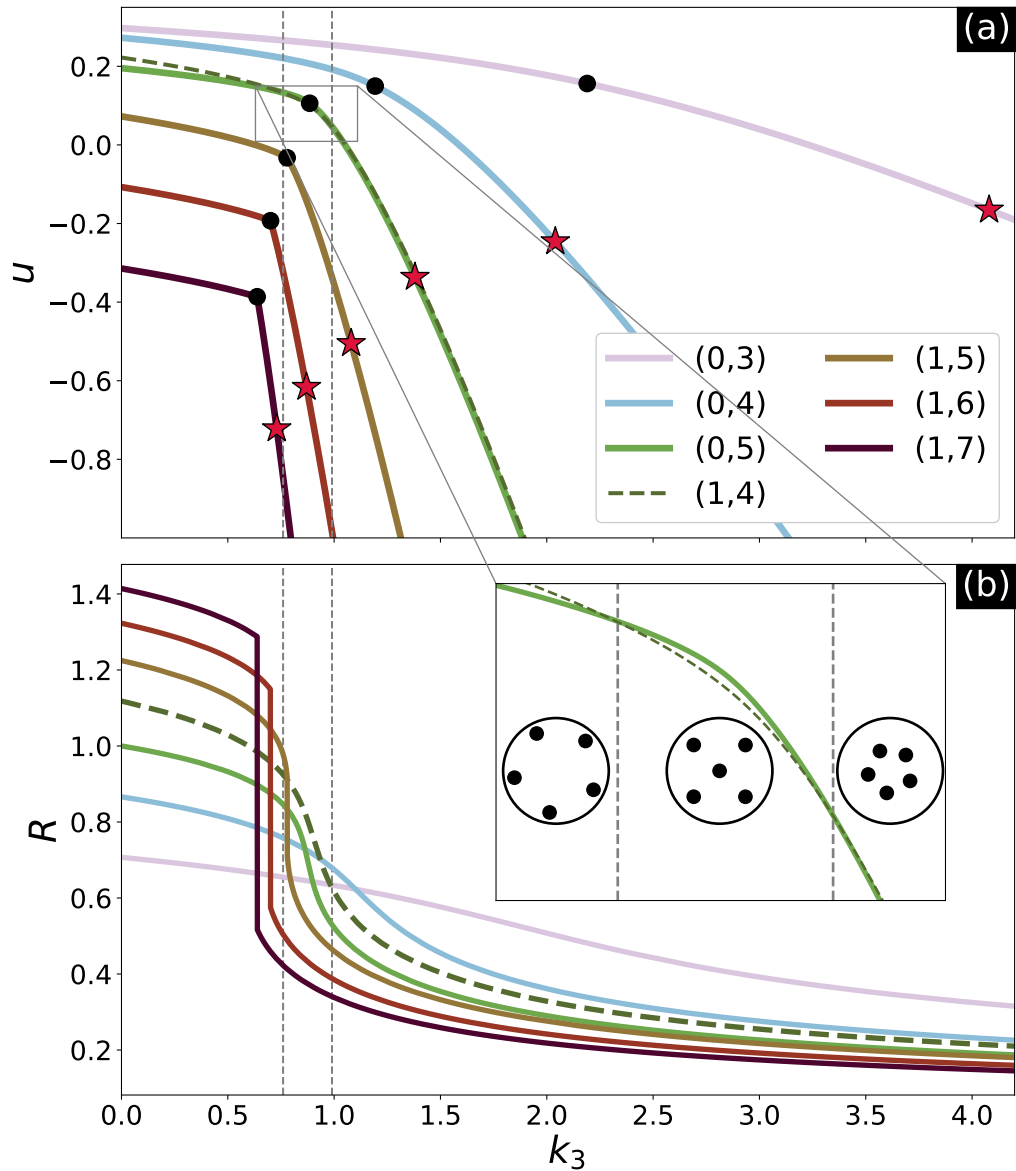
3.2.2 Transições estruturais e autosustentabilidade

Outro efeito observado é a mudança estrutural de configurações cujo arranjo de camadas não está presente nos sistemas sem interação de três corpos. Para exemplificação temos na Fig. 26(a) as energias de aglomerados das configurações com diferentes quantidades de partículas $N \leq 8$ e $k_2 = 1.0$. Perceba que no caso $N = 5$ temos duas curvas associadas às configurações $(0, 5)$ e $(1, 4)$ que disputam o papel de configuração de menor energia com a variação de k_3 . Na Fig. 26(b) temos os raios de equilíbrio das mesmas configurações, uma inserção ampliando a curva da energia de $N = 5$ e as respectivas configurações de menor energia.

A primeira transição ocorre entre as configurações não compactadas $(0, 5) \rightarrow (1, 4)$. Pode-se perceber que o raio do quadrado centrado na Fig. 26(b) é um pouco maior que o raio do pentágono na região da transição estrutural, portanto o aglomerado sofre a transição com um leve aumento do raio da camada. Com o aumento da intensidade de k_3 temos uma redução suave do tamanho do aglomerado até ocorrer a segunda transição entre as configurações compactadas $(1, 4) \rightarrow (0, 5)$. Temos assim um sistema que além da compactação sofre uma migração de partículas buscando formar configurações mais estáveis. Essas configurações não são observadas com frequência em sistemas com interações de pares logarítmicas. Investigamos essas transições estruturais do cluster com $N = 5$ para intensidade de dois corpos $k_2 = 1.2$, valor esse que permite coexistência das fases compactada e não compactada, na Fig. 27.

Pelo fato de transições estruturais ocorrerem nesse sistema é particularmente interessante verificar o comportamento da LNF. O intervalo onde ocorrem as transições é $k_3 \in [1.00, 1.40]$ e novamente utilizamos o esquema de cores para representar os tipos de modos do sistema. Curiosamente o modo elástico que sofre um abrandamento é o modo misto ou de migração de uma partícula para dentro da estrutura de camadas. Esse aglomerado não compacto se torna metaestável na região entre $k_3 \in [1.13, 1.30]$. Nessa região de metaestabilidade da

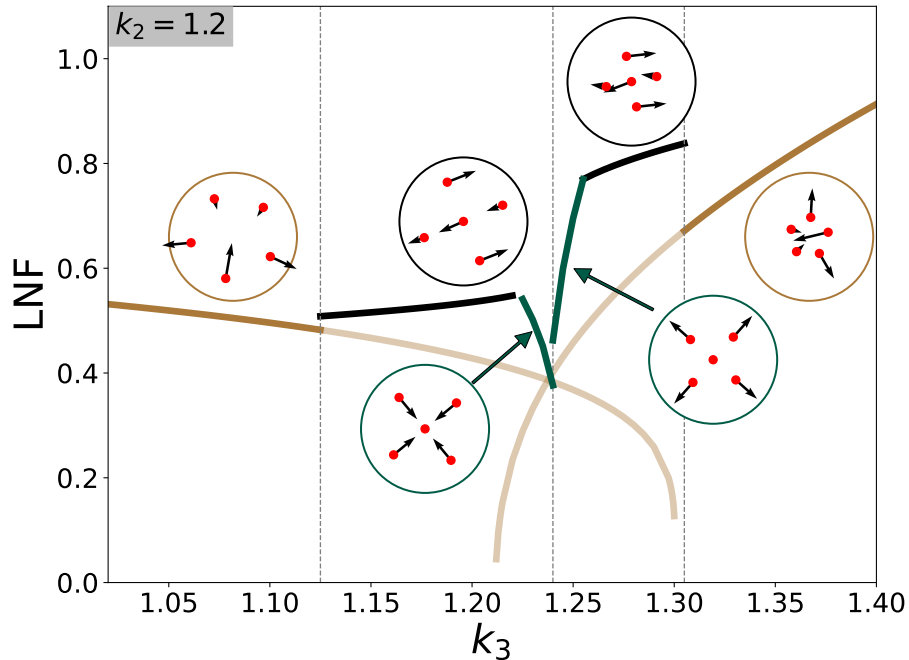
Figura 26 – Energia e raio em função de k_3 para os aglomerados com número de partículas $N = [3 - 8]$ com interação de pares logarítmica.



Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

configuração (0,5), o estado de menor energia é (1,4), onde sua versão não compactada se tornou o estado fundamental em $k_3 \approx 1.13$ como pode ser visto na Fig. 27. Sua LNF corresponde ao modo associado ao movimento de cisalhamento, ou seja, se fizermos o caminho de volta em k_3 o modo mais baixo (mais fácil de ser excitado) favorece uma mudança estrutural para deslocar a partícula central. As duas configurações não estão compactadas, mas uma segunda transição de compactação da configuração (1,4) ocorre em $k_3 \approx 1.24$ sendo indicado pelo salto descontínuo no modo de respiração. Outra transição ocorre em $k_3 \approx 1.30$ entre as configurações compactadas (1,4) \rightarrow (0,5).

Figura 27 – Menor frequência não nula (LNF) para o aglomerado com $N = 5$ e interação entre pares logarítmica para $k_2 = 1.2$, com seus autovetores associados. As curvas da LNF dos estados metaestáveis em cores mais claras.

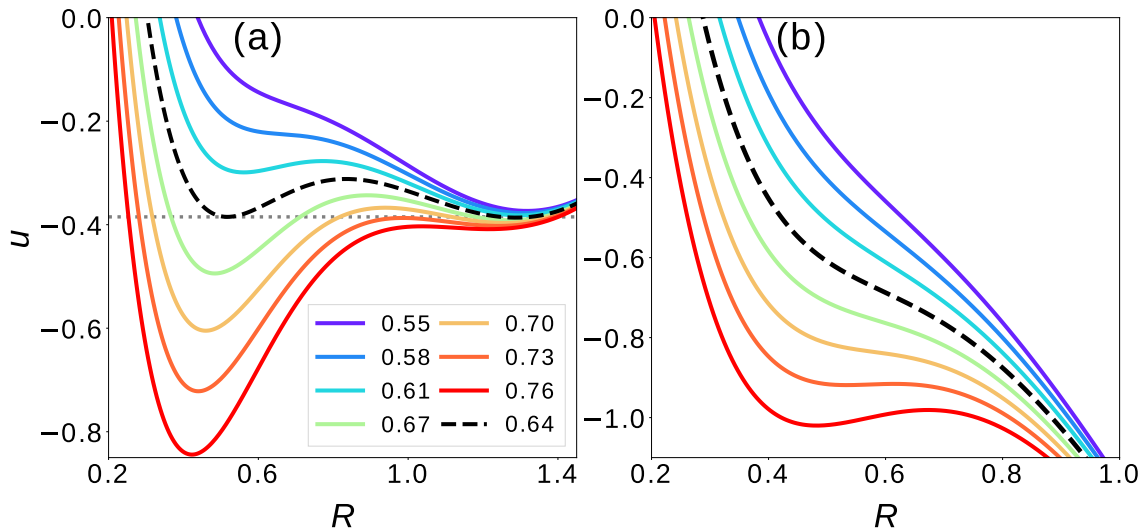


Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

Também mostramos a LNF das configurações metaestáveis $(0, 5)$ compactada e não compactada na região $1.13 \leq k_3 \leq 1.30$, onde o quadrado centralizado é o estado de menor energia. Perceba que a configuração metaestável não compactada é mecanicamente estável em um intervalo de k_3 maior que a configuração metaestável compactada.

Quando aumenta-se a intensidade de k_3 acima do valor de compactação k_3^c (pontos pretos na Fig. 26(a)) outro efeito interessante acontece. Se o valor da intensidade de três corpos atingir o valor k_3^* o sistema permanece coeso mesmo se o potencial de confinamento for retirado, ou seja, o sistema se torna autosustentável a partir de k_3^* (estrelas na Fig. 26(a)). A Fig. 28 mostra o comportamento da energia do aglomerado com $N = 8$ partículas em função do raio da camada. Na Fig. 28(a) temos dois mínimos a partir da intensidade $k_3 = 0.64$, permitindo as duas soluções para a posição de equilíbrio do sistema. Na Fig. 28(b) temos a energia do mesmo sistema, mas sem confinamento e, nesse caso, um único mínimo local é formado quando $k_3 \geq 0.73$. Esse estado de autosustentabilidade é metaestável uma vez que o sistema pode acessar energias mais baixas quando as partículas se afastarem. O termo de três corpos é necessário para que exista esse efeito de autosustentabilidade, mas não gera um

Figura 28 – Gráficos da energia em função do raio R da camada para o sistema com $N = 8$ partículas: (a) com confinamento e (b) sem confinamento. Perceba que um mínimo local surge em (b) para valores de $k_3 > 0.70$ (cores mais avermelhadas), indicando uma possível autosustentabilidade do aglomerado mesmo sem confinamento externo.



Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

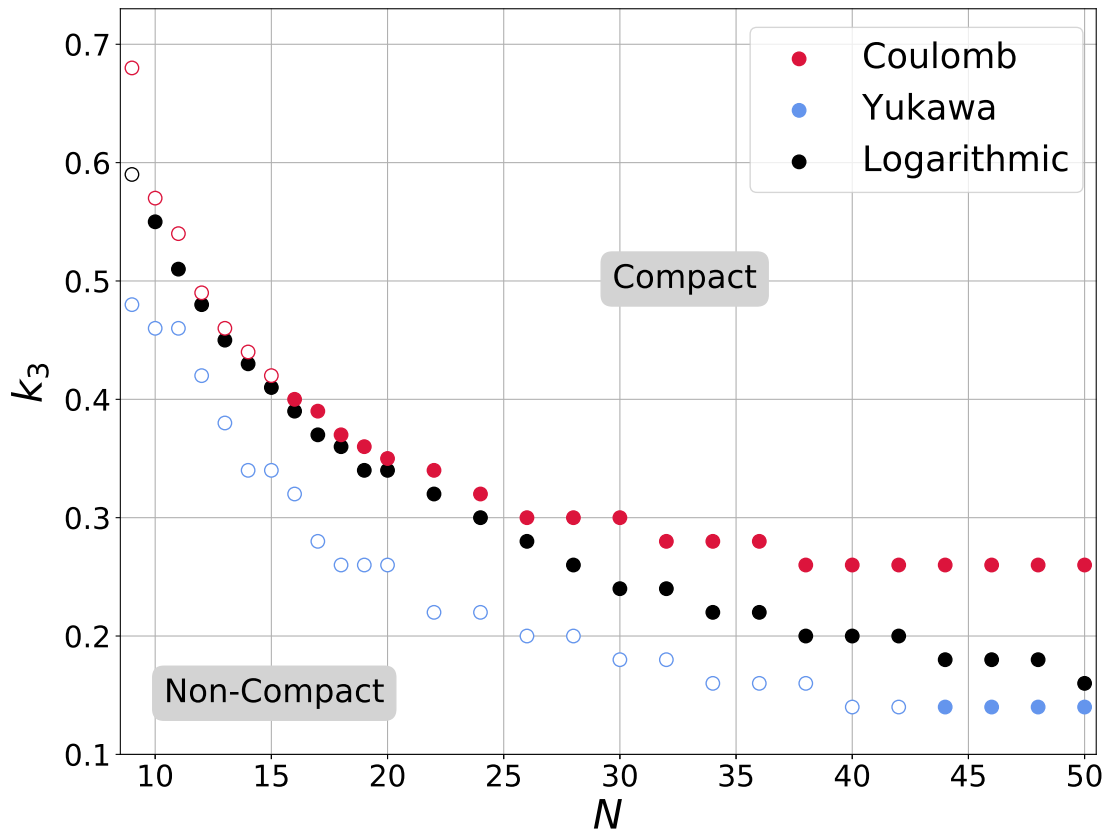
estado globalmente estável, ou seja, para que o estado seja globalmente estável é necessário considerar a contribuição dos três potenciais, confinamento, dois corpos e três corpos.

3.3 SISTEMAS COM MÚLTIPLAS CAMADAS

A estabilização dos aglomerados com quantidade de partículas $N > 8$ ainda forma estruturas de camadas, entretanto, em geral, elas não formam polígonos regulares como acontece nos sistemas pequenos. Ainda assim as transições estrutural e de compactação estão presentes para os três tipos de interação de pares, acontecendo em diferentes valores de k_3 . Com o aumento do número de partículas do sistema aumenta-se a quantidade de estados metaestáveis acessíveis, mas podemos limitar nosso olhar para uma faixa do espaço de parâmetros com $k_2 = 1$ e aferir em qual valor de k_3 o sistema admite soluções compactadas ou não em função do número de partículas. Nesses casos a suscetibilidade χ_3 assume seu valor máximo na fronteira entre as soluções de interesse. Assim, mostramos na Fig. 29 qual é o valor de k_3 que separa as duas soluções em função do número de partículas do sistema. Nesses pontos de suscetibilidade máxima o sistema pode sofrer compactação suave ou abrupta e indicamos esse efeito pelos pontos vazados e preenchidos, respectivamente.

A Fig. 29 nos revela que o aumento da quantidade de partículas do sistema necessita de

Figura 29 – Curvas de máxima suscetibilidade no plano (N, k_3) para os três tipos de interação de pares. Os pontos vazados/preenchidos representam compactação suave/abrupta.



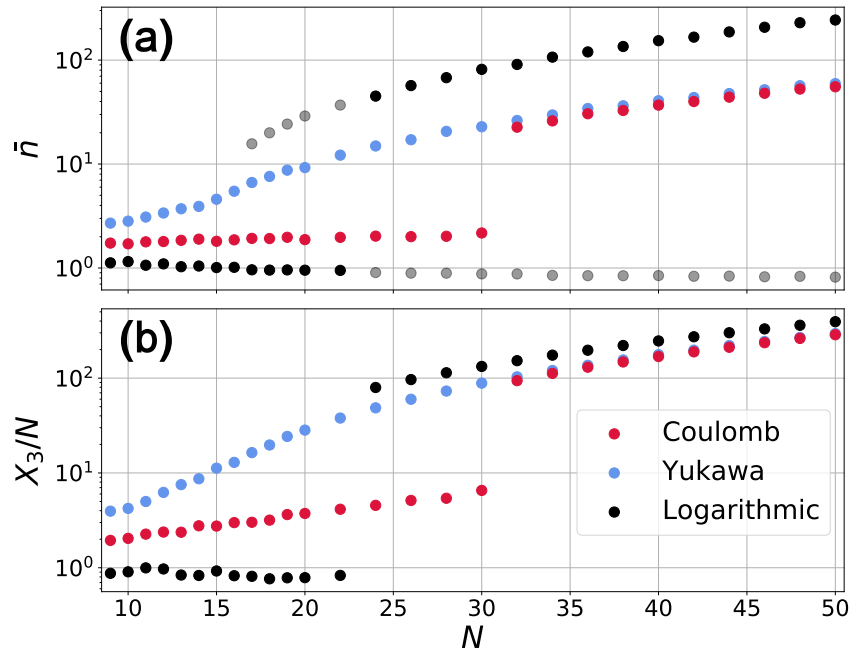
Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

intensidades menores do termo de três corpos para compactá-lo e esse comportamento pode ser explicado pelo fato de que o aumento do número de partículas provoca um aumento na quantidade de trios que contribuirão no termo de três corpos. Perceba que os sistemas com interação de Yukawa sofrem compactação para valores menores de k_3 pelo fato de possuir um alcance de interação menor em comparação com os casos Coulomb e Logarítmico.

Se fixarmos um valor para k_3 na Fig. 29, por exemplo $k_3 = 0.3$, temos aglomerados compactados para valores de $N \geq 24$ para interações logarítmicas. Para valores maiores de N entramos na região compacta com dominância do termo de três corpos em relação à interação logarítmica e a densidade média de partículas nesse caso deve sofrer um salto nessa região como pode ser visto na Fig. 30. Para a interação coulombiana os aglomerados até $N = 30$ mantem um pequeno crescimento em sua densidade - ver Fig. 30(a) - e sofrem compactação abrupta para sistemas maiores que $N = 30$. A interação Yukawa exibe compactação suave como pode ser verificado na variação da densidade e X_3 (Figs. 30(a) e (b), respectivamente) até $N \approx 42$.

As densidades das interações de pares Yukawa e Coulomb crescem quase monotonicamente

Figura 30 – Densidade de partículas em (a) e Deslocamento generalizado em (b) em função do número de partículas para os três tipos de interação de pares e valor de $k_3 = 0.3$.



Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

com o aumento de N , mas para o caso Log a densidade inicialmente decai até o valor limite $N = 22$ onde ocorre um salto indicando a compactação abrupta. Esse decaimento na densidade é resultado de uma predominância das interações de dois corpos antes da compactação, pois mesmo sem termos de três corpos esse decaimento ocorre para o caso logarítmico (maiores detalhes no apêndice B de (CORREIA et al., 2023)). No sentido oposto temos uma prevalência da interação de três corpos nos aglomerados compactados que exibem um aumento na densidade. Ambos os estados, compactado ou não, se mantêm como estados metaestáveis além do valor limite onde ocorre a transição abrupta, ou seja, $N \geq 22$. Eles foram representados por pontos cinza na Fig. 30(a). O comportamento da densidade exibe um alto grau de correlação com X_3 , corroborando nosso argumento sobre o mecanismo de aumento da quantidade de trios disponível para interações de três corpos discutido anteriormente.

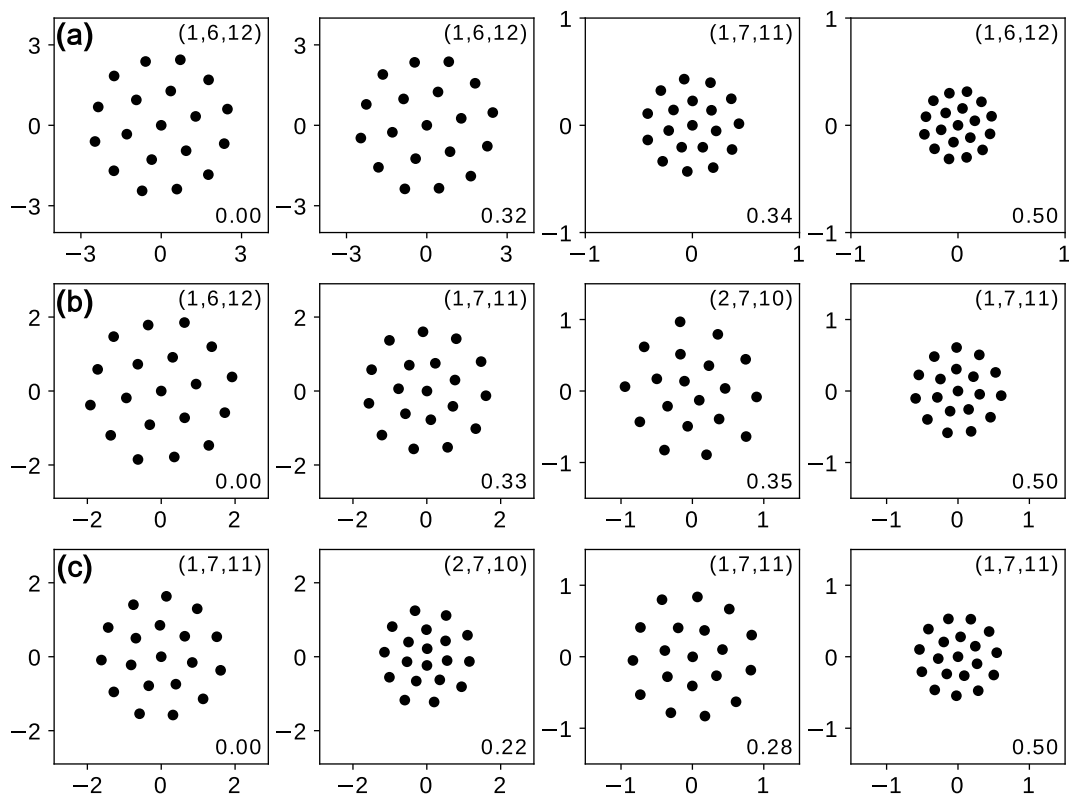
3.3.1 Estabilidade de configurações mágicas

Como discutido no capítulo 1 as configurações denominadas "mágicas" se mostram mais estáveis com relação à rotações intercamadas (SCHWEIGERT; PEETERS, 1995). Investigações sobre esse tipo de aglomerado foram realizadas para $N = 19$ com relação às variações no alcance do potencial de Yukawa (parâmetro κ) (KONG; PARTOENS; PEETERS, 2003). Transições

estruturais entre os estados $(1, 6, 12) \rightarrow (1, 7, 11)$ ocorrem quando se modifica o alcance do potencial. Aqui vamos olhar para essa mesma configuração, mas sob a perspectiva da interação de três corpos que apresenta metaestabilidade dessa configuração para os três tipos de interação, logaritmo, Coulomb e Yukawa ($\kappa = 1$). As transições estruturais que surgem aqui se assemelham ao estudo realizado para $N = 5$ anteriormente, onde tem-se compactação do sistema além da transição estrutural.

Exibimos na Fig. 31 as configurações metaestáveis para o número mágico ($N = 19$) para os três tipos de interação de pares, (a) Logaritmo, (b) Coulomb e (c) Yukawa. Para inte-

Figura 31 – Configuração para o número mágico $N = 19$ em função de k_3 para os três tipos de interação de pares, (a) Logaritmo, (b) Coulomb e (c) Yukawa.

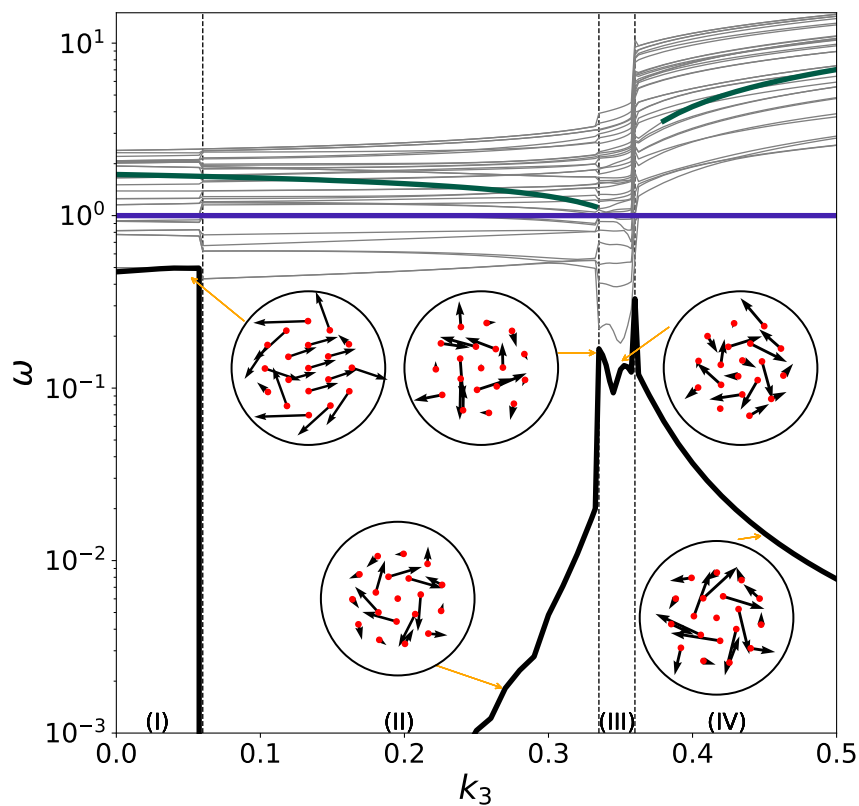


Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

rações logarítmicas na Fig. 31(a) as configurações que alternam entre estável e metaestável são as $(1, 6, 12)$ e $(1, 7, 11)$, mas para o caso Coulomb na Fig. 31(b) e Yukawa na Fig. 31(c) surge uma terceira configuração $(2, 7, 10)$. Essas configurações podem ser pensadas a partir de sua comensurabilidade, sendo $(1, 6, 12)$ e $(2, 7, 10)$ configurações totalmente e parcialmente comensuráveis, respectivamente, enquanto a configuração $(1, 7, 11)$ é incomensurável. Informações sobre a estabilidade dessas configurações são mostradas no espectro de frequências da Fig. 32 para o potencial de interação de pares coulombiano. Mostramos todo o espectro com

linhas cinza e destacamos os modos de translação e respiração com o padrão de cores utilizados nos casos de sistemas pequenos. Destacamos também a LNF pela cor preta e mostramos alguns autovetores associados a cada região de k_3 . Observe que antes da primeira transição estrutural (região I) a LNF corresponde ao modo de migração (misto) como vimos para o caso com $N = 5$ e na região II ela se torna o modo de rotação intercamada, pois essa configuração é agora incomensurável (1, 7, 11), ou seja, suas camadas são mais suscetíveis às rotações entre si e por isso sua frequência é relativamente baixa. O aumento do parâmetro k_3 na região

Figura 32 – Espectro dos modos normais do número mágico $N = 19$ em função de k_3 para o potencial de interação de pares coulombiano.



Fonte: Figura adaptada de (CORREIA et al., 2023).

II provoca um aumento da LNF até encontrar a fronteira com a região III, onde ocorre a transição para (2, 7, 10). Essa configuração por ser parcialmente comensurável se mostra mais estável que a anterior e por isso sua LNF é mais alta. Embora a LNF da configuração (1, 7, 11) tenha aumentado na região II com o aumento de k_3 essa tendência não pode ser considerada como um efeito da interação de três corpos simplesmente, pois na região IV, a LNF dessa mesma configuração decai com o aumento do termo de três corpos. Isso nos mostra que as mudanças na LNF são mais complexas do que meras situações de causa-efeito.

Concluimos que o modelo de interação de três corpos gaussiano utilizado nesse trabalho

nos permitiu avaliar vários efeitos interessantes e nos mostrou que pequenas contribuições podem provocar mudanças estruturais ainda não relatadas para interação puramente de pares, além de comportamentos dinâmicos não triviais como visto para a configuração mágica $N = 19$ anteriormente. Especificamente os modos normais nos auxiliaram na compreensão do comportamento do sistema diante das transições estruturais e de compactação. Os resultados apresentados aqui, em conjunto com o trabalho (CORREIA et al., 2023), podem ser relevantes para vários dos sistemas da matéria condensada/mole, como colóides carregados (RUSS et al., 2002), vórtices supercondutores (CHAVES et al., 2011) ou skyrmions magnéticos (NETO; SILVA, 2022).

4 AGLOMERADOS COM DENSIDADES NÃO UNIFORMES

Vem de dentro do peito
 Essa chama que acende
 Meu corpo inteiro não pode parar
 Eu sou mandingueiro de lá da
 Bahia
 Axé capoeira salve Abadá

Abadá capoeira

Abordaremos nesse capítulo os sistemas de partículas clássicas com interação de pares coulombianas (sem termos de três corpos) com interesse em gerar um perfil de densidade não uniforme. Para produzir essas estruturas é necessário calcular o potencial que aprisionará as partículas. Utilizaremos um mapeamento conforme espiral (Eq. 2.39) de uma rede uniforme no espaço complexo w que produzirá a densidade desejada no espaço complexo z . Estamos interessados principalmente em investigar as estruturas e propriedades espectrais desses sistemas para regimes em que a anarmonicidade do potencial é mais elevada. Nossa atenção, nesse trabalho, será dedicada aos sistemas com poucas partículas ($N \leq 30$), onde conseguiremos explorar vários detalhes desses aglomerados.

Como resultado inicial apresentamos o cálculo do potencial confinador pelo mapeamento conforme e em seguida a MD do sistema. Posteriormente avaliaremos algumas configurações obtidas para o regime quase harmônico como verificação de consistência do nosso potencial confinador. Discutiremos os efeitos associados ao confinamento para o regime conforme e as principais consequências sobre os sistemas contendo múltiplas camadas tanto com respeito a transições de fase estrutural como dos seus MNV.

4.1 CÁLCULO DO POTENCIAL CONFINADOR E MATRIZ DINÂMICA

Consideramos o problema de partículas coulombianas armadilhadas por um potencial $u_1(r)$ que reproduz dois comportamentos de interesse: para pequenas distâncias, o potencial se comporta como um poço harmônico, enquanto que, para longas distâncias, o potencial é especialmente desenhado para produzir um perfil de densidade não uniforme mapeada por uma transformação conforme¹. Assim, para um dado número de partículas, as partículas tendem

¹ Detalhes sobre mapeamento conforme se encontram no capítulo 2

a se agrupar mais próximas ao centro para altas intensidades do potencial de confinamento, experimentando um perfil mais harmônico do potencial, enquanto que para intensidades menores, elas se espalham e experimentam o perfil conforme. Desta forma estamos interessados em obter a forma funcional do potencial externo, $u_1(r)$, necessário para provocar um perfil de densidade não uniforme do tipo: $\eta(r) \propto 1/r^2$.

O hamiltoniano configuracional, V , do sistema em termos do potencial externo e de interação de pares é da forma:

$$V(\{q_j\}) = \underbrace{\sum_{i=1}^N u_1(\{q_j\})}_{\text{Potencial externo}} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N u_2(q_i, q_j)}_{\text{Potencial de 2 corpos}}, \quad (4.1)$$

no limite contínuo podemos descrever o funcional de energia livre em termos da densidade (REICHL, 2016) como

$$\mathcal{F}[\eta(r)] = \int dr \eta(r) u_1(r) + \frac{1}{2} \int dr dr' \eta_2(r, r') u_2(r, r'). \quad (4.2)$$

onde η é a densidade de partículas, η_2 a densidade de pares de partículas. Para encontrar esse potencial hipotético podemos usar o funcional de energia livre (Eq. 4.2) na aproximação de campo médio minimizando-o em relação à densidade, ou seja,

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \eta(r)} = 0, \quad (4.3)$$

fornecendo como resultado

$$u_1(r) = - \int dr' \eta(r') u_2(r, r') + \mathcal{C}. \quad (4.4)$$

O cálculo do potencial $u_1(r)$ pode ser realizado no espaço dos momentos, k , a partir das transformadas de Fourier da densidade η e do potencial de pares u_2 (HASSANI, 2009), ou seja

$$u_1(r) = - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \tilde{u}_2(k) \tilde{\eta}(k) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) = TIF [\tilde{u}_2(k) \tilde{\eta}(k)], \quad (4.5)$$

onde denotamos a transformada inversa de Fourier por TIF .

A densidade no espaço de Fourier para esse tipo de mapeamento conforme ($z = e^{cw}$) já foi calculada anteriormente por (SILVA et al., 2020), onde introduziram um *cut-off* (r_0) na densidade para evitar divergência na integração. Com essa mudança a densidade no espaço real foi reescrita como $\eta(r) = \frac{\eta_0 r_0^2}{r_0^2 + r^2}$, onde η_0 é a densidade do aglomerado na região circular de raio igual ao *cut-off* r_0 .

A densidade transformada encontrada é dada por (SILVA et al., 2020)

$$\tilde{\eta}(\vec{k}) = 2\pi\eta_0 r_0^2 K_0(kr_0), \quad (4.6)$$

onde $K_0(x)$ é a função de *Bessel* modificada de segundo tipo (BRAGA, 2006).

Comentários importantes

1. A introdução do *cut-off* na densidade foi empregada para evitar divergência no cálculo de $\tilde{\eta}$ e, como consequência, as partículas aprisionadas na região delimitada pelo *cut-off* se organizarão com densidade uniforme $\eta = \eta_0$, reproduzindo o confinamento harmônico;
2. Além da densidade transformada, é necessário calcular o potencial de interação no espaço de Fourier e esse processo deve ser realizado para o tipo específico de interação interpartícula. Nas próximas seções realizaremos esse procedimento para interações do tipo Coulomb e Yukawa.
3. Temos um vínculo entre a densidade e o número total de partículas do sistema, onde todas as partículas ficam confinadas em uma região circular de raio \mathcal{R} , portanto

$$N = \int d\vec{r} \eta(\vec{r}) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}} \eta_0 r_0^2 (r_0^2 + r^2)^{-1} r dr,$$

onde a densidade foi reescrita com o *cut-off* e a integral permite encontrar o valor da densidade η_0 , ou seja,

$$\eta_0 = \frac{N}{\pi r_0^2 \ln\left(1 + \frac{\mathcal{R}^2}{r_0^2}\right)}. \quad (4.7)$$

4. O número de partículas acumulado em função da distância radial no limite contínuo fica

$$N(r) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^r r' dr' \eta(r) = \frac{N \ln(1 + r^2/r_0^2)}{\ln(1 + \mathcal{R}^2/r_0^2)}; \quad (4.8)$$

5. A constante \mathcal{R} utilizada anteriormente foi introduzida para representar a distância na qual todas as partículas confinadas não podem ultrapassar, portanto o tamanho do aglomerado é sempre menor do que \mathcal{R} .

4.1.1 Confinamento com interação tipo Coulomb

O potencial de interação de pares para partículas coulombianas é dado por

$$u_2 = \frac{\lambda\epsilon}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (4.9)$$

A transformada de Fourier desse potencial é dada por (HASSANI, 2009)

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_2(\vec{k}) &\equiv \frac{1}{2\pi} \int d\vec{r}' u_2(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty r' dr' d\phi e^{ikr' \cos \phi} \frac{\lambda\epsilon}{r'} \\
&= \lambda\epsilon \int_0^\infty dr' \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{ikr' \cos \phi} \\
&= \lambda\epsilon \int_0^\infty dr' J_0(kr') \\
&= \frac{\lambda\epsilon}{k}, \tag{4.10}
\end{aligned}$$

onde utilizamos as seguintes identidades das funções de Bessel de primeira espécie (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2014):

$$\int_0^{2\pi} d\phi e^{ikr \cos \phi} = 2\pi J_0(kr) \tag{4.11}$$

$$\int_0^\infty dr J_0(kr) = \frac{1}{k}. \tag{4.12}$$

Substituindo as Eqs. 4.6 e 4.10 na Eq. 4.5 teremos,

$$\begin{aligned}
u_1(r) &= - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \left(\frac{\lambda\epsilon}{k} \right) (2\pi\eta_0 r_0^2 K_0(kr_0)) \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r}) \\
&= -\eta_0 r_0^2 \lambda\epsilon \int k dk \frac{K_0(kr_0)}{k} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \exp(-ikr \cos \theta) \\
&= -\eta_0 r_0^2 \lambda\epsilon \int dk K_0(kr_0) J_0(kr) \\
&= -\eta_0 r_0^2 \lambda\epsilon \left[\frac{\Gamma(1/2)\Gamma(1/2)}{2r_0\Gamma(1)} F_c(1/2, 1/2; 1; -r^2/r_0^2) + u_0 \right], \tag{4.13}
\end{aligned}$$

onde fizemos uso das Eqs. (4.11, 4.12), e da identidade (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2014)

$$\int dx x^{-\xi} K_\mu(ax) J_\nu(bx) = G(a, b, \xi, \mu, \nu) F_c(A, B; C; -b^2/a^2). \tag{4.14}$$

Note que a Eq. 4.13 foi obtida após substituirmos os parâmetros (a, b, μ, ν, ξ) por $(r_0, r, 0, 0, 0)$, Γ é a função *Gamma* (BRAGA, 2006), $F_c(A, B; C; -x^2)$ é a função *hipergeométrica* de índices $(1, 2)$ com parâmetros (A, B, C) (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2014) e as constantes A, B, C e G , são dadas por

$$A = \frac{\nu - \xi + \mu + 1}{2} \tag{4.15}$$

$$B = \frac{\nu - \xi - \mu + 1}{2} \tag{4.16}$$

$$C = 1 + \nu \tag{4.17}$$

$$G[a, b, \xi, \mu, \nu] = b^\nu \frac{\Gamma(A)\Gamma(B)}{2^{\xi+1} a^{\nu-\xi+1} \Gamma(C)}. \tag{4.18}$$

O potencial de confinamento assume a forma:

$$V_1(r) = \frac{\lambda\epsilon}{r_0} \sum_{i=1}^N u_1(\vec{r}_i), \quad (4.19)$$

$$u_1(r_i) = -2C_N F_c \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; -\frac{r_i^2}{r_0^2} \right) + u_0, \quad (4.20)$$

onde definimos $C_N \equiv 2\pi N/4 \ln \left(1 + \frac{\mathcal{R}^2}{r_0^2} \right)$ e u_0 é uma constante.

Se considerarmos o limite em que a região de confinamento seja muito menor que a escala de comprimento do sistema, ou seja, $\mathcal{R} \ll r_0$, a expansão do potencial $u_1(r)$ em torno da origem é dada por

$$\begin{aligned} u_1 &= -2C_N F_c \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; -\frac{r_i^2}{r_0^2} \right) + u_0 \\ &= -2C_N \left[1 + \left(\frac{1}{4} \right) \alpha^2 + O(\alpha^4) + \dots \right] + u_0, \end{aligned}$$

onde $\alpha \equiv i \frac{r}{r_0}$. Desprezando os termos de ordem maior que 2 o potencial se torna,

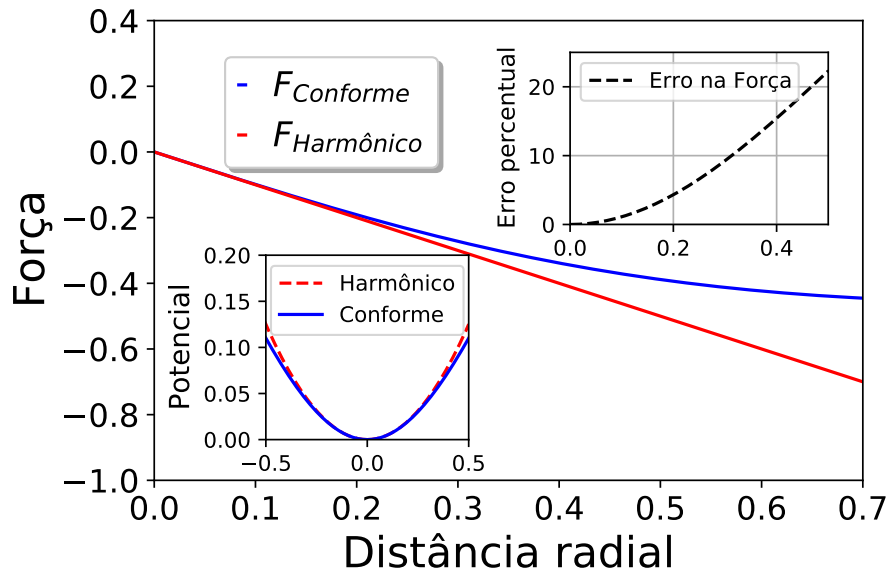
$$u_1(r) \approx \left(\frac{C_N}{2r_0^2} \right) r^2 - 2C_N + u_0, \quad (4.21)$$

como o potencial é nulo na origem, então $u_1(0) = -2C_N + u_0 = 0$, a constante é dada por $u_0 = 2C_N$ e o potencial conforme se torna harmônico nesse regime com $\mathcal{R} \ll r_0$. Vemos, portanto, que para distâncias menores que a escala de comprimento o potencial conforme é aproximadamente harmônico. Mostramos na Fig. 33 uma comparação entre as forças de confinamento em função da distância radial de uma partícula e na inserção inferior temos os potenciais parabólico e conforme. Na inserção superior apresentamos o erro percentual entre a força restauradora do potencial conforme em relação ao caso harmônico. Utilizaremos como critério para aproximação harmônica do potencial conforme uma tolerância de até 10% no erro da força, ou seja, o regime harmônico é obtido se o sistema possuir tamanho de confinamento $\mathcal{R} \leq 0.3r_0$. Adotaremos a partir daqui que todas as grandezas envolvendo distâncias estarão adimensionalizadas em unidades de r_0 e potencial em termos da energia $\frac{\lambda\epsilon}{r_0}$.

4.1.2 Matriz dinâmica para confinamento conforme coulombiano

Vamos considerar novamente o cálculo da MD, mas agora o confinamento possui uma dependência com a distância radial das partículas mais complicada envolvendo uma função

Figura 33 – Gráfico comparativo da força e potencial parabólico e conforme. Na inserção superior mostramos o erro percentual na força conforme com relação ao caso parabólico.



Fonte: O autor.

especial, a função hipergeométrica, ou seja,

$$V_1 = \sum_{i=1}^N u_1 = \sum_{i=1}^N 2C_N \left[1 - F_c\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; z_i\right) \right],$$

com $C_N = 2\pi N/4 \ln(1 + \mathcal{R}^2)$, $z_i = -r_i^2$ e $F_c(a, b; c; -x^2)$ é a função hipergeométrica com parâmetros $a = 1/2, b = 1/2, c = 1$. Assim como para o confinamento harmônico, queremos determinar a contribuição do confinamento conforme para a MD, então

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}_1)_{p\ell}^{\alpha\beta} &= \partial_{\alpha p} \partial_{\beta \ell} V_1 = \partial_{\alpha p} \sum_{i=1}^N \partial_{\beta \ell} u_1 \\ &= -\partial_{\alpha p} \left[2C_N \sum_{i=1}^N \partial_{\beta \ell} F_c\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; z_i\right) \right] \\ &= -\partial_{\alpha p} \left[2C_N \sum_{i=1}^N \left(\frac{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}{1}\right) F_c\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; z_i\right) \partial_{\beta \ell} z_i \right], \\ &= -\partial_{\alpha p} \left[2C_N \sum_{i=1}^N \left(\frac{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}{1}\right) F_c\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; z_i\right) (-2x_i^\beta \delta_{i\ell}) \right], \end{aligned}$$

em que fizemos uso da regra da cadeia e da propriedade envolvendo a função hipergeométrica (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2014), a saber: $\partial_y F_c(a, b; c; x) = \frac{ab}{c} F_c(a+1, b+1; c+1; x) \partial_y x$.

Realizando a segunda derivada encontramos

$$\begin{aligned}
(\mathcal{D}_1)_{pl}^{\alpha\beta} &= -(-2 \cdot 2C_N) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \partial_{\alpha p} \left[F_c \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; z_\ell \right) x_\ell^\beta \right] \\
&= C_N \left[x_\ell^\beta \partial_{\alpha p} F_c \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; z_\ell \right) + F_c \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; z_\ell \right) \partial_{\alpha p} x_\ell^\beta \right] \\
&= C_N \left[x_\ell^\beta (9/8) F_c \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}; 3; z_\ell \right) \partial_{\alpha p} z_\ell + F_c \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; z_\ell \right) \partial_{\alpha p} x_\ell^\beta \right] \\
&= C_N \delta_{pl} \left[\delta^{\alpha\beta} F_c \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; -r_\ell^2 \right) - \left(\frac{3}{2} \right)^2 x_k^\alpha x_k^\beta F_c \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}; 3; -r_\ell^2 \right) \right], \quad (4.22)
\end{aligned}$$

resultando, portanto, em

$$\mathcal{D}_{\alpha,\beta;kl} = \left[A_{pl}^{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{\Gamma_{pij} \Gamma_{lij}}{r_{ij}^2} B_{ij}^{\alpha\beta} \right] \quad (4.23)$$

$$A_{pl}^{\alpha\beta} = C_N \delta_{pl} \left[\delta^{\alpha\beta} F_c \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 2; -\frac{r_k^2}{r_0^2} \right) - \left(\frac{3}{2r_0} \right)^2 x_k^\alpha x_k^\beta F_c \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}; 3; -\frac{r_k^2}{r_0^2} \right) \right] \quad (4.24)$$

$$B_{ij}^{\alpha\beta} = \left[\delta^{\alpha\beta} - \frac{3(x_i^\alpha - x_j^\alpha)(x_i^\beta - x_j^\beta)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2} \right] \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (4.25)$$

onde o termo $\Gamma_{pij} = \delta_{pi} - \delta_{pj}$ como foi definido na Eq. 2.21.

4.1.3 Confinamento com interação do tipo Yukawa

Sendo as interações do tipo *Yukawa* o potencial de interação é da forma

$$u_2(\vec{r}) \equiv \frac{\lambda\epsilon}{r} \exp(-r/\lambda). \quad (4.26)$$

O procedimento de obtenção do potencial confinador é análogo ao desenvolvido para o caso de interação coulombiana e mostraremos somente as expressões calculadas. O potencial de interação no espaço de Fourier fica

$$\tilde{u}_2(\vec{k}) = \frac{2\pi\lambda^2\epsilon}{\sqrt{1 + \lambda^2 k^2}}. \quad (4.27)$$

Definindo $x \equiv \lambda k$, o potencial de confinamento conforme para partículas com interação de Yukawa é dado por

$$u_{yukawa} = -2\pi\eta_0 r_0^2 \epsilon \int_0^\infty \frac{x dx}{\sqrt{1 + x^2}} J_0(rx/\lambda) K_0(r_0 x/\lambda). \quad (4.28)$$

Note que o potencial conforme para interações do tipo *Yukawa* depende de uma integral definida, mas numericamente é possível resolver tal integral sem grandes problemas. No limite com $\lambda \rightarrow \infty$ resgatamos o potencial de Coulomb, ou seja, Eq. 4.27 \rightarrow Eq. 4.10.

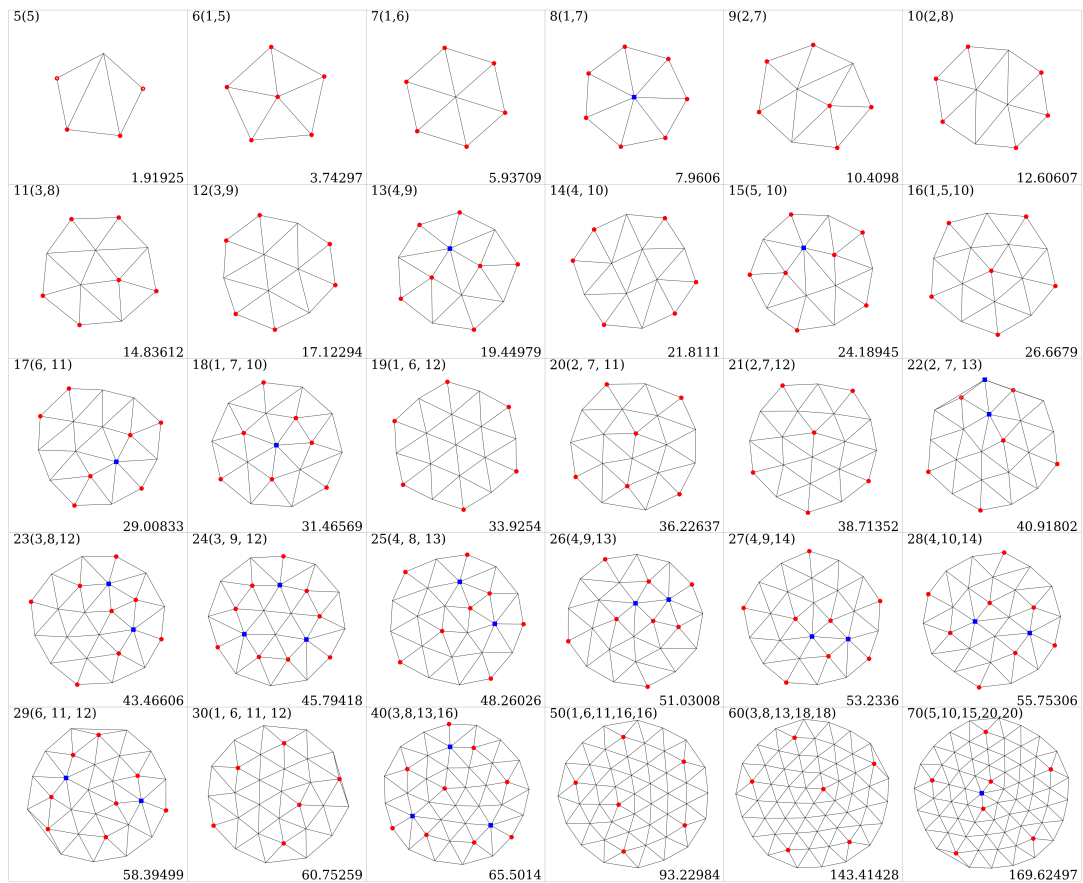
Nas próximas seções vamos abordar o sistema com interação coulombiana e analisar as propriedades estruturais e mecânicas dos aglomerados. O potencial de Yukawa para confinamento conforme (Eq. 4.28) obtido nesse trabalho também constitui um dos nossos resultados analíticos, mas aqui só nos concentraremos nos sistemas com interação coulombianas. Em trabalhos futuros voltaremos a explorar esses sistemas com interação de Yukawa.

4.2 RESULTADOS PARA APROXIMAÇÃO HARMÔNICA

Estudamos os sistemas na aproximação harmônica para o potencial conforme. Nesse regime os aglomerados de equilíbrio devem apresentar comportamento semelhante aos que foram apresentados nos capítulos (1 e 2), então reproduzimos simulações dos sistemas com N variando entre 5 e 70 partículas na aproximação harmônica. As configurações resultantes do processo de minimização da energia se agrupam em camadas devido a competição entre os potenciais de confinamento (simetria radial) e de interação como esperado. Mostramos na Fig. 34 os aglomerados obtidos. Com as configurações de equilíbrio calculamos os MNV e mostramos na Fig. 35 o espectro das autofrequências do lado esquerdo. É possível perceber uma concentração de autofrequências nas proximidades das frequências dos modos característicos para interações coulombianas em poço harmônico, ou seja, $\omega = \{0, \sqrt{2}, \sqrt{6}\}$, cujos modos são os de rotação de corpo rígido, translação e respiração, respectivamente. Mostramos também a DOS do lado direito para as simulações do caso harmônico e do regime quase parabólico do potencial conforme para comparação. O maior pico ocorre próximo à frequência do modo de translação pela fato do mesmo estar presente em todos os casos de forma degenerada como vimos no capítulo 2. Os resultados nesse regime se mostram em acordo com resultados já conhecidos na literatura (BEDANOV; PEETERS, 1994), (SCHWEIGERT; PEETERS, 1995).

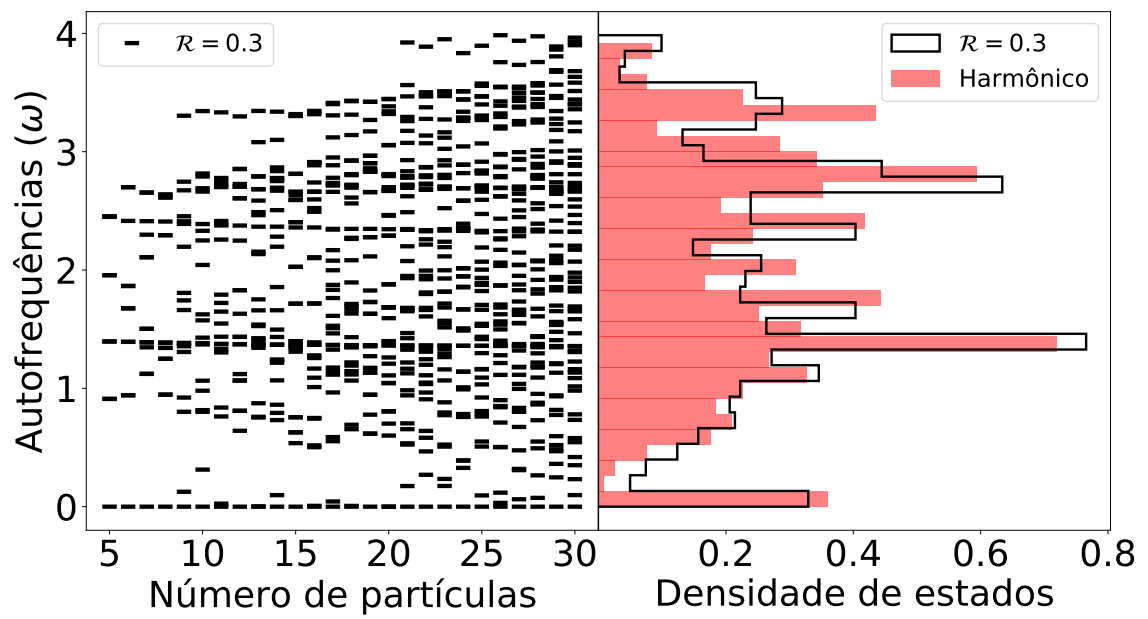
Discutiremos a seguir o regime conforme em que o perfil de densidade se torna não uniforme.

Figura 34 – Configurações de equilíbrio na aproximação harmônica $\mathcal{R} = 0.3$ para sistemas com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 70$. Os aglomerados foram representados por linhas que conectam as partículas vizinhas. Partículas que possuem número de vizinhos iguais a $\{5, 6, 7\}$ estão representadas por círculos vermelhos, sem representação e quadrados azuis respectivamente. Na parte superior esquerda de cada quadro está denotado o número de partículas e entre parênteses tem-se a estrutura de camadas da configuração. Na região inferior direita temos a energia da configuração.



Fonte: O autor.

Figura 35 – Espectro das autofrequências das configurações com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$. A figura do lado direito corresponde à densidade de estados das autofrequências para os casos harmônico e quase harmônico.

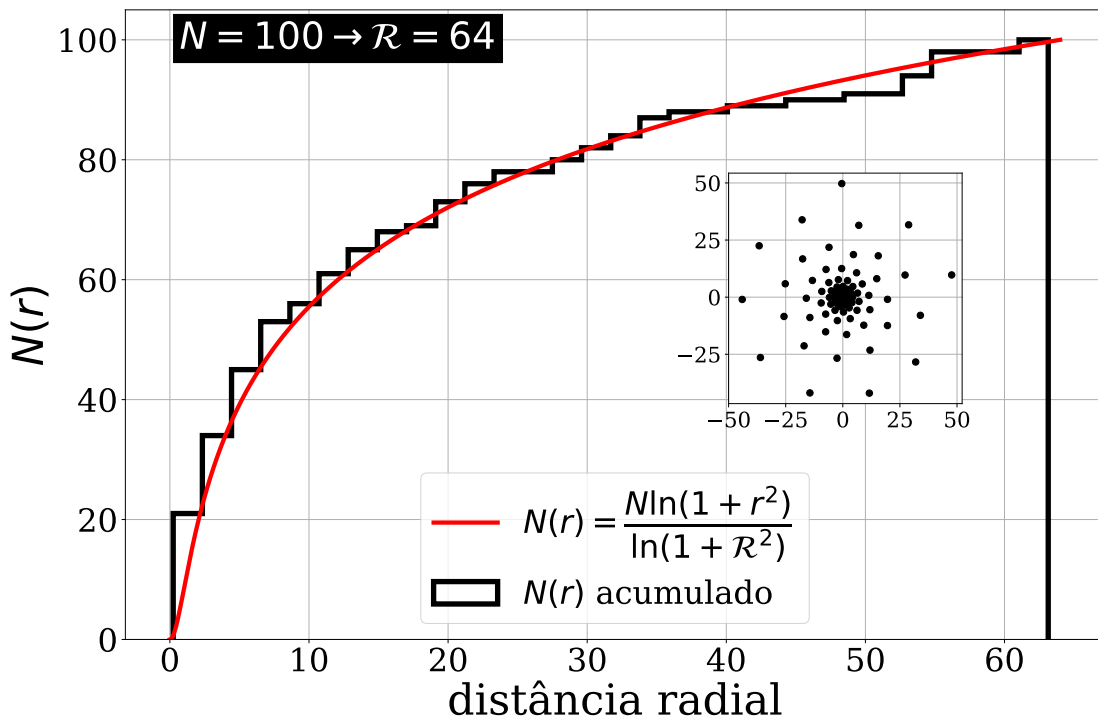


Fonte: O autor.

4.3 CONFINAMENTO CONFORME ($\mathcal{R} > 0.3$)

Pelos resultados apresentados na seção (4.2) conseguimos mostrar que o potencial projetado no limite em que $\mathcal{R} = 0.3$ reproduz resultados bastante conhecidos na literatura para confinamento harmônico. Concentraremos atenção aqui nas configurações obtidas no regime conforme e nas principais mudanças com relação ao caso harmônico. Realizamos simulações com quantidade de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$ e com diferentes graus de anarmonicidade \mathcal{R} do potencial confinador (podem ser consultadas no **apêndice A**). Antes de analisarmos os aglomerados, simulamos um caso teste para verificar se o perfil de densidade do sistema finito se aproxima do limite contínuo. Nesse caso consideramos um sistema com $N = 100$ partículas confinadas com parâmetro de anarmonicidade $\mathcal{R} = 64$ e representamos na Fig. 36 o número de partículas acumulado em função da distância. Perceba que o sistema apresenta uma boa concordância com o limite contínuo (Eq. 4.8).

Figura 36 – Número de partículas acumulado em função da distância radial para um aglomerado com $N = 100$ partículas e parâmetro de confinamento $\mathcal{R} = 64$. Na inserção temos o aglomerado com número de partículas $N = 100$ no plano (x, y) .



Fonte: O autor.

Os efeitos provocados pela anarmonicidade do potencial se revelaram no tamanho dos aglomerados, pois os mesmos aumentaram à medida em que aumentamos \mathcal{R} . Podemos explicar isso

pelo fato de a "constante de mola" efetiva $C_N \propto N/\ln(1 + \mathcal{R}^2)$ diminuir com o aumento de \mathcal{R} (para N fixo) permitindo assim uma acomodação mais afastada das partículas. Mostramos na Fig. 37 configurações de equilíbrio de sistemas com quantidade de partículas entre $N = 5$ e $N = 10$ para valores do parâmetro \mathcal{R} no intervalo $\mathcal{R} \in [1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512]$. O efeito de alongamento dos aglomerados pode ser observado claramente no caso com $N = 5$ partículas, que se agrupa como quadrados para valores menores de \mathcal{R} e losangos no extremo oposto. Além do efeito de alongamento das configurações é possível observar várias estruturas exibindo padrões repetitivos parcialmente ou totalmente quando tornamos o potencial mais conforme. Uma maneira alternativa de observar essas estruturas pode ser realizada transformando as coordenadas polares (r, ϕ) nas variáveis (u, v) do plano $w = f(z) = u + iv$ pelo mapeamento conforme $w = \ln z$, onde $z = re^{i\phi}$. Dessa forma a configuração mapeada no plano w ainda preservará os ângulos que formam no plano z , mas permitirá uma melhor observação da estrutura interna do sistema. Ilustramos na Fig. 38 algumas configurações nos dois espaços (z e w) para o confinamento $\mathcal{R} = 256$ e diferentes quantidades de partículas.

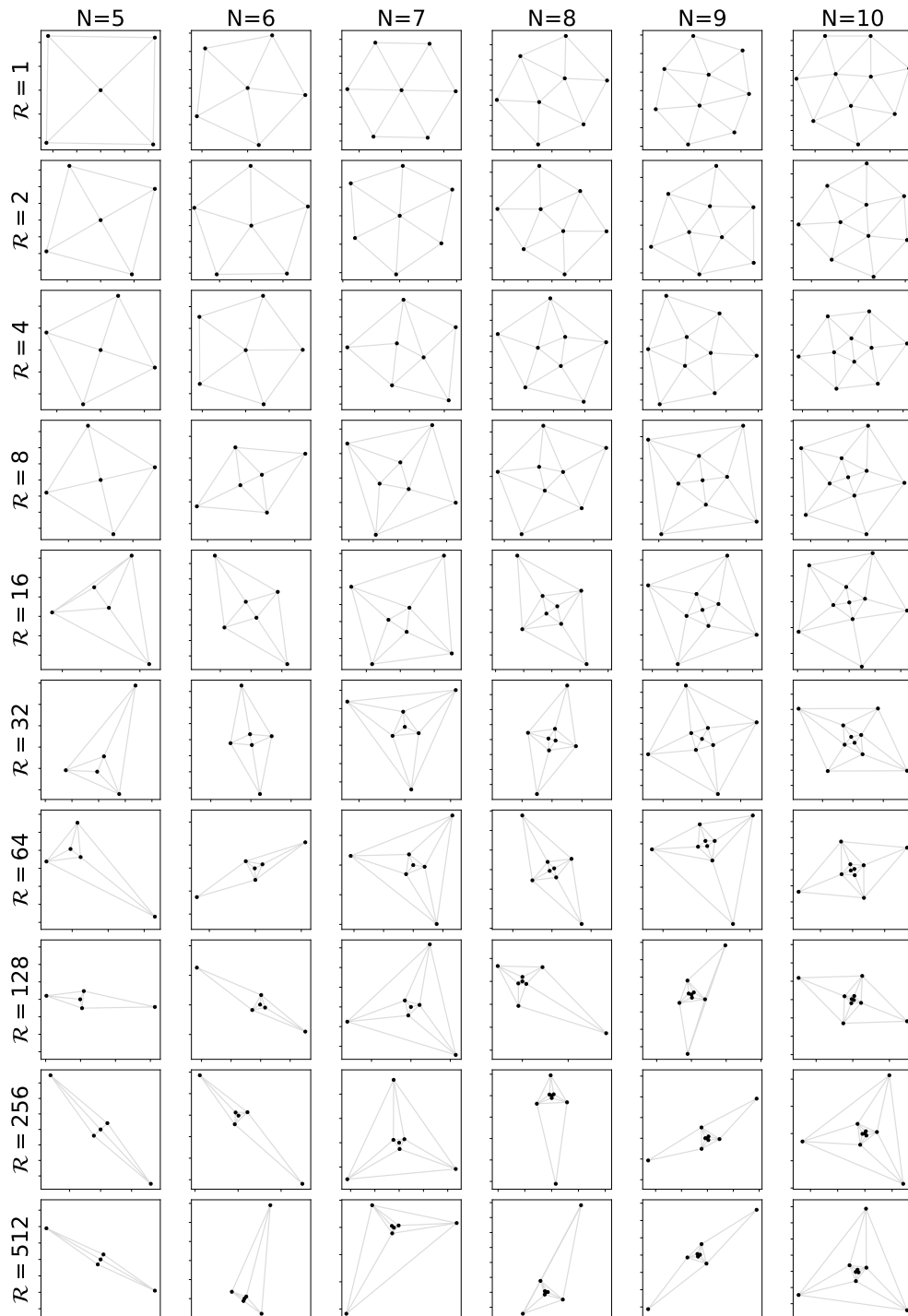
Nos agregados da Fig. 38 mostramos quatro tipos distintos de redes no plano conforme e dois deles apresentam mesmo número de partículas por camadas. Estas *configurações comensuráveis*², se diferenciam pela orientação das linhas retas que ligam os primeiros vizinhos no espaço w , ou seja, temos as configurações *concêntricas* com linhas verticais ($N = [10, 20, 21]$) e as *radiais* com linhas horizontais ($N = [24, 25]$). Em nossos resultados percebemos que estruturalmente todas as configurações concêntricas possuem uma partícula central (centradas)³, e as radiais são não centradas. Perceba que em alguns casos a quantidade de partículas não é suficiente para formar todas as camadas com o mesmo ordenamento, mas ainda assim percebemos a formação de estruturas mantendo a regularidade no interior do aglomerado, embora a camada mais externa quebre a regra. Temos as estruturas concêntrica ($N = 20$) e radial ($N = \{25\}$), indicando uma forte tendência a se organizarem formando esses padrões incompletos.

Os outros dois tipos de redes correspondem aos casos com $N = 22$ e $N = 23$, mostrados na Fig. 38, que representam a rede quiral e mista respectivamente. Essas configurações apresentam defeitos topológicos em suas estruturas deformando as configurações. Esses defeitos

² Configurações comensuráveis são aquelas em que as camadas mais externas possuem número de partículas como um múltiplo inteiro da camada mais interna.

³ Não exibimos a partícula central na figura para uma melhor visualização da estrutura, mas é possível perceber as linhas cortando o limite esquerdo nas figuras, indicando a existência de uma partícula nessa direção.

Figura 37 – Configurações obtidas para confinamento conforme. O número de partículas varia entre $N = [5, 10]$ e a região de confinamento é de $\mathcal{R} = [1, 512]$.

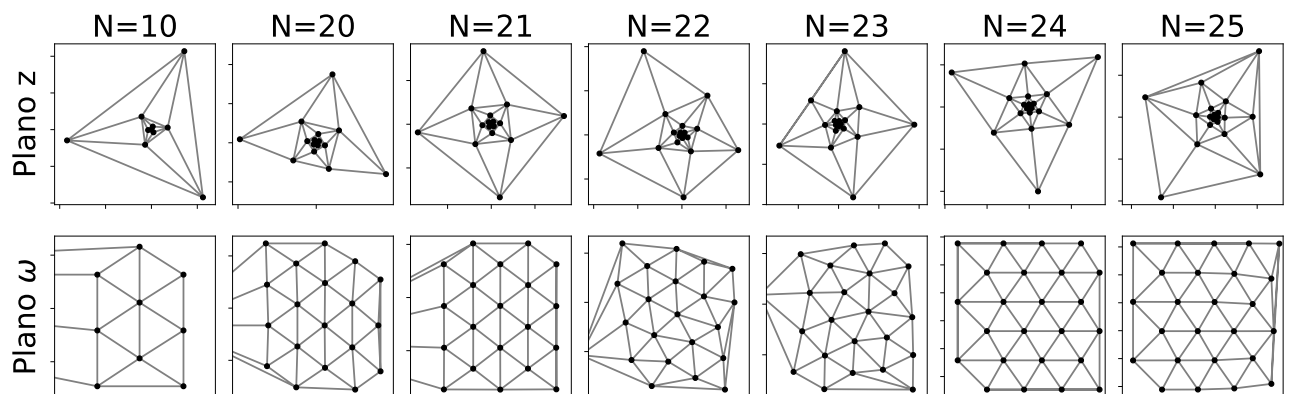


Fonte: O autor.

promovem uma mudança no número de primeiros vizinhos (número de coordenação Z), para $Z = 5$ ou $Z = 7^4$. Além das configurações comensuráveis citadas anteriormente encontramos vários casos em que não conseguimos definir de forma inequívoca uma classificação, de tal

⁴ Em redes triangulares o número de coordenação é $Z = 6$.

Figura 38 – Configurações cujo mapeamento exibe redes concêntrica, radial e quiral. A linha superior é a representação no espaço z e a linha de baixo as respectivas configurações no espaço w .



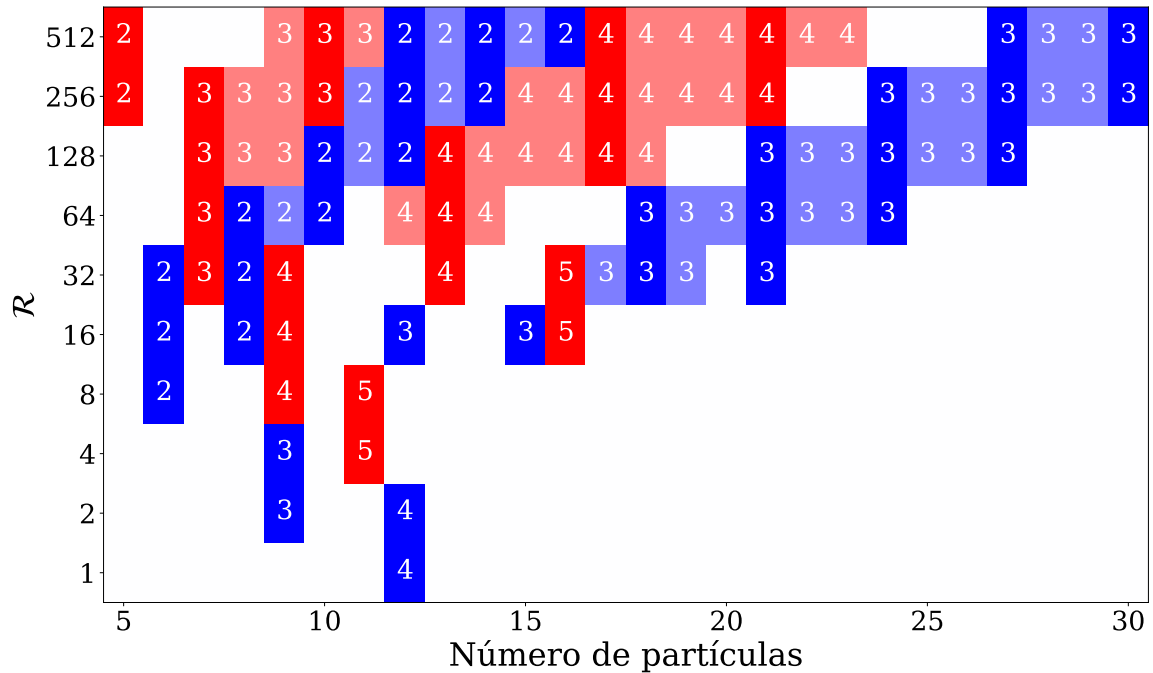
Fonte: O autor.

modo que as registramos como *configurações sem classificação definida*. Para os aglomerados cujas redes no espaço w são radiais ou concêntricas conseguimos adotar um critério de classificação a partir do tipo de rede conforme e da completeza do número de partículas na última camada. Nomeamos essas configurações de Configurações Verticiladas (CV) devido à sua semelhança com os padrões da filotaxia verticilada que ocorrem nas plantas (YONEKURA; SUGIYAMA, 2021), ou seja, temos as configurações *Decussada*, *Tricussada*, *Tetracussada* e *Pentacussada* para os aglomerados contendo número de partículas por camada $N_s = 2, 3, 4, 5$, respectivamente.

Dentre as CV temos as CVC, que possuem o mesmo número de partículas, N_s , em todas as camadas e as Configurações Verticiladas Incompletas (CVI), sendo as CVI estruturas completas na região interna e apenas na camada mais externa esse ordenamento não ocorre devido à ausência ou excesso de partículas. Perceba que as estruturas CVI exibem o mesmo tipo de rede (radiais ou concêntricas) que as CVC, como pode ser visto para os casos $N = 20$ (concêntrica) e $N = 25$ (radial) na Fig. 38. A partir dessa classificação elaboramos um diagrama de fases na Fig. 39 que resume os tipos de configurações encontradas, com destaque em cores para as verticiladas.

Nesse diagrama representamos pela cor branca (sem numeração) as redes *sem classificação definida*, as redes radiais pela cor azul e as redes concêntricas pela cor vermelha. Utilizamos uma tonalidade mais intensa para distinguir as configurações completas das incompletas, ou seja, configurações radiais completas são da cor azul escuro e as radiais incompletas, azul claro. De modo análogo para as configurações concêntricas, mas com a cor vermelha, ou seja,

Figura 39 – Diagrama de fases de todas as configurações obtidas para $\mathcal{R} \in [1, 512]$, onde das 260 configurações simuladas 100 são . Registramos as quantidades: 22 *Decussada*, 45 *Tricussada*, 29 *Tetracussada* e 4 *Pentacussada*. Representamos as configurações sem classificação com a cor branca (sem preenchimento), enquanto que as configurações verticiladas são preenchidas com o número de partículas por camada, N_s . As configurações radiais/concêntricas foram representadas pela cor azul/vermelho. Representamos as configurações completas pelas cores mais intensas, enquanto que as configurações incompletas são representadas pela tonalidade mais clara.



Fonte: O autor.

configurações concêntricas completas estão representadas em vermelho escuro e as incompletas por vermelho claro. Note também que apresentamos uma numeração na parte interna dos quadros indicando o número de partículas por camada N_s .

Esse diagrama também revela o quantitativo de que surgiram em nossas simulações, ou seja, de um total de 260 configurações de equilíbrio (para diferentes valores de N e \mathcal{R}), 100 são verticiladas, correspondendo aproximadamente a 38% do total. Dessas temos 22 do tipo *Decussada*, 45 *Tricussada*, 29 *Tetracussada* e 4 *Pentacussada*.

Nas subseções seguintes analisaremos dois pontos associados às configurações da Fig. 37:

- O primeiro está relacionado com os sistemas contendo uma única camada ($N \leq 8$), em particular o caso $N = 5$ que exhibe uma configuração bem diferente do caso harmônico mesmo para confinamento próximo da aproximação harmônica ($\mathcal{R} = 1$). No caso harmônico temos o pentágono como o estado de menor energia, então é natural compararmos as energias do pentágono e da configuração encontrada (1, 4);

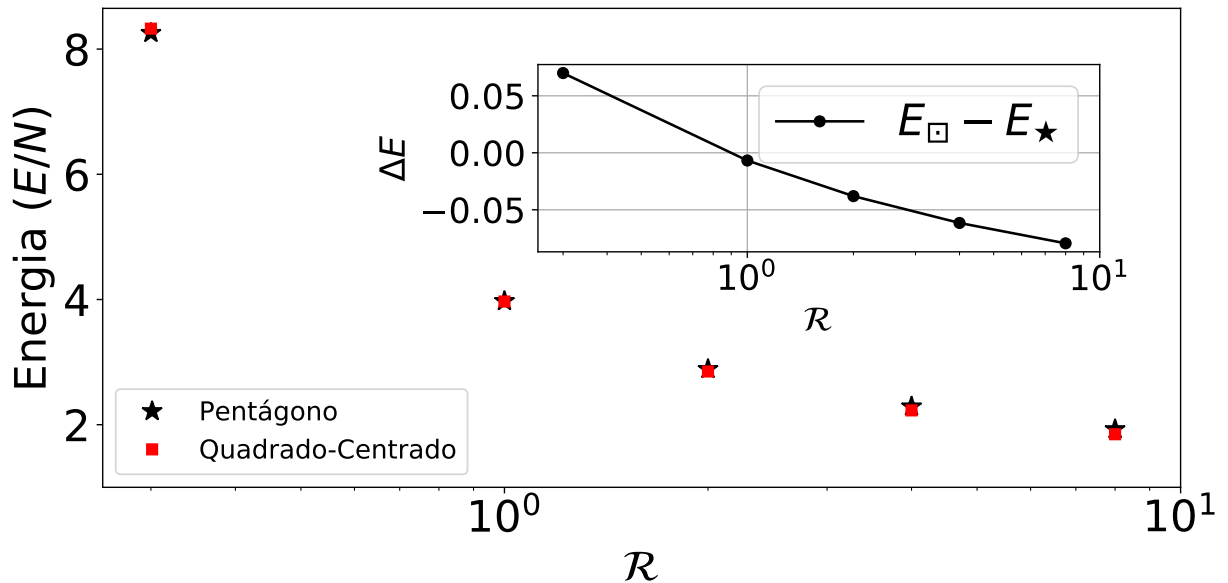
- O segundo ponto se trata da descrição quantitativa da estrutura das CVC, onde utilizaremos o mapeamento conforme para obter as curvas espirais associadas e estabelecer uma grandeza quantitativa para as configurações radiais e concêntricas. Elaboraremos uma descrição analítica para modelar as configurações CVC a partir de uma rede idealizada, onde a estrutura de camadas da configuração será representada pela notação $(N_0, M \times N_s)$, onde N_0 se refere ao número de partículas no centro, enquanto que M corresponde ao número de camadas e cada camada possui o mesmo número de partículas N_s . Omitiremos o parâmetro N_0 para os agregados sem partícula central, resultando a seguinte notação para a configuração: $(M \times N_s)$. Também omitiremos o parâmetro M quando a configuração possuir apenas uma única camada, $M = 1$, de tal modo que a configuração será representada por (N_0, N_s) .

4.3.1 *Sistemas com uma camada*

As configurações apresentadas na Fig. 37 nos mostram resultados relativamente interessantes para confinamento $\mathcal{R} < 16$, em particular as configurações contendo $N = 5$ partículas, ou seja, a configuração $(N_0, M \times N_s) = (1, 4)$. Nesse último caso estamos diante de uma configuração particularmente curiosa, uma vez que o potencial confinante para $\mathcal{R} = 1.0$ não está num regime de alta conformidade, sendo mais próximo do caso parabólico. Uma pergunta natural a se fazer aqui é se essa configuração seria a de menor energia em comparação com a configuração do caso harmônico (pentágono). Na verdade, estamos diante de uma configuração que se mantém até $\mathcal{R} = 8$, sendo interessante uma comparação entre a energia dessas configurações e as configurações em pentágono para cada confinamento \mathcal{R} . Para isso calculamos numericamente o raio do pentágono e do quadrado (centrado) que minimizam as energias em cada região de confinamento e mostramos as energias das duas configurações na Fig. 40. Embora sejam muito próximas as energias, adicionamos uma inserção com a diferença entre as energias do quadrado centrado e o pentágono, mostrando assim que o quadrado centrado tem energia menor do que o pentágono para valores de $\mathcal{R} \geq 1$.

O sistema contendo $N = 6$ partículas não altera sua estrutura, mantendo-se na configuração $(1, 5)$ até $\mathcal{R} = 4$, se tornando uma CVC-decussada com três camadas em $\mathcal{R} = 8$ (ver segunda coluna da esquerda para a direita na Fig. 37). O caso $N = 7$ só mantém o hexágono centrado em $\mathcal{R} = 1$ e transforma sua estrutura em duas para valores maiores do confinamento (ver terceira coluna na Fig. 37). Perceba que $N = 8$, assim como $N = 5$ não possui mesma

Figura 40 – Comparação entre as energias das configurações idealizadas (0, 5) e (1, 4) para diferentes graus de anarmonicidade \mathcal{R} do potencial confinador. Na inserção mostramos a diferença de energia entre o quadrado centrado e o pentágono.



Fonte: O autor.

estrutura que o caso harmônico, entretanto a estrutura para $N = 8$ possui duas camadas⁵, impossibilitando uma descrição semianalítica para comparação.

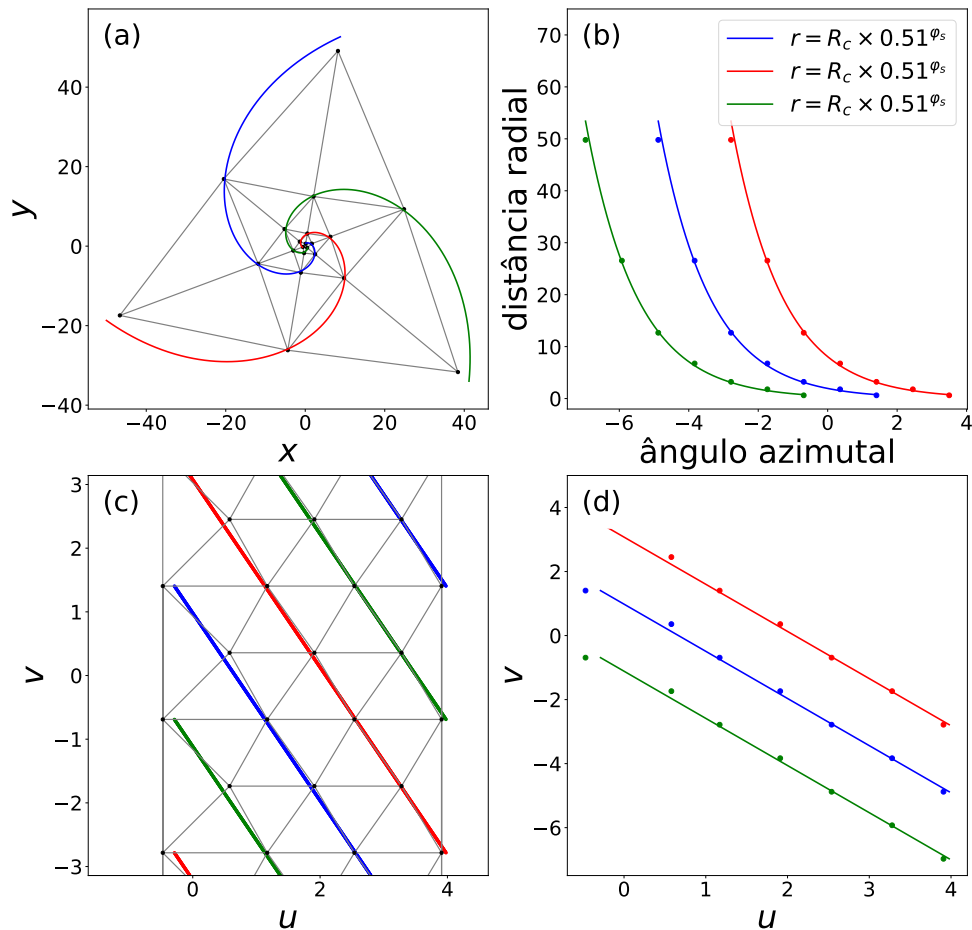
Na subseção a seguir nos concentraremos na descrição destas configurações que exibem padrões filotáticos.

4.3.2 Configurações Verticiladas Completas

As configurações que discutiremos exibem uma alta regularidade de tal forma que a separação angular entre partículas da mesma camada é constante, igual a $\frac{2\pi}{N_s}$, e partículas vizinhas de camadas consecutivas também, com defasagem de $\frac{\pi}{N_s}$. Esse ordenamento fornece vantagens para um estudo semianalítico de tais configurações. Para estabelecer uma forma de descrição quantitativa seria necessário conhecermos o raio e a quantidade de partículas N_s em cada anel, assim a configuração CVC estaria bem definida. Novamente utilizaremos o mapeamento conforme como recurso para tentar descrever melhor esses aglomerados e utilizaremos como exemplo a configuração da Fig. 41(a) que contém $N = 21$ partículas confinadas com $\mathcal{R} = 128$, organizadas em $M = 7$ camadas de $N_s = 3$ partículas, ou seja, a configuração $(N_0, M \times N_s) = (7 \times 3)$. Mostramos na Fig. 41(b) a distancia radial como função do ângulo

⁵ Dependendo do critério adotado para definir o raio da camada essa configuração pode exibir 3 camadas.

Figura 41 – Em (a) temos uma triangulação de Delaunay da configuração com $N = 21$ partículas (pontos pretos) na região $\mathcal{R} = 128$ formando um padrão do tipo Tricussada. (b) Gráfico da distância radial das partículas em função do ângulo azimutal. Em (c) mostramos a configuração Tricussada no espaço conforme cuja rede é do tipo radial. Em (d) utilizamos a periodicidade da variável angular para agrupar as partículas de cada espiral a fim de obter os coeficientes da reta de ajuste. Com os coeficientes da reta representamos as espirais em (a), (b) e (c), além das retas de ajuste em (d).



Fonte: O autor.

azimutal de cada partícula e percebemos que além do padrão angular, os raios das camadas seguem uma relação funcional entre si.

Consideraremos que cada partícula de uma camada pertença à uma curva espiral e através da equação dessa espiral teremos a conexão entre as partículas de camadas distintas (veja que as espirais da Fig. 41(a) conectam partículas de camadas distintas). Como estamos diante de um sistema finito e essas espirais partem de uma camada mais interna até outra mais externa é necessário conhecer o raio de pelo menos uma delas, além de um segundo parâmetro que descreva a taxa de "enrolamento" da espiral. Assim escolhemos como modelo uma equação espiral que se inicia no raio da camada mais externa R_c e decresce sua distância radial até a

camada mais interna através do parâmetro $0 < q < 1$, ou seja,

$$r_n = R_c q^{\varphi_n}, \quad n = 1, 2, \dots, M, \quad (4.29)$$

onde φ_n representa o ângulo em relação a algum eixo escolhido (eixo x , por exemplo) e M é a quantidade de camadas.

Observe que nessa descrição o ângulo de cada partícula pode ser determinado através do ângulo da partícula vizinha na espiral, uma vez que elas estão defasadas de $\phi = \frac{\pi}{N_s}$. Falando de outra forma, o ângulo da n -ésima partícula da espiral pode ser escrito como $\varphi_n = n \frac{\pi}{N_s} + \phi_0$ a partir de um eixo de referência defasado de ϕ_0 do eixo x .

Pelo mapeamento conforme temos que $w = \ln(z) = \ln(r) + i\varphi = u + iv$ e substituindo a Eq. 4.29 encontramos

$$u_n = \ln(R_c) + \ln(q)\varphi_n, \quad (4.30)$$

$$v_n = \varphi_n.$$

Para partículas consecutivas na curva espiral a diferença $u_{n+1} - u_n = \Delta u = -|\Delta u|$ se torna

$$\begin{aligned} -|\Delta u| &= \ln(q)\Delta\varphi = \ln(q)\Delta v \\ &\Downarrow \\ q &= \exp\left(-\frac{|\Delta u|}{\Delta v}\right). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Note que podemos determinar os valores de R_c e q a partir das partículas no espaço conforme, pois a Eq. 4.30 representa uma reta e os coeficientes podem ser obtidos pelos dados. Mostramos o mapeamento das partículas na Fig. 41(c) e calculamos por regressão linear os parâmetros de interesse pelas retas mostradas na Fig. 41(d). As retas e espirais em cores foram graficadas após a regressão linear e na Fig. 41(b) mostramos a equação obtida por esse processo.

Se avaliarmos qual o valor de q para redes hexagonais seguindo o ordenamento radial e concêntrico encontraremos as seguintes relações $|\Delta u| = \Delta v/\sqrt{3}$ para radial e $|\Delta u| = \sqrt{3}\Delta v$ para concêntricas⁶. Ou seja, o parâmetro associado às redes hexagonais radiais e concêntricas são

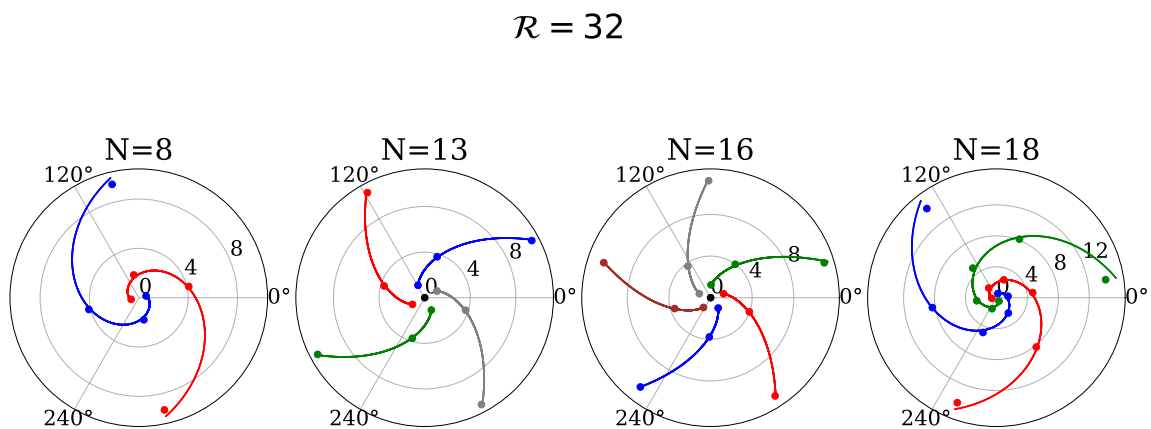
$$q_{\text{concêntrica}} = \exp\left(-\sqrt{3}\right) \approx 0.18 \quad (4.32)$$

$$q_{\text{radial}} = \exp\left(-1/\sqrt{3}\right) \approx 0.56 \quad (4.33)$$

⁶ Ver Fig. 19 na seção 2.2 para mais detalhes.

Conhecer os valores de q associados a redes hexagonais no espaço conforme nos fornece uma comparação quantitativa do quão próximas das redes hexagonais as configurações simuladas estão, assim analisamos os valores do parâmetro q para todas as configurações CVC encontradas nesse trabalho. Na Fig. 42 representamos configurações para $\mathcal{R} = 32$ para exemplificar os 4 tipos de aglomerados CVC que aparecem em nossas simulações. Também representamos as espirais correspondentes obtidas pelo procedimento descrito anteriormente. Construimos

Figura 42 – Configurações CVC com suas respectivas curvas espirais obtidas pela regressão linear no espaço conforme. Todas as configurações correspondem ao confinamento com $\mathcal{R} = 32$, onde temos estruturas Decussada ($N = 8$), Tricussada ($N = 18$), Tetracussada ($N = 13$) e Pentacussada ($N = 16$).



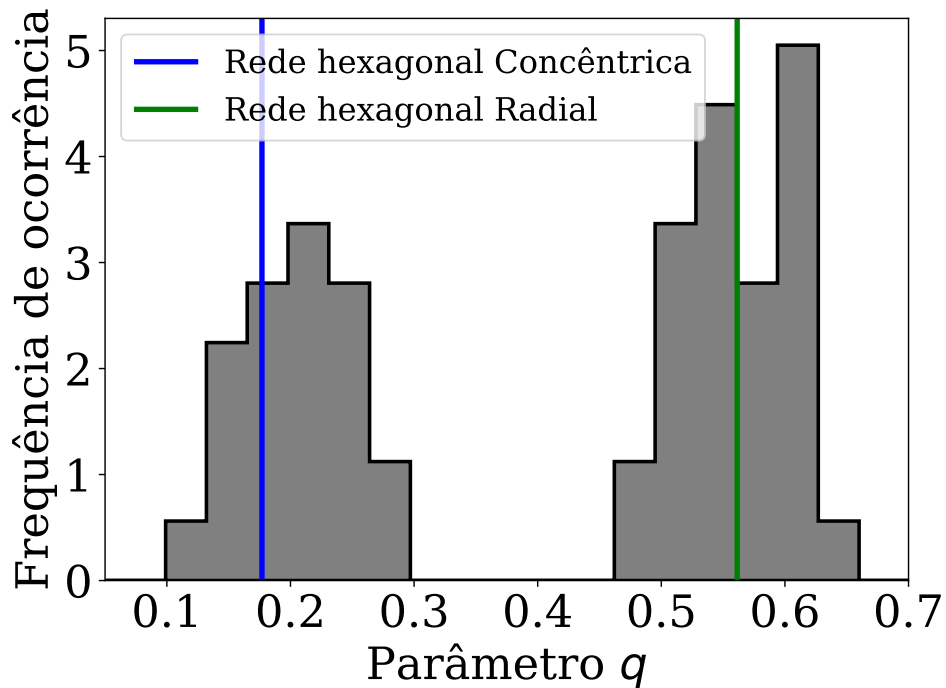
Fonte: O autor.

um histograma do parâmetro q de todos os casos CVC encontrados e mostramos na Fig. 43. Temos, então, uma distribuição de configurações deformadas, tanto para redes concêntricas nas proximidades da rede hexagonal concêntrica (linha azul), como das hexagonais radiais (linha verde).

Podemos então resumir a classificação das configurações através do diagrama de fases (Fig. 39) e do histograma do parâmetro q (Fig. 43) que nos revelam o seguinte:

1. O diagrama da Fig. 39 nos ajuda a distinguir as fases que pertencem ou não ao nosso modelo CVC;
2. Dentre as podemos identificar quais são radiais ou concêntricas, completas ou incompletas e qual o padrão filotático seguido a partir do valor N_s ;
3. O histograma na Fig. 43 nos fornece uma imagem comparativa entre as redes CVC e as redes hexagonais ideais no plano w .

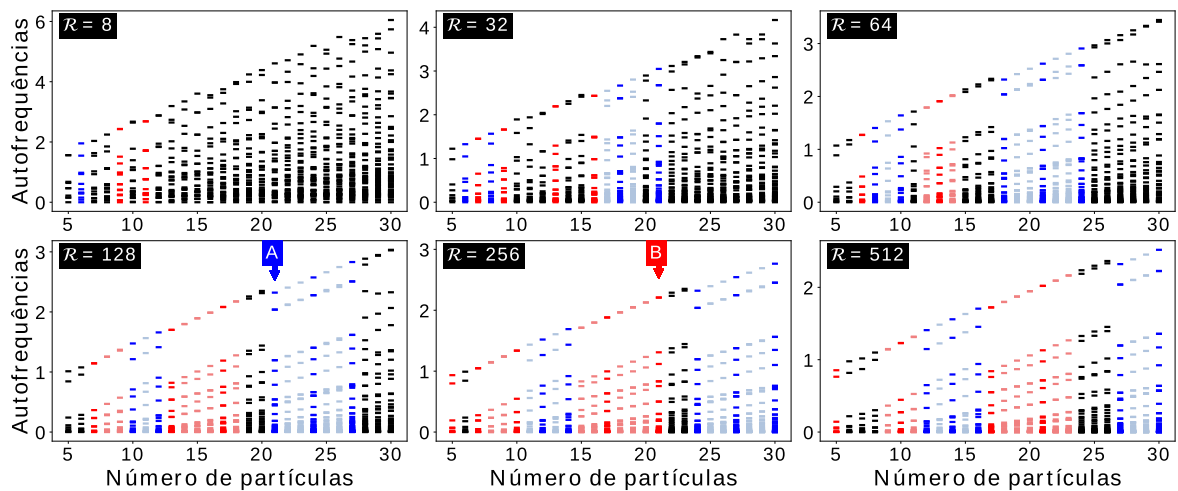
Figura 43 – Histograma do parâmetro q calculado para todas as configurações CVC encontradas. As linhas verticais indicam os valores das redes hexagonais concêntrica (azul) e radial (verde).



Fonte: O autor.

Vamos agora olhar para os modos elásticos dos aglomerados para diferentes valores de anarmonicidade \mathcal{R} . Alguns espectros são mostrados na Fig. 44 para os aglomerados simulados com diferentes valores de \mathcal{R} .

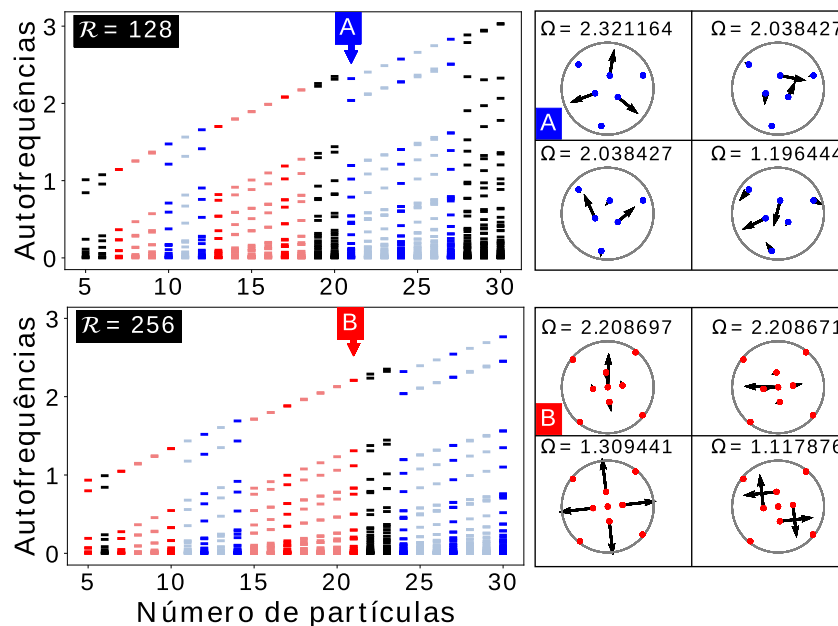
Figura 44 – Espectro de autofrequências dos modos normais para sistemas com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$ e diferentes valores de \mathcal{R} . Destacamos as autofrequências do aglomerado com $N = 21$ partículas para $\mathcal{R} = 128$ e $\mathcal{R} = 256$.



Fonte: O autor.

Olhando especificamente para os dois casos ($\mathcal{R} = \{128, 256\}$) como ilustração, pois eles possuem uma faixa maior de configurações CVC, exibimos na Fig. 45 os espectros de frequências dos modos normais em função do número de partículas para esses dois casos (Fig. 45-lado esquerdo). Utilizamos o esquema de cores do diagrama da Fig. 39 como referência⁷ e mostramos alguns autovetores associados aos modos de mais alta frequência para os aglomerados com $N = 21$, destacados pelas letras A e B.

Figura 45 – Esquerda: Espectro de autofrequências dos modos normais para sistemas com número de partículas entre $N = 5$ e $N = 30$, $\mathcal{R} = 128$ e $\mathcal{R} = 256$. Direita: Quatro autovetores com maior autofrequência Ω . A e B representam as configurações Tricussada ($\mathcal{R} = 128$) e Tetracussada ($\mathcal{R} = 256$) respectivamente.



Fonte: O autor.

Três observações importantes podem ser percebidas com base nos espectros: a primeira é que as autofrequências estão sendo compactadas a medida em que aumentamos a anarmonicidade \mathcal{R} do sistema (efeito causado pela diminuição da constante de mola efetiva C_N e conseqüentemente dos autovalores dos sistema); a segunda é que vários modos normais possuem autofrequências muito próximas da frequência de rotação de corpo rígido ($\omega = 0.0$) formando uma espécie de banda de frequências, sendo interessante olharmos para alguns modos nessa região (voltaremos a falar disso mais adiante); e a terceira é sobre as frequências mais altas que estão associadas ao movimento da região interna dos aglomerados. Destacamos na Fig. 45 à direita a similaridade entre as frequências mais altas das configurações radiais(azul) que exibem duas faixas de frequência representando os movimentos da primeira

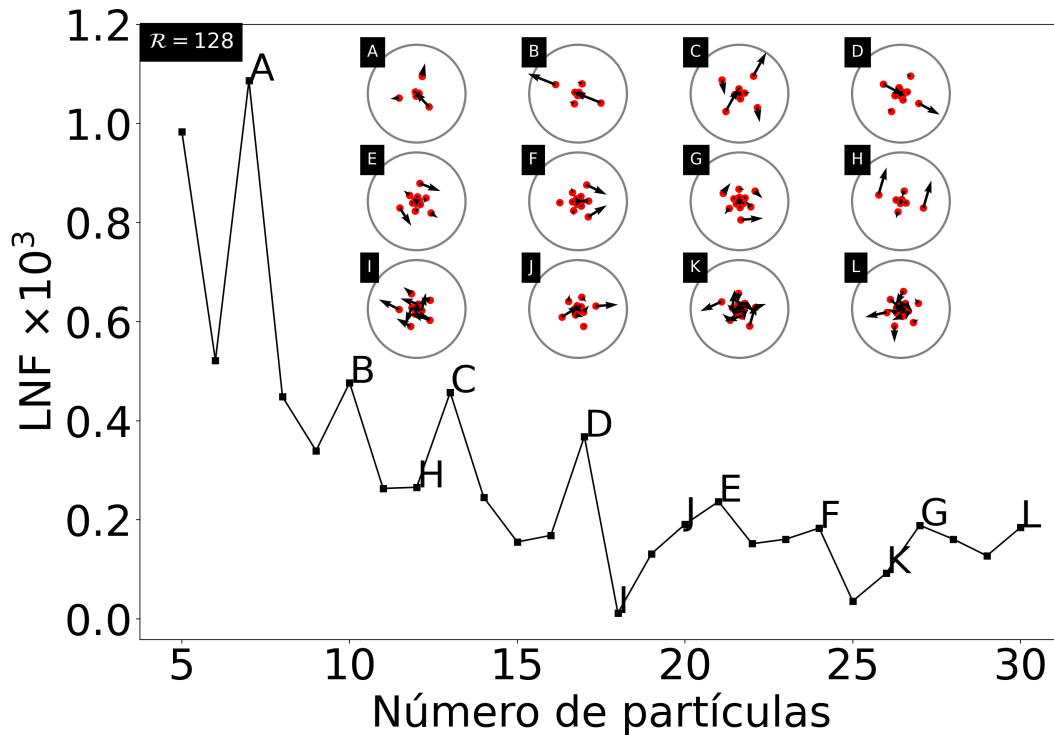
⁷ Mostramos as autofrequências das configurações que não pertencem ao modelo filotático pela cor preta.

camada (interna). Essas duas faixas representam os três últimos modos normais, onde o mais alto corresponde ao movimento de respiração da camada mais interna e a segunda faixa representa dois modos degenerados como pode ser observado pelos autovetores do caso A na (Fig. 45- superior direita). De maneira um pouco distinta temos uma única faixa para as configurações concêntricas (vermelha) que representa dois modos degenerados associados ao movimento mais pronunciado da partícula central. Nesse caso a partícula pode oscilar em duas direções ortogonais associadas às autofrequências degeneradas (ver autovetores do caso B na (Fig. 45-inferior direita).

Com relação às bandas de frequências mais baixas formadas nos espectros podemos olhar a menor frequência não nula (LNF-do inglês) como função do número de partículas do sistema. Usando novamente o caso $\mathcal{R} = 128$ como exemplo mostramos na Fig. 46 o gráfico da LNF. Note que algumas configurações apresentam picos na LNF e esses casos correspondem exatamente às configurações CVC, com exceção de $N = 12$ (Fig. 46-H). Comparativamente esses saltos indicam que as configurações CVC são mais estáveis (com relação às rotações intercamadas que as configurações CVI uma vez que os autovetores das CVC possuem caráter de cisalhamento menos intenso (ver inserções A, B, C, D, E, F, G, H), enquanto as CVI são mais rotativos(ver inserções I, J, K, L).

Na próxima seção veremos mais alguns detalhes dos modos elásticos das configurações CVC com interesse em transições estruturais a medida em que variamos a conformidade \mathcal{R} do potencial para um sistema com a mesma quantidade de partículas. Com auxílio do modelo de camadas descrito na próxima seção analisaremos a transição entre configurações CVC como por exemplo $N = 10$ e $\mathcal{R} = [128 \rightarrow 256]$, onde ocorre transição entre os padrões verticilados $N_s = 3 \rightarrow N_s = 4$ (ver diagrama da Fig. 39).

Figura 46 – Gráfico da menor frequência não nula (LNF) em função do número de partículas para o confinamento $\mathcal{R} = 128$. Inserções com alguns autovetores mostram o tipo de movimento coletivo associado.



Fonte: O autor.

4.4 MODELO DE CONFIGURAÇÕES VERTICILADAS COMPLETAS

Para uma abordagem semianálítica descrevemos um sistema de N partículas coulombianas nas posições de equilíbrio formando uma configuração filotática verticilada completa CVC, ou seja, uma estrutura de camadas com mesmo número de partículas por camadas

$$N = N_0 + M \times N_s. \quad (4.34)$$

A energia total de um sistema de partículas coulombianas confinadas pelo potencial $u_1(\vec{r})$ é dada por

$$E(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N u_1(\vec{r}_i) + \frac{\gamma\epsilon}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{j \neq k}^N \frac{1}{|\vec{r}_k - \vec{r}_j|}. \quad (4.35)$$

A energia de confinamento pode ser computada através de suas camadas, ou seja, cada camada contribui com N_s energias idênticas, pois essas energias só dependem da distância radial das partículas, que nesse caso são iguais ao raio da própria camada, portanto

$$E_c = N_s \sum_{n=1}^M u_1(r_n),$$

de tal forma que só precisamos somar as energias de uma partícula em cada camada e multiplicar esse resultado pelo número de partículas por camada N_s .

A energia de interação pode ser reescrita considerando as somas por camadas como fizemos com a energia de confinamento. Uma partícula na n -ésima camada interage com às demais partículas dessa mesma camada e com as partículas de outras camadas, então podemos separar as contribuições intracamadas e intercamadas, ou seja

$$E_I = \sum_{n=1}^M [E_{intra}^{(n)} + E_{inter}^{(n)}]. \quad (4.36)$$

A energia de interação intracamada é dada pela soma sobre as demais partículas na camada, logo

$$E_{intra}^{(n)} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_s} \sum_{j \neq k}^{N_s} \frac{\gamma \epsilon_0}{|\vec{r}_{nk} - \vec{r}_{nj}|}. \quad (4.37)$$

Para a energia de interação intercamada nós somamos a contribuição de cada partícula k na n -ésima camada com as partículas j da m -ésima camada. Essa soma dupla em k e em j representa a energia associada à n -ésima camada em relação às demais, sendo necessário somar sobre todas as camadas m diferentes de n , assim:

$$E_{inter}^{(n)} = \frac{1}{2} \sum_{m \neq n}^M \sum_{k=1}^{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \frac{\gamma \epsilon_0}{|\vec{r}_{nk} - \vec{r}_{mj}|}. \quad (4.38)$$

Como as partículas de cada anel formam um polígono regular, então o ângulo entre partículas vizinhas (na mesma camada) é dado por $\frac{2\pi}{N_s}$, então cada partícula da camada terá como posição angular um múltiplo desse fator. Logo, as coordenadas angulares da k -ésima partícula da n -ésima camada são $\frac{2\pi}{N_s}(k-1)$, onde $k \in \{1, 2, \dots, N_s\}$. Considerando uma situação mais genérica nas posições das partículas, podemos considerar que cada camada formará um ângulo θ_n em relação ao eixo das abscissas, de tal forma que o ângulo de cada partícula dependerá da camada em que está e em que posição no polígono a mesma se encontra. Podemos resumir as coordenadas polares da k -ésima partícula pertencente à n -ésima camada como:

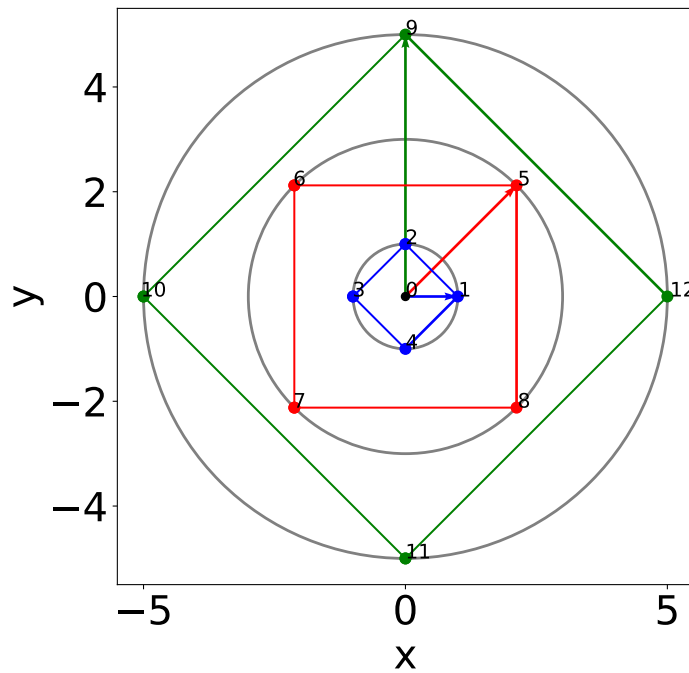
$$\vec{r}_{kn} = R_n(\cos \alpha_{kn}, \sin \alpha_{kn}); \quad (4.39)$$

$$\alpha_{kn} = \frac{2\pi}{N_s}(k-1) + \theta_n; \quad (4.40)$$

com R_n sendo o raio da n -ésima camada, $k \in \{1, \dots, N_s\}$ e $n \in \{1, \dots, M\}$.

Na Fig. 47 temos uma representação de uma configuração com três camadas ($M = 3$) e quatro partículas por camada ($N_s = 4$), além da partícula central ($N_0 = 1$).

Figura 47 – Representação esquemática de uma configuração em quartetos.



Fonte: O autor.

Enumeramos as partículas das camadas e utilizamos a primeira (partícula de número 1) como a referência da camada. Note na Fig. 47 que a primeira partícula da camada mais interna está posicionada exatamente no eixo x , ou seja, o ângulo entre o vetor posição dessa partícula e o eixo das abscissas é nulo. Perceba também que o ângulo entre as partículas de uma mesma camada é dado por $\frac{2\pi}{N_s} = \frac{2\pi}{4} = \frac{\pi}{2}$ rad, e a defasagem angular entre camadas de raios consecutivos vale $\theta_n - \theta_{n-1} = \frac{\pi}{4}$ rad; esses valores foram escolhidos para ilustrar os padrões CVC encontrados em nossas simulações.

Por fim, desenvolvendo os termos de interação intracamadas e intercamadas é possível

encontrar a expressão para a energia de interação:

$$E_I = N_s \sum_{n=1}^M \frac{\gamma \epsilon_0}{2R_n} \left[\frac{\Delta_n}{2} + \sum_{m \neq n}^M \Delta_{nm} \right]; \quad (4.41)$$

$$\Delta_n = 4N_0 + \sum_{\ell=1}^{N_s-1} \frac{1}{|\sin(\frac{\pi \ell}{N_s})|} \quad (4.42)$$

$$\Delta_{nm} = \sum_{\ell=1}^{N_s} \frac{R_n}{\sqrt{R_n^2 + R_m^2 - 2R_n R_m \cos(\frac{2\pi \ell}{N_s} + \chi_{nm})}} \quad (4.43)$$

$$\chi_{nm} \equiv \theta_n - \theta_m. \quad (4.44)$$

Portanto, na expressão para a energia, teremos:

$$E(\vec{r}) = N_s \sum_{n=1}^M \left[u_1(R_n) + \frac{\gamma \epsilon_0 \Delta_n}{4R_n} + \frac{\gamma \epsilon_0}{2R_n} \sum_{m \neq n}^M \Delta_{nm} \right]. \quad (4.45)$$

É possível obter expressões para as forças radial e angular nas partículas de uma determinada camada, ou seja, dada uma partícula na camada de raio R_ℓ as forças radial e angular resultantes atuantes nela são dadas pelo gradiente negativo e podem ser expressas como

$$f_{R_\ell} = N_s \left\{ -\frac{1}{\gamma \epsilon_0} \frac{\partial u_1}{\partial R_\ell} + \frac{1}{2} \sum_{m \neq \ell}^M \sum_{k=1}^{N_s} [a_{\ell km}^+ b_{\ell km}^+ + a_{\ell km}^- b_{\ell km}^-] \right\} \quad (4.46)$$

$$f_{\phi_\ell} = \frac{N_s R_\ell}{2} \sum_{m \neq \ell}^M R_m \sum_{k=1}^{N_s} \left[\sin\left(\frac{2\pi k}{N_s} + \chi_{nm}\right) b_{\ell km}^+ + \sin\left(\frac{2\pi k}{N_s} - \chi_{nm}\right) b_{\ell km}^- \right] \quad (4.47)$$

onde definimos

$$a_{\ell km}^\pm \equiv R_\ell - R_m \cos\left(\frac{2\pi}{N_s} k \pm \chi_{\ell m}\right) \quad (4.48)$$

$$b_{\ell km}^\pm \equiv \frac{1}{[R_\ell^2 + R_m^2 - 2R_\ell R_m \cos(\frac{2\pi}{N_s} k \pm \chi_{\ell m})]^{\frac{3}{2}}} \quad (4.49)$$

Até aqui esse resultado descreve configurações organizadas em M camadas, defasadas de θ_n do eixo das abscissas e contendo N_s partículas formando um polígono regular. Resultados podem ser obtidos se alimentarmos as equações com os raios e ângulos das camadas. Para as configurações filotáticas, o ângulo já é conhecido pelo seu tipo de ordenamento, ou seja, $\theta_n = (n-1)\frac{\pi}{N_s}$ ⁸ representa o ângulo da n -ésima camada em relação ao eixo x . Além do ângulo é possível também obter a relação radial entre as camadas se lançarmos mão de algum tipo de rede específico, ou seja, podemos utilizar o parâmetro q das redes hexagonais radiais ou concêntricas e obter suas posições de equilíbrio, energia, forças radial e angular, modos normais e etc.

⁸ Consideramos $\theta_1 = 0$ por simplicidade, uma vez que o potencial possui simetria circular, ou seja, só depende da defasagem angular, ficando livre a escolha do ângulo da primeira camada.

4.4.1 Modelando as configurações hexagonais

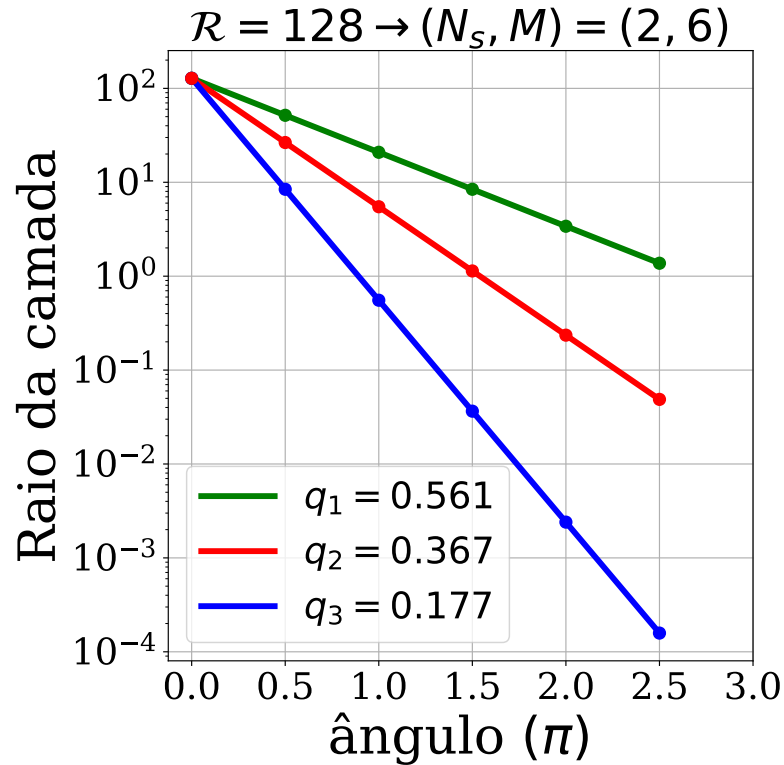
As configurações hexagonais no espaço conforme são caracterizadas segundo nossa abordagem pelo raio do aglomerado e pelo parâmetro q que pode ser $q_1 = e^{-1/\sqrt{3}}$ para redes radiais e $q_1 = e^{-\sqrt{3}}$ para redes concêntricas. Em nossa descrição escolhemos o raio da última camada como parâmetro e isso está compatível com nosso modelo de confinamento, uma vez que o tamanho do aglomerado limitado pelo raio do potencial confinador, parâmetro \mathcal{R} . Perceba, entretanto que o sistema pode se equilibrar em distâncias radiais menores e que para fins de abordagem inicial, podemos usar esse raio máximo para a última camada.

Na seção sobre transições de fase entre as configurações filotáticas, utilizamos esse modelo, mas o raio da última camada foi determinado pela minimização da energia da configuração. Consideraremos, por exemplo, uma configuração decussate com $M = 6$ camadas, ou seja, $(N_0, M \times N_s) = (0, 6 \times 2)$, para um confinamento $\mathcal{R} = 128$ que será utilizado como raio da última camada.

O modelo CVC para os parâmetros das redes hexagonais são mostrados na Fig. 48. Além dos parâmetros q das redes hexagonais também mostramos uma rede com parâmetro intermediário. Perceba que o decaimento radial é mais pronunciado para a rede concêntrica, $q \approx 0.177$, e que o raio da camada mais interna é praticamente nulo, ou seja, essa configuração aparenta não ser estável devido à essa proximidade tão grande entre as partículas internas (raio da camada quase nulo $R_1 \approx 10^{-4}$).

Utilizaremos esse modelo para configurações hexagonais radiais e concêntricas no estudo das transições estruturais que ocorrem entre as CVC na próxima seção. Mesmo essas configurações hexagonais não correspondendo exatamente aos aglomerados encontrados conseguimos avaliar de modo aproximado o comportamento das energias em comparação com as simulações.

Figura 48 – Raio das camadas de uma configuração decussada gerada para diferentes parâmetros q da espiral.



Fonte: O autor.

4.5 TRANSIÇÃO DE FASE ESTRUTURAL ENTRE CONFIGURAÇÕES FILOTÁTICAS COMPLETAS

Discutiremos aqui uma mudança entre configurações CVC quando varremos a anarmonicidade \mathcal{R} do potencial confinador. Essas transições estruturais podem ser vistas no diagrama da Fig. 39 para $N = 9$ entre os valores $\mathcal{R} = 4$ e $\mathcal{R} = 8$, onde uma configuração radial completa $(0, 3 \times 3)$ se transforma numa configuração concêntrica completa $(1, 2 \times 4)$ à medida em que aumentamos o valor de \mathcal{R} . De maneira análoga esse comportamento surge nos casos com $N = 10$ e $N = 21$ para a região $\mathcal{R} = [128, 256]$ onde temos as fases $(0, 5 \times 2) \rightarrow (1, 3 \times 3)$ e $(0, 7 \times 3) \rightarrow (1, 5 \times 4)$, respectivamente. Essas não são as únicas transições estruturais presentes, pois ocorrem transições entre configurações não comensuráveis para as CVC (por exemplo $N = 10, \mathcal{R} = [32, 64]$) e entre configurações CVC para CVI ($N = 9, \mathcal{R} = [32, 64]$).

Estamos interessados nas transições estruturais entre os aglomerados CVC e seus comportamentos na região em que possam coexistir. Outro motivo é o fato de podermos modelar sua estrutura e estudá-la semianaliticamente através de sua energia utilizando o procedimento

descrito na seção (4.4). Perceba que o caso com $N = 9$ mostra as duas fases CVC numa região de \mathcal{R} que embora seja fora do regime harmônico, ainda está relativamente próximo se comparado com o caso com $N = 10$ ou $N = 21$ que apresentam a transição mais distante de $\mathcal{R} = 0.3$. Esse detalhe é relevante também pelo fato de que as configurações CVC ocorrerem de maneira mais expressiva nas regiões com $\mathcal{R} > 16$ (ver Fig. 39), de tal modo que o modelo de camadas CVC descrito na seção (4.4) reproduzirá melhor os resultados nessa região. Assim, vamos olhar especificamente para o sistema com $N = 10$.

Para estudarmos a transição estrutural realizamos uma varredura no parâmetro \mathcal{R} partindo inicialmente da fase de interesse e determinamos quais eram os limites inferior e superior de \mathcal{R} para aquela fase. O procedimento foi realizado para as duas fases CVC de interesse, ou seja, $N = 10$ cujas fases são:

- fase Decussada $\rightarrow (0, 5 \times 2)$, para $64 \leq \mathcal{R} \leq 128$;
- fase Tricussada $\rightarrow (1, 3 \times 3)$, para $256 \leq \mathcal{R} \leq 512$.

Mostramos na Fig. 49(a) a distância radial das partículas em função do parâmetro \mathcal{R} e as regiões (I, II, III e IV) em que o aglomerado se encontra nas fases (Sem classificação, Decussada, Ambas as fases, Tricussada), respectivamente. Definimos um parâmetro de ordem (Eq. 4.50) para identificar as mudanças estruturais entre as fases CVC:

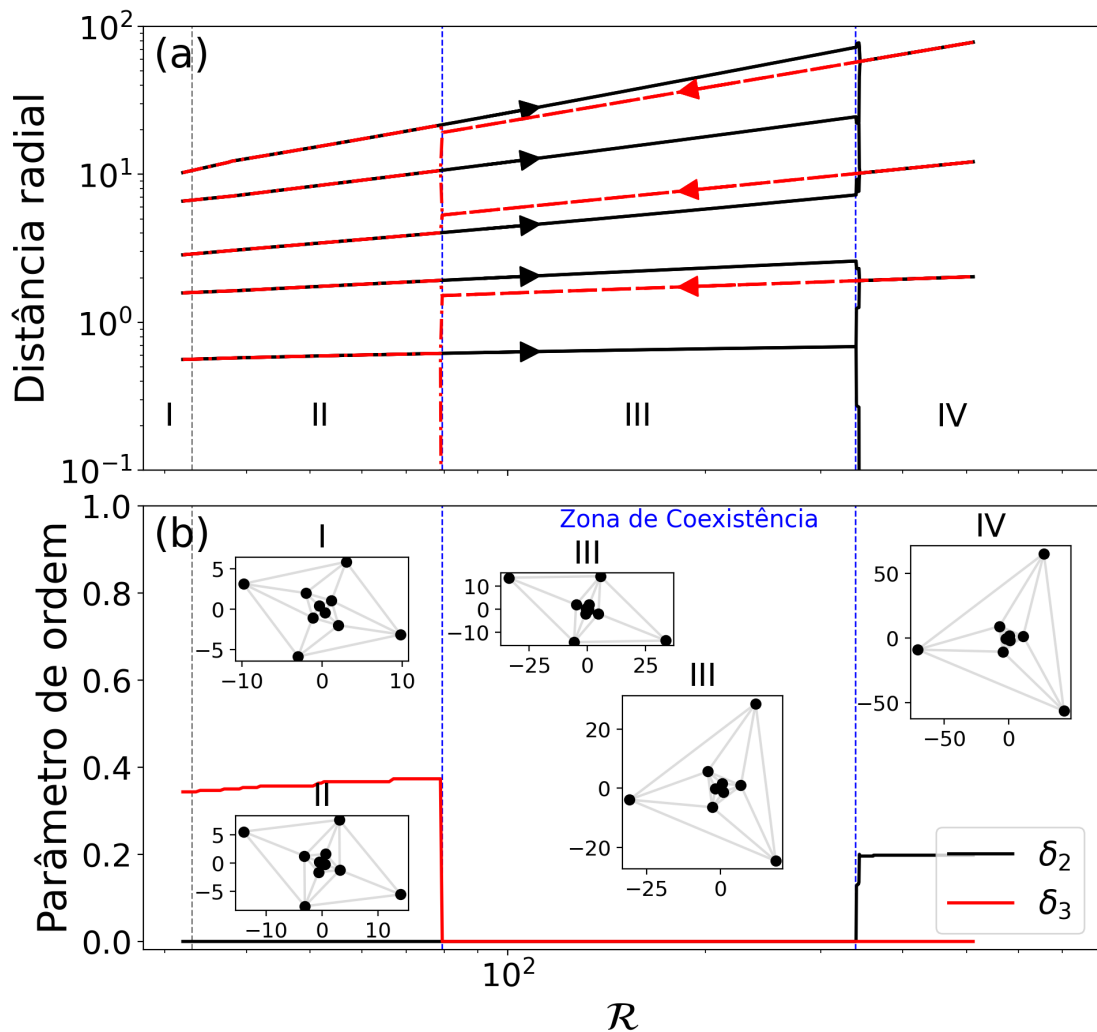
$$\delta_{N_s} \equiv 1 - \frac{1}{M} \sum_i^M f_i, \quad (4.50)$$

$$f_i = \frac{1}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \left(\frac{r_j}{R_i} \right)^2, \quad (4.51)$$

onde R_i é a distância radial da partícula mais afastada na i -ésima camada e f_i representa o valor médio da distância radial quadrática (normalizada pela distância da partícula mais afastada). Note que o parâmetro de ordem da Eq. 4.50 não é geral e está associado ao tipo de fase (representada no nosso modelo por N_s) e por esse motivo δ_{N_s} não foi capaz de identificar a transição da configuração CVC para a configuração da região I nas proximidades de $\mathcal{R} = 32$. A configuração em $\mathcal{R} = 32$ preserva o número de partículas por camadas $N_s = 2$, mas as camadas mais internas estão defasadas em relação as camadas mais externas, modificando assim a estrutura angular da configuração e sendo "transparente" ao δ_{N_s} .

Aqui já conseguimos responder as duas perguntas sobre a transição estrutural supramencionada: Primeiro que não encontramos fase diferente das CVC decussada e tricussada, e

Figura 49 – Gráfico de grandezas em função do parâmetro \mathcal{R} . Em (a) temos a distancia radial de cada partícula, onde a curva preta indica uma configuração CVC com $N_s = 2$ até o limite superior próximo de $\mathcal{R} = 339$ (limite superior da região III). Similarmente temos as distancias radiais para a configuração CVC com $N_s = 3$ permanecendo na região III até seu limite inferior $\mathcal{R} = 79.5$. Cada região foi representada com configurações ilustrativas associadas como pode ser visto em (b). Mostramos em (b) um parâmetro que permitiu identificar os limites superior (para as duplas) e inferior (para os trios) e conseqüentemente a região de coexistência entre as fases.

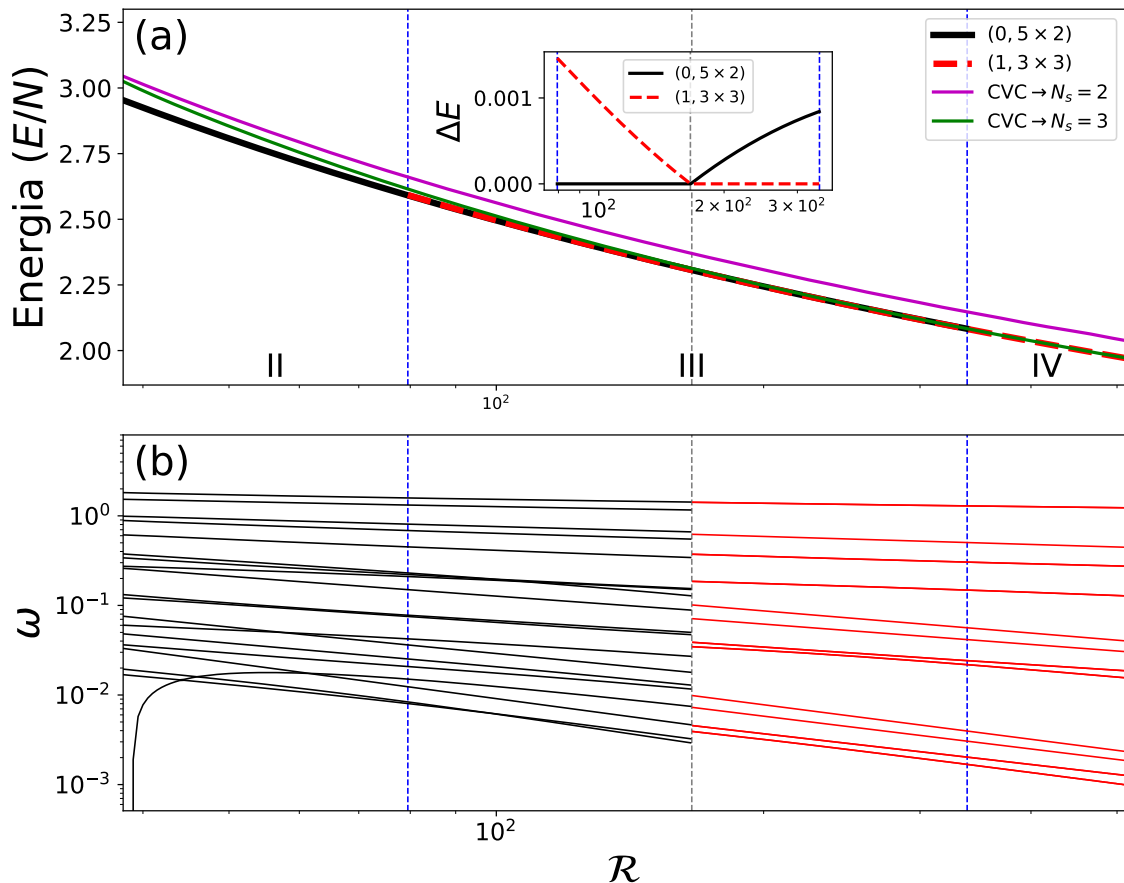


Fonte: O autor.

segundo que as fases 1 e 2 coexistem em uma faixa do parâmetro \mathcal{R} . Uma vez que as fases coexistem em uma região é importante também analisarmos o comportamento energético das duas fases, ou seja, temos dois estados metaestáveis e desejamos saber qual dos dois é o de mais baixa energia nessa região de coexistência. Para isso calculamos as energias das duas fases e representamos na Fig. 50(a).

As energias são levemente distintas na região de coexistência, mas podemos observar na

Figura 50 – Mostramos em (a) o gráfico da energia por partícula em função do parâmetro \mathcal{R} para resultados de simulação (linhas preta e vermelha) e do modelo CVC (linhas verde e magenta). As linhas tracejadas verticais na cor azul delimita a região de coexistência das fases decussada ($0,5 \times 2$) e tricussada ($1,3 \times 3$). Na inserção mostramos a diferença de energia entre as configurações e a menor energia entre as duas fases. A linha tracejada vertical cinza separa as regiões em que as fases decussada e tricussada são energeticamente mais favoráveis, ou seja, antes da linha a fase decussada é de menor energia, enquanto que na região à direita da linha a fase tricussada é a fase de menor energia. Em (b) representamos o espectro das autofrequências (ω) das fases simuladas nas respectivas regiões em que são energeticamente mais favoráveis, ou seja, antes da linha cinza temos a fase decussada e após a linha cinza temos a fase tricussada.

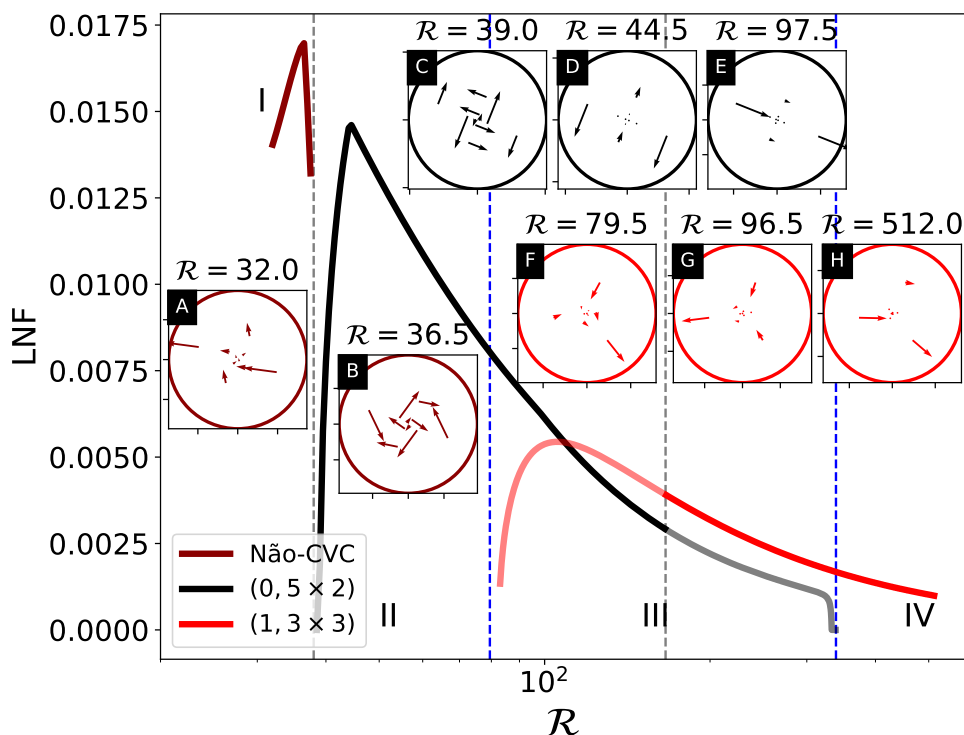


Fonte: O autor.

inserção a diferença de energia de cada configuração com a menor energia entre ambas. Nesse caso a fase decussada é a configuração energeticamente mais favorável para $\mathcal{R} \leq 166$ e acima desse valor temos a fase tricussada como a configuração de menor energia. Analisamos também o espectro dos modos normais das duas fases nos seus respectivos intervalos de estabilidade como pode ser visto na Fig. 50(b). Perceba que em torno de $\mathcal{R} = 40$ um dos modos sofre um decaimento brusco indicando, assim, que essa fase (duplas) está ficando mais instável à medida em que diminuimos o parâmetro da anarmonicidade. O espectro nos mostra que as duas fases são estáveis mecanicamente na região de coexistência (região III). Outra informação relevante que pode ser obtida com o espectro dos modos elásticos é olhar esses modos nas regiões

de metaestabilidade, ou seja, queremos verificar o comportamento da estabilidade mecânica das fases nas regiões em que a outra fase seria energeticamente mais favorável. Podemos obter essa informação olhando especificamente para a menor frequência não nula LNF que sofrerá decaimento nas regiões de instabilidade como pode ser visto na Fig. 51. Os modos

Figura 51 – Menor frequência não nula LNF em função do parâmetro \mathcal{R} . O modo mais baixo sofre um decaimento indicando que a configuração está sofrendo uma mudança estrutural. Nas inserções apresentamos os autovetores associados para alguns valores de \mathcal{R} . As linhas tracejadas cinzas indicam as transições estruturais e as linhas na cor azul delimitam a região de coexistência das fases CVC (Decussada e Tricussada).



Fonte: O autor.

normais associados a LNF contém informações mais esclarecedoras sobre o tipo de movimento coletivo das partículas e conseqüentemente como o sistema se comportaria em uma situação de fornecimento de energia externa ao mesmo. Mostramos o comportamento desses modos nas inserções da Fig. 51, onde associamos às cores à respectiva fase. Os modos apresentados em (A e B) correspondem à LNF da fase não comensurável e indicamos na parte superior qual valor de \mathcal{R} associado. Note que os modos elásticos são distintos e seus valores correspondem ao limite inferior do parâmetro \mathcal{R} em que esse modo ocorre, ou seja, valores menores do que

$\mathcal{R} = 36.5$ acessaremos os modos mostrados na inserção (A) e esse modo da inserção (B) se estende até o valor do parâmetro da inserção (C). Vale destacar que entre o intervalo das inserções (B e C) ocorre uma transição entre as configurações não comensurável para a fase 1 e por esse motivo ocorre o decaimento da LNF. Destacamos também o decaimento da LNF associada às fases nas respectivas regiões de metaestabilidade, onde temos a fase das duplas decaindo no limite superior da região de coexistência das fases e o oposto acontecendo com a fase dos trios.

A partir de nosso trabalho conseguimos analisar algumas propriedades estruturais de um sistema de partículas coulombianas confinadas em potencial conforme que produz um perfil de densidade não uniforme. O potencial conforme promoveu mudanças estruturais em comparação com o caso harmônico, onde surgiram configurações que não são encontradas em poço parabólico, como $N = 5$ que se estabilizou nas configuração $(1, 4)$. Percebemos que o sistema se alonga a medida em que aumenta-se \mathcal{R} como consequência da diminuição da constante efetiva de mola C_N . Encontramos padrões de organização e classificamos de acordo com os padrões filotáticos de estruturas verticiladas e analisamos a transição entre as configurações decussada e tricussada para o caso $N = 10$ com anarmonicidade entre $\mathcal{R} = 128$ e $\mathcal{R} = 256$. Elaboramos um modelo simplificado para descrever as configurações verticiladas e comparamos as energias das configurações obtidas pelo modelo e pela simulação, onde uma boa aproximação é obtida, mas devido ao congelamento de um dos parâmetros da configuração, q , o modelo não captura a configuração ótima para minimização da energia.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O principal resultado que nos chamou a atenção foi o fato de a configuração com $N = 5$ não se estabilizar como um pentágono para os dois problemas abordados nesse trabalho. Dois sistemas distintos estão indicando que a configuração do pentágono não é a de mais baixa energia quando nos afastamos do confinamento puramente harmônico e interação de pares.

Para o sistema com interação de três corpos encontramos configurações que geralmente não aparecem em aglomerados clássicos, como o número "mágico" $N = 19$ que sofre transição estrutural para a configuração $(2, 7, 10)$ e, dependendo da intensidade da contribuição de três corpos, os aglomerados sofrem compactação brusca e até permanecem coesos mesmo se o confinamento for desligado. Mostramos que os modos normais são bastante sensíveis à mudanças estruturais do sistema e nas proximidades das transições ocorre um "amolecimento" dos modos associados ao tipo de transição, como o modo de respiração para compactação ou modo misto para mudanças estruturais. Esses resultados contribuem para uma grande variedade de sistemas da matéria condensada/mole como vórtices supercondutores, colóides carregados e skyrmions magnéticos que podem ser modelados com termos de muitos corpos.

Mostramos que os aglomerados de coulomb confinados por potencial conforme apresentam um certo tipo de organização similar aos padrões filotáticos encontrados em plantas ou órgãos florais. Realizamos uma classificação dessas configurações que denominamos de verticiladas pela sua semelhança com a filotaxia verticilada. Apresentamos um modelo simples que considera as configurações verticiladas idealizadas que fornece de maneira aproximada o comportamento de transição entre essas estruturas filotáticas. As simulações nos indicam que os aglomerados mesmo formando os padrões verticilados preferem se organizar em estruturas levemente deformadas em relação às redes hexagonais no plano w . Os modos elásticos foram investigados para diferentes quantidades de partículas e anarmonicidade do potencial conforme. As configurações verticiladas que se organizam em redes concêntricas e radiais apresentaram um padrão distinto nos modos de maior autofrequência devido à existência de partícula central para as configurações concêntricas. Avaliamos os estados metaestáveis das fases verticiladas para $N = 10$ tanto pelo espectro de energia como dos modos elásticos, onde determinamos a região de coexistência entre as fases decussate e tricussate em termos do parâmetro de anarmonicidade \mathcal{R} do potencial confinador.

Como perspectivas, estamos finalizando a escrita de um artigo com nossos resultados sobre

cristais de Coulomb conforme. Para trabalhos futuros podemos considerar termos de mais alta ordem para interações não aditivas de pares ou considerar interações de três corpos repulsiva e interação de pares atrativa por exemplo. Para os sistemas conformes pretendemos realizar um estudo com o potencial de Yukawa (Eq. 4.28).

Particularmente para as propriedades espectrais dos modos normais poderíamos realizar um estudo estatístico do espaçamento de níveis das autofrequências a partir da Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA) e investigar se algum ensemble da TMA descreve a separação de níveis dos modos normais, bem como fornecer algum meio de correlacionarmos o tipo de ordenamento filotático e o parâmetro \mathcal{R} .

REFERÊNCIAS

- ADLER, I.; BARABE, D.; JEAN, R. V. A history of the study of phyllotaxis. *Annals of botany*, Elsevier, v. 80, n. 3, p. 231–244, 1997. Disponível em: <<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:53690761>>.
- BEDANOV, V. M.; PEETERS, F. M. Ordering and phase transitions of charged particles in a classical finite two-dimensional system. *Physical Review B*, APS, v. 49, n. 4, p. 2667, 1994. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.49.2667>>.
- BRAGA, C. *Notas de Física Matemática*. Editora Livraria da Física, 2006. ISBN 9788588325609. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=sXBCFdQCEEQC>>.
- BROWN, J.; CHURCHILL, R. *Variáveis Complexas e Aplicações - 9ed*. McGraw Hill Brasil, 2015. ISBN 9788580555189. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=KlsbCgAAQBAJ>>.
- BUBECK, R.; BECHINGER, C.; NESER, S.; LEIDERER, P. Melting and reentrant freezing of two-dimensional colloidal crystals in confined geometry. *Physical review letters*, APS, v. 82, n. 16, p. 3364, 1999. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.82.3364>>.
- CARLSTRÖM, J.; GARAUD, J.; BABAEV, E. Semi-meissner state and nonpairwise intervortex interactions in type-1.5 superconductors. *Physical Review B*, APS, v. 84, n. 13, p. 134515, 2011. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.84.134515>>.
- CHAVES, A.; PEETERS, F.; FARIAS, G.; MILOŠEVIĆ, M. Vortex-vortex interaction in bulk superconductors: Ginzburg-landau theory. *Physical Review B*, APS, v. 83, n. 5, p. 054516, 2011. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.83.054516>>.
- CHU, J.; LIN, I. Direct observation of coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas. *Physical review letters*, APS, v. 72, n. 25, p. 4009, 1994. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.72.4009>>.
- CORREIA, M. V.; FREITAS, E. J.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. de S. Structural phases of classical 2d clusters with competing two-body and three-body interactions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2023. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/ace50e/meta>>.
- DOBNIKAR, J.; BRUNNER, M.; GRÜNBERG, H.-H. von; BECHINGER, C. Three-body interactions in colloidal systems. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 69, p. 031402, Mar 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.69.031402>>.
- DOUADY, S.; COUDER, Y. Phyllotaxis as a physical self-organized growth process. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 68, p. 2098–2101, Mar 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.68.2098>>.
- DOUADY, S.; COUDER, Y. Phyllotaxis as a dynamical self organizing process part i: The spiral modes resulting from time-periodic iterations. *Journal of Theoretical Biology*, v. 178, n. 3, p. 255–273, 1996. ISSN 0022-5193. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519396900247>>.

- DOUADY, S.; COUDER, Y. Phyllotaxis as a dynamical self organizing process part ii: the spontaneous formation of a periodicity and the coexistence of spiral and whorled patterns. *Journal of theoretical Biology*, Elsevier, v. 178, n. 3, p. 275–294, 1996. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519396900259>>.
- DRENCKHAN, W.; WEAIRE, D.; COX, S. J. The demonstration of conformal maps with two-dimensional foams. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 25, n. 3, p. 429, mar 2004. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0143-0807/25/3/010>>.
- EDSON-CHAVES, B.; SANTOS, T. V. A. dos; OLIVEIRA, F. M. C. de. Filotaxia. *Revista de Ciência Elementar*, Casa das Ciências, v. 9, n. 2, 2021. Disponível em: <<https://rce.casadasciencias.org/rceapp/art/2021/046/>>.
- ELIAS, F.; BACRI, J.-C.; MOUGINS, F. H. D.; SPENGLER, T. Two-dimensional ferrofluid foam in an external force field: gravity arches and topological defects. *Philosophical magazine letters*, Taylor & Francis, v. 79, n. 6, p. 389–397, 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/095008399177246>>.
- FERREIRA, W.; PEETERS, F.; FARIAS, G. Normal mode spectra of two-dimensional classical atoms confined by a coulomb potential. *Physical Review E*, APS, v. 68, n. 6, p. 066405, 2003. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.68.066405>>.
- GRADSHTEYN, I.; RYZHIK, I. *Table of Integrals, Series, and Products*. Elsevier Science, 2014. ISBN 9781483265643. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=F7jiBQAAQBAJ>>.
- GREEN, P. B. Pattern formation in shoots: a likely role for minimal energy configurations of the tunica. *International Journal of Plant Sciences*, The University of Chicago Press, v. 153, n. 3, Part 2, p. S59–S75, 1992. Disponível em: <<https://www.journals.uchicago.edu/doi/abs/10.1086/297064>>.
- GRIMES, C.; ADAMS, G. Evidence for a liquid-to-crystal phase transition in a classical, two-dimensional sheet of electrons. *Physical Review Letters*, APS, v. 42, n. 12, p. 795, 1979. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.42.795>>.
- HAMMER, H.-W.; NOGGA, A.; SCHWENK, A. Colloquium: Three-body forces: From cold atoms to nuclei. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 85, p. 197–217, Jan 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.197>>.
- HASSANI, S. *Mathematical methods: for students of physics and related fields*. Springer, 2009. v. 2. Disponível em: <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-0-387-21562-4>>.
- JUAN, W.-T.; HUANG, Z.-H.; HSU, J.-W.; LAI, Y.-J.; LIN, I. Observation of dust coulomb clusters in a plasma trap. *Physical Review E*, APS, v. 58, n. 6, p. R6947, 1998. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.58.R6947>>.
- KITAZAWA, M. S.; FUJIMOTO, K. Perianth phyllotaxis is polymorphic in the basal eudicot anemone and eranthis species. *Frontiers in Ecology and Evolution*, Frontiers Media SA, v. 8, p. 70, 2020. Disponível em: <<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fevo.2020.00070/full>>.

KLINDWORTH, M.; MELZER, A.; PIEL, A.; SCHWEIGERT, V. Laser-excited intershell rotation of finite coulomb clusters in a dusty plasma. *Physical Review B*, APS, v. 61, n. 12, p. 8404, 2000. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.61.8404>>.

KONG, M.; PARTOENS, B.; MATULIS, A.; PEETERS, F. Structure and spectrum of two-dimensional clusters confined in a hard wall potential. *Physical Review E*, APS, v. 69, n. 3, p. 036412, 2004. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.69.036412>>.

KONG, M.; PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. Structural, dynamical and melting properties of two-dimensional clusters of complex plasmas. *New Journal of Physics*, v. 5, n. 1, p. 23, mar 2003. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/5/1/323>>.

LEMOS, N. *Mecânica Analítica*. LIVRARIA DA FÍSICA, 2007. ISBN 9788588325241. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=XpOS2eOdDR4C>>.

LEVIN, Y. Electrostatic correlations: from plasma to biology. *Reports on progress in physics*, IOP Publishing, v. 65, n. 11, p. 1577, 2002. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0034-4885/65/11/201/meta>>.

LEVITOV, L. S. Phyllotaxis of flux lattices in layered superconductors. *Physical review letters*, APS, v. 66, n. 2, p. 224, 1991. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.66.224>>.

LIPPY, M.; BLAND, H.; BATALLER, A. Fundamental interactions in a classical wigner system. *Physical Review E*, APS, v. 104, n. 2, p. L023202, 2021. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.104.L023202>>.

MEINHARDT, H.; KOCH, A.-J.; BERNASCONI, G. Models of pattern formation applied to plant development. *Symmetry in plants*, Singapore: World Scientific, v. 4, p. 723–758, 1998. Disponível em: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9789814261074_0027>.

MELZER, A. Mode spectra of thermally excited two-dimensional dust coulomb clusters. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 67, p. 016411, Jan 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.67.016411>>.

MELZER, A.; KLINDWORTH, M.; PIEL, A. Normal modes of 2d finite clusters in complex plasmas. *Physical review letters*, APS, v. 87, n. 11, p. 115002, 2001. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.87.115002>>.

MENEZES, R. M.; SARDELLA, E.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. de S. Self-assembled vortex crystals induced by inhomogeneous magnetic textures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 31, n. 17, p. 175402, mar 2019. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ab035a>>.

MENEZES, R. M.; SILVA, C. C. d. S. Conformal vortex crystals. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 7, n. 1, p. 12766, 2017. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41598-017-12807-4>>.

- MITCHISON, G. J. Phyllotaxis and the fibonacci series: An explanation is offered for the characteristic spiral leaf arrangement found in many plants. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 196, n. 4287, p. 270–275, 1977. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.196.4287.270>>.
- NETO, J. F.; SILVA, C. C. d. S. Mesoscale phase separation of skyrmion-vortex matter in chiral-magnet–superconductor heterostructures. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 128, p. 057001, Feb 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.128.057001>>.
- PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. Classical artificial two-dimensional atoms: the thomson model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 9, n. 25, p. 5383, jun 1997. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/9/25/007>>.
- PEETERS, F. M. The phase diagram. In: *Two-Dimensional Electron Systems: on Helium and other Cryogenic Substrates*. Springer, 1997. p. 17–32. Disponível em: <https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-015-1286-2_2>.
- PIENIAZEK, P. A.; TAINTER, C. J.; SKINNER, J. L. Surface of liquid water: Three-body interactions and vibrational sum-frequency spectroscopy. *Journal of the American Chemical Society*, ACS Publications, v. 133, n. 27, p. 10360–10363, 2011. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja2026695>>.
- REICHL, L. *A Modern Course in Statistical Physics*. Wiley, 2016. ISBN 9783527413492. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=YmGzCgAAQBAJ>>.
- REIMANN, S. M.; MANNINEN, M. Electronic structure of quantum dots. *Reviews of modern physics*, APS, v. 74, n. 4, p. 1283, 2002. Disponível em: <<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.74.1283>>.
- ROBERTS, D. A contact pressure model for semi-decussate and related phyllotaxis. *Journal of Theoretical Biology*, Elsevier, v. 68, n. 4, p. 583–597, 1977. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022519377901072>>.
- ROTHEN, F.; PIERAŃSKI, P. Mechanical equilibrium of conformal crystals. *Physical Review E*, APS, v. 53, n. 3, p. 2828, 1996. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.53.2828>>.
- ROTHEN, F.; PIERANSKI, P.; RIVIER, N.; JOYET, A. Cristaux conformes. *European journal of physics*, v. 14, n. 5, p. 227–233, 1993. Disponível em: <<https://pascal-francis.inist.fr/vibad/index.php?action=getRecordDetail&idt=3898560>>.
- RUSS, C.; GRÜNBERG, H. V.; DIJKSTRA, M.; ROIJ, R. van. Three-body forces between charged colloidal particles. *Physical Review E*, APS, v. 66, n. 1, p. 011402, 2002. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.66.011402>>.
- SCHWEIGERT, V. A.; PEETERS, F. M. Spectral properties of classical two-dimensional clusters. *Physical Review B*, APS, v. 51, n. 12, p. 7700, 1995. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.51.7700>>.
- SILVA, F. C. O.; MENEZES, R. M.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. de S. Formation and stability of conformal spirals in confined 2d crystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 32, n. 50, p. 505401, sep 2020. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/abb0a7>>.

SMITH, R. S.; GUYOMARC'H, S.; MANDEL, T.; REINHARDT, D.; KUHLEMEIER, C.; PRUSINKIEWICZ, P. A plausible model of phyllotaxis. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 103, n. 5, p. 1301–1306, 2006. Disponível em: <<https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.0510457103>>.

SNOW, M.; SNOW, G. R. S. A theory of the regulation of phyllotaxis based on lupinus albus. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, The Royal Society London, v. 244, n. 717, p. 483–513, 1962. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rstb.1962.0003>>.

SOUZA, J. B.; VIZARIM, N.; REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C.; VENEGAS, P. Spontaneous skyrmion conformal lattice and transverse motion during dc and ac compression. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 25, n. 5, p. 053020, 2023. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/acd46f/meta>>.

THOMAS, R. Orthostichy, parastichy and plastochrone ratio in a central theory of phyllotaxis. *Annals of botany*, Oxford University Press, v. 39, n. 3, p. 455–489, 1975. Disponível em: <<https://academic.oup.com/aob/article-abstract/39/3/455/117962>>.

THOMSON, J. F. Xxiv. on the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle; with application of the results to the theory of atomic structure. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Taylor Francis, v. 7, n. 39, p. 237–265, 1904. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786440409463107>>.

TURNER, H.-A.; HUMPAGE, M.; KERP, H.; HETHERINGTON, A. J. Leaves and sporangia developed in rare non-fibonacci spirals in early leafy plants. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 380, n. 6650, p. 1188–1192, 2023. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.adg4014>>.

WIGNER, E. On the interaction of electrons in metals. *Physical Review*, APS, v. 46, n. 11, p. 1002, 1934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.46.1002>>.

WOLF, S.; VAGOV, A.; SHANENKO, A.; AXT, V. M.; AGUIAR, J. A. Vortex matter stabilized by many-body interactions. *Physical Review B*, APS, v. 96, n. 14, p. 144515, 2017. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.96.144515>>.

YAKOVLEV, E. V.; KRYUCHKOV, N. P.; KORSAKOVA, S. A.; DMITRYUK, N. A.; OVCHAROV, P. V.; ANDRONIC, M. M.; RODIONOV, I. A.; SAPELKIN, A. V.; YURCHENKO, S. O. 2d colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions. *Journal of Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 608, p. 564–574, 2022. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979721015757>>.

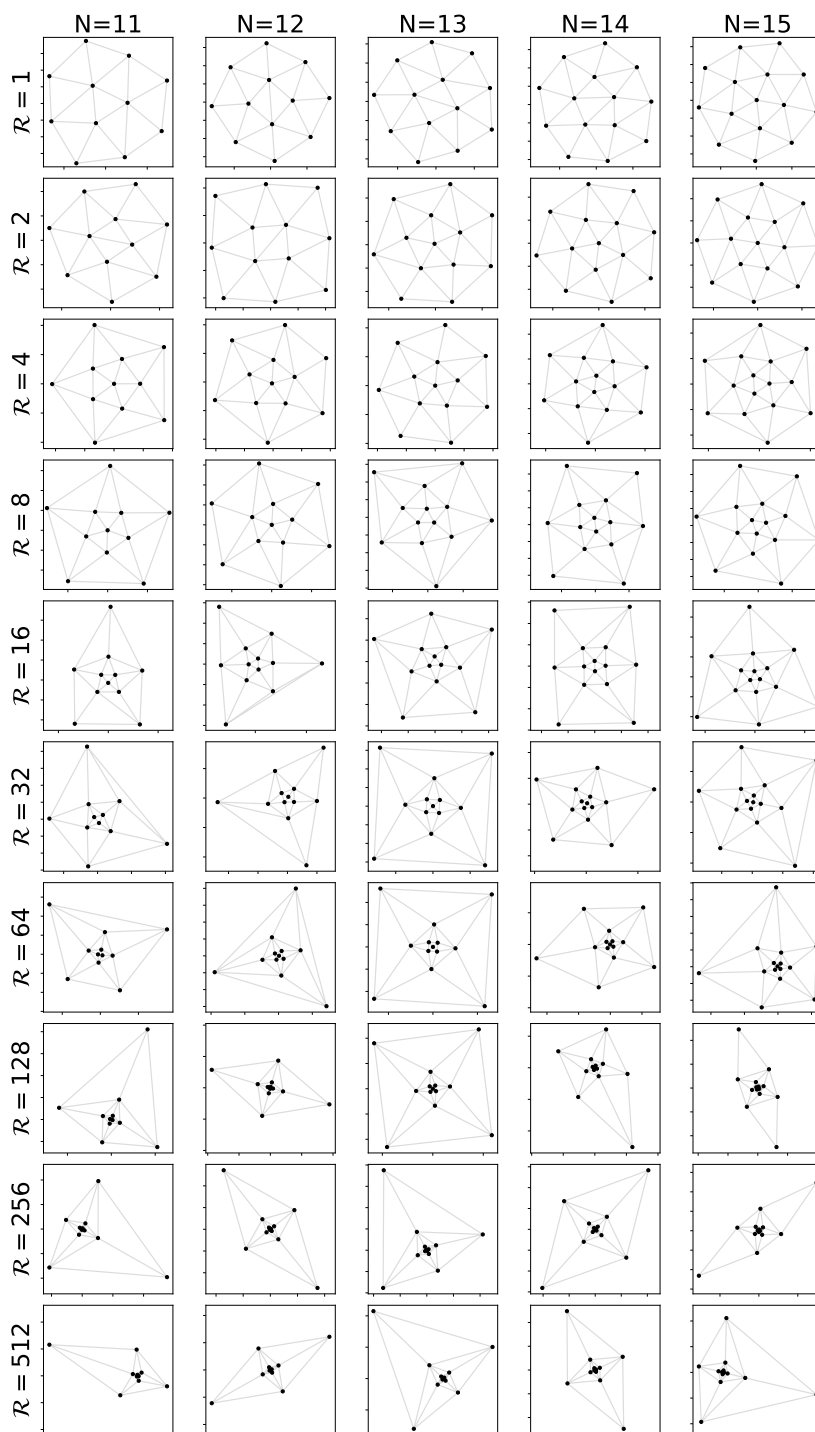
YONEKURA, T.; SUGIYAMA, M. Symmetry and its transition in phyllotaxis. *Journal of plant research*, Springer, v. 134, n. 3, p. 417–430, 2021. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s10265-021-01308-1>>.

YOTSUMOTO, A. A diffusion model for phyllotaxis. *Journal of theoretical biology*, Elsevier, v. 162, n. 2, p. 131–151, 1993. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519383710805>>.

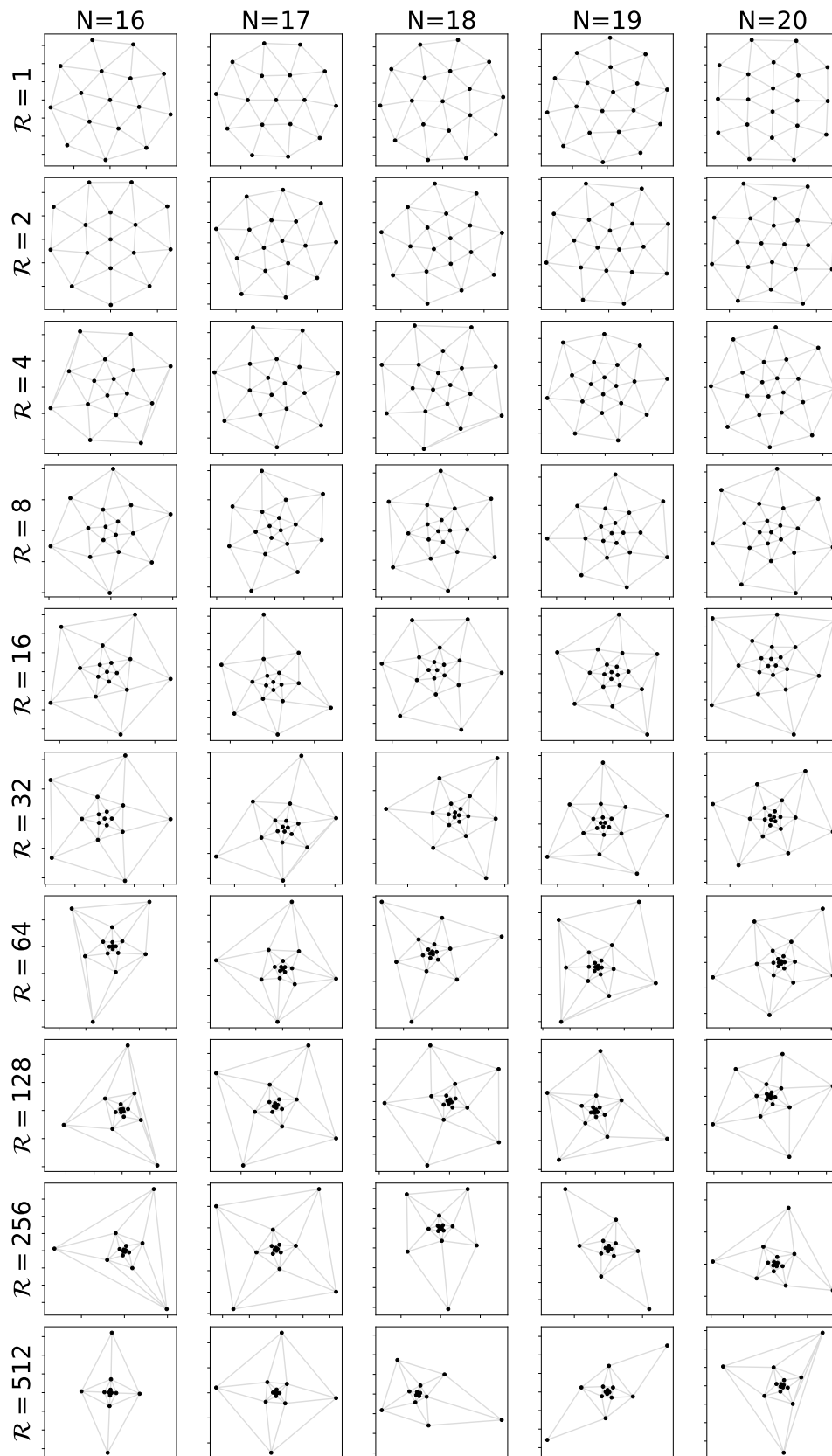
ZAMPETAKI, A. V.; LIEBCHEN, B.; IVLEV, A. V.; LÖWEN, H. Collective self-optimization of communicating active particles. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 118, n. 49, p. e2111142118, 2021. Disponível em: <<https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.2111142118>>.

APÊNDICE A – CONFIGURAÇÕES OBTIDAS PARA CONFINAMENTO CONFORME DE PARTÍCULAS COULOMBIANAS

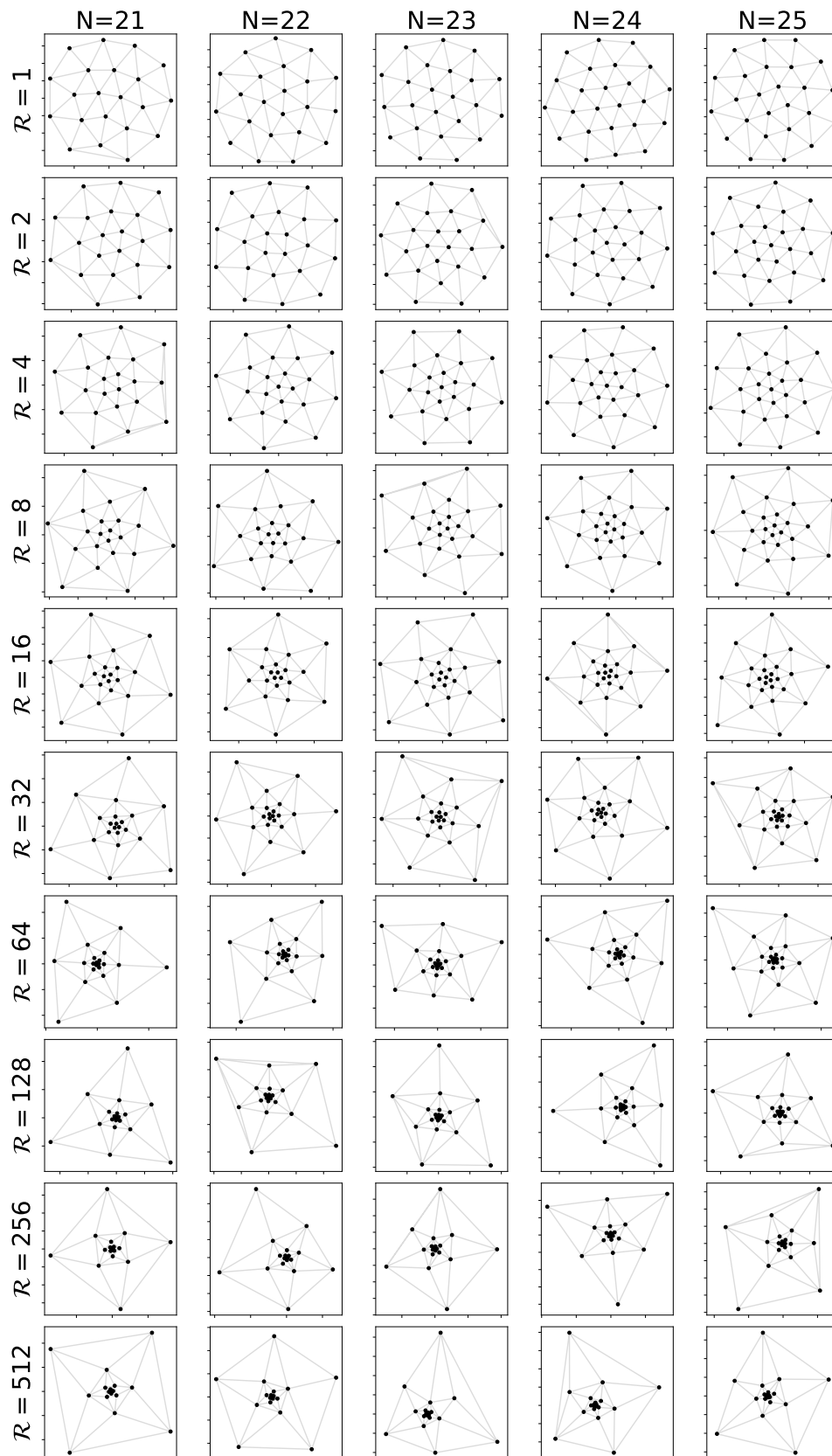
Figura 52 – Configurações para $N \in [11, 15]$.



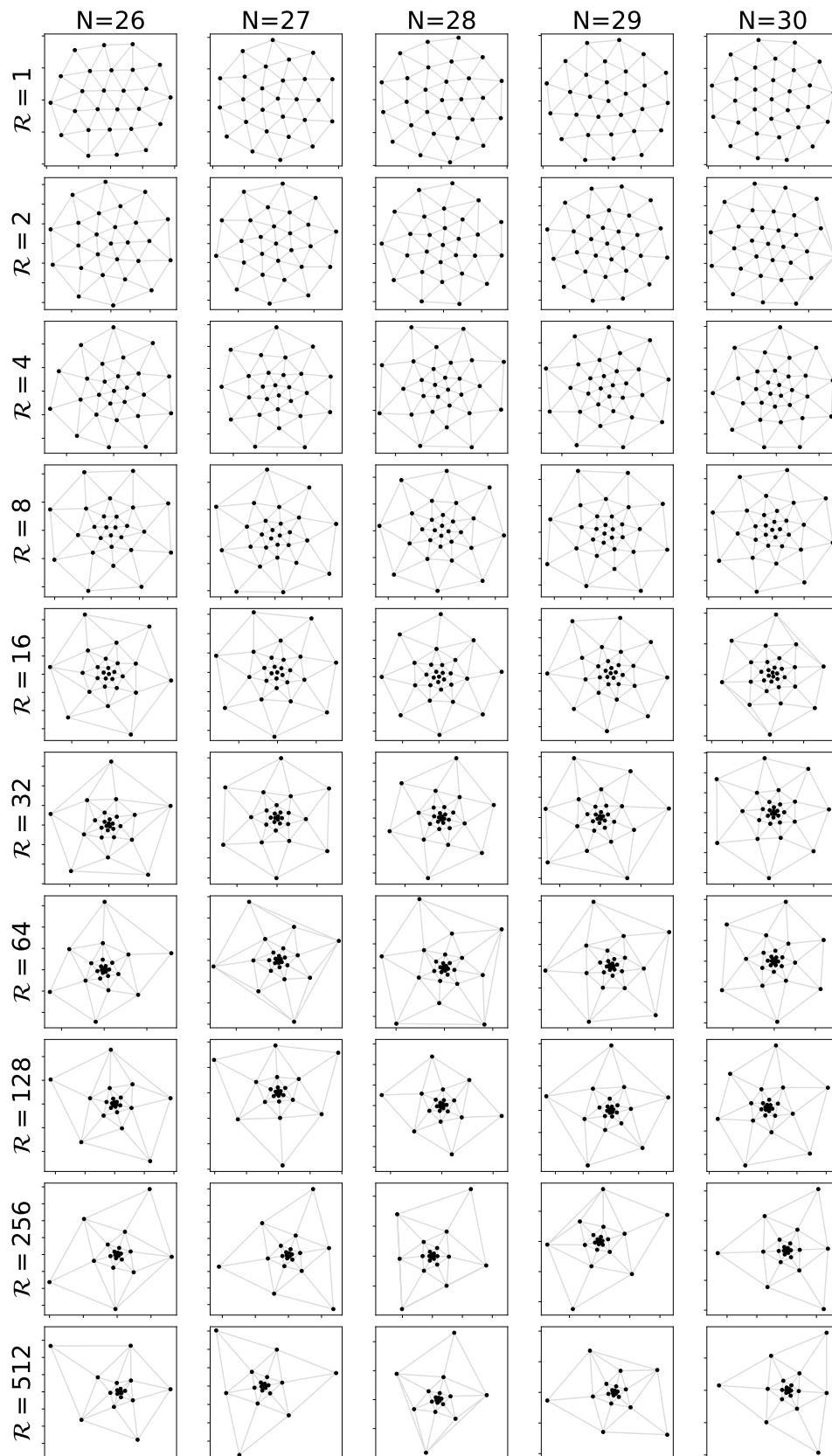
Fonte: O autor.

Figura 53 – Configurações para $N \in [16, 20]$.

Fonte: O autor.

Figura 54 – Configurações para $N \in [21, 25]$.

Fonte: O autor.

Figura 55 – Configurações para $N \in [26, 30]$.

Fonte: O autor.