



Universidade de Brasília

Universidade de Brasília

Instituto de Física

Pós-graduação em Física Teórica

**Estudo de Modelos Simplificados com
Interações de Longo Alcance no Ensemble
Microcanônico**

João Marcos Batista de Souza Maciel

Tese de Doutorado

Brasília - DF

24 de Agosto de 2015

Universidade de Brasília
Instituto de Física

João Marcos Batista de Souza Maciel

Estudo de Modelos Simplificados com Interações de Longo Alcance no Ensemble Microcanônico

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Física Teórica do Instituto de Física da Universidade de Brasília como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física Teórica.

Orientador: *Dr. Marco Antonio Amato*
Co-orientadora: *Dra. Marie-Christine Firpo*

Brasília - DF
24 de Agosto de 2015

“Estudos de modelos simplificados com interações de longo alcance no ensemble microcanônico.”

Por

João Marcos Batista de Souza Maciel

Tese submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Física.

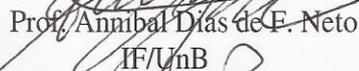
Aprovada por:



Prof. Marco Antônio Amato
IF/UnB



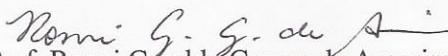
Prof. Tarcísio Marciano da R. Filho
IF/UnB



Prof. Annibal Dias de F. Neto
IF/UnB



Prof. Bruno V. Ribeiro
IFT/Go



Prof. Ronni Geraldo Gomes de Amorim
UnB/Gama

Prof. Dr. Fernando de Oliveira Albuquerque
Coordenador de Pós-Graduação
Instituto de Física

A meus pais, a minha irmã e a minha amada Jessyka.

Agradecimentos

Desafio tão grande como produzir uma tese de doutorado como esta é o de suportar e apoiar quem a produziu. Parafrazeando *sir Isaac Newton*, "*Se fui capaz de ver mais longe é porque estava de pé nos ombros de gigantes*", gostaria de agradecer a todos os gigantes que me ofereceram o ombro para que eu pudesse chegar mais longe.

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer a dois gigantes de caráter - Seu *Gercy* e Dona *Eula*. Agradecer por não terem desistido de ter filhos, mesmo em face a tantos obstáculos. Agradecer pelo tempo gasto na infância e na adolescência, brincando comigo, me educando e suprindo as necessidades de um ser humano em formação, guiando pelos caminhos certos, caminhos de Deus, e por não terem poupado a disciplina nem a vara quando precisei e mereci. Agradeço pelo exemplo de vida, de conduta moral, afetiva e espiritua. Se hoje sou um homem adulto, cidadão formado é porque pude imitar o exemplo de vida de vocês. Também agradeço por terem me ensinado sobre o valor do conhecimento: "*o conhecimento, meu filho, é algo que nunca vão poder roubar de você*" diziam vocês por toda a minha infância e adolescência. Agradeço ainda por terem me ensinado o valor da ética cristã, que tudo o que eu fazia deveria ser realizado com a maior excelência, dando o meu melhor com honestidade, pois nada do que eu fazia era para vocês, ou para mim mesmo, mas para oferecer a Deus.

Gostaria de agradecer também à dona *Maria*, minha avó que durante a infância ajudou os meus pais a cuidarem de mim, para que pudessem trabalhar tranquilos e trazerem o sustento para casa. Agradeço também pelo exemplo de conduta e caráter, e por todos os conselhos sábios de uma pessoa que viveu e superou tempos difíceis.

Agradeço à minha irmã por toda a ajuda e apoio durante o período do doutorado, pela companhia durante a infância e pela esperança e alegria trazida pela dona *Helena*.

Agradeço a minha amada *Jessyka*, minha noiva e futura esposa, por ter ficado ao meu lado durante estes sete anos da minha caminhada, começando pela graduação, passando por todo o mestrado e agora doutorado. Por ter aguentado firme e me dado suporte em todo o período em que estive na França fazendo doutorado sanduíche, longe da minha família (da qual você faz parte) e amigos. Enfim, agradeço por todo o seu amor comigo.

Gostaria de agradecer ao meu orientador, professor *Marco Amato*, por ter disponibilizado o seu tempo para me orientar desde 2007 quando fiz iniciação científica, passando pelo mestrado, chegando ao doutorado agora em 2015. Agradeço pelos conselhos não somente na área profissional como pessoal. Mais do que um orientador é um verdadeiro amigo.

Agradeço também à Dra. *Marie-Christine Firpo* que disponibilizou de seu tempo para me orientar durante o ano em que estive fazendo a pesquisa de doutorado em Paris, bem como também agradeço à instituição e ao pessoal do *Laboratoire de Physique des Plasmas* da *École Polytechnique* pela acolhida durante este tempo.

Aos meus professores e colegas de pós-graduação que apoiaram e enriqueceram o meu desenvolvimento científico com discussões científicas e ajudando a desenvolver a pesquisa quando meu conhecimento não foi suficiente.

Agradeço à CAPES e à UnB pelo financiamento completo de minha pesquisa, bem como o financiamento do período de doutorado sanduíche no exterior, custeando minhas despesas com viagens para congressos.

Gostaria também de agradecer a todos os meus amigos que, de alguma forma contribuíram para o sucesso de minha formação como pesquisador. Em especial, agradeço ao casal de amigos *Claude e Marie-Claude David* que me alugaram o estúdio que morei em Paris, e foram fundamentais para que pudesse obter êxito nessa etapa, me ajudando com o idioma e costumes locais, bem como com a ajuda em me estabelecer corretamente na França, a eles um obrigado especial pela amizade desenvolvida ao longo desse ano.

Por último, mas não menos importante, gostaria de agradecer a Deus pela sua bondade e soberania em escolher as pessoas certas para me ajudar e para colocar em minha vida todos esses gigantes, nos quais pude estar de pé em seus ombros.

*"Todos os modelos são errados. A questão é quão errados eles tem que ser
para que não sejam úteis?
—GEORGE E. P. BOX (1987)*

Resumo

Sistemas com interações de longo alcance apresentam uma gama de problemas mais desafiadores do que os associados aos sistemas com interações de curto alcance. Este fato é bem ilustrado pela existência de uma rápida relaxação a estados *quasi*-estacionários com distribuição de velocidades não-gaussianas seguidas por uma relaxação extremamente lenta em direção ao equilíbrio termodinâmico, variações abruptas de temperatura em regiões de transições de fases, possibilidade da existência de calor específico negativo no ensemble microcanônico e inequivalência entre os ensembles microcanônico e canônico. No intuito de evitar as dificuldades presentes em sistemas com interações de longo alcance, tais como divergências a curtas distâncias, problemas de evaporação de partículas, alto esforço computacional para o cálculo dos potenciais de pares, que escalam com N^2 , dentre outros, sistemas que apresentem simplificações técnicas como sistemas de menor dimensão, descrição de gás de rede e descrições de campo médio têm sido introduzidas e têm desempenhado um papel importante no entendimento do comportamento peculiar dos sistemas com interações de longo alcance. Neste trabalho mostrarei o estudo feito como parte da minha pesquisa de doutorado sobre alguns desses modelos simplificados, mantendo as características intrínsecas de sistemas com interações de longo alcance. No último capítulo será apresentada uma possível analogia entre um comportamento peculiar de um desses modelos no limite de partículas ultra-resfriadas e o fenômeno da supersolidez.

Palavras-chave: Interações de Longo Alcance, Estados *Quasi*-Estacionários, Calor Específico Negativo, Modelos de Campo Médio, HMF, Modelo do Anel Auto-Gravitante, Sistemas Auto-Gravitantes, Relaxação Violenta, Supersolidez, Teoria Core-Halo, Modelos Simplificados.

Abstract

Systems with long-ranged interactions presents a plethora of novel and challenging problems in comparison to short-ranged interacting systems: violent relaxation to non-Gaussian *quasi*-stationary states followed by an extreme slow relaxation to the thermodynamical equilibrium, temperature jumps in phase transition, ensemble inequivalence and the existence of regions with negative specific heat. In order to avoid technical difficulties presents in long-ranged interacting systems - such as short distance divergences, particles evaporation and high computational effort to compute the pair potential, which scales with N^2 , toy models by considering lower dimensional models, additional symmetries, mean field or lattice gas description have been introduced and played an important role in the study of long-ranged interacting systems. In this work I will present the research done as part of doctoral studies about some of those toy models, which keeps the characteristics of long-ranged interacting systems. In the last chapter it will be presented a possible analogy between the peculiar behaviour of a two dimensional classical mean field model in the ultra-cold particles limit and supersolidity.

Keywords: Long-Ranged Interacting Systems, *Quasi*-Stationary States, Negative Specific Heat, Mean Field Models, HMF, Self-Gravitating Ring Model, Violent Relaxation, Core-Halo Theory, Supersolidity, Toy Models.

Sumário

1	Introdução	1
2	Sistemas com Interações de Longo Alcance	5
2.1	Definição, não-aditividade e não-extensividade	5
2.2	Termodinâmica de sistemas com interações de longo alcance	7
2.2.1	Impossibilidade de coexistência de fases	7
2.2.2	Concavidade e estabilidade - calor específico negativo	8
2.2.3	Inequivalência de ensembles	10
2.3	Sistemas com interações de longo alcance fora-do-equilíbrio	12
2.3.1	Hierarquia de BBGKY	12
2.3.2	Limite de Vlasov e equação de Boltzmann não-colisional	16
2.3.3	Equações hidrodinâmicas no limite de partículas frias	19
2.3.4	Estados <i>quasi</i> -estacionários	21
3	Métodos Computacionais	23
3.1	Método de Monte Carlo Microcanônico	23
3.2	Dinâmica Molecular	25
4	Modelos auto-gravitantes em 1D - abordagem de gás de rede	29
4.1	Modelos	30
4.1.1	Modelo do anel auto-gravitante	30
4.1.2	Modelo auto-gravitante na linha	32
4.2	Resultados	33
4.2.1	Ocupação do sistema	33
4.2.2	Potencial mínimo e não-extensividade nos modelos com partículas rígidas	33
4.2.3	Modelo do anel auto-gravitante	35
4.2.4	Modelo auto-gravitante na linha	39
5	Propriedades termodinâmicas e de estabilidade do HMF-2D	47
5.1	Modelo HMF bidimensional	48
5.2	Mecânica estatística de equilíbrio no ensemble microcanônico	50
5.2.1	Estrutura periódica no regime de baixas energias: Rede similar à <i>Bravais</i>	53
5.3	Teoria linear no regime hidrodinâmico de Vlasov com partículas frias	53

6	Estados <i>quasi</i>-estacionários no modelo HMF bi-dimensional	59
6.1	Distribuição <i>water-bag</i> com partículas frias	61
6.2	Estados <i>quasi</i> -estacionários - Estrutura bi-cluster	62
6.3	Estados <i>quasi</i> -estacionários - Tempo de vida	67
6.4	Estados <i>quasi</i> -estacionários - Difusão	67
6.4.1	Mecanismo de <i>Hopping</i>	68
6.5	Teoria <i>Core-Halo</i>	70
6.5.1	Resultados - Densidades de partícula e de energia	74
6.5.2	Fração de <i>Hopping</i>	77
7	Conclusões e perspectivas futuras	79
A	Divergência do Potencial Gravitacional a Curtas Distâncias	83
B	Implementação do método de Monte Carlo microcanônico	85
B.1	Gás de Rede	85
B.2	Derivação do peso estatístico	85
C	Teorema De <i>Jeans</i>	87
D	Supersólidos	89
E	Derivação da expressão das densidades	93

Lista de Figuras

- 2.1 Evolução temporal da curtose reduzida da distribuição do momentum para o modelo HMF bidimensional (a ser apresentado no capítulo 6). O valor nulo para a curtose reduzida indica que a distribuição é gaussiana. O eixo da abscissa foi reescalado pelo número de partículas N para mostrar a dependência linear dos QSS 's com N . A simulação foi feita para $N = 500$ (verde), $N = 1000$ (vermelho), $N = 10000$ (preto). 22
- 2.2 Descrição esquemática dos processos da evolução dinâmica de sistemas com interações de longo alcance. τ é a escala do tempo de relaxação associada a cada processo. 22
- 4.1 Descrição geométrica do modelo do anel auto-gravitante. As partículas têm o movimento confinado a um círculo de raio unitário r e, portanto, tem sua localização determinada por ângulos θ_i medidos com relação a uma direção fixa. Cada par de partículas interage por uma força proporcional ao inverso do quadrado da distância entre elas, onde esta distância é dada pelo comprimento da corda d . 31
- 4.2 Ilustração do caso de menor energia potencial possível no caso da linha quando há partículas rígidas: quando todas as partículas se encontram aglomeradas, a uma distância ℓ dos dois vizinhos mais próximos e uma distância $j\ell$ do j -ésimo vizinho. 34
- 4.3 Gráficos do potencial mínimo calculado numericamente em função do número de partículas, as diferentes curvas foram obtidas variando a quantidade de sítios da rede de 10^4 a 10^5 . No painel à esquerda foi plotado os gráficos de $|V_{min}|/N$ com o eixo das abcissas em escala log, o resultado é uma reta, que mostra a dependência logarítmica do potencial mínimo com a quantidade de partículas, portanto a prescrição de Kac falha em reestabelecer a extensividade neste caso. O painel à direita mostra o gráfico de $|V_{min}|\eta L/N^2$ com o eixo das abcissas em escala log, verifica-se que todas as curvas do gráfico à esquerda colapsam na mesma curva, isto mostra que o resultado numérico está em acordo com o resultado da equação 4.18. 35

- 4.4 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Os resultados concordam com os resultados obtidos por *Sota et al.* e *Tatekawa et al.* [6, 18]- para altos valores de ε o sistema tende à curva calórica do modelo HMF unidimensional, e para baixos valores de ε o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo. 36
- 4.5 Magnetização em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Os resultados concordam com os resultados obtidos por *Sota et al.* e *Tatekawa et al.* [6, 18]- para altos valores de ε o sistema tende à curva de magnetização do modelo HMF unidimensional, e para baixos valores de ε o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a fase aglomerada a baixas energias. 37
- 4.6 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. A ocupação η desempenha um papel análogo ao do parâmetro de abrandamento no caso anterior - para altos valores de η o sistema tende à curva calórica do modelo HMF unidimensional, e para baixos valores de η o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo. 38
- 4.7 Magnetização em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. A ocupação η desempenha um papel análogo ao do parâmetro de abrandamento no caso anterior - para altos valores de η o sistema tende à curva de magnetização do modelo HMF unidimensional; e para baixos valores de η , o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a fase aglomerada a baixas energias. 38
- 4.8 À esquerda os gráficos do segundo momento central μ_2 em função da energia por partícula para diversos valores de η . À direita os gráficos do quarto momento central μ_4 em função da energia por partícula para diversos valores de η . Para $\eta < \eta_c$ é possível ver a descontinuidade na transição de fase entre as fases homogênea e aglomerada, caracterizando uma transição de primeira ordem. Para $\eta > \eta_c$ a transição é de segunda ordem com os valores variando continuamente. Não apresenta nenhum indício de outra transição de fase a baixas energias. 40
- 4.9 Gráfico da curtose em função da energia por partícula para diversos valores de η . Para pequenos valores de η há formação de um pico acentuado a baixas energias. Este corresponde a uma transição estrutural, de uma mudança de regime de único core para um regime de um core com a formação de um halo difuso. 40

- 4.10 Diagramas de fase para o modelo do anel auto-gravitante. O painel à esquerda mostra o diagrama de fases no plano $T - E$ e o painel à direita mostra o diagrama de fases no plano $\eta - E$. (I) corresponde à região onde o sistema está na fase aglomerada; (II) corresponde a região onde o sistema está na fase homogênea. A linha tracejada denota a região onde há transição de fase de segunda ordem, enquanto a linha pontilhada a região onde há transição de fase de primeira ordem. A linha sólida é o limite físico acessível ao sistema e corresponde à curva calórica do sistema quando $\eta = \eta_{max}$. 41
- 4.11 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Para altos valores de ε o sistema tende à curva calórica do modelo das folhas gravitacionais, ou modelo planar [60]; e para baixos valores de ε o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo. 42
- 4.12 Gráficos dos momentos centrais da distribuição espacial de partículas para o modelo linear com parâmetro de abrandamento em função da energia para diversos valores de ε . À esquerda os gráficos do segundo momento central e à direita os gráficos do quarto momento central μ_4 . Para pequenos valores de ε é possível ver a descontinuidade na transição de fase entre as fases homogênea e aglomerada, caracterizando uma transição de primeira ordem. Para grandes valores de ε a transição de fases deixa de ocorrer e o sistema se aproxima aos resultados do modelo planar. 43
- 4.13 Gráfico da curtose da distribuição espacial de partículas na linha em função da energia para vários valores de ε . O pico a baixas energias corresponde à transição estrutural, onde o regime caracterizado por uma estrutura de um único aglomerado passa a uma estrutura de core-halo, sendo que o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ corresponderia a uma transição de fase termodinâmica. 43
- 4.14 Gráfico da variância e da curtose da distribuição espacial de partículas para o modelo das folhas auto-gravitantes em função da energia. 44
- 4.15 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Para altos valores de η o sistema tende à curva calórica do modelo das folhas gravitacionais, ou modelo planar [60], e para baixos valores de η o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo. 45
- 4.16 Gráficos dos momentos centrais da distribuição espacial de partículas para o modelo linear com partículas rígidas em função da energia para diversos valores de η . À esquerda os gráficos do segundo momento central e à direita os gráficos do quarto momento central μ_4 . Para pequenos valores de $\eta \leq \eta_c$ é possível ver a descontinuidade na transição de fase entre as fases homogênea e aglomerada, caracterizando uma transição de primeira ordem. Para grandes valores de $\eta > \eta_c$ a transição de fases deixa de ocorrer e o sistema se aproxima aos resultados do modelo planar. 45

- 4.17 Gráfico da curtose da distribuição espacial de partículas na linha em função da energia para vários valores de η . O pico a baixas energias corresponde à transição estrutural, onde o regime caracterizado por uma estrutura de um único aglomerado passa a uma estrutura de core-halo, sendo que o limite $\ell \rightarrow 0$ corresponderia a uma transição de fase termodinâmica. 46
- 4.18 Diagramas de fase para o modelo do anel auto-gravitante. O painel à esquerda mostra o diagrama de fases no plano $T - E$ e o painel à direita mostra o diagrama de fases no plano $\eta - E$. (I) corresponde à região onde o sistema está na fase aglomerada; (II) corresponde à região onde o sistema está na fase homogênea (III) corresponde à região na qual o sistema deixa de ter transição de fase e tende ao comportamento do modelo planar. A linha tracejada denota a região onde há transição de fase de segunda ordem, enquanto a linha pontilhada a região onde há transição de fase de primeira ordem. A linha sólida é o limite físico acessível ao sistema e corresponde à curva calórica do sistema quando $\eta = \eta_{max}$. O triângulo corresponde à ocupação na qual o sistema deixa de ter transição de fase e tende ao comportamento do modelo planar. 46
- 5.1 Gráfico da dependência da temperatura (preto) e dos campos médios - magnetização (azul) e polarização (vermelho)- com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso completamente atrativo $c = d = 1$. Os resultados concordam com os resultados obtidos por *Antoni e Torcini* e por *Rocha Filho et al.* Há a presença de uma região com calor específico negativo, mostrando que o modelo mantém características de sistemas auto-gravitantes. 50
- 5.2 Distribuição de partículas no espaço cartesiano na fase SCP para $\varepsilon = 0.3$. As partículas estão aprisionadas em uma estrutura formando um único *cluster*. 51
- 5.3 Gráfico da dependência da temperatura (preto) e dos campos médios - magnetização (azul) e polarização (vermelho)- com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso completamente repulsivo $c = d = -1$. Não há nenhuma transição de fase e os estados homogêneos são acessíveis a qualquer valor de energia. 51
- 5.4 Gráfico da dependência da temperatura (preto) e dos campos médios - magnetização (azul) e polarização (vermelho)- com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso misto atrativo repulsivo $c = -d = -1$. Para baixas energias, o sistema se encontra na fase TCP, com dois clusters homoganeamente distribuídos ao longo dos eixos x e y , mas alinhados ao longo das diagonais $x + y = k_+$ e $x - y = k_-$, levando a magnetizações nulas, mas polarizações não nulas. 52
- 5.5 Distribuição espacial das partículas para os dois regimes da fase TCP, a) à direita o regime a baixas energias com partículas de baixa energia presas aos *clusters* e b) à esquerda o regime de energias intermediárias, com partículas mais energéticas que transitam entre os *clusters*. 53
- 5.6 Estrutura periódica obtida no regime de menor energia da fase TCP do caso misto atrativo-repulsivo. A estrutura é semelhante a uma rede de *Bravais* obtida pelo conjunto de operações de translação descritas por $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$. 54

- 5.7 Resultado de simulação de dinâmica molecular para o model HMF no limite de partículas frias com distribuição inicial de uma *water-bag* homogênea no espaço e com $N = 100000$. O painel menor mostra uma ampliação nos tempos iniciais: o gráfico em vermelho mostra os resultados teóricos obtidos com a taxa de crescimento linear $\gamma_L = 1/\sqrt{2}$, mostrando uma boa concordância com os resultados da simulação. 57
- 6.1 Filamentação da distribuição de grão fino, se uma resolução infinita fosse possível o sistema nunca relaxaria a um estado estacionário. Como não é possível ter esta resolução infinita, o sistema relaxa a um estado *quasi*-estacionário em uma escala de grão grosso. 60
- 6.2 Evolução temporal da distribuição das partículas no espaço das posições do sistema descrito na seção anterior no estado *quasi*-estacionário. A simulação de dinâmica molecular foi executada com $N = 10000$ e $n = 1$. A escala temporal pode ser acompanhada no gráfico da evolução temporal dos campos médios, abaixo das figuras das configurações estantâneas e cuja escala é logarítmica. Os valores de magnetização e de polarização ficam oscilando próximo aos valores 0 e 0.6, respectivamente. As cores indicam a energia das partículas, as cores quentes (amarelo, laranja e vermelho) representam as partículas mais energéticas que se movem praticamente livre do potencial de campo médio, as cores verde e roxa são as partículas com energias intermediárias que formam o fluxo entre os aglomerados densos e as partículas em cores azul e preto são as partículas menos energéticas que ficam presas ao poço do potencial de campo médio e formam os aglomerados. 64
- 6.3 Distribuição espacial das partículas do sistema descrito na seção anterior no estado *quasi*-estacionário. A simulação de dinâmica molecular foi executada com $N = 100000$ e $n = 4$. A expansão para valores de $n > 1$ leva a replicação da estrutura bicluster formando uma estrutura periódica descrita pela rede de *Bravais* apresentada no capítulo anterior. 65
- 6.4 Histograma da frequência de energia do sistema para $t = 2000$. Há três tipos de partículas no sistema: partículas de baixa energia que formam os aglomerados densos - essas partículas estão associadas ao pico principal do histograma, partículas com energia intermediária, que formam um fluxo entre os aglomerados, essas partículas estão associadas ao pico secundário do histograma- e as partículas de alta energia que se movem de maneira aleatória e livre de influências do potencial. 65
- 6.5 Mesma configuração da figura 6.2, mas agora mostrando em uma perspectiva diferente: o eixo horizontal é o eixo da coordenada x e o eixo vertical é o eixo da energia. A escala de cores foi mantida na mesma escala da figura 6.2. 66

- 6.6 Gráfico da evolução temporal da curtose da distribuição dos momenta para o modelo HMF bidimensional no caso misto atrativo-repulsivo. A escala do eixo abcissas foi reescalado pelo número de partículas como t/N e o eixo das ordenadas foi reescalado de forma a obter a curtose reduzida, também chamada de curtose de excesso, que basicamente é a dada por $k' = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} - 3$, dessa forma, quando $k' = 0$ o sistema se encontra com uma distribuição gaussiana dos momenta, que corresponde à distribuição de equilíbrio. 67
- 6.7 Evolução temporal da difusão média quadrática para $N = 10^4$ e $n = 3$. As partículas dos cores apresentam uma subdifusão vítrea, caracterizada por intervalos sem difusão. As partículas livres e as partículas do fluxo apresentam um regime de difusão normal de sistemas confinado semelhante à difusão das partículas livres. 69
- 6.8 Evolução temporal da distribuição das partículas no espaço das posições do sistema. As linhas pretas são as linhas equipotencias instantâneas, que oscilam devido à oscilação do campo médio. 70
- 6.9 Função de distribuição $f(\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}))$ para $N = 10^5$ e $n = 4$. O tempo final de simulação foi $t_f = 20000$, tempo suficiente para o sistema perder memória da distribuição inicial (problema da filamentação mostrado na figura 6.1) e atingir uma melhor termalização. 71
- 6.10 Função de distribuição obtida na equação (6.11). A escala do eixo das ordenadas está em escala logarítmica. 73
- 6.11 Densidade de energia obtida com a função de distribuição *core-halo* com dois níveis de halo. Ambos os gráficos mostram o mesmo resultado, variando somente a perspectiva. No gráfico à direita as cores mais escuras representam regiões menos densas, enquanto que as regiões em amarelo e vermelho representam as regiões mais densas. As regiões com maior densidade são interligadas por regiões de densidade intermediárias, este canal de ligação com densidade intermediária - região mais clara da figura - são as partículas do fluxo. 75
- 6.12 Densidade de energia obtida com a função de distribuição *core-halo* com dois níveis de halo. As cores mais quentes representam regiões mais energéticas e cores mais frias representam as regiões menos energéticas. Ambos os gráficos mostram o mesmo resultado, variando somente a perspectiva. É possível ver que as regiões com menor densidade de energia são interligadas por regiões de energia intermediária formando canais energéticos que funcionam como colimadores do feixe de partículas que forma o fluxo de partícula entre os clusters, aumentando, assim a coerencia do fluxo. 76
- D.1 A função de onda num supersólido não se anula completamente entre os sítios da rede cristalina. Figura obtida na referência [96] 91

- D.2 O painel acima mostra o perfil de densidade de um supersólido, a densidade não se anula longe do centro core central, o que mostra o fluxo de partículas gerado pelo tunelamento entre os sítios da rede e a conseqüente deslocalização das partículas. O painel abaixo mostra o perfil de densidade de um sólido comum para comparação, a densidade se anula para valores afastados do core central do sítio, mostrando a alta localização das partículas no sólido comum. Figura obtida na referência [86] 91
- D.3 Configurações instantâneas de uma simulação de Monte Carlo de um sistema de bósons interagindo por um potencial dipolar regularizado a curtas distâncias. Cada um das configurações instantâneas foram obtidas a uma temperatura diferente, decrescendo de(a) até (d) a uma taxa de uma ordem de magnitude do anterior. O painel (a) mostra configuração de um superfluido, o painel (b) uma configuração de um cristal sólido de aglomerados, o painel (c) uma configuração de um supersólido com baixa fração de partículas supersólidas e em (d) uma configuração de um supersólido com alta fração de partículas supersólidas. A figura obtida na referência [96] 92

CAPÍTULO 1

Introdução

Em termodinâmica, o estudo de sistemas com interações de longo alcance apresenta uma gama de problemas mais desafiadores do que aqueles associados a sistemas com interações de curto alcance. Este fato é bem ilustrado pela existência de uma rápida relaxação a estados *quasi*-estacionários com distribuição de velocidades não-gaussianas, seguidas por uma relaxação extremamente lenta em direção ao equilíbrio termodinâmico; variações abruptas de temperatura em regiões de transições de fases; possibilidade da existência de calor específico negativo no ensemble microcanônico e inequivalência entre os ensembles microcanônico e canônico. Alguns exemplos de sistemas com tais interações são: sistemas auto-gravitantes, plasmas não neutros, o laser de recuo coletivo de átomos (CARL), laser de elétrons livre (FEL), sistemas dipolares, interações entre vórtices bidimensionais e modelos simplificados como o modelo de Hamiltoniano de Campo-Médio [1, 2, 3].

Uma interação é dita de longo alcance se seu potencial decai, para longas distâncias, com $r^{-\alpha}$ sendo α menor que a dimensão espacial [1]. A razão desta definição é que se o potencial não decresce rapidamente, a energia potencial por partícula cresce superlinearmente com o volume e, assim, no limite termodinâmico a energia potencial por partícula divergirá levando à não-aditividade e não-extensividade da energia interna [1].

Sistemas interagindo por potencial gravitacional newtoniano interagem com um potencial de pares do tipo $V \propto r^{-1}$ e, portanto, é um potencial de longo alcance para qualquer dimensão espacial. Esta característica é compartilhada com o potencial coulombiano, porém, este possui um potencial que pode ser tanto atrativo, como repulsivo, quando neutros apresentam a chamada blindagem de *Debye* que modifica o comprimento característico efetivo do potencial, levando a uma interação efetiva de curto alcance para distâncias maiores que o comprimento da blindagem [1, 2, 4]. Sistemas gravitacionais não apresentam nenhum tipo de blindagem do potencial efetivo e portanto são sistemas que mantêm as características intrínsecas de forças de longo alcance [1, 2, 5]. Para um estado estacionário de um sistema isolado de muitos corpos interagindo entre si por forças gravitacionais - portanto descrito pelo ensemble microcanônico - o teorema do virial enuncia que $E = -\langle K \rangle$, onde K é a energia cinética do sistema, e isto resume-se em calor específico negativo para sistemas auto-gravitantes. Todavia, é um resultado bem conhecido que sistemas em contato com banho térmico - portanto descritos pelo ensemble canônico - não podem ter calor específico negativo, pois seriam macroestados altamente instáveis. Em consequência disto, surge a inequivalência entre os ensembles para os sistemas auto-gravitantes. Este fato pode ser rerepresentado observando que as transformações de *Fenchel-Legendre* da entropia microcanônica para obtenção da energia livre de *Helmholtz* do ensemble canônico é não inversível, porquanto estados estáveis no ensemble microcanônico seriam instáveis ou metaestáveis no ensemble canônico [1, 2, 4, 6]. Neste sentido, o ensemble

microcanônico é o mais fundamental e contém todas as informações e propriedades termodinâmicas da interação gravitacional [1, 2, 5, 7]. Além disso, sistemas auto-gravitantes como galáxias, aglomerados globulares dentre outros, geralmente, se apresentam isolados e não em contato com banho térmico [5, 8, 9, 10].

As principais dificuldades no estudo de sistemas auto-gravitantes tridimensionais são o problema da evaporação de partículas e a divergência do potencial a curtas distâncias. O fato do sistema gravitacional real ser aberto [5] e o potencial ser finito mesmo com $r \rightarrow \infty$ leva à evaporação de partículas, o que significa que a entropia não é um máximo global, mas um máximo local [2, 5] e, assim, nenhum estado estacionário é possível a não ser que o sistema seja confinado a um volume finito [5, 6]. Mesmo neste caso, se o potencial não for regularizado a curtas distâncias, pode ocorrer o fenômeno da catástrofe gravotérmica [7, 11].

Há uma grande quantidade de estudos teóricos e experimentais demonstrando que a descrição clássica de relaxação colisional de dois corpos falha em descrever corretamente as propriedades de transporte de sistemas com interações de longo alcance [12]. Historicamente, as primeiras identificações das propriedades de relaxação peculiares de sistemas com interações de longo alcance vieram de observações astronômicas [5, 13, 14, 8, 9, 15]. Nos anos sessenta, descobriu-se que o perfil de luminosidade de galáxias elípticas eram regulares, suaves e simétricos, o que sugeriria que tinham alcançado um estado de alguma sorte de equilíbrio. No entanto, anteriormente, cálculos feitos por *Chandrasekar* [15] resultaram numa escala de tempo de relaxação gerada por colisões de dois corpos muito maior do que a idade do universo, contradizendo a hipótese de relaxação por colisões binárias. Tal contradição levou *Lynden-Bell* a introduzir o conceito de *Relaxação Violenta* em seu famoso artigo de 1967 [14], como um cenário não-colisional para explicar a rápida evolução de sistemas auto-gravitantes em direção a estados de *quasi-equilíbrio*.

No intuito de evitar as dificuldades presentes em sistemas com interações de longo alcance - tais como divergências a curtas distâncias, problemas de evaporação de partículas [5], alto esforço computacional para o cálculo dos potenciais de pares, que escalam com N^2 [8], dentre outros, sistemas que apresentem simplificações técnicas como sistemas de menor dimensão, descrição de gás de rede e descrições de campo médio têm sido introduzidos e desempenhado um papel importante no entendimento do comportamento peculiar dos sistemas com interações de longo alcance [16, 17, 18].

A proposta de *Lynden-Bell* deu início a um campo de pesquisa ativo e muito debatido que, progressivamente, se difundiu da comunidade de astrofísica para a comunidade de mecânica estatística [1, 13, 19, 20, 21]. Isto foi facilitado pelo uso dos modelos simplificados com interações gravitacionais [13]. Em particular, muito progresso no entendimento de tais processos de relaxação foi devido a extensivas simulações numéricas de modelos simplificados [18, 22, 16, 17, 23] que apontam para o seguinte cenário: uma rápida relaxação para o equilíbrio seguida de um curso extremamente lento em direção ao equilíbrio termodinâmico [24, 25, 26, 27]. Um exemplo destes modelos simplificados é o HMF [16], um modelo minimalístico e paradigmático no estudo de interações com longo alcance [1, 2, 28].

Desde os trabalhos iniciais de *Boltzmann* e *Gibbs* [29] sabe-se que sistemas com partículas interagindo por meio de forças de curto alcance atingem um estado final estacionário, que só depende das grandezas conservadas como energia e momento e este estado estacionário corres-

ponde ao estado de equilíbrio termodinâmico [30]. O equilíbrio termodinâmico é caracterizado pela distribuição gaussiana de velocidades e não depende das condições iniciais [31, 32, 29].

Quando há partículas interagindo por meio de forças de longo alcance o sistema fica preso em estados *quasi*-estacionários que não correspondem ao equilíbrio termodinâmico e cujo tempo de vida diverge com o número de partículas do sistema. A dificuldade principal em estudar os *QSS*'s é que tais estados dependem explicitamente da distribuição inicial das partículas no espaço de fase [1, 14, 4, 30, 33].

Embora a distribuição gaussiana dos momenta seja uma solução estacionária de *Vlasov*, ao contrário da equação de *Boltzmann*, ela não é um atrator global da dinâmica [1, 30] e o sistema não irá, necessariamente, evoluir ao equilíbrio termodinâmico. A relaxação não-colisional é, portanto, mais complexa do que a relaxação colisional de *Boltzmann* para forças de curto alcance [1, 13, 30]. A dinâmica de *Vlasov* é incompressível e reversível no tempo, assim, numa escala fina, a evolução da distribuição no espaço de fase leva a uma filamentação que fica cada vez menor com o tempo, i. e., uma evolução temporal de grão-fino que nunca relaxa a nenhum estado estacionário. Contudo, não é possível ter uma resolução infinita e, ao atingir uma resolução máxima no espaço de fase, o sistema parece ter atingido um estado estacionário de uma escala de grão-grosso.

Foi observado que nos *QSS*'s, sistemas com interações de longo alcance apresentam a formação de estruturas com um aglomerado denso circundado por um halo difuso - estruturas *core-halo* [33, 34]. À medida em que a dinâmica do sistema evolui, ondas macroscópicas de densidade são formadas. Algumas partículas entram em ressonância com estas oscilações macroscópicas ganhando energia e formando o halo difuso às custas do movimento coletivo do sistema. Em contrapartida, a perda de energia para as partículas do halo diminui a amplitude das oscilações coletivas de maneira que as partículas restantes condensam em estados de baixa energia resultado na formação do aglomerado denso [30, 33, 34]. Devido à incompressibilidade da dinâmica de *Vlasov*, as partículas não podem perder toda a sua energia cinética, mas o core terá uma densidade máxima permitida pela distribuição inicial, o sistema tenderá a ter o estado de menor energia completamente ocupado equivalente a um gás de *fermi* totalmente degenerado [30, 33, 34].

Desde o trabalho seminal de *Lynden-Bell* [14], a comunidade científica tem empregado um grande esforço na tentativa de prever o *QSS* sem a necessidade de resolver explicitamente a dinâmica de muitos corpos ou a equação de *Vlasov* [30, 35]. A maioria das tentativas foi baseada na idéia de relaxação violenta [20, 19], no entanto, mesmo sendo úteis para uma primeira aproximação, nenhuma se mostrou realmente satisfatória [36].

Nesta última década, *Levin*, *Pakter* e *Teles* propuseram uma abordagem que apresenta resultados mais precisos [30, 33]. Qualitativamente, observaram que para diferentes sistemas e modelos os *QSS*'s apresentavam a formação de uma estrutura *core-halo* e, baseados no teorema de *Jeans*, propuseram uma solução *ansatz* para a equação de *Vlasov* chamada distribuição *Core-Halo* [30, 33, 34]. Recentemente, Rocha Filho propôs uma melhoria baseada num princípio de maximização de entropia a fim de evitar completamente a utilização de parâmetros da dinâmica dos sistemas [35].

Neste trabalho mostrarei o estudo feito como parte da minha pesquisa de doutorado sobre alguns desses modelos simplificados. No capítulo 2 será apresentada uma breve introdução

sobre as propriedades peculiares dos sistemas com interações de longo alcance no equilíbrio e fora-do-equilíbrio. O capítulo 3 apresentará a descrição da metodologia computacional usada para estudar os modelos simplificados, sendo um método de Monte Carlo microcanônico para o estudo das propriedades de equilíbrio e um método de dinâmica molecular para estudar o processo de relaxação violenta e as propriedades dos estados *quasi*-estacionários da dinâmica fora-do-equilíbrio. No capítulo 4 apresentarei um estudo termodinâmico de equilíbrio de modelos simplificados com interações gravitacionais sob uma simplificação ulterior de descrição de gás de rede, dois modelos com diferentes geometrias serão utilizados: o modelo do anel auto-gravitante e um novo modelo proposto que é o modelo com interação $1/r$ em uma linha. As diferentes geometrias serão úteis no entendimento dos efeitos de bordas em sistemas com interações de longo alcance, também será apresentada uma comparação dos resultados utilizando dois métodos diferentes para a regularização do potencial gravitacional - o parâmetro de abrandamento e o potencial de partículas rígidas, bem como uma discussão sobre a utilização da prescrição de *Kac* em modelos com partículas rígidas. No capítulo 5 apresentarei a expansão bidimensional de um modelo paradigmático no estudo das interações de longo alcance - o HMF bidimensional - com um estudo termodinâmico e de estabilidade linear das distribuições homogêneas no limite de uma descrição de fluido frio para os três casos de interações do modelo: ferromagnético, antiferromagnético e o caso com interações mistas atrativas e repulsivas. No capítulo 6 será apresentado um estudo sobre os estados *quasi*-estacionário do modelo HMF bidimensional no caso com interações mistas atrativas e repulsivas, o tempo de duração destes estados e a dependência com o número de partículas, a derivação de uma solução *ansatz* do tipo core-halo para este sistema e a derivação das densidades de partícula e energia e, por último, será apresentada uma analogia a formação de uma estrutura periódica similar a uma rede de *Bravais* com fluxo coerente entre os cores da rede presente nos estados *quasi*-estacionários e o fenômeno de supersolidez, conjecturado teoricamente por *Andreev e Lifshitz* [37] e *Legget* [38], é um fenômeno no qual uma ordem cristalina de longo alcance coexiste em uma mesma fase com a presença de uma difusão de partículas pelos sítios da rede, caracterizando um caráter superfluido a um material sólido.

Sistemas com Interações de Longo Alcance

Em termodinâmica, o estudo de sistemas com interações de longo alcance apresenta uma gama de problemas mais desafiadores do que aqueles associados aos sistemas com interações de curto alcance. No entanto, sabe-se muito mais sobre as propriedades estatísticas e dinâmicas associadas a estes do que àqueles. Este fato é bem ilustrado pela existência de estados *quasi*-estacionários com distribuição de velocidades não-gaussianas, variações abruptas de temperatura em regiões de transições de fases, possibilidade de existência de calor específico negativo no ensemble microcanônico e inequivalência entre os ensembles microcanônico e canônico. Alguns exemplos de sistemas com interações de longo alcance são: sistemas auto-gravitantes, plasmas não neutros, o laser de recuo coletivo de átomos (CARL) e modelos simplificados como o modelo de Hamiltoniano de Campo-Médio [1, 2, 3].

Uma interação é dita de longo alcance se seu potencial decai, para longas distâncias, com $r^{-\alpha}$ sendo α menor que a dimensão espacial [1]. A razão desta definição é que se o potencial não decresce rapidamente, a energia potencial por partícula cresce superlinearmente com o volume e, assim, no limite termodinâmico a energia potencial por partícula divergirá levando à não-aditividade e não-extensividade da energia interna [1].

Este Capítulo está organizado da seguinte forma: na seção 2.1 é apresentada a definição de interações de longo alcance, bem como uma breve discussão sobre a ausência das propriedades de aditividade e de extensividade e as consequências dessa ausência; na seção 2.2 é apresentado uma discussão sobre propriedades termodinâmicas peculiares dos sistemas com interações de longo alcance - a saber, na subseção 2.2.1 a impossibilidade de coexistência de fases, na subseção 2.2.2 a possibilidade de calor específico negativo no ensemble microcanônico e na subseção 2.2.3 a inequivalência entre os ensembles canônico e microcanônico. Na seção 2.3 serão derivadas as equações cinéticas e hidrodinâmicas a serem usadas para o estudo de sistemas com interações de longo alcance fora-do-equilíbrio e, por último, uma breve discussão sobre os estados *quasi*-estacionários com distribuição de velocidades não-gaussianas e o processo de relaxação para o equilíbrio termodinâmico destes sistemas.

2.1 Definição, não-aditividade e não-extensividade

A energia potencial por partícula é dada por [1, 2]:

$$\varepsilon = \int d^d \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) J r^{-\alpha}, \quad (2.1)$$

onde o potencial é dado por $\Phi(\mathbf{r}) = J r^{-\alpha}$ e ρ é uma densidade generalizada. Considerando uma densidade constante e tomando como limite de integração uma pequena vizinhança de

raio δ para evitar a divergência do potencial a curtas distâncias, tem-se que:

$$\varepsilon = \rho J \Omega_d \int_{\delta}^R r^{d-1-\alpha} dr, \quad (2.2)$$

$$\varepsilon = \rho J \Omega_d \frac{(R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha})}{d-\alpha}, \quad (2.3)$$

onde Ω_d é o ângulo d-dimensional. A equação (2.3) mostra que se $\alpha > d$ então ε permanece finito mesmo com $R \rightarrow \infty$. Neste caso a interação é dita curto alcance. Se $\alpha \leq d$, então ε divergirá com $R \rightarrow \infty$, isto é, a energia de uma partícula dependerá das outras partículas localizadas suficientemente afastadas. Neste caso a interação é dita longo alcance.

No caso em que $\alpha \leq d$, a energia cresce superlinearmente com o volume (ou logaritmicamente no caso $\alpha = d$). Isso implica na perda da propriedade de extensividade: a energia interna não é função extensiva das variáveis termodinâmicas. Porém, a extensividade ainda pode ser restaurada por meio da prescrição de *Kac*, que consiste numa renormalização da energia potencial a fim de tornar as contribuições das energias cinética e potencial em contribuições de magnitudes comparáveis para a função hamiltoniana, e pode ser entendido como uma mudança na escala de tempo [1, 2].

Ao dividirmos um sistema termodinâmico em dois subsistemas, a energia interna do sistema será dada por

$$E_{Total} = E_1 + E_2 + E_{1,2}, \quad (2.4)$$

onde $E_{1,2}$ é a energia de interação entre os dois subsistemas. Para sistemas com forças de curto alcance ($\alpha > d$), no limite termodinâmico, tem se que:

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty}} \frac{E_{1,2}}{E_1 + E_2} = 0, \quad (2.5)$$

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty}} E_{Total} = E_1 + E_2, \quad (2.6)$$

a energia é a soma das energias dos constituintes do sistema, ou seja, a energia é aditiva.

No caso em que as forças são de longo alcance ($\alpha \leq d$) a energia é dada por (2.4) mesmo no limite termodinâmico. Isto implica na perda da propriedade da aditividade: a energia interna não é mais simplesmente a soma das energias internas dos substistemas constituintes. Muitas das características termodinâmicas dos sistemas com interações de longo alcance, tais como o calor específico negativo e a impossibilidade de coexistência de fases, surgem do fatos destes sistemas serem intrinsecamente não-aditivos [1, 2].

Se um sistema for aditivo, então a sua energia será dada por:

$$E(S, V, N) = \sum_k E(S_k, V_k, N_k), \quad (2.7)$$

com

$$S = \sum_k S_k, \quad V = \sum_k V_k \quad e \quad N = \sum_k N_k. \quad (2.8)$$

Dividindo esse sistema em N subsistemas iguais com 1 partícula em cada ($N_k = 1$), teríamos:

$$S = NS_k, \quad V = NV_k \quad e \quad N_k = 1. \quad (2.9)$$

e, portanto

$$E(S, V, N) = \sum_{k=1}^N E\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}, 1\right) = N\varepsilon(s, v), \quad (2.10)$$

onde ε é a energia por partícula, s e v a entropia e o volume por partícula, respectivamente. Isto mostra que a aditividade implica em extensividade, mas o contrário é falso, já que a extensividade pode ser restaurada pela prescrição de Kac.

Um exemplo clássico de um modelo não-aditivo e não-extensivo é o modelo magnético de *Curie-Weiss*, cujo hamiltoniano é dado por [1, 2]:

$$H_{CW} = -\frac{J}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N S_i S_j, \quad (2.11)$$

onde S_i e S_j são as variáveis de *spin*. Como cada um dos *spins* interagem de igual maneira, não importando a distância entre eles, o hamiltoniano na equação (2.11) escala com N^2 , mostrando a não-extensividade. O fator $1/N$ pode ser multiplicado na equação (2.11) a fim de restaurar a extensividade deste hamiltoniano.

Se este sistema se encontrar em uma configuração com metade dos *spins* para cima e a outra metade com os *spins* para baixo teria energia nula. Nesta configuração podemos dividi-lo em dois subsistemas: uma com *spins* para cima e outra com *spins* para baixo. A energia de cada um dos sistemas é $E_1 = E_2 = -\frac{JN^2}{4}$, assim $E_1 + E_2 = -\frac{JN^2}{2} \neq 0$. Como a soma das duas energias não é nula, então há uma energia de interação $E_{1,2} = \frac{JN^2}{2}$ que não é desprezível no limite termodinâmico, pois escala com N^2 , o que mostra a não-aditividade deste sistema.

2.2 Termodinâmica de sistemas com interações de longo alcance

2.2.1 Impossibilidade de coexistência de fases

Considere um sistema aditivo constituído de Q subsistemas, cada um com N_k partículas e com ε_k energia por partícula. Se o sistema for aditivo a energia total pode ser escrita, pelo resultado das equações (2.7) e (2.10), como:

$$E(S, V, N) = \sum_{k=1}^Q N_k \varepsilon_k(s_k, v_k), \quad (2.12)$$

onde $N = \sum_{k=1}^Q N_k$ é o número total de partículas. Definindo a quantidade relativa de partículas do subistema k como $\lambda_k = N_k/N$, a energia por partícula do sistema total fica como:

$$\varepsilon(s, v) = \frac{E}{N} = \sum_{k=1}^Q \lambda_k \varepsilon_k(s_k, v_k). \quad (2.13)$$

Se tomarmos cada subsistema k como sendo uma fase, então há a possibilidade de diversas fases coexistirem em um mesmo macroestado. No entanto, o sistema deve ser aditivo para que a equação (2.12) e conseqüentemente a equação (2.13) sejam válidas.

Para sistemas com interações de longo alcance não é possível dividir o sistema em subsistemas independentes entre si como consta na equação (2.12), o sistema não é separável. Para tais sistemas a energia não é aditiva e a coexistência de fases não é permitida - ou o sistema se encontra completamente em uma fase, ou completamente em outra fase [1, 2].

2.2.2 Concavidade e estabilidade - calor específico negativo

Uma propriedade que surge da aditividade da energia é a concavidade da entropia, e, conseqüentemente, a positividade do calor específico. Todavia, sistemas com interações de longo alcance são não-aditivos. Para estes há a possibilidade de o calor específico ser negativo.

Para mostrar como o critério de estabilidade da concavidade da entropia está relacionado com a aditividade da energia considere dois subsistemas, idênticos, aditivos, com a equação fundamental $S = S(E, V, N)$, isolados e separados por uma parede totalmente restritiva. Assim [31]:

$$S_A = 2S(E, V, N). \quad (2.14)$$

Se a parede adiabática for removida e um dos dois sistemas ceder uma quantidade ΔE para o outro sistema, então, a nova entropia será [31]:

$$S_B = S(E + \Delta E, V, N) + S(E - \Delta E, V, N). \quad (2.15)$$

Assim a condição de estabilidade para este sistema é:

$$2S(E, V, N) \geq S(E + \Delta E, V, N) + S(E - \Delta E, V, N). \quad (2.16)$$

Caso contrário, se a entropia final S_1 fosse maior que a inicial S_0 , a energia seria transferida espontaneamente de um subsistema para outro através da parede. Ou seja, um subsistema iria aumentar sua energia e temperatura às custas do outro [31]. No limite infinitesimal $\Delta E \rightarrow 0$, esse critério é escrito como uma condição de concavidade:

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \right|_{V, N} \leq 0, \quad (2.17)$$

ou,

$$C_V \geq 0. \quad (2.18)$$

Contudo, o sistema tem que ser aditivo para que as equações (2.14) e (2.15) sejam válidas. Como sistemas com interações de longo alcance são intrinsecamente não-aditivos, esta condição não é válida, existindo a possibilidade de haver calor específico negativo para estes sistemas, sem violar a segunda lei da termodinâmica.

O próprio equilíbrio do virial da mecânica clássica estabelece que o calor específico é negativo para determinados sistemas. Se considerarmos um sistema de N partículas interagindo entre si por meio de forças conservativas e na ausência de forças externas, define-se o virial G do sistema como sendo [39]:

$$G = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i, \quad (2.19)$$

onde \mathbf{p}_i e \mathbf{r}_i são os vetores momentum e posição, respectivamente, da partícula i .

A variação de G no tempo é:

$$\frac{dG}{dt} = \dot{G} = \sum_{i=1}^N \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \mathbf{r}_i + \mathbf{p}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i, \quad (2.20)$$

onde o ponto é a notação para derivada temporal.

Pela definição de força de momentum em sistemas conservativos $\mathbf{F}_i = \dot{\mathbf{p}}_i$ e $\mathbf{p}_i = m_i \dot{\mathbf{r}}_i$ [39], assim:

$$\dot{G} = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i + \frac{1}{m_i} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i. \quad (2.21)$$

O segundo termo do somatório é o dobro da energia cinética total do sistema e o primeiro termo, podemos ainda reescrever em termos de um gradiente de potencial, uma vez que o sistema é conservativo:

$$\mathbf{F}_i = -\nabla \Phi_i, \quad (2.22)$$

para um potencial do tipo $\Phi_i(\mathbf{r}) \propto r_i^{-\alpha}$, com α sendo uma constante positiva não-nula:

$$\mathbf{F}_i = \frac{\alpha \Phi_i}{r_i} \hat{\mathbf{r}}_i, \quad (2.23)$$

onde $\hat{\mathbf{r}}_i$ é o vetor unitário na direção de \mathbf{r}_i . Assim a equação (2.21) fica como:

$$\dot{G} = 2K + \alpha \Phi, \quad (2.24)$$

onde K e Φ são as energias cinética e potencial totais, respectivamente.

Se tomarmos a média de \dot{G} no tempo, temos:

$$\frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \dot{G} dt = 2\langle K \rangle + \alpha \langle \Phi \rangle, \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{\tau} [G(t = \tau) - G(t = 0)] = 2\langle K \rangle + \alpha \langle \Phi \rangle. \quad (2.26)$$

Se as posições e os momentos se mantiverem finitos ao longo do tempo, ou seja, se as partículas estiverem confinadas a um volume do espaço de fase, então é possível fazer uma

escolha de um τ suficientemente grande, para que o lado esquerdo da equação (2.26) seja nulo [39]:

$$2\langle K \rangle + \alpha \langle \Phi \rangle = 0, \quad (2.27)$$

que é a condição do chamado equilíbrio do virial. Aplicando este resultado à energia total, tem-se que

$$E = \langle K \rangle + \langle \Phi \rangle = \frac{1}{\alpha}(\alpha - 2)\langle K \rangle. \quad (2.28)$$

Como a temperatura cinética é definida por $\langle K \rangle = \frac{dNk_b}{2}T$, com d sendo a dimensão do sistema [32], então:

$$E = \frac{1}{\alpha}(\alpha - 2) \left(\frac{dNk_b}{2} \right) T. \quad (2.29)$$

O resultado da equação (2.29) leva a concluir que sistemas com interações de longo alcance ($\alpha \leq d$) no equilíbrio do virial terão calor específico negativo para $\alpha < 2$ [39, 40].

2.2.3 Inequivalência de ensembles

Em contato com banho térmico, um sistema com calor específico negativo tenderia a aumentar ou a diminuir sua temperatura indefinidamente às custas do reservatório - a) se o sistema tiver temperatura menor do que a do banho, ele iria receber o calor do banho, aumentando sua energia e diminuindo a temperatura até sair da região com calor específico negativo, ou até atingir o zero absoluto ou b) se o sistema tiver temperatura maior do que a do banho, ele iria ceder energia ao banho e aumentar a temperatura indefinidamente ou até sair da região com calor específico negativo [5]. Dessa forma, enquanto há a possibilidade do calor específico ser negativo em um sistema isolado (ensemble microcanônico), em um sistema em contato com um banho térmico (ensemble canônico) isto não seria permitido, pois seria instável em contato com o banho térmico [5]. A própria definição do calor específico a volume constante no ensemble canônico proíbe valores negativos para o mesmo, pois no ensemble canônico $C_V \propto \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ [32], que não pode ser negativo. Por essa razão quando ocorrer regiões com calor específico negativo, os ensembles são inequivalentes [1, 2, 5].

Na verdade, para sistemas não aditivos, a derivação usual do ensemble canônico falha, pois necessita da propriedade da aditividade da energia. Neste caso, o próprio ensemble canônico está mal definido.

No ensemble microcanônico o número de microestados do sistema $\Omega(E, V, N)$ é dado por [32]:

$$\Omega(E, V, N) = \int_{E=H(\mathbf{p}, \mathbf{r})} d^{dN} \mathbf{r} d^{dN} \mathbf{p} = \int d^{dN} \mathbf{r} d^{dN} \mathbf{p} \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{r})), \quad (2.30)$$

onde δ é a função delta de Dirac e $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ é o hamiltoniano do sistema. A entropia de Boltzmann é definida como [31, 32]:

$$S(E, V, N) = k_B \ln \Omega(E, V, N). \quad (2.31)$$

Para a derivação usual do ensemble canônico, considere um sistema isolado com energia E e divida este sistema em duas partes- uma com energia E_1 e outra com energia maior E_2 , que fará o papel de banho térmico.

A probabilidade de encontrar o sistema com energia E é [1]:

$$P(E) = \int dE_2 \Omega(E_2) \delta(E_1 + E_2 + E_{1,2} - E), \quad (2.32)$$

onde $E_{1,2}$ é a energia de interação entre os dois subsistemas. Se o sistema tiver forças de interação de curto alcance, $E_{1,2}$ é desprezível no limite termodinâmico:

$$P(E) = \int dE_2 \Omega(E_2) \delta(E_1 + E_2 - E), \quad (2.33)$$

$$P(E) = \Omega_2(E - E_1). \quad (2.34)$$

Utilizando a equação (2.31):

$$P(E) = \exp \left[\frac{S_2(E - E_1)}{k_B} \right]. \quad (2.35)$$

Expandindo a equação anterior em séries de *Taylor* em termos de $S_2(E - E_1)$ [1, 32]:

$$P(E) \approx \exp(k_B^{-1}) \exp \left[S_2(E) - (E - E_1) \left(\frac{\partial S_2}{\partial E} \right)_{E=E_1} + \dots \right], \quad (2.36)$$

$$P(E) \approx \exp \left(\frac{S_2(E)}{k_B} \right) \exp \left[-\frac{E}{k_B T} \right], \quad (2.37)$$

$$P(E) \approx \Omega_2(E) \exp[-\beta E], \quad (2.38)$$

que é a distribuição usual do ensemble canônico.

Note que para chegarmos a este resultado foi necessário supor que o sistema era aditivo para passarmos da equação (2.32) para a equação (2.33). Se o sistema não tiver energia aditiva, é necessário tomar a contribuição da energia de interação entre o sistema com energia E_1 e o banho térmico com energia E_2 para a construção da distribuição em (2.38), e esta pode ser dependente do sistema estudado, a não ser que o sistema não interaja com o banho [1].

A função de partição no ensemble canônico é dada por [32]:

$$Z(\beta, V, N) = \frac{1}{N!} \int d^{dN} \mathbf{p} d^{dN} \mathbf{r} \exp(-\beta H(\mathbf{p}, \mathbf{r})), \quad (2.39)$$

$$Z(\beta, V, N) = \frac{1}{N!} \int dE \exp(-\beta E) \int d^{dN} \mathbf{p} d^{dN} \mathbf{r} \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{r})). \quad (2.40)$$

A integral nas variáveis do espaço de fase é a definição do número de microestados em (2.30), assim:

$$Z(\beta, V, N) = \frac{1}{N!} \int dE \Omega(E, V, N) \exp(-\beta E), \quad (2.41)$$

$$Z(\beta, V, N) = \frac{1}{N!} \int dE \exp(-\beta E + k_B S(E, V, N)), \quad (2.42)$$

$$Z(\beta, V, N) = \frac{1}{N!} \int dE \exp[-\beta N(\varepsilon - Ts(\varepsilon, v))]. \quad (2.43)$$

Se $s(\varepsilon, v)$ for côncava, o termo $\varepsilon - Ts(\varepsilon, v)$ é a transformação de *Legendre* para a energia livre de *Helmholtz* definidos como [1]

$$\Psi(\beta, v) = \beta A(\beta, v) = \inf_{\varepsilon} [\varepsilon - Ts(\varepsilon, v)], \quad (2.44)$$

onde $\Psi(\beta, v)$ é a energia livre de *Helmholtz* $A(\beta, v)$ reescalada por β . E a inversão de (2.44) é feita por:

$$s(\varepsilon, v) = \inf_{\beta} [\beta \varepsilon - \Psi(\beta, v)]. \quad (2.45)$$

Se $s(\varepsilon, v)$ for côncava, há uma correspondência única de cada valor de ε para cada valor de β satisfazendo as equações (2.44) e (2.45) [31], levando à equivalência dos ensembles [32]. Para sistemas não-aditivos a concavidade da entropia não está garantida que poderia levar a uma não correspondência única entre ε e β . Macroestados termodinâmicos realizáveis em um ensemble não são realizáveis em outro [1, 2].

Em sistemas aditivos, regiões convexas para a entropia são instáveis e não podem ser observadas nem mesmo em sistemas isolados [31]. Para esses sistemas, ao atingir o limite termodinâmico a entropia tende ao envelope côncavo da construção de *Maxwell* levando à transição de fases com coexistência de fases [1, 2, 31, 32, 41].

Para sistemas com interações de longo alcance, regiões convexas para entropia podem ser estáveis no ensemble microcanônico e a coexistência de fases não é permitida, assim a construção de *Maxwell* e o envelope côncavo podem não ser realizáveis no ensemble microcanônico, levando à inequivalência de ensembles [1, 2, 5].

2.3 Sistemas com interações de longo alcance fora-do-equilíbrio

2.3.1 Hierarquia de BBGKY

As equações da hierarquia de BBGKY e da equação de *Vlasov* são deduzidas neste trabalho conforme foi proposto por *Liboff* (2003) [42].

Seja $f_N(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots, \omega_{i-1}, \omega_i, \omega_{i+1}, \dots, \omega_N)$ a função de distribuição de N partículas em função dos vetores $2d$ -dimensionais $\omega_i = (\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i)$. A equação de *Liouville* para f_N é:

$$\frac{d}{dt} f_N = \frac{\partial f_N}{\partial t} - \widehat{L}_N f_N = 0. \quad (2.46)$$

O operador de *Liouville* \widehat{L}_N é definido em termos dos parenteses de *Poisson* como:

$$\widehat{L}_N = [H, \quad] = \sum_{i=1}^N \left\{ (\nabla_i H) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) - \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \right) \cdot (\nabla_i) \right\}, \quad (2.47)$$

e H é o hamiltoniano do sistema:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{p}_j}{2m_j} + \frac{1}{N} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N \Phi(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k), \quad (2.48)$$

o fator N^{-1} é introduzido como prescrição de *Kac*.

Assim as derivadas em (2.47) ficam:

$$\nabla_i H = \frac{1}{N} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N \nabla_i \Phi(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N \nabla_i \Phi_{j,k} \quad (2.49)$$

e

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}. \quad (2.50)$$

Substituindo (2.49) e (2.50) na equação (2.47):

$$\widehat{L}_N = \sum_{i=1}^N - \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \right) \cdot (\nabla_i) + \frac{1}{N} \sum_{\substack{i,j,k=1 \\ j < k}}^N (\nabla_i \Phi_{j,k}) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right). \quad (2.51)$$

Podemos ainda reescrever (2.51) como a soma de dois operadores, um relacionado à energia cinética \widehat{K}_i e outro relacionado à energia potencial $\widehat{\Phi}_{j,k}$:

$$\widehat{K}_i = \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \right) \cdot (\nabla_i) \quad (2.52)$$

e

$$\widehat{\Phi}_{j,k} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\nabla_i \Phi_{j,k}) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right), \quad (2.53)$$

assim:

$$\widehat{L}_N = \sum_{i=1}^N -\widehat{K}_i + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N \widehat{\Phi}_{j,k}. \quad (2.54)$$

Os termos não-nulos da soma em (2.53) são os termos em que $i = j$ e $i = k$, e tendo em consideração a simetria do potencial $\nabla_j \Phi_{j,k} = -\nabla_j \Phi_{k,j}$, podemos reduzir a equação (2.53) em:

$$\widehat{\Phi}_{j,k} = \left(\frac{\nabla_j \Phi_{j,k}}{N} \right) \cdot \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_k} \right) \right\}. \quad (2.55)$$

Para efeito de notação tomaremos a matriz $\mathbf{G}_{j,k} = N^{-1} \nabla_j \Phi(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)$, que representa a força sentida pela partícula j na presença da partícula k .

Como o interesse está em obter a equação reduzida para s partículas ($s < N$), particionamos o operador de *Liouville* para N partículas \widehat{L}_N da seguinte maneira:

$$\widehat{L}_N = \widehat{L}_s + \widehat{L}_{s+1 \rightarrow N}. \quad (2.56)$$

Onde o operador \widehat{L}_s da primeira até a s -ésima partícula e o operador $\widehat{L}_{s+1 \rightarrow N}$ atua nas partículas $s+1$ até N . Podemos também reduzir a função de distribuição de N partículas para s partículas como:

$$f_s(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_s) = \int d\omega_{s+1} d\omega_{s+2} \dots d\omega_N f_N(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_s, \omega_{s+1}, \dots, \omega_N). \quad (2.57)$$

Se integrarmos a equação de *Liouville* em (2.46) como foi integrado em (2.57) e aplicarmos o resultado de (2.56), temos:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} - \widehat{L}_s f_s = I_{s+1 \rightarrow N}, \quad (2.58)$$

onde

$$I_{s+1 \rightarrow N} = \int d\omega_{s+1} d\omega_{s+2} \dots d\omega_N \widehat{L}_{s+1 \rightarrow N} f_N. \quad (2.59)$$

Os termos à esquerda em (2.58) foram integrados diretamente, pois \widehat{L}_s não depende das partículas $s+1$ até N . Para o cálculo da integral em (2.59) é necessário definirmos os operadores \widehat{L}_s e $\widehat{L}_{s+1 \rightarrow N}$:

$$\widehat{L}_s = \sum_{i=1}^s -\widehat{K}_i + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^s \widehat{\Phi}_{j,k} \quad (2.60)$$

e

$$\widehat{L}_{s+1 \rightarrow N} = \sum_{i=s+1}^N -\widehat{K}_i + \sum_{\substack{j,k=s+1 \\ j < k}}^N \widehat{\Phi}_{j,k} + \sum_{n=1}^s \sum_{m=s+1}^N \widehat{\Phi}_{n,m}. \quad (2.61)$$

O primeiro termo à direita de (2.61) é referente à energia cinética das partículas de $s+1$ até N . O segundo termo é referente à interação entre as partículas $s+1$ até N . E o terceiro termo é referente à interação entre as partículas $s+1$ até N e as partículas de 1 até s .

Para o cálculo da integral em (2.59) apliquemos o operador $\widehat{L}_{s+1 \rightarrow N}$ definido em (2.61) em f_N :

$$\widehat{L}_{s+1 \rightarrow N} f_N = \sum_{i=s+1}^N -\widehat{K}_i f_N + \sum_{\substack{j,k=s+1 \\ j < k}}^N \widehat{\Phi}_{j,k} f_N + \sum_{n=1}^s \sum_{m=s+1}^N \widehat{\Phi}_{n,m} f_N \quad (2.62)$$

$$\widehat{L}_{s+1 \rightarrow N} f_N = \sum_{i=s+1}^N - \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \right) \cdot (\nabla_i f_N) + \sum_{\substack{j,k=s+1 \\ j < k}}^N \mathbf{G}_{j,k} \cdot \left\{ \left(\frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_j} \right) - \left(\frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_k} \right) \right\} + \sum_{n=1}^s \sum_{m=s+1}^N \widehat{\Phi}_{n,m} f_N. \quad (2.63)$$

Se integrarmos (2.63) como em (2.59), o primeiro e o segundo termo à direita de (2.63) serão integrais de gradientes, ou seja, termos de superfície; e serão muito pequenos em comparação à contribuição do terceiro termo. Podemos reescrever a equação (2.59) como:

$$I_{s+1 \rightarrow N} = \int d\omega_{s+1} d\omega_{s+2} \dots d\omega_N \sum_{n=1}^s \sum_{m=s+1}^N \widehat{\Phi}_{n,m} f_N, \quad (2.64)$$

$$I_{s+1 \rightarrow N} = \int d\omega_{s+1} d\omega_{s+2} \dots d\omega_N \sum_{n=1}^s \sum_{m=s+1}^N \mathbf{G}_{n,m} \cdot \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_m} \right) \right\} f_N. \quad (2.65)$$

O termo do gradiente com índice em m também é um termo de superfície, e a soma com índice n envolve variáveis que não estão presentes na integral:

$$I_{s+1 \rightarrow N} = - \sum_{n=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \cdot \left\{ \int d\omega_{s+1} d\omega_{s+2} \dots d\omega_N \sum_{m=s+1}^N \mathbf{G}_{n,m} f_N \right\}. \quad (2.66)$$

Sejam as partículas idênticas e de mesma massa $m_i = m$, a função de distribuição f_N será simétrica por permutações de partículas, de modo que:

$$\int d\omega_2 \mathbf{G}_{1,2} f_2(\omega_1, \omega_2) = \int d\omega_3 \mathbf{G}_{1,3} f_2(\omega_1, \omega_3) = \int d\omega_4 \mathbf{G}_{1,4} f_2(\omega_1, \omega_4). \quad (2.67)$$

A soma com índice em m de (2.66) dará $N - s$ termos iguais.

$$I_{s+1 \rightarrow N} = -(N-s) \sum_{n=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \cdot \left\{ \int d\omega_{s+1} \mathbf{G}_{n,s+1} \int d\omega_{s+2} \dots d\omega_N f_N \right\}, \quad (2.68)$$

ou

$$I_{s+1 \rightarrow N} = -(N-s) \sum_{n=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \cdot \left\{ \int d\omega_{s+1} \mathbf{G}_{n,s+1} f_{s+1} \right\}. \quad (2.69)$$

Substituindo o resultado da equação (2.69) na equação (2.58):

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} - \widehat{L}_s f_s = -(N-s) \sum_{n=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \cdot \left\{ \int d\omega_{s+1} \mathbf{G}_{n,s+1} f_{s+1} \right\}. \quad (2.70)$$

As equações em (2.70) são chamadas hierarquia de BBGKY (abreviação para *Bogoliubov, Born, Kirkhood, Green e Yvon*, que foram os cientistas que trabalharam nesta derivação de

equações cinéticas [42, 43]). Elas formam um conjunto de equações que descrevem a evolução temporal da função de distribuição reduzida de s partículas e, ao contrário da equação de *Liouville* para f_N , a evolução temporal de f_s não conserva o volume no espaço de fase, pois o termo à direita de (2.70) é não nulo para $s \neq N$. Esse conjunto de equações é denominado hierarquia, pois para obter a solução da função de distribuição de menor ordem f_s é necessário obter a solução da função de distribuição de ordem superior f_{s+1} .

A hierarquia de BBGKY desempenha um papel fundamental na teoria cinética, a partir de hipóteses sobre as funções de correlação entre as partículas é possível fechar a hierarquia e obter as equações cinéticas de *Boltzmann*, *Lennard-Balescu* e *Vlasov* [42, 43, 44]. Esta última será de interesse especial neste trabalho.

2.3.2 Limite de Vlasov e equação de Boltzmann não-colisional

As equações da Hierarquia de BBGKY dadas pela equação (2.70) podem ser reescritas em uma forma mais fácil de renormalizá-las a fim de torná-las adimensionais [42]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s \right) f_s = \hat{I}_s f_{s+1}, \quad (2.71)$$

onde

$$\hat{I}_s = -(N-s) \sum_{n=1}^s \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \cdot \int d\omega_{s+1} \mathbf{G}_{n,s+1} = -(N-s) \sum_{n=1}^s \hat{I}_n^{s+1}. \quad (2.72)$$

Renormalizando a função de distribuição f_s com relação ao volume V_s ocupado pelas s partículas [42]:

$$F_s = V^s f_s, \quad (2.73)$$

as equações em (2.71) são reescritas como:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s \right) F_s = \frac{1}{V} \hat{I}_s F_{s+1}. \quad (2.74)$$

Tomando novas parâmetros: a velocidade térmica média das partículas $\langle v \rangle$, a força do potencial Φ_0 , o comprimento característico do potencial r_0 e uma densidade de partículas n_0 , definidos como [42]:

$$\begin{aligned} m \langle v \rangle^2 &= k_b T, \\ \mathbf{G}_{i,j} &= \frac{\Phi_0}{r_0} \tilde{\mathbf{G}}_{i,j} \quad e \\ n_0 &= \frac{N}{V}, \end{aligned} \quad (2.75)$$

com $\tilde{\mathbf{G}}_{i,j}$ adimensional. É possível renormalizar as variáveis usando as definições dos parâmetros em (2.75):

$$\begin{aligned}
t &= \frac{r_0}{\langle v \rangle} \tilde{t}, \\
\mathbf{r} &= r_0 \tilde{\mathbf{r}}, \\
\mathbf{p} &= m \langle v \rangle \tilde{\mathbf{p}} \quad e \\
F_s &= (m \langle v \rangle)^{-ds} \tilde{F}_s,
\end{aligned} \tag{2.76}$$

as variáveis com o símbolo $\tilde{}$ são adimensionais.

Substituindo as variáveis adimensionais definidas em (2.76) e o operador \hat{L}_s definido como [42]:

$$\hat{L}_s = \sum_{i=1}^s -\hat{K}_i + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^s \hat{\Phi}_{j,k}, \tag{2.77}$$

em (2.74) e com alguns algebrismos podemos renormalizar as equações da hierarquia e torná-las adimensionais [42]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \sum_{i=1}^s \hat{K}'_i - \alpha \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^s \hat{\Phi}'_{j,k} \right) \tilde{F}_s = \frac{\alpha}{\gamma} \hat{I}'_s \tilde{F}_{s+1}, \tag{2.78}$$

onde os operadores \hat{K}'_s , $\hat{\Phi}'_{j,k}$ e \hat{I}'_s são adimensionais e os parâmetros α e γ foram tomados para encurtar a notação e são definidos como:

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{\Phi_0}{k_B T} \\
\gamma &= \frac{1}{n_0 r_0^d}.
\end{aligned} \tag{2.79}$$

Assim a razão $\frac{\alpha}{\gamma}$ à direita da equação (2.78) é escrita como:

$$\frac{\alpha}{\gamma} = n_0 r_0^d \left(\frac{\Phi_0}{k_B T} \right) = \frac{\langle \Phi \rangle}{\langle K \rangle}, \tag{2.80}$$

se $\frac{\alpha}{\gamma} \geq 1$, então o sistema está fortemente acoplado e se $\frac{\alpha}{\gamma} \rightarrow 0$ o sistema está fracamente acoplado [42, 44].

O limite do regime de *Vlasov* está no caso do sistema fracamente acoplado, o lado direito das equações da hierarquia de BBGKY em (2.78) é muito pequeno e a evolução temporal para f_s conserva seu volume no espaço de fases [42, 43]. Isso acontece quando: a) $\alpha \rightarrow 0$, a força do potencial Φ_0 é muito pequena em comparação com a energia térmica das partículas e isso implica em um sistema de pequenas correlações; b) $\gamma^{-1} \rightarrow 0$, isso ocorre ou quando o comprimento característico do potencial é muito grande, ou seja, quando há interações de longo alcance no sistema [42, 43, 44].

Da condição a) referida anteriormente as correlações entre as partículas devem ser pequenas, dessa forma é possível escrever as três primeiras funções de distribuição f_s como sendo [42]:

$$\begin{aligned} f_2(\omega_1, \omega_2) &= f_1(\omega_1)f_1(\omega_2) + \lambda C_2(\omega_1, \omega_2) \\ f_3(\omega_1, \omega_2, \omega_3) &= f_1(\omega_1)f_1(\omega_2)f_1(\omega_3) + \lambda \sum_{\substack{j,k \\ P(1,2,3)}} C_2(\omega_j, \omega_k) + \mathcal{O}(\lambda^2), \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde λ é o parâmetro de pequenez e $P(1, 2, 3, \dots, s)$ indica que as somas em i e j devem tomar todas as permutações entre as s partículas.

A primeira e a segunda equação da hierarquia em (2.78) são [42]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \widehat{K}'_1 \right) \tilde{F}_1 &= \frac{\alpha}{\gamma} \widehat{I}'_1 \tilde{F}_2, \\ \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \widehat{K}'_1 + \widehat{K}'_2 - \alpha \lambda \widehat{\Phi}'_{1,2} \right) \tilde{F}_2 &= \frac{\alpha}{\gamma} \widehat{I}'_2 \tilde{F}_3. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Substituindo (2.81) em (2.82), utilizando a definição (2.72) e mantendo os termos de menor ordem em λ :

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \sum_{i=1}^s \widehat{K}'_i \right) \prod_{j=1}^s \tilde{F}_1(\omega_j) = -\frac{\alpha}{\gamma} (N-s) \sum_{i=1}^s \widehat{I}'_i{}^{s+1} \prod_{j=1}^{s+1} \tilde{F}_1(\omega_j). \quad (2.83)$$

Os operadores \widehat{K}'_i e $\widehat{I}'_i{}^{s+1}$ dos somatórios somente irão atuar nos termos com índice i dos produtórios da equação (2.83), portanto serão estes os termos importantes [42]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + \widehat{K}'_i \right) \tilde{F}_1(\omega_i) = -\frac{\alpha}{\gamma} (N-1) \widehat{I}'_i{}^{s+1} \tilde{F}_1(\omega_i). \quad (2.84)$$

Substituindo as formas integro-diferenciais para os operadores definidas em (2.52) e (2.72) e voltando para a notação dimensional [42]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f - \frac{1}{N} \nabla \langle \Phi \rangle \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \langle \Phi \rangle &= \int d^d r' d^d p' \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{f}(\mathbf{p}', \mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (2.85)$$

que é conhecida como equação de *Vlasov* [44], ou equação de *Boltzmann* não-colisional. O motivo desta nomenclatura é que na expansão em (2.83) os termos colisionais são abandonados, pois mantém-se somente os termos de menor ordem em λ [42, 43].

A equação de *Vlasov* descreve a evolução temporal da distribuição de uma partícula sujeita a um campo médio $\langle \Phi \rangle$ gerado pela distribuição das outras partículas [42, 43, 44].

2.3.3 Equações hidrodinâmicas no limite de partículas frias

Na equação de *Vlasov* em (2.85) quando a função de distribuição de uma partícula for homogênea na posição $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = f_0(\mathbf{p}, t)$, o segundo e o terceiro termos da equação serão nulos, visto que $\nabla f(\mathbf{p}, t) = 0$ e também $\langle \Phi \rangle = \text{constante}$. E por consequência, a equação de *Vlasov* se reduzirá a [1]

$$\frac{\partial f_0(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = 0, \quad (2.86)$$

ou seja, $f_0(\mathbf{p}, t)$ será uma solução estacionária da equação de *Vlasov*. Na verdade todo $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ que satisfizer a condição:

$$\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f = \nabla \langle \Phi \rangle \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}, \quad (2.87)$$

levará a uma solução estacionária. Contudo a estacionariedade não implica em estabilidade [1].

Uma ferramenta para o estudo da estabilidade das soluções da equação de *Vlasov* é a abordagem hidrodinâmica do regime de *Vlasov* e analisar o efeito de pequenas perturbações sobre as soluções estacionárias [13]. Para uma discussão mais detalhada sobre a estabilidade das soluções estacionárias confira a referência [1].

Definindo as variáveis hidrodinâmicas $n(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ como a densidade e a velocidade de fluxo, respectivamente:

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &= \int d^d p f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d^d p \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.88)$$

é possível obter as equações hidrodinâmicas integrando (2.85) com respeito ao momentum [13]

$$\int d^d p \left\{ \frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f - \nabla \langle \Phi \rangle \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right\} = 0, \quad (2.89)$$

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [n(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)] - \nabla \langle \Phi \rangle \cdot \int d^d p \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (2.90)$$

O último termo á esquerda em (2.90) é um termo de superfície e pode ser desprezado. Assim, obtemos a equação da continuidade no regime de *Vlasov*:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}) = 0. \quad (2.91)$$

Para obter a equação da conservação de momentum multiplica-se (2.85) por $\frac{\mathbf{p}}{m}$ e integra-se com respeito ao momentum:

$$\int d^d p \frac{\mathbf{p}}{m} \left\{ \frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f - \nabla \langle \Phi \rangle \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right\} = 0, \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial n\mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{m^2} \nabla \cdot \int d^d p \overline{\mathbf{p}\mathbf{p}} f - \int d^d p \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \cdot (f \nabla \langle \Phi \rangle) \right\} \frac{\mathbf{p}}{m} = 0, \quad (2.93)$$

onde a notação $\overline{\mathbf{a}\mathbf{b}}$ indica o tensor diádico composto pelos vetores \mathbf{a} e \mathbf{b} e a integral do tensor diádico é o tensor das pressões $\overline{\mathbf{P}}$. Usando a identidade vetorial:

$$\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (\nabla \cdot \mathbf{B})\mathbf{A} - (\nabla \cdot \mathbf{A})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{B} \quad (2.94)$$

e tomando $\mathbf{A} = f \nabla \langle \Phi \rangle$ e $\mathbf{B} = \mathbf{p}$, podemos resolver a última integral em (2.93) como:

$$\int d^d p \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \cdot (f \nabla \langle \Phi \rangle) \right\} \frac{\mathbf{p}}{m} = \nabla \langle \Phi \rangle \int d^d p \frac{f}{m} = \frac{n}{m} \nabla \langle \Phi \rangle, \quad (2.95)$$

pois os outros termos seriam termos de superfície envolvendo divergentes e rotacionais. Assim:

$$m \frac{\partial n\mathbf{v}}{\partial t} - n \nabla \langle \Phi \rangle + \frac{1}{m} \nabla \cdot \overline{\mathbf{P}} = 0. \quad (2.96)$$

No limite de partículas frias podemos reescrever f como sendo $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{v})$ [13] e o tensor $\overline{\mathbf{P}}$ pode ser calculado como:

$$\overline{\mathbf{P}} = \int d^d p \overline{\mathbf{p}\mathbf{p}} f = n \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}}, \quad (2.97)$$

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{P}} = \nabla \cdot (n \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}}) = (\nabla n) \cdot \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}} + n \nabla \cdot \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}}, \quad (2.98)$$

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{P}} = [(\nabla n) \cdot \mathbf{v}] \mathbf{v} + n [(\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}], \quad (2.99)$$

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{P}} = [\nabla \cdot (n\mathbf{v})] \mathbf{v} + [(n\mathbf{v}) \cdot \nabla] \mathbf{v}. \quad (2.100)$$

Substituindo (2.100) em (2.96) e tomando massas unitárias $m = 1$:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + 2[\nabla \cdot (n\mathbf{v})] \mathbf{v} + n(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \nabla \langle \Phi \rangle = 0. \quad (2.101)$$

As duas equações hidrodinâmicas para o estudo da estabilidade das soluções da equação de Vlasov [13]

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + 2[\nabla \cdot (n\mathbf{v})] \mathbf{v} + n(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \nabla \langle \Phi \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.102)$$

2.3.4 Estados *quasi-estacionários*

A equação de *Vlasov* em (2.85) tem a característica de:

$$\frac{df}{dt} = 0. \quad (2.103)$$

Este resultado é particularmente importante pois leva à conservação dos *Casimirs*. Os *Casimirs* são funcionais que somente dependem da função de distribuição de uma partícula $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$, sendo funcionais do tipo $C[f]$. Desta maneira, pela regra da cadeia:

$$\frac{dC[f]}{dt} = \frac{dC[f]}{df} \frac{df}{dt} = 0. \quad (2.104)$$

Um *Casimir* de grande importância na termodinâmica é a entropia de *Gibbs*, definida como:

$$S[f] = \int d^d \mathbf{p} d^d \mathbf{r} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \ln f(\mathbf{p}, \mathbf{r}). \quad (2.105)$$

De fato, a entropia é maximizada pelos efeitos das correlações causadas por colisões, que não desempenham papel importante na dinâmica de *Vlasov* [42, 43]. Isto caracteriza a dinâmica de *Vlasov* como uma dinâmica reversível [42].

Para sistemas com interações de longo alcance, soluções estáveis para a equação de *Vlasov* não evoluem em escalas de tempo proporcional a N [1, 2]. Estes sistemas ficam presos em estados *quasi-estacionários* (*QSS's* do inglês *Quasi-Stationary States*) [1, 2, 14] que são dependentes da distribuição inicial e que têm duração de tempo τ que diverge com o número de partículas ($\tau \propto N^v$): a) para gravitação tridimensional, *Chandrasekhar* [45] obteve $\tau \propto N / \ln N$ b) para sistemas bidimensionais, *Chavanis* [46] obteve $\tau \propto N$ e c) para sistemas unidimensionais *Rocha Filho et al.* [28] obtiveram¹ $\tau \propto N^2$. Para sistemas reais com $N \rightarrow \infty$, sistemas com interações de longo alcance não atingem o equilíbrio termodinâmico, mas ficam presos nos estados *quasi-estacionários* [1, 2, 28]. Para estes estados, a distribuição do momentum pode ser não-gaussiana.

Sistemas com interações de longo alcance com número finito de partículas passam por três estágios de relaxação [1, 14]: 1) um primeiro estágio chamado Relaxação Violenta, no qual o sistema evolui rapidamente de uma distribuição inicial qualquer até uma distribuição que seja estável na dinâmica de *Vlasov*, a escala de tempo desse processo independe do número de partículas do sistema 2) o sistema fica preso no *QSS* 3) Relaxação colisional, em que efeitos de N finito dão importância às colisões e o regime de *Vlasov* não é mais válido, levando o sistema ao equilíbrio termodinâmico.

Uma maneira de verificar se a distribuição dos momenta é gaussiana é verificar a curtose. A curtose reduzida é definida como $K_r = \mu_4 / \mu_2^2 - 3$, onde $\mu_n = \langle (y - \langle y \rangle)^n \rangle$ é o n -ésimo momento central da distribuição da variável aleatória y . A gaussiana sempre tem um valor nulo para K_r , assim, para valores positivos, a distribuição é leptocúrtica - mais afunilada ou com caudas mais longas do que a gaussiana, e para valores negativos a distribuição é platicúrtica - mais quadrada

¹Para um pequeno número de partículas uma falha na hipótese de *markovianização* na obtenção dos termos de auto-correlação da força levaria a uma escala de tempo $\tau \propto N^{1.7}$, conforme exposto na referência [47].

ou com caudas mais curtas do que a gaussiana. No equilíbrio termodinâmico, a função de distribuição dos momenta sempre tem curtose nula.

Na figura 2.3.4 é possível ver a escala de tempo na evolução dos QSS 's de um modelo bidimensional com interações de longo alcance (HMF bidimensional a ser apresentado no capítulo 6) com o número de partículas. O eixo da abscissa foi reescalado pelo número de partículas N para mostrar a dependência linear dos QSS 's com N , de acordo com o resultado obtido por *Chavanis* [46]. Com esta escala independentemente de N , o sistema sempre atinge $K_r = 0$ para o mesmo t/N .

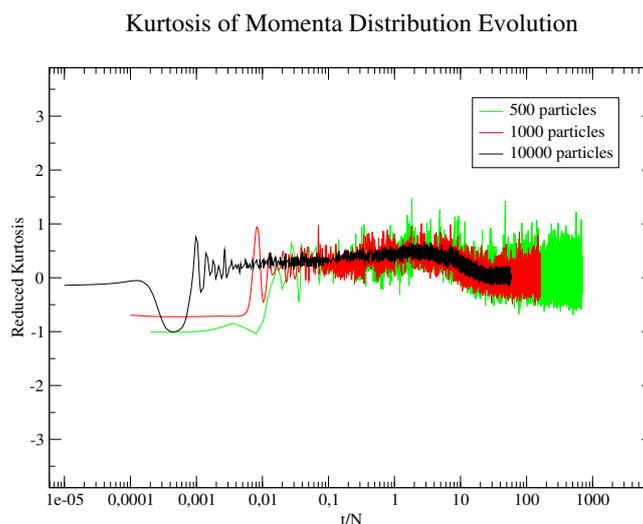


Figura 2.1 Evolução temporal da curtose reduzida da distribuição do momentum para o modelo HMF bidimensional (a ser apresentado no capítulo 6). O valor nulo para a curtose reduzida indica que a distribuição é gaussiana. O eixo da abscissa foi reescalado pelo número de partículas N para mostrar a dependência linear dos QSS 's com N . A simulação foi feita para $N = 500$ (verde), $N = 1000$ (vermelho), $N = 10000$ (preto).

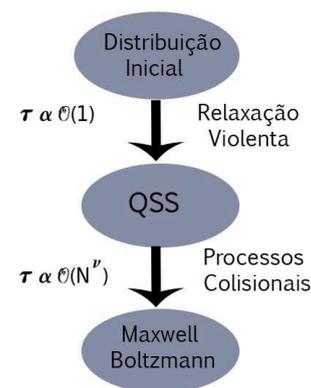


Figura 2.2 Descrição esquemática dos processos da evolução dinâmica de sistemas com interações de longo alcance. τ é a escala do tempo de relaxação associada a cada processo.

Métodos Computacionais

Métodos numéricos e simulações computacionais são uma ferramenta poderosa na física [48]. O objetivo das simulações computacionais é criar o entendimento dos fenômenos e das propriedades físicas, fazendo uso do controle sobre as condições experimentais do sistema estudado, com a vantagem de que cada aspecto das configurações do sistema possa ser examinado com detalhes [49].

Neste capítulo são apresentados os métodos computacionais utilizados, aqui, no contexto de equilíbrio termodinâmico e fora-do-equilíbrio. Na seção 3.1 é apresentada uma modificação do algoritmo de Metropolis [49, 50] para o ensemble microcanônico, e na seção 3.2 é apresentado um algoritmo simplético de integração das equações de movimento para dinâmica molecular.

3.1 Método de Monte Carlo Microcanônico

Simulações computacionais usando métodos de Monte Carlo são extensivamente usadas em física teórica [49, 50, 51, 52]. Sistemas com interação de longo alcance ficam presos em estados *quasi*-estacionários com tempo de vida que escala com o número de partículas e a utilização de dinâmica molecular para a determinação de propriedades de equilíbrio desses sistemas pode ser de elevado esforço computacional e também levar um tempo grande para que o sistema relaxe ao equilíbrio. Para estes casos é mais vantajoso usar métodos de Monte Carlo para a determinação das propriedades de equilíbrio, uma vez que estes evitam os *QSS*'s, sorteando diretamente as configurações de equilíbrio ao invés de evoluir as orbitas do sistema até atingir a distribuição de *Maxwell-Boltzmann*.

Na forma original do método de Monte Carlo, a configuração de equilíbrio do sistema é determinada pelo algoritmo de *Metropolis* [50], que gera a configuração de equilíbrio do sistema em contato com um banho térmico. No entanto, como discutido no capítulo 2, sistemas com interações de longo alcance podem apresentar inequivalência entre os ensembles canônicos e microcanoônicos no contexto em que macroestados estáveis no ensemble microcanoônico não são permitidos no ensemble canônico. Assim, o ensemble microcanoônico é o ensemble mais fundamental, no sentido que ele contém toda a informação física do estado de equilíbrio.

Levando em consideração os *QSS*'s e a inequivalência de ensembles, faz-se necessário a utilização de um método de Monte Carlo que gere a configuração de equilíbrio termodinâmico de um sistema isolado.

Provavelmente a mais popular implementação de um método de Monte Carlo microcanônico seja o algoritmo de *Creutz* [53], o qual introduz um demônio - grau de liberdade extra que faz um passeio aleatório pelas configurações do sistema e com a energia total de ambos

- sistema mais demônio - conservada. Este algoritmo não é verdadeiramente microcanônico, mas quando o sistema é suficientemente grande de tal maneira que a energia do sistema seja muito maior do que a energia do demônio, é possível considerar a energia do sistema fixa, com pequenas flutuações devido a ação do demônio. Para sistemas pequenos isso representa uma limitação do algoritmo e sistemas com interações de longo alcance com algumas centenas de partículas são sistemas de interesse em astrofísica com aglomerados estelares [5, 6, 18] e no campo dos átomos ultra resfriados com interações de longo alcance [2, 54].

Por razões das limitações do algoritmo de *Creutz* usaremos o algoritmo desenvolvido em 1991 por *Ray* [55], que é uma modificação do algoritmo de *Metropolis*, ajustando o peso estatístico ao volume do espaço de fase. O algoritmo de *Ray* difere do algoritmo de *Creutz* por eliminar o truque do demônio e por não necessitar do passeio aleatório na configuração dos momenta [13].

No ensemble microcanônico, o volume do espaço de fases $\Gamma(E, V, N)$ é dado por [32, 55, 13]:

$$\Gamma(E, V, N) = \int_{E=H(\{p_i\}, \{q_i\})} d^{dN} p d^{dN} q = C(N) \int \delta[E - H(\{p_i\}, \{q_i\})] \prod_{i=1}^N d^d p_i d^d q_i, \quad (3.1)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de *Dirac* e $C(N)$ é uma constante que depende somente da quantidade de partículas N . Integrando sobre os momenta, temos [55]:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int [E - V(\{q_i\})]^{\frac{dN}{2}-1} \Theta[E - V(\{q_i\})] \prod_{i=1}^N d^d q_i, \quad (3.2)$$

onde $\Theta(x)$ é a função degrau unitário de *Heaviside* e $V(\{q_i\})$ é a energia potencial com as partículas na configuração $\{q_i\}$ e $C'(N)$ é outra constante que só depende de N . A densidade de probabilidade em função das variáveis de posição é dada pelo integrando da equação (3.2) [55]:

$$W_E(\{q_i\}) = C'(N) [E - V(\{q_i\})]^{\frac{dN}{2}-1} \Theta[E - V(\{q_i\})], \quad (3.3)$$

onde a função degrau de *Heaviside* evita valores negativos para a energia cinética. A probabilidade de aceitação de uma nova configuração $\{q'_i\}$, que é por definição [49, 51, 52]:

$$P(\{q_i\} \rightarrow \{q'_i\}) = \min \left(1, \frac{W_E(\{q'_i\})}{W_E(\{q_i\})} \right), \quad (3.4)$$

ao substituir o resultado de (3.3) em (3.4) e levando em conta que a energia cinética do estado original é não-negativa obtém-se:

$$P(\{q_i\} \rightarrow \{q'_i\}) = \min \left(1, \frac{[K(\{q'_i\})]^{\frac{dN}{2}-1} \Theta[K(\{q'_i\})]}{[K(\{q_i\})]^{\frac{dN}{2}-1}} \right), \quad (3.5)$$

onde $K(\{q_i\}) = E - V(\{q_i\})$ é a energia cinética em função das configuração no espaço das posições.

As grandezas termodinâmicas usuais do sistema podem ser obtidas pela diferenciação da entropia de *Boltzmann* definida como

$$S(E, V, N) = k_B \ln \Gamma(E, V, N). \quad (3.6)$$

Em particular a temperatura é calculada no ensemble microcanônico como $T^{-1} = \partial S / \partial E$:

$$T = \left(\frac{2}{dNk_B} \right) \langle K(q) \rangle, \quad (3.7)$$

onde $\langle K(q) \rangle = E - \langle V(q) \rangle$ é a energia cinética média.

3.2 Dinâmica Molecular

Dinâmica molecular (DM) é a técnica computacional que consiste em resolver as equações de movimento das partículas de um sistema, que se movem sob a ação do potencial de interação interpartícula, e também, quando for o caso, com campos externos e, à medida que as partículas vão se movimentando, calcula-se as variáveis macroscópicas como temperatura e magnetização [56].

Para integrar as equações de movimento é necessário escolher o algoritmo de integração numérica, como por exemplo *Velocity-Verlet*, *Runge-Kutta*, *Leap-Frog* [56]. Bons algoritmos numéricos para a solução de sistemas hamiltonianos devem conservar as constantes de movimento [8]. Neste sentido, algoritmos simpléticos são considerados superiores aos não-simpléticos para sistemas hamiltonianos [57], pois os algoritmos simpléticos conservam a forma simplética $dp \wedge dq$, de maneira que a evolução temporal das coordenadas é uma transformação canônica [58]. Foi mostrado por *Yoshida* em [58] que o mapa discreto obtido em métodos simpléticos descreve exatamente a evolução de sistemas hamiltonianos fracamente perturbados. Isso garante que não há uma mudança de longa duração no erro da energia total causada por um truncamento local do erro [58]. Neste trabalho, para o estudo dos *QSS's* será usado o método simplético de integração descrito por *Yoshida* em [58].

A solução geral da equação de *Liouville* em (2.46) é:

$$f_N = \exp(\widehat{L}_N t) f_N(t=0), \quad (3.8)$$

ou reescrevendo $\widehat{L}_N = \widehat{K}_N + \widehat{\Phi}_N$

$$f_N = \exp[(\widehat{K}_N + \widehat{\Phi}_N) t] f_N(t=0). \quad (3.9)$$

Sendo a fórmula de *Baker-Campbell-Hausdorff*: para quaisquer operadores não-comutativos \widehat{X} e \widehat{Y} :

$$\exp(\widehat{Z}) = \exp(\widehat{X}) \exp(\widehat{Y})$$

$$\begin{aligned}\widehat{Z} = & \widehat{X} + \widehat{Y} + \frac{1}{2}[\widehat{X}, \widehat{Y}] + \frac{1}{12}([\widehat{X}, [\widehat{X}, \widehat{Y}]] + [\widehat{Y}, [\widehat{Y}, \widehat{X}]]) - \\ & \frac{1}{720}([\widehat{X}, [\widehat{X}, [\widehat{X}, [\widehat{X}, \widehat{Y}]]] + [\widehat{X}, [\widehat{X}, [\widehat{X}, [\widehat{X}, \widehat{Y}]]]) + \dots,\end{aligned}\quad (3.10)$$

Aplicando (3.10) repetidas vezes em (3.9) *Yoshida* aproxima o operador de evolução temporal $\exp(\widehat{L}_N t)$ por uma aproximação reversível no tempo [58]:

$$\begin{aligned}\exp(\widehat{L}_N \Delta t) = & \exp(B_0 \Delta t \widehat{\Phi}_N) \exp(D_0 \Delta t \widehat{K}_N) \exp(B_1 \Delta t \widehat{\Phi}_N) \exp(D_1 \Delta t \widehat{K}_N) \times \\ & \times \exp(B_1 \Delta t \widehat{\Phi}_N) \exp(D_0 \Delta t \widehat{K}_N) \exp(B_0 \Delta t \widehat{\Phi}_N),\end{aligned}\quad (3.11)$$

onde Δt é o passo temporal de integração e B_0, B_1, D_0 e D_1 são constantes dadas por [58]:

$$\begin{aligned}D_0 = \frac{1}{2 - \sqrt[3]{2}} \quad D_1 = \sqrt[3]{2} D_0 \\ B_0 = \left(\frac{1}{2}\right) D_0 \quad B_1 = \left(\frac{1}{2}\right) (D_0 + D_1).\end{aligned}\quad (3.12)$$

O algoritmo simplético de quarta ordem de *Yoshida* é, então, descrito como se segue [59]:

1. Calcula-se a força

$$\mathbf{F}^{(I)} = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t))$$

2. Aplica-se o último operador de evolução - $\exp(B_0 \Delta t \widehat{\Phi}_N)$ - da equação (3.11) nos momentos:

$$\mathbf{p}^{(I)} = \mathbf{p}(t) + B_0 \Delta t \mathbf{F}^{(I)}$$

3. Aplica-se o penúltimo operador de evolução - $\exp(D_0 \Delta t \widehat{K}_N)$ - da equação (3.11) nas posições

$$\mathbf{r}^{(I)} = \mathbf{r}(t) + D_0 \Delta t \mathbf{p}^{(I)}$$

4. Calcula-se a força atualizada na posição obtida no passo anterior

$$\mathbf{F}^{(II)} = \mathbf{F}(\mathbf{r}^{(I)})$$

5. Aplica-se o quinto operador de evolução - $\exp(B_1 \Delta t \widehat{\Phi}_N)$ - da equação (3.11) nos momentos:

$$\mathbf{p}^{(II)} = \mathbf{p}^{(I)} + B_1 \Delta t \mathbf{F}^{(II)}$$

6. Aplica-se o quarto operador de evolução - $\exp(D_1\Delta t\widehat{K}_N)$ - da equação (3.11) nas posições:

$$\mathbf{r}^{(II)} = \mathbf{r}^{(I)} + D_1\Delta t\mathbf{p}^{(II)}$$

7. Calcula-se a força atualizada na posição obtida no passo anterior

$$\mathbf{F}^{(III)} = \mathbf{F}(\mathbf{r}^{(II)})$$

8. Aplica-se o terceiro operador de evolução - $\exp(B_1\Delta t\widehat{\Phi}_N)$ - da equação (3.11) nos momentos:

$$\mathbf{p}^{(III)} = \mathbf{p}^{(II)} + B_1\Delta t\mathbf{F}^{(III)}$$

9. Aplica-se o segundo operador de evolução - $\exp(D_0\Delta t\widehat{K}_N)$ - da equação (3.11) nas posições e atualiza o valor da posição para o tempo $t + \Delta t$:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}^{(II)} + D_0\Delta t\mathbf{p}^{(III)}$$

10. Calcula-se a força atualizada no tempo $t + \Delta t$:

$$\mathbf{F}(t + \Delta t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t + \Delta t))$$

11. Aplica-se o primeiro operador de evolução - $\exp(B_0\Delta t\widehat{\Phi}_N)$ - da equação (3.11) nos momentos e atualiza o valor do momentum para o tempo posterior $t + \Delta t$:

$$\mathbf{p}(t + \Delta t) = \mathbf{p}^{(III)} + B_0\Delta t\mathbf{F}(t + \Delta t)$$

12. Repete-se os passos 1 a 11 para todas as partículas e calcula as variáveis termodinâmicas do sistema.
13. Os 12 passos acima são repetidos para cada passo temporal.

Modelos auto-gravitantes em 1D - abordagem de gás de rede

Como demonstrado no capítulo 2, um potencial é dito de longo alcance se decai, para longas distâncias, como $V \propto r^{-\alpha}$ com $\alpha \leq d$, em que d é a dimensão espacial. Sistemas interagindo por potencial gravitacional newtoniano interagem com um potencial de pares do tipo $V \propto r^{-1}$ e, portanto, é um potencial de longo alcance para qualquer dimensão espacial. Esta característica é compartilhada com o potencial coulombiano, porém como estes possuem um potencial que pode ser atrativo ou repulsivo, sistemas coulombianos neutros - carga elétrica total nula - apresentam a chamada blindagem de *Debye* que modificam o comprimento característico efetivo do potencial, levando a efeitos de interações de curto alcance [1, 2, 4]. Sistemas gravitacionais não apresentam nenhum tipo de blindagem do potencial efetivo e portanto são sistemas que mantêm as características de forças de longo alcance [1, 2, 5].

Para um estado estacionário de um sistema isolado de muitos corpos interagindo entre si por forças gravitacionais - portanto descrito pelo ensemble microcanônico - o teorema do virial enuncia que (2.28) $E = -\langle K \rangle$, em que K é a energia cinética do sistema e que resulta em calor específico negativo para tais sistemas como na equação (2.29). Todavia, é um resultado bem conhecido que sistemas em contato com banho térmico - portanto, descritos pelo ensemble canônico - não podem ter calor específico negativo. Em consequência disto, surge a inequivalência entre os ensembles para sistemas auto-gravitantes. Este fato pode ser reapresentado observando que as transformações de *Fenchel-Legendre* da entropia microcanônica para obtenção da energia livre de *Helmholtz* do ensemble canônico é não inversível, porquanto estados estáveis no ensemble microcanônico seriam instáveis ou metaestáveis no ensemble canônico [1, 2, 4, 6]. Neste sentido, o ensemble microcanônico é o mais fundamental e contém todas as informações e propriedades termodinâmicas da interação gravitacional [1, 2, 5, 7]. Além disso, sistemas auto-gravitantes como galáxias, aglomerados globulares, dentre outros, geralmente se apresentam isolados e não em contato com banho térmico [5, 8, 9, 10].

As principais dificuldades no estudo de sistemas auto-gravitantes tridimensionais são o problema da evaporação de partículas e a divergência do potencial a curtas distâncias. O fato do sistema gravitacional real ser aberto [5] e o potencial ser finito mesmo com $r \rightarrow \infty$ leva à evaporação de partículas, o que significa que a entropia não é um máximo global mas um máximo local [2, 5] e, assim, nenhum estado estacionário é possível a não ser que o sistema seja confinado a um volume finito [5, 6]. Mesmo neste caso, se o potencial não for regularizado a curtas distâncias pode ocorrer o fenômeno da catástrofe gravotérmica [7, 11]. Uma discussão mais detalhada sobre o problema da divergência a curtas distâncias se encontra no Apêndice A deste trabalho. Uma regularização do potencial muito utilizada é a introdução de um pequeno

parâmetro de abrandamento ε na forma $V \propto 1/(r + \varepsilon)$ [10, 18, 6, 8, 1, 2, 5, 9].

No intuito de evitar tais dificuldades, modelos de dimensões menores têm sido introduzidos para o estudo do problema gravitacional de muitos corpos como sistemas auto-gravitantes em uma e duas dimensões, como por exemplo o modelo das folhas gravitacionais [60], modelo HMF [16], modelo HMF bidimensional [17] e o modelo do anel auto-gravitante [18]. Estes modelos simplificados têm desempenhado um importante papel no estudo das propriedades de sistemas com interações de longo alcance devido às suas simplificações técnicas.

Neste capítulo será apresentado uma simplificação ulterior introduzindo uma abordagem de gás de rede de alguns modelos simplificados unidimensionais. Esta é uma drástica simplificação dos estados microscópicos obtida considerando a média local da dinâmica exata de N corpos. Este trabalho será restrito na determinação das propriedades de equilíbrio utilizando o método de Monte Carlo microcanônico de *Ray*, descrito no capítulo 3, e discretizando o espaço em células finitas para obter as médias locais, numa maneira em que os resultados convergem para a dinâmica microscópica exata. Também neste trabalho será estudado o efeito do tamanho da partícula, introduzindo um potencial de partícula rígida para evitar a divergência do potencial, e comparando os resultados com aqueles obtidos utilizando o parâmetro de abrandamento ε . Por último, os efeitos da geometria do sistema e das condições de contorno serão estudadas utilizando duas geometrias: círculo e linha.

Este capítulo está estruturado como se segue: na seção 4.1 serão apresentados os modelos a serem estudados : o modelo do anel auto-gravitante e o modelo auto-gravitante em uma linha finita e suas contrapartidas com partículas rígidas e com o parâmetro de abrandamento. Na seção 4.2 serão apresentados os resultados das curvas calóricas, dependência do parâmetro de ordem com relação à energia interna do sistema e os diagramas de fase dos dois modelos.

4.1 Modelos

Nesta seção iremos apresentar os modelos contínuos estudados neste capítulo. Todos os modelos deste capítulo tem o hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N V(q_i - q_j), \quad (4.1)$$

onde q_i é a coordenada generalizada da posição da partícula i e p_i o momento generalizado associado a q_i . O potencial interpartícula $V(q_i - q_j)$ é especificado para cada modelo a seguir. O fator $1/N$ foi introduzido para restaurar a extensividade dos potenciais de pares.

4.1.1 Modelo do anel auto-gravitante

O modelo do anel auto-gravitante foi primeiramente proposto por *Sota et al.* [18] e consiste de N partículas pontuais de massa unitária interagindo por gravitação newtoniana tridimensional, mas cujo movimento está confinado a um anel unidimensional de raio fixo unitário como mostra a figura 4.1. A regularização usual do potencial para este modelo é a utilização de um pequeno parâmetro de abrandamento ε [1, 2, 4, 18, 6], tal que o potencial interpartícula é:

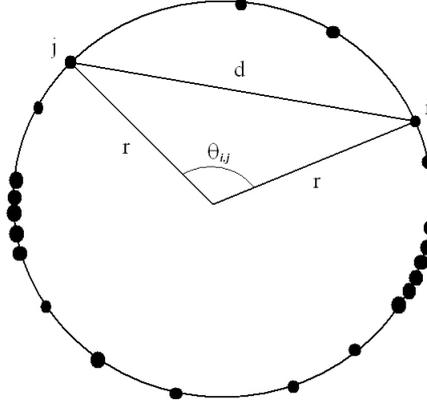


Figura 4.1 Descrição geométrica do modelo do anel auto-gravitante. As partículas têm o movimento confinado a um círculo de raio unitário r e, portanto, tem sua localização determinada por ângulos θ_i medidos com relação a uma direção fixa. Cada par de partículas interage por uma força proporcional ao inverso do quadrado da distância entre elas, onde esta distância é dada pelo comprimento da corda d .

$$V(\theta_i - \theta_j) = \frac{-1}{\sqrt{2}\sqrt{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)} + \varepsilon}, \quad (4.2)$$

onde as coordenadas generalizadas foram tomadas como posições angulares θ_i .

Tomando o limite para ε grande, o potencial em (4.2) fica:

$$V(\theta_i, \theta_j) = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \left[\frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{2\varepsilon} - 1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^{-2}), \quad (4.3)$$

que é o potencial do modelo de Hamiltoniano de Campo Médio - HMF, do inglês *Hamiltonian Mean Field*, um modelo paradigmático para sistemas com interações de longo alcance e bem estudado na literatura [1, 2, 28, 18, 6, 59, 4, 16, 61, 62, 63, 64, 26, 25, 21]. O modelo HMF possui duas fases - uma fase ferromagnética a baixas energias com partículas aglomeradas em um único cluster; e uma fase gás a altas energias com as partículas distribuídas homogeneamente no círculo- com uma transição de fase de segunda ordem entre as duas fases [16].

Neste trabalho também consideraremos a introdução de um potencial de partícula rígida como regularização do potencial a curtas distâncias:

$$V(\theta_i - \theta_j) = \begin{cases} -1/\sqrt{2(1 - \cos(\theta_i - \theta_j))} & , \text{ se } \theta_i - \theta_j > \ell; \\ +\infty & , \text{ se } \theta_i - \theta_j \leq \ell, \end{cases} \quad (4.4)$$

em que ℓ é a menor distância angular que uma partícula pode se aproximar da outra e representa o tamanho da partícula.

O campo médio da magnetização é o parâmetro de ordem para ambos os modelos - anel e HMF- e é definida como:

$$M = \sqrt{M_x^2 + M_y^2}, \quad (4.5)$$

com os componentes vetórias:

$$M_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i) = \langle \cos \theta \rangle_N, \quad M_y = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin(\theta_i) = \langle \sin \theta \rangle_N. \quad (4.6)$$

A magnetização M é máxima e igual a 1 quando todas as partículas se encontram no mesmo ponto e é mínima e nula quando as partículas se encontram homoganeamente distribuídas no círculo.

Utilizando as definições de (4.5) e (4.5) o potencial em (4.3) pode ser reescrito como:

$$V(\theta_i, \theta_j) = \frac{N^2}{(2\varepsilon)^{\frac{3}{2}}} \left[1 - M^2 - \sqrt{2\varepsilon} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^{-2}), \quad (4.7)$$

que mostra a não-extensividade deste modelo e a natureza de campo médio do modelo HMF.

4.1.2 Modelo auto-gravitante na linha

Ambos os modelos apresentados na seção anterior apresentam condições de contorno periódicas. No intuito de estudar o efeito das bordas (não-periódicas) nas propriedades termodinâmicas vamos introduzir aqui um modelo simplificado unidimensional com um potencial do tipo r^{-1} com partículas se movendo numa linha finita. O modelo consiste de N partículas se movendo com potencial gravitacional newtoniano tridimensional, mas cujo o movimento está confinado neste caso a uma linha finita de comprimento L . Portanto:

$$V(x_i - x_j) = \begin{cases} -1/|x_i - x_j| & , \text{ se } |x_i - x_j| > \ell; \\ +\infty & , \text{ se } |x_i - x_j| \leq \ell, \end{cases} \quad (4.8)$$

com uma regularização de partículas rígidas aplicada para evitar a divergência do potencial a curtas distâncias, e:

$$V(x_i, x_j) = \frac{-1}{(|x_i - x_j| + \varepsilon)}, \quad (4.9)$$

com uma regularização utilizando o parâmetro de abrandamento ε .

No limite de ε grande o potencial em (4.9) pode ser reescrito como:

$$V(x_i, x_j) = \frac{1}{\varepsilon^2} (|x_i - x_j| - \varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon^{-3}), \quad (4.10)$$

que é o potencial do modelo das folhas auto-gravitantes, ou modelo planar - um modelo unidimensional formado por folhas de dimensões infinitas de densidade de massa fixa se movendo na direção perpendicular ao plano das folhas [60]. O modelo planar é um modelo solúvel que não apresenta nenhuma região de calor específico negativo, nem nenhuma transição de fases.

4.2 Resultados

Para o estudo das propriedades termodinâmicas dos sistemas apresentados na seção anterior foi utilizado o método de Monte Carlo Microcanônico de *Ray* apresentado no capítulo 3. A implementação do método para gás de rede é discutida no apêndice **B** deste trabalho. A abordagem de gás de rede é implementada dividindo o sistema em N_c células iguais. O limite contínuo é obtido quando N_c é muito grande.

4.2.1 Ocupação do sistema

Para a análise dos resultados dos modelos com potencial de partícula rígida é importante introduzir uma nova variável - a ocupação η do sistema, que é definida como a fração do espaço total disponível ocupado por partículas:

$$\eta = \frac{N\ell}{L}. \quad (4.11)$$

No caso dos modelos do anel e HMF, obrigatoriamente, $L = 2\pi$. Por razões de praticidade e sem perda de generalidade vamos fixar $L = 2\pi$ para o modelo na linha também, isto facilitará comparações com o modelo do anel. A presença do potencial de partícula rígida implica que o sistema pode ter uma ocupação máxima $\eta_{max} = 1$, ou seja, há uma limitação na quantidade de partículas do sistema em que $N_{max} = Trunc(L/\ell)$, onde a operação *Trunc* representa o truncamento da razão L/ℓ , i. e., o menor inteiro próximo a L/ℓ .

A ocupação η está relacionada com a densidade linear média física ρ , com $\rho = \frac{Nm}{L}$, da seguinte maneira:

$$\eta = \frac{\rho\ell}{m}. \quad (4.12)$$

Para a implementação computacional do algoritmo de Monte Carlo Microcanônico é conveniente definir o tamanho das partículas em termos da quantidade de células N_c da rede como $\ell = \frac{L}{N_c}$. Desta maneira, a ocupação pode ainda ser definida como:

$$\eta = \frac{N}{N_c}, \quad (4.13)$$

para fins computacionais.

4.2.2 Potencial mínimo e não-extensividade nos modelos com partículas rígidas

Nos casos onde há a presença do potencial de partícula rígida, a energia potencial mínima não escala com N^2 mas de uma maneira diferente. Consideremos o caso da linha por razões de simplicidade, sem contudo perder generalidade.

O caso de menor energia potencial possível quando há partículas rígidas ocorre quando todas as partículas se encontram aglomeradas, uma ao lado das outras, a uma distância ℓ dos dois vizinhos mais próximos e uma distância $j\ell$ do j -ésimo vizinho, como mostrado na figura 4.2.

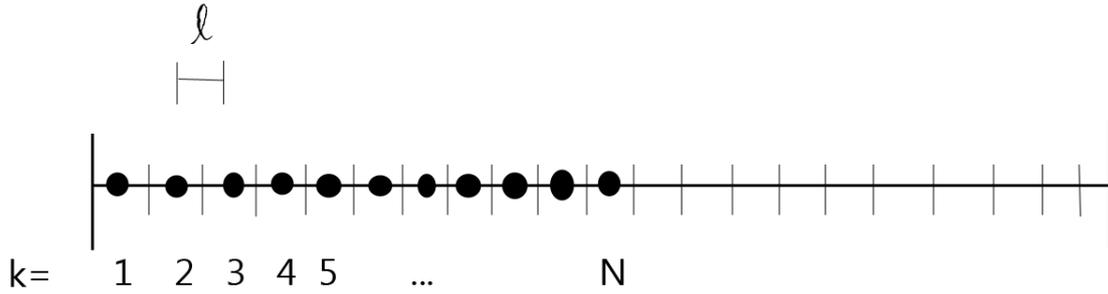


Figura 4.2 Ilustração do caso de menor energia potencial possível no caso da linha quando há partículas rígidas: quando todas as partículas se encontram aglomeradas, a uma distância ℓ dos dois vizinhos mais próximos e uma distância $j\ell$ do j -ésimo vizinho.

Nesta situação é conveniente transformar a soma dupla de pares do potencial dado na equação (4.8) em uma soma simples sobre a contribuição de cada par de vizinhos. Sendo $N - k$ pares de vizinhos com partículas a uma distância $k\ell$ um dos outros:

$$V_{min} = - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{N-k}{k\ell}, \quad (4.14)$$

onde V_{min} é o potencial mínimo.

$$V_{min} = \frac{1}{\ell} \left[N-1 - N \sum_{k=1}^{N-1} \frac{1}{k} \right]. \quad (4.15)$$

A soma ao lado direita da equação (4.15) é a série harmônica truncada e tem resultado conhecido:

$$\sum_{k=1}^{N-1} \frac{1}{k} = \ln(N-1) + \gamma + \frac{1}{2(N-1)}, \quad (4.16)$$

onde $\gamma = 0.5772156\dots$ é a constante de *Euler-Mascheroni*. Para $N \gg 1$, $N-1 \approx N$ e $\frac{1}{N} \ll 1$:

$$V_{min} = \frac{N}{\ell} [1 - \gamma - \ln(N)]. \quad (4.17)$$

Tomando a definição de ocupação da equação (4.11) e substituindo em (4.17):

$$|V_{min}| = \frac{N^2}{\eta L} [\ln(N) + \gamma - 1]. \quad (4.18)$$

Portanto, o potencial mínimo no modelo na linha com partículas escala com $N^2 \ln(N)$. Ao contrário, quando utiliza-se o parâmetro de abrandamento, o potencial mínimo é dado por

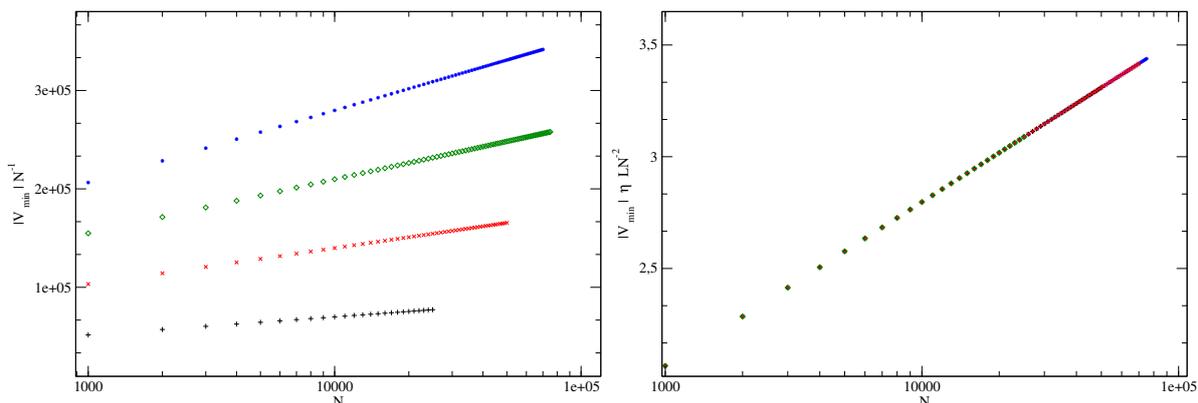


Figura 4.3 Gráficos do potencial mínimo calculado numericamente em função do número de partículas, as diferentes curvas foram obtidas variando a quantidade de sítios da rede de 10^4 a 10^5 . No painel à esquerda foi plotado os gráficos de $|V_{min}|/N$ com o eixo das abcissas em escala log, o resultado é uma reta, que mostra a dependência logarítmica do potencial mínimo com a quantidade de partículas, portanto a prescrição de *Kac* falha em reestabelecer a extensividade neste caso. O painel à direita mostra o gráfico de $|V_{min}|\eta L/N^2$ com o eixo das abcissas em escala log, verifica-se que todas as curvas do gráfico à esquerda colapsam na mesma curva, isto mostra que o resultado numérico está em acordo com o resultado da equação 4.18.

$|V_{min}| = \frac{N^2}{\varepsilon}$. Enquanto nos modelos com o parâmetro de abrandamento a prescrição de *Kac* restaura a extensividade da energia, nos casos onde há o potencial de partícula rígida a prescrição de *Kac* não é suficiente para restaurar a extensividade da energia potencial, pois há a dependência logarítmica com o número de partículas. A figura 4.3 mostra o cálculo numérico do potencial mínimo, é possível ver que os resultados numéricos estão de acordo com a equação (4.18).

No intuito de executar uma prescrição que elimine a dependência do potencial por partícula com N , reescalamos a energia pelo menor valor de energia potencial possível de tal maneira em que $V \rightarrow V/|V_{min}|$. Desta maneira, o valor mínimo para a energia por partícula é $E_{min} = -1$ independentemente de quantas partículas há no sistema. Como os resultados a seguir mostram, os gráficos da temperatura, da magnetização e dos momentos estatísticos colapsam na mesma curva para diferentes valores de N e de quantidade de sítios da rede N_c , variando somente com relação aos outros parâmetros - a saber o parâmetro de abrandamento ε a ocupação η . Isto significa que a dependência do potencial com relação a N é a mesma de V_{min} , que pode ser calculado numericamente, ou analiticamente.

4.2.3 Modelo do anel auto-gravitante

Primeiramente, consideraremos um caso já estudado na literatura para modelos contínuos - o modelo do anel auto-gravitante com o potencial dado pela equação (4.2), com o parâmetro de abrandamento ε . A curva calórica e a curva de magnetização em função da energia total por partícula são mostradas nas figuras 4.4 e 4.5, respectivamente. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 interações por partícula tomando um ponto

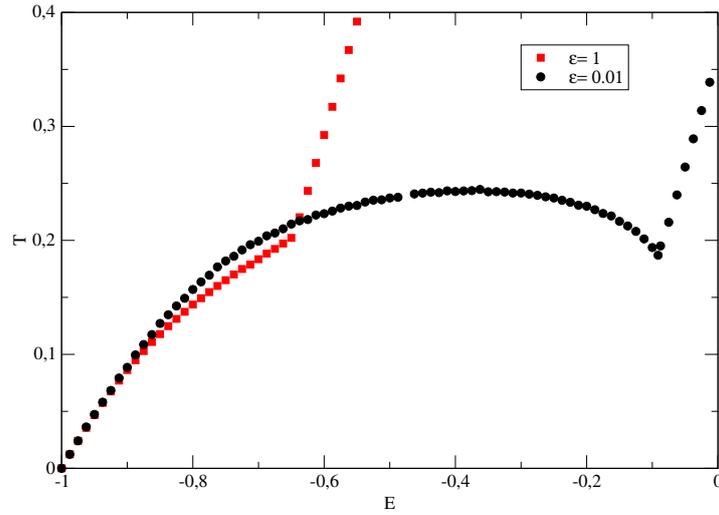


Figura 4.4 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Os resultados concordam com os resultados obtidos por *Sota et al.* e *Tatekawa et al.* [6, 18]- para altos valores de ε o sistema tende à curva calórica do modelo HMF unidimensional, e para baixos valores de ε o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo.

para média a cada 1000 iterações a fim de o sistema perder informações sobre a configuração anterior. Os resultados estão em conformidade com os resultados obtidos por *Tatekawa et al.* e *Sota et al.* nas referências [6, 18]. Isto mostra que a descrição de gás de rede converge para o limite contínuo ao aumentar a quantidade de sítios da rede N_c .

O modelo do anel auto-gravitante com o potencial com o parâmetro de abrandamento ε possui duas fases, uma homogênea a altas energias - $E \geq E_t$, onde E_t é a energia de transição e é dependente do parâmetro ε - e uma fase inhomogênea a baixas energias ($E < E_t$). Para grandes valores de ε o sistema tende ao modelo HMF unidimensional no caso ferromagnético [16, 18, 6], com uma transição de fase de segunda ordem entre a fase homogênea e aglomerada. Para pequenos valores de ε o modelo mantém as características de sistemas auto-gravitantes com dois regimes na fase aglomerada [65]: o primeiro a baixas energias, é estabilizado pelo parâmetro de abrandamento do potencial, sem o qual as partículas cairiam numa singularidade, caracterizado por ser uma região com calor específico positivo e por somente haver partículas com baixa energia formando somente um cluster sem a formação de um halo difuso; o outro é um regime a energias intermediárias que é o regime que mantém as características intrínsecas dos modelos auto-gravitantes, tendo uma região com calor específico negativo, este é um regime virializado, com partículas de baixa energia formando um aglomerado (chamado de core, ou cluster) e partículas mais energéticas formando um halo difuso.

As figuras 4.6 e 4.7 mostram a curva calórica e a magnetização em função da energia para diversos valores de ocupações η no caso com o potencial de partícula rígida dada pela equação (4.4). Neste caso a η desempenha um papel análogo ao papel de ε no caso anterior. À medida em que o sistema fica mais preenchido por partículas, situação em que η cresce, o comportamento termodinâmico do sistema se aproxima ao do modelo HMF no regime ferro-

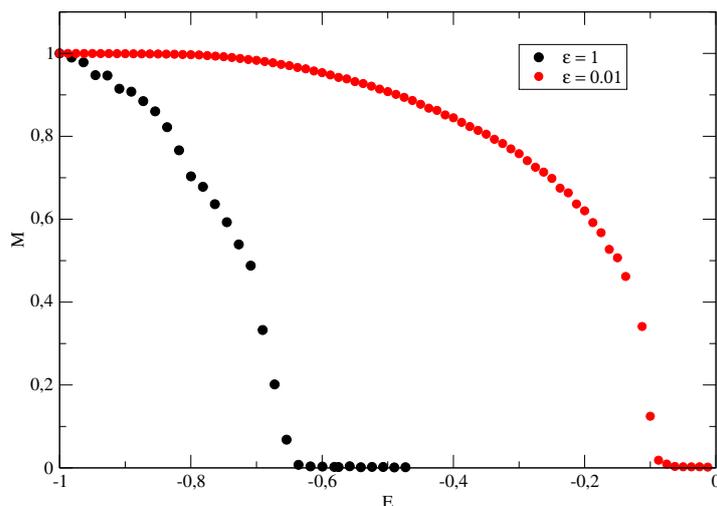


Figura 4.5 Magnetização em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Os resultados concordam com os resultados obtidos por *Sota et al.* e *Tatekawa et al.* [6, 18]- para altos valores de ε o sistema tende à curva de magnetização do modelo HMF unidimensional, e para baixos valores de ε o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a fase aglomerada a baixas energias.

magnético [1, 16].

O modelo com potencial de partícula rígida possui duas fases, uma fase a altas energias - $E \geq E_t$, onde E_t é a energia de transição e neste caso é dependente da ocupação η e uma fase inhomogênea a baixas energias $E < E_t$. Para valores de η menores do que uma ocupação crítica $\eta_c = 44\%$, o sistema mantém a característica de sistemas auto-gravitantes de possuir uma região de calor específico negativo, a transição entre as fases homogênea e aglomerada é de primeira ordem apresentando uma descontinuidade na temperatura do tipo salto na energia de transição E_t . Para $\eta \geq \eta_c$, a transição de fases passa a ser de segunda ordem e não há nenhuma região com calor específico negativo, confirmando a tendência ao modelo HMF para grandes valores de η .

O n -ésimo momento central de uma distribuição de uma variável aleatória Y é definido como $\mu_n = \langle (Y - \langle Y \rangle)^n \rangle$, portanto o segundo momento central de uma distribuição é a variância da variável aleatória. Os momentos centrais de uma distribuição são sensíveis a mudanças na estrutura da distribuição e estas mudanças por sua vez podem indicar a ocorrência de transições de fases. A curtose de uma variável aleatória é dada pela razão $k = \mu_4 / (\mu_2)^2$, é uma medida adimensional e traz informações importantes sobre a função de distribuição de Y , a curtose de uma gaussiana sempre tem valor 3, a curtose da distribuição homogênea sempre tem valor 1,8 e a curtose de uma distribuição delta de *Dirac* sempre tem curtose com valor infinito. Valores altos para a curtose acontecem no caso em que $\mu_2 \ll \mu_4$ e isto se dá em duas circunstâncias: quando a variância é pequena, ou seja, quando a distribuição está concentrada ao redor da média, ou quando μ_4 é muito grande, e isto ocorre quando a função de distribuição não decai suficientemente rápido ao se afastar da média, ou seja, a uma distribuição do tipo *heavy-tail*.

Os gráficos da figura 4.8 mostram a dependência do segundo e do quarto momento centrais

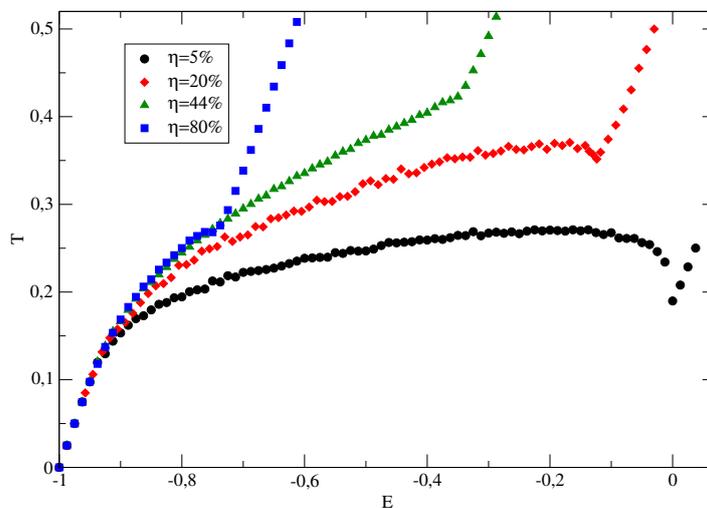


Figura 4.6 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. A ocupação η desempenha um papel análogo ao do parâmetro de abrandamento no caso anterior - para altos valores de η o sistema tende à curva calórica do modelo HMF unidimensional, e para baixos valores de η o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo.

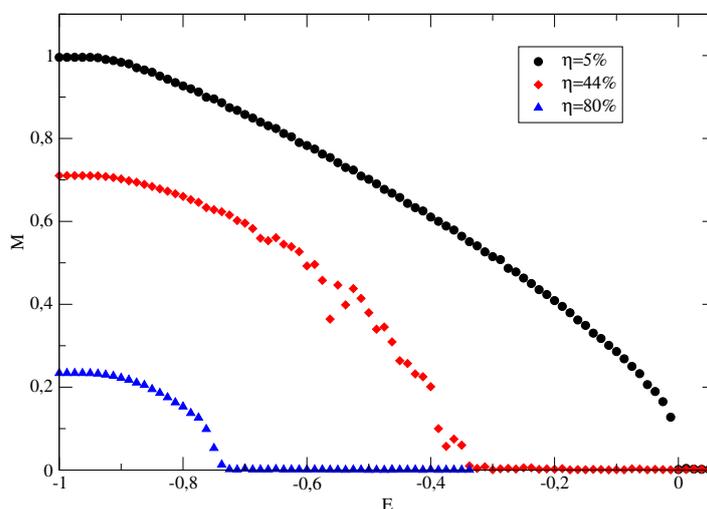


Figura 4.7 Magnetização em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. A ocupação η desempenha um papel análogo ao do parâmetro de abrandamento no caso anterior - para altos valores de η o sistema tende à curva de magnetização do modelo HMF unidimensional; e para baixos valores de η , o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a fase aglomerada a baixas energias.

da distribuição espacial de partículas no círculo em função da energia total por partícula com relação à ocupação. Para $\eta < \eta_c$ há uma descontinuidade do tipo salto em ambos os gráficos do segundo e do quarto momentos centrais, indicando a transição de fases de primeira ordem entre as fases homogênea e aglomerada. Para $\eta = \eta_c$ os momentos estatísticos têm uma oscilação grande na área próxima a energia de transição, sendo difícil, portanto, de categorizar a transição para esta ocupação como sendo de primeira ou segunda ordem. Para $\eta > \eta_c$ os momentos variam de maneira contínua e suave, categorizando a transição como sendo de segunda ordem.

Nardini e Casetti em seu trabalho de 2009 [66] propuseram a existência de uma transição de fases próxima à energia mínima para o sistema, esta idéia foi baseada no método de topologia da energia potencial [67]. No entanto, *Rocha Filho et al.* [65] não encontraram nenhuma evidência para tal transição neste modelo com o parâmetro de abrandamento. Corroborando com os resultados obtidos por *Rocha Filho et al.* [65] os gráficos da curva calórica na figura 4.6, da magnetização na figura 4.7 e dos momentos centrais na figura 4.8 não mostram nenhum indício de alguma transição de fases a baixas energias no caso com partículas rígidas também.

O gráfico da figura 4.9 mostra a curtose da distribuição espacial de partículas em função da energia por partícula para diversas ocupações. À medida em que η diminui, a curtose passa a ter um forte pico a baixas energias com uma alta variação, mas que não chega a ser considerada uma descontinuidade. Esta variação abrupta corresponde a uma transição estrutural, a uma mudança de regime onde o sistema passa de uma estrutura com um core único e distribuição de partículas com curtose $k = 1,8$ e um valor pequeno para a variância μ_2 - que corresponde a uma distribuição homogênea dentro do aglomerado devido ao potencial de partícula rígida - para uma estrutura do tipo core-halo, a formação deste halo leva a uma distribuição de partículas mais afastadas do valor médio conferindo uma curtose alta para este segundo regime. A única transição de fase termodinâmica ocorreria com $\eta \rightarrow 0$ e $\ell \rightarrow 0$, em que todas as partículas colapsariam em um único ponto levando à catástrofe gravotérmica.

A figura 4.10 mostra o diagrama de fases para o modelo do anel auto-gravitante com partículas rígidas mostrando a dependência da natureza das transições de fase com a ocupação e a localização de cada fase no plano calórico $T - E$.

4.2.4 Modelo auto-gravitante na linha

Consideremos agora o modelo auto-gravitante na linha. A comparação dos resultados deste modelo com os do anel auto-gravitante permite uma melhor compreensão dos efeitos da topologia e das bordas nas propriedades dos modelos simplificados unidimensionais. Primeiro consideremos o resultado do modelo com o parâmetro ε dado pela equação (4.9). O primeiro efeito da topologia para este modelo foi demonstrado na equação (4.10), enquanto o modelo do anel, no limite de ε grande, tende ao modelo HMF unidimensional ferromagnético, no mesmo limite, o modelo linear tende ao modelo planar de gravitação unidimensional [60].

A figura 4.11 mostra a curva calórica do modelo para vários valores de ε e confirma a predição da equação (4.10), para altos valores de ε , o sistema tende à curva calórica do modelo planar. Embora este modelo apresente características interessantes fora-do-equilíbrio como os estados *quasi*-estacionários com distribuição de velocidades não-gaussianas, emergência de estruturas fractais, e formação de estruturas core-halo [68, 69, 70], no equilíbrio não há nenhuma região com calor específico negativo, não apresenta inequivalência de ensembles e

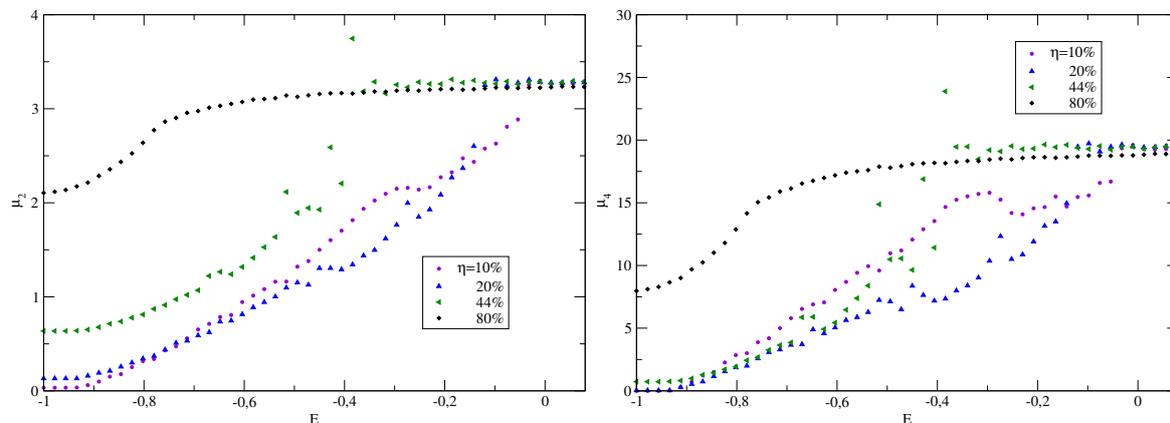


Figura 4.8 À esquerda os gráficos do segundo momento central μ_2 em função da energia por partícula para diversos valores de η . À direita os gráficos do quarto momento central μ_4 em função da energia por partícula para diversos valores de η . Para $\eta < \eta_c$ é possível ver a descontinuidade na transição de fase entre as fases homogênea e aglomerada, caracterizando uma transição de primeira ordem. Para $\eta > \eta_c$ a transição é de segunda ordem com os valores variando continuamente. Não apresenta nenhum indício de outra transição de fase a baixas energias.

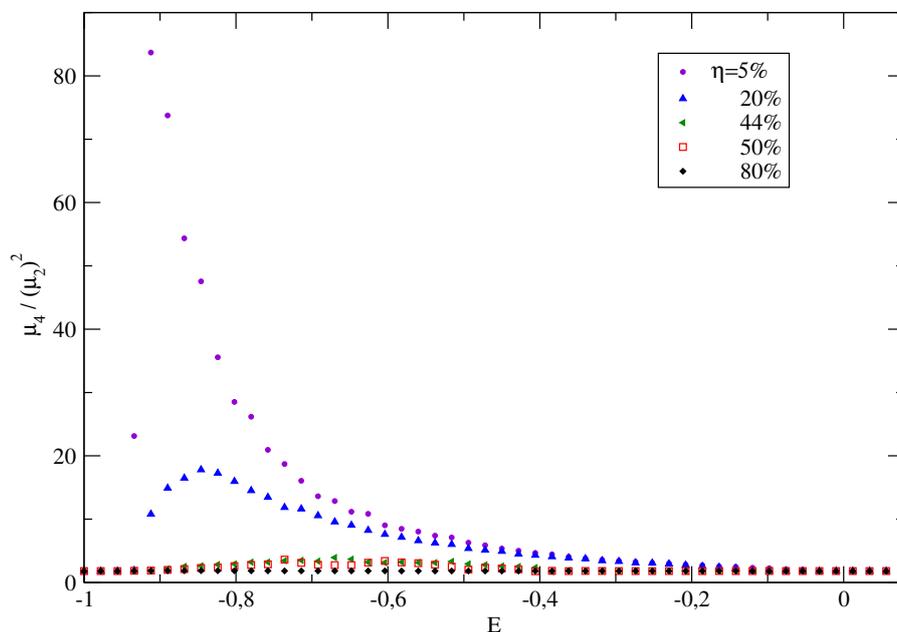


Figura 4.9 Gráfico da curtose em função da energia por partícula para diversos valores de η . Para pequenos valores de η há formação de um pico acentuado a baixas energias. Este corresponde a uma transição estrutural, de uma mudança de regime de único core para um regime de um core com a formação de um halo difuso.

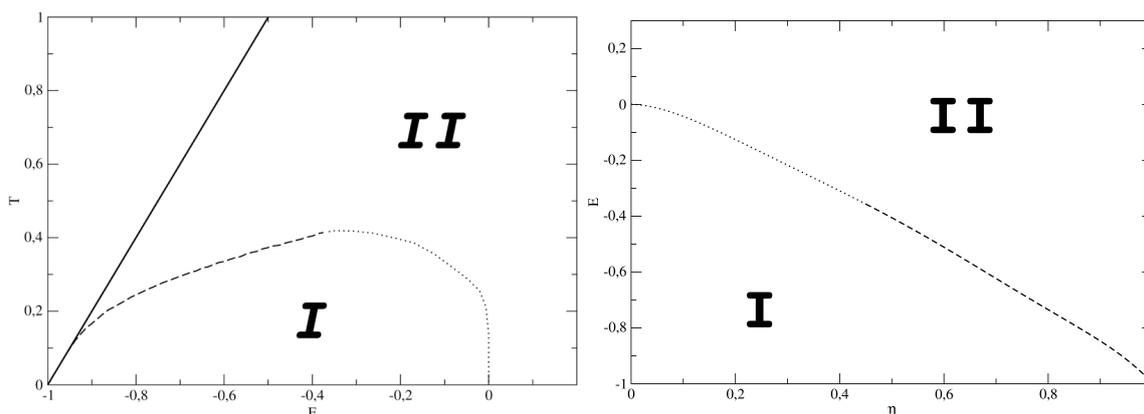


Figura 4.10 Diagramas de fase para o modelo do anel auto-gravitante. O painel à esquerda mostra o diagrama de fases no plano $T - E$ e o painel à direita mostra o diagrama de fases no plano $\eta - E$. (I) corresponde à região onde o sistema está na fase aglomerada; (II) corresponde a região onde o sistema está na fase homogênea. A linha tracejada denota a região onde há transição de fase de segunda ordem, enquanto a linha pontilhada a região onde há transição de fase de primeira ordem. A linha sólida é o limite físico acessível ao sistema e corresponde à curva calórica do sistema quando $\eta = \eta_{max}$.

também não apresenta nenhuma transição de fase.

Para pequenos valores de ε o sistema mantém as características de sistemas gravitacionais de maneira semelhante ao que ocorre no modelo do anel; há duas fases, uma fase homogênea a altas energias e outra inhomogênea a baixas energias; e uma transição de fase de primeira ordem, com uma descontinuidade do tipo salto na temperatura na energia de transição. Esta fase a baixas energias possui de igual maneira dois regimes: um a energias intermediárias caracterizado por uma estrutura core-halo com calor específico negativo representando a propriedade intrínseca de sistemas gravitacionais no equilíbrio do virial; e outro a energias muito baixas com calor específico positivo e caracterizado por uma estrutura de somente um aglomerado estabilizado pelo parâmetro de abrandamento do potencial, sem o qual as partículas cairiam na singularidade.

A figura 4.12 mostra os momentos centrais e a figura 4.13 mostra o gráfico da curtose da distribuição espacial de partículas para o presente modelo. O estudo dos momentos centrais é importante neste modelo para analisar a inhomogeneidade da distribuição. Para pequenos valores de ε a baixas energias, o sistema tem um baixo valor da variância μ_2 e um alto valor da curtose, implicando que o sistema possui uma alta inhomogeneidade, pois as partículas estão concentradas ao redor do valor médio com poucas partículas afastadas. À medida em que a energia aumenta, a variância aumenta e a curtose diminui, implicado em uma distribuição mais afastada do valor médio, mas mantendo o aglomerado central. Ao aumentar a energia até a energia de transição ocorre uma descontinuidade do tipo salto nos momentos centrais indicado a transição de fase, esta segunda fase é caracterizada por um valor máximo da variância e uma curtose com valor $k = 1,8$, característica de uma distribuição homogênea.

Para altos valores de ε o sistema tende ao comportamento do modelo planar, nenhuma descontinuidade é notada nos momentos centrais. A transição do regime aglomerado para o regime homogêneo ocorre de maneira suave, sem a indicação de nenhuma transição de fase. Os gráficos da figura 4.14 mostram o resultado para a variância e a curtose da distribuição

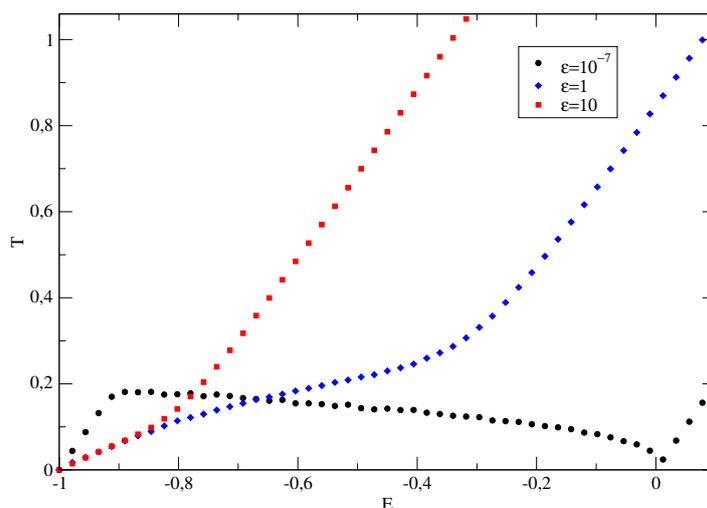


Figura 4.11 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Para altos valores de ε o sistema tende à curva calórica do modelo das folhas gravitacionais, ou modelo planar [60]; e para baixos valores de ε o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo.

especial para o modelo planar obtido por meio do mesmo algoritmo de gás de rede utilizado neste capítulo. Os resultados do modelo planar estão de acordo com os resultados do modelo linear com altos valores de ε .

Para o modelo do anel auto-gravitante, vimos que a introdução do potencial de partícula rígida introduziu o efeito da ocupação do sistema. O mesmo ocorre para o modelo auto-gravitante na linha com partículas rígidas com potencial dado pela equação (4.8). O gráfico da figura 4.15 mostra a curva calórica do modelo na linha com partículas rígidas para alguns valores de η . Com a introdução das partículas rígidas η desempenha um papel semelhante àquele desempenhado por ε , semelhantemente ao que ocorre no modelo do anel auto-gravitante. Para $\eta > \eta_c$, onde, agora, $\eta_c = 37\%$, o sistema se aproxima do comportamento do modelo planar, neste modelo, como já dito, não há nenhuma transição de fase. Isto configura uma diferença do modelo do anel, pois, para o anel, valores de ocupação acima de η_c levam ao modelo HMF que tem transição de fase de segunda ordem entre as fases homogênea e inhomogênea.

Para $\eta \leq \eta_c$, o sistema tem duas fases: uma inhomogênea a baixas energias e uma homogênea a altas energias. A fase inhomogênea mantém os dois regimes: um a energias muito baixas com calor específico positivo e caracterizado pela estrutura de um aglomerado único, estabilizado pelo potencial repulsivo de partícula rígida sem o qual as partículas colapsariam todas num mesmo sítio da rede; e outro regime com partículas formando uma estrutura core-halo. Para $30\% < \eta \leq \eta_c$ a transição de fases é uma transição de segunda ordem, com o sistema indo para a fase homogênea de maneira contínua. Neste caso, o regime a energias intermediárias somente possui calor específico positivo e, portanto, não mantém as características intrínsecas dos sistemas auto-gravitantes no equilíbrio do virial. Para $\eta \leq 30\%$, o sistema passa a ter uma transição de fase de primeira ordem com uma descontinuidade do tipo salto na temperatura na

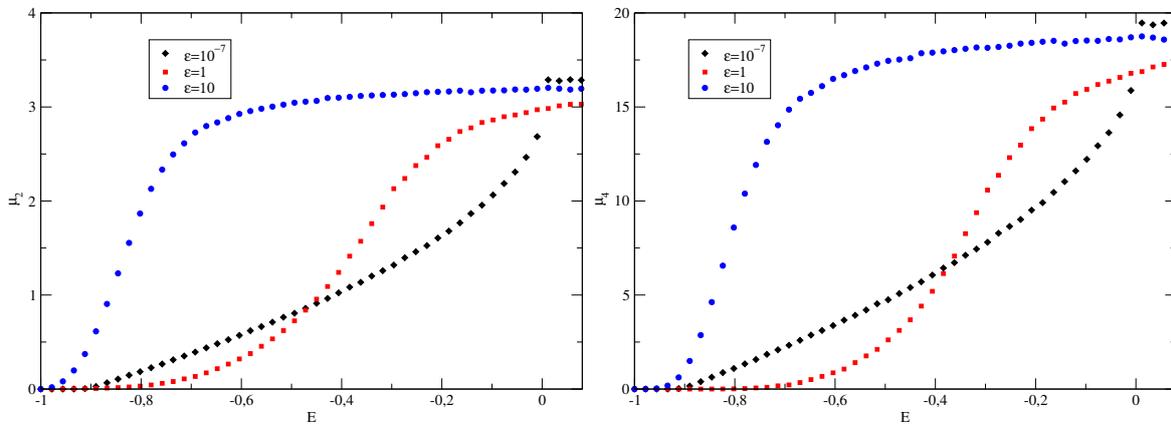


Figura 4.12 Gráficos dos momentos centrais da distribuição espacial de partículas para o modelo linear com parâmetro de abrandamento em função da energia para diversos valores de ε . À esquerda os gráficos do segundo momento central e à direita os gráficos do quarto momento central μ_4 . Para pequenos valores de ε é possível ver a descontinuidade na transição de fase entre as fases homogênea e aglomerada, caracterizando uma transição de primeira ordem. Para grandes valores de ε a transição de fases deixa de ocorrer e o sistema se aproxima aos resultados do modelo planar.

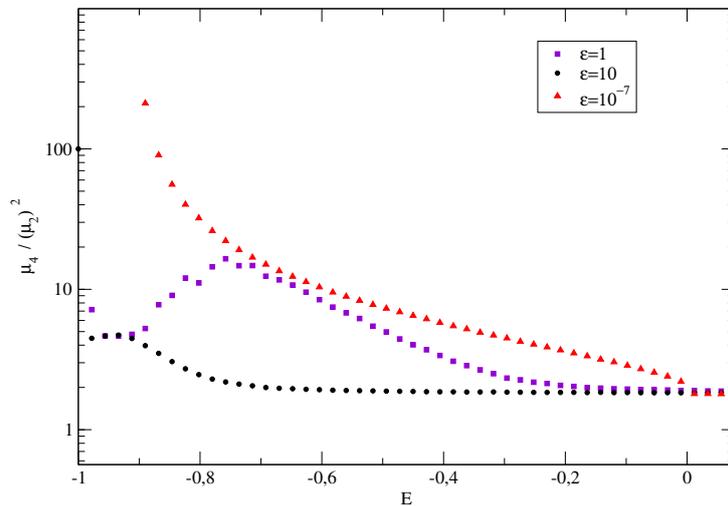


Figura 4.13 Gráfico da curtose da distribuição espacial de partículas na linha em função da energia para vários valores de ε . O pico a baixas energias corresponde à transição estrutural, onde o regime caracterizado por uma estrutura de um único aglomerado passa a uma estrutura de core-halo, sendo que o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ corresponderia a uma transição de fase termodinâmica.

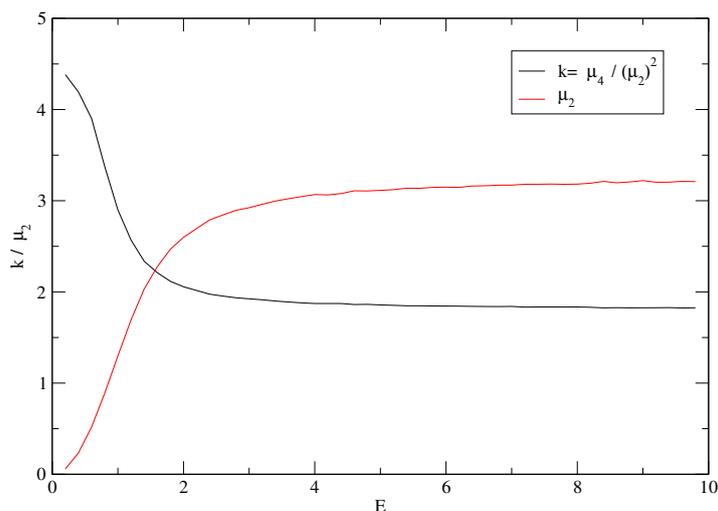


Figura 4.14 Gráfico da variância e da curtose da distribuição espacial de partículas para o modelo das folhas auto-gravitantes em função da energia.

energia de transição. Neste caso, o regime a energias intermediárias passa a ter calor específico negativo, mantendo a característica dos sistemas auto-gravitantes virializados.

A figura 4.12 mostra os momentos centrais e a figura 4.13 mostra o gráfico da curtose da distribuição espacial de partículas para modelo auto-gravitante na linha com partículas rígidas. Para baixas energias o sistema apresenta uma variância baixa que aumenta com a ocupação η e uma curtose com valor $k = 1,8$, isto acontece porque a introdução do potencial de partícula rígida impede as partículas de se aglomerarem no mesmo sítio da rede, criando uma estrutura de um único aglomerado de partículas homogeneamente distribuídas dentro deste. Ao aumentar a energia o sistema passa por uma transição estrutural, em que as partículas têm energia suficiente para se desprender do aglomerado formando um halo difuso à sua volta, com isso a variância μ_2 aumenta indicando uma distribuição com partículas mais afastadas do aglomerado e a curtose também aumenta indicando que a distribuição de partículas passa a ficar mais concentrada nas caudas da distribuição. No caso em que $\eta \rightarrow 0$ e $\ell \rightarrow 0$ a transição estrutural passa a ser uma transição de fases termodinâmica. À medida em que se aumenta a energia, a curtose tende a voltar ao valor $k = 1,8$ e a variância aumenta a um valor máximo indicando a fase homogênea.

Para $\eta > \eta_c$ os gráficos dos momentos centrais e da curtose tendem aos mesmo gráficos do modelo planar mostrado na figura 4.14. Para $30\% < \eta \leq \eta_c$ o sistema vai da fase inhomogênea para a fase homogênea de maneira contínua indicando a transição de fase de segunda ordem. E para $\eta < 30\%$ é possível verificar uma descontinuidade do tipo salto nos momentos centrais μ_2 e μ_4 indicando uma transição de fases de primeira ordem.

Os gráficos da figura 4.18 mostram o diagrama de fases para o modelo auto-gravitante na linha no caso com partículas rígidas. Para valores de η maiores do que 37% o sistema passa a não exibir nenhuma transição de fases, pois tende ao comportamento do modelo das folhas auto-gravitantes, e isto é um efeito da topologia da linha em comparação com a topologia do anel, em que o sistema tem transição de fases para qualquer valor de ocupação.

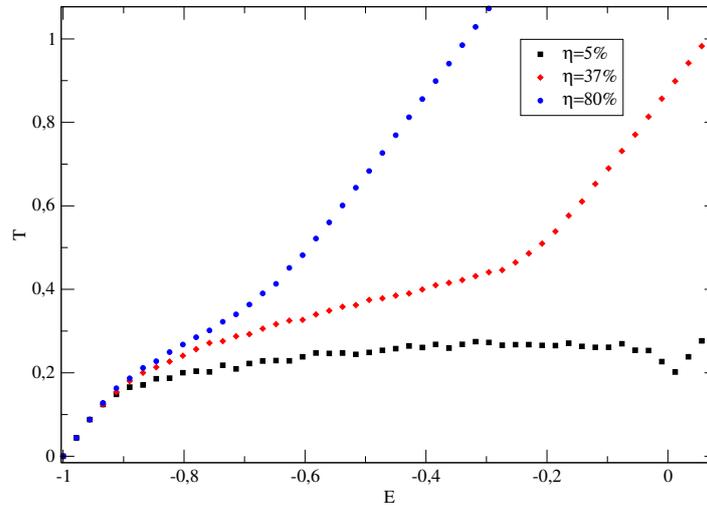


Figura 4.15 Temperatura em função da energia total por partícula. Os resultados foram obtidos para $N = 1000$ e as médias foram tomadas a partir de 500 iterações por partícula. Para altos valores de η o sistema tende à curva calórica do modelo das folhas gravitacionais, ou modelo planar [60], e para baixos valores de η o sistema mantém características de sistemas gravitacionais, como a região com calor específico negativo.

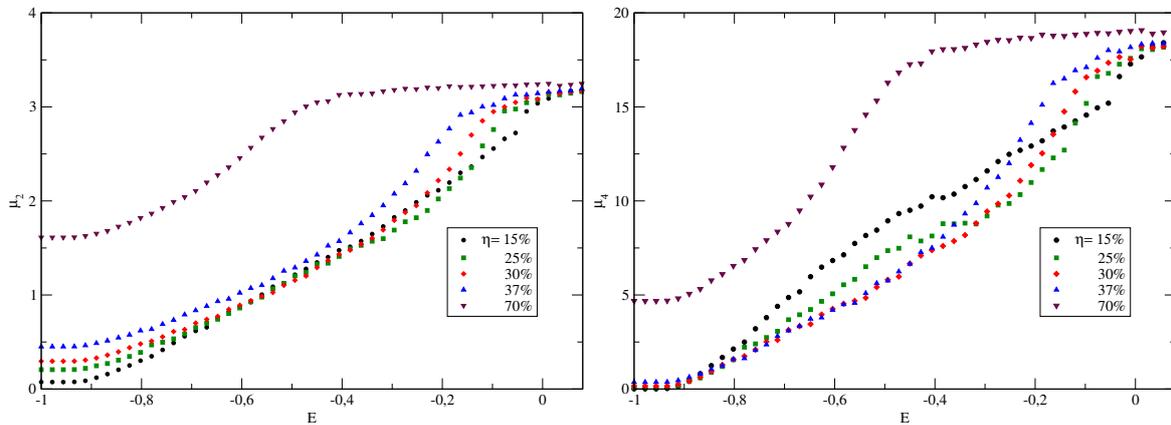


Figura 4.16 Gráficos dos momentos centrais da distribuição espacial de partículas para o modelo linear com partículas rígidas em função da energia para diversos alguns de η . À esquerda os gráficos do segundo momento central e à direita os gráficos do quarto momento central μ_4 . Para pequenos valores de $\eta \leq \eta_c$ é possível ver a descontinuidade na transição de fase entre as fases homogênea e aglomerada, caracterizando uma transição de primeira ordem. Para grandes valores de $\eta > \eta_c$ a transição de fases deixa de ocorrer e o sistema se aproxima aos resultados do modelo planar.

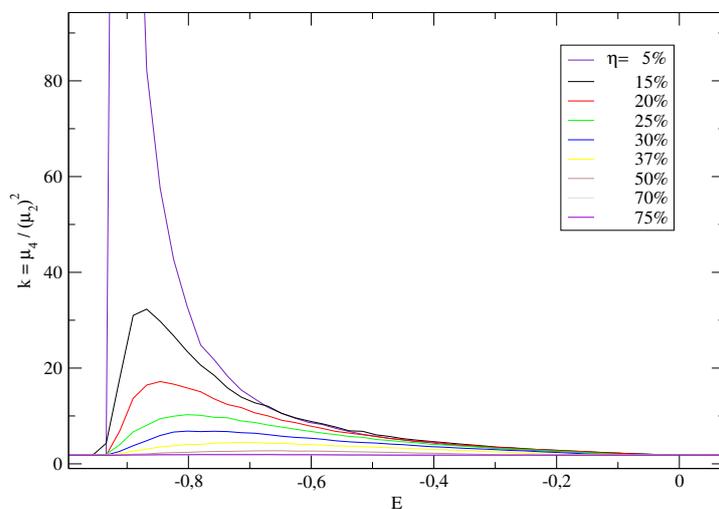


Figura 4.17 Gráfico da curtose da distribuição espacial de partículas na linha em função da energia para vários valores de η . O pico a baixas energias corresponde à transição estrutural, onde o regime caracterizado por uma estrutura de um único aglomerado passa a uma estrutura de core-halo, sendo que o limite $\ell \rightarrow 0$ corresponderia a uma transição de fase termodinâmica.

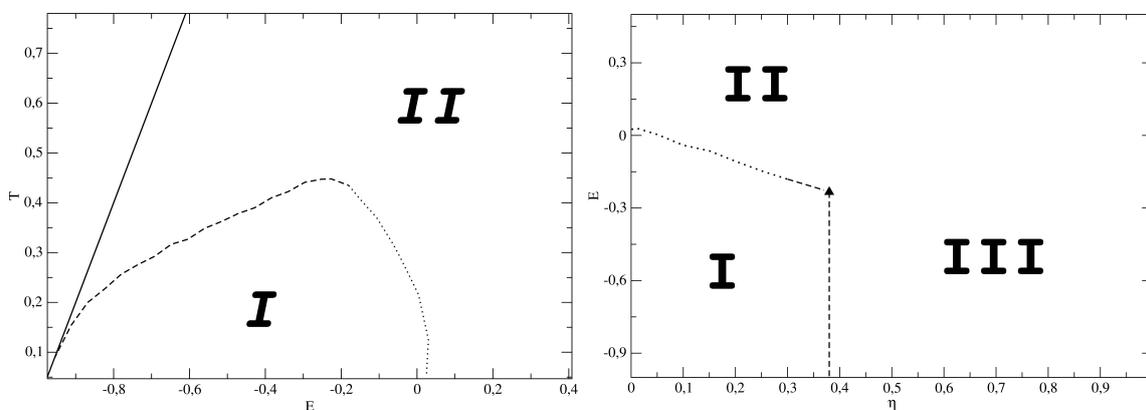


Figura 4.18 Diagramas de fase para o modelo do anel auto-gravitante. O painel à esquerda mostra o diagrama de fases no plano $T - E$ e o painel à direita mostra o diagrama de fases no plano $\eta - E$. (I) corresponde à região onde o sistema está na fase aglomerada; (II) corresponde à região onde o sistema está na fase homogênea (III) corresponde à região na qual o sistema deixa de ter transição de fase e tende ao comportamento do modelo planar. A linha tracejada denota a região onde há transição de fase de segunda ordem, enquanto a linha pontilhada a região onde há transição de fase de primeira ordem. A linha sólida é o limite físico acessível ao sistema e corresponde à curva calórica do sistema quando $\eta = \eta_{max}$. O triângulo corresponde à ocupação na qual o sistema deixa de ter transição de fase e tende ao comportamento do modelo planar.

Propriedades termodinâmicas e de estabilidade do HMF-2D

Há uma grande quantidade de estudos teóricos e experimentais demonstrando que a descrição clássica de relaxação colisional de dois corpos falha em descrever corretamente as propriedades de transporte de sistemas com interações de longo alcance [12]. Historicamente, as primeiras identificações das propriedades de relaxação peculiares de sistemas com interações de longo alcance vieram de observações astronômicas [5, 13, 14, 8, 9, 15]. Nos anos sessenta, descobriu-se que o perfil de luminosidade de galáxias elípticas eram regulares, suaves e simétricos, o que sugeriria que tinham alcançado um de estado de alguma sorte de equilíbrio. No entanto, anteriormente, cálculos feitos por *Chandrasekar* [15] resultaram numa escala de tempo de relaxação gerada por colisões de dois corpos muito maior do que a idade do universo, contradizendo a hipótese de relaxação por colisões binárias. Tal contradição levou *Lynden-Bell* a introduzir o conceito de *Relaxação Violenta* em seu famoso artigo de 1967 [14], como um cenário não-colisional para explicar a rápida evolução de sistemas auto-gravitantes em direção a estados de *quasi-equilíbrio*, estados estes apresentados no capítulo 1. A teoria de *Lynden-Bell*, é baseada na importância da conservação do volume do espaço de fases e consistia em dividir o espaço de fases em microcélulas -relacionadas a uma função de distribuição chamada distribuição de grão fino - e arranjá-las para se encaixarem em macrocélulas - relacionada a uma função de distribuição chamada distribuição de grão grosso - então era contado e maximizado o número de combinações das macrocélulas que conservavam a energia obedecendo certos vínculos de conservação [19]. O resultado obtido foi uma superposição de distribuições de *Fermi-Dirac*.

A proposta de *Lynden-Bell* deu início um campo de pesquisa ativo e muito debatido que, progressivamente, se difundiu da comunidade de astrofísica para a comunidade de mecânica estatística [1, 13, 19, 20, 21]. Isto foi facilitado pelo uso de modelos simplificados com interações gravitacionais [13]. Em particular, muito progresso no entendimento de tais processos de relaxação foi devido a extensivas simulações numéricas de modelos simplificados [18, 22, 16, 17, 23] que apontam para o seguinte cenário: uma rápida relaxação para o equilíbrio seguida de um curso extremamente lento em direção ao equilíbrio termodinâmico [24, 25, 26, 27]. Um exemplo destes modelos simplificados é o HMF [16], um modelo minimalístico e paradigmático no estudo de interações com longo alcance [1, 2, 28].

O modelo HMF é unidimensional no espaço, o que poderia ser uma restrição severa para realizações experimentais. Em 2000 surgiu a proposta de utilizar condensados de *Bose-Einstein* como plano de fundo para preparar experimentos com potenciais de longo alcance artificiais em laboratório [54]. Além desta limitação, estudar difusão no HMF unidimensional implica em estudar a difusão no espaço de ângulo-ação [64], já em um modelo bidimensional é possível

estudar a difusão no espaço 2D real. Isto conduziu *Torcini e Antoni*, em 1998, a introduzir a expansão bidimensional do modelo HMF [17].

Este capítulo está organizado como se segue: na seção 4.1 é apresentado a extensão do modelo HMF para duas dimensões; na seção 4.2 é apresentado os resultados do método de Monte Carlo microcanônico de *Ray* para o modelo HMF; e na seção 4.3 é apresentado um estudo da estabilidade linear de distribuições espaciais homogêneas no limite de partículas frias para o modelo HMF bidimensional.

5.1 Modelo HMF bidimensional

O modelo HMF bidimensional (HMF-2D) consiste num sistema de N -corpos interagindo por um potencial de pares de longo alcance e cujo movimento das partículas se dá em um espaço cartesiano bidimensional e periódico. A hamiltoniana desse sistema é do tipo

$$H_{HMF-2D} = \sum_{i=1}^N \frac{p_{i,x}^2 + p_{i,y}^2}{2} + V(x,y), \quad (5.1)$$

onde

$$V(x,y) = \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N \{2c + d - c[\cos(x_i - x_j) + \cos(y_i - y_j)] - d \cos(x_i - x_j) \cos(y_i - y_j)\}, \quad (5.2)$$

o fator N^{-1} foi introduzido como prescrição de *Kac*, c e d são constantes de acoplamento - se c ou d forem nulos, o movimento bidimensional seria desacoplado - c e d também determinam se o potencial é atrativo ou repulsivo. Em seu artigo original *Torcini e Antoni* tomaram o caso $c = d = 1$ [23] para o estudo de sistemas auto-gravitantes, no entanto este trabalho não será restrito somente ao caso totalmente atrativo ($c > 0$ e $d > 0$), mas também aos casos totalmente repulsivo ($c < 0$ e $d < 0$) e misto atrativo-repulsivo (demais valores para c e d).

Introduzindo as quatro variáveis de campo médio, sendo dois campos médios chamados magnetização [13, 23]:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1 &= \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos(x_i), \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin(x_i) \right) = (\langle \cos(x) \rangle, \langle \sin(x) \rangle) = M_1(\cos \phi_1, \sin \phi_1) \\ \mathbf{M}_2 &= \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos(y_i), \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin(y_i) \right) = (\langle \cos(y) \rangle, \langle \sin(y) \rangle) = M_2(\cos \phi_2, \sin \phi_2), \end{aligned} \quad (5.3)$$

e dois campos médios chamados polarização:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_+ &= (\langle \cos(x+y) \rangle, \langle \sin(x+y) \rangle) = P_+(\cos \psi_+, \sin \psi_+) \\ \mathbf{P}_- &= (\langle \cos(x-y) \rangle, \langle \sin(x-y) \rangle) = P_-(\cos \psi_-, \sin \psi_-), \end{aligned} \quad (5.4)$$

obtém-se que o potencial de pares introduzido anteriormente em (5.2) é um potencial de campo médio. Substituindo as definições de (5.3) e (5.4) em (5.2), obtemos a seguinte hamiltoniana:

$$H_{HMF-2D} = \sum_{i=1}^N \frac{p_{i,x}^2 + p_{i,y}^2}{2} + N \left[2c + d - c(M_1^2 + M_2^2) - \frac{d}{2}(P_+^2 + P_-^2) \right], \quad (5.5)$$

onde o potencial só depende dos módulos dos campos médios. O hamiltoniano de uma partícula h_i definido como $H = \sum_{i=1}^N h_i$ é dado por:

$$h_i = \frac{p_{i,x}^2 + p_{i,y}^2}{2} + 2c + d - c[M_1 \cos(x_i - \phi_1) + M_2 \cos(y_i - \phi_2)] - \frac{d}{2}[P_+ \cos(x_i + y_i - \psi_+) + P_- \cos(x_i - y_i - \psi_-)], \quad (5.6)$$

e as equações de movimento obtidas por meio de (5.6) são:

$$\begin{aligned} \ddot{x}_i &= c F_1 + \frac{d}{2} (F_+ + F_-) \\ \ddot{y}_i &= c F_2 + \frac{d}{2} (F_+ - F_-), \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde

$$\begin{aligned} F_1 &= M_1 \sin(x_i - \phi_1), \\ F_2 &= M_2 \sin(y_i - \phi_2), \\ F_+ &= P_+ \sin(x_i + y_i - \psi_+), \\ F_- &= P_- \sin(x_i - y_i - \psi_-). \end{aligned} \quad (5.8)$$

É importante notar que os quatro campos médios definidos em (5.3) e (5.4) são também parâmetros de ordem do sistema [23], pois os módulos M_1 e M_2 são máximos e iguais a 1 quando todas as partículas se encontram alinhadas nas direções x e y , respectivamente, e são nulos quando as partículas se encontram homoganeamente distribuídas em x e y , respectivamente, bem como os módulos P_+ e P_- são máximos e iguais a 1 quando todas as partículas se encontram alinhadas nas direções $x + y = k_+$ e $x - y = k_-$, respectivamente, e são nulos quando as partículas se encontram homoganeamente distribuídas nas direções $x + y = k_+$ e $x - y = k_-$, respectivamente.

Por questão de simplicidade, neste trabalho adotaremos $c = \pm 1$ e $d = \pm 1$. Também é importante notar que por questão de simetria de rotações de $\pi/4$ do potencial em (5.2), o caso misto em que $c = 1$ e $d = -1$ dará os mesmos resultados do que o caso $c = -1$ e $d = 1$, dando possibilidade a três casos: 1) completamente atrativo, 2) completamente repulsivo e 3) misto atrativo-repulsivo.

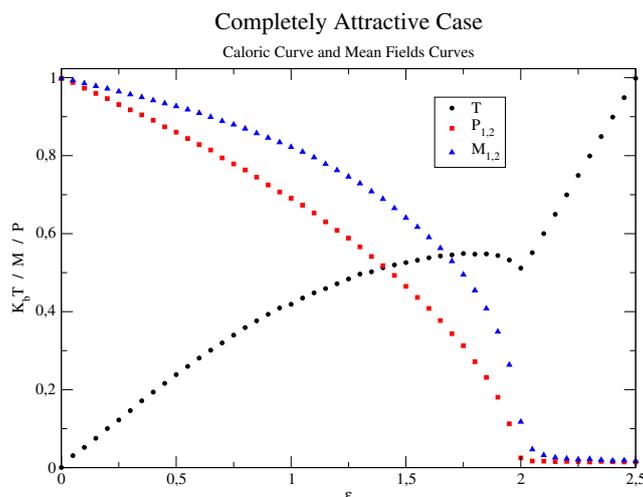


Figura 5.1 Gráfico da dependência da temperatura (preto) e dos campos médios - magnetização (azul) e polarização (vermelho)- com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso completamente atrativo $c = d = 1$. Os resultados concordam com os resultados obtidos por *Antoni e Torcini* e por *Rocha Filho et al.* Há a presença de uma região com calor específico negativo, mostrando que o modelo mantém características de sistemas auto-gravitantes.

5.2 Mecânica estatística de equilíbrio no ensemble microcanônico

Para obtermos as curvas termodinâmicas no ensemble microcanônico, implementamos o algoritmo microcanônico de *Ray* apresentado no capítulo 2, seção 2.1 com $N = 10^4$. Das simulações, obtemos que, para $N > 100$, as curvas calóricas são praticamente independentes do número de partículas, exceto para regiões de transições de fase, onde efeitos de N finito podem ser detectados. As médias foram tomadas no intervalo entre 10^6 a $2 \cdot 10^6$ iterações, intervalo no qual a convergência para a distribuição de equilíbrio mostrou-se efetiva. Devido à isotropia do potencial $M_1 \approx M_2$ e $P_+ \approx P_-$ à medida em que N cresce [23].

Na figura 5.1, o gráfico da dependência da temperatura e dos campos médios com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso completamente atrativo $c = d = 1$ é mostrado. Os resultados estão em concordância com resultados previamente obtidos por *Antoni e Torcini* [17, 23] e por *Rocha Filho et al* [61] no caso completamente atrativo. O sistema apresenta duas fases: uma fase homogênea (HP do inglês *Homogeneous Phase* para valores de energia maiores do que uma energia crítica ($\varepsilon \geq U_C^A \approx 2$) e uma fase fria (SCP- do inglês *Single Cluster Phase*), altamente inhomogênea com a presença de um único *cluster* para energias abaixo de uma energia crítica ($0 \leq \varepsilon \leq U_C^A$). Esta fase apresenta calor específico negativo no intervalo $1.25 \leq \varepsilon \leq U_C^A$. A transição de fase conectando a SCP com a HP é de segunda ordem, uma vez que os campos médios vão continuamente a zero e há uma desconuidade no calor específico. A distribuição da SCP no espaço cartesiano é mostrada na figura 5.2.

O caso completamente repulsivo é mostrado na figura 5.3. Esse Caso é menos interessante em termos de propriedades de equilíbrio. O estados homogêneos são estáveis para todos os valores de energia, o calor específico é sempre positivo e constante e não há nenhuma transição de fase [13].

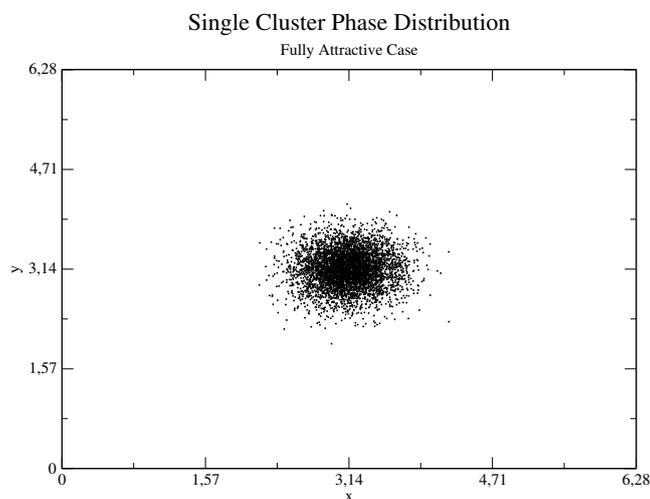


Figura 5.2 Distribuição de partículas no espaço cartesiano na fase SCP para $\varepsilon = 0.3$. As partículas estão aprisionadas em uma estrutura formando um único *cluster*.

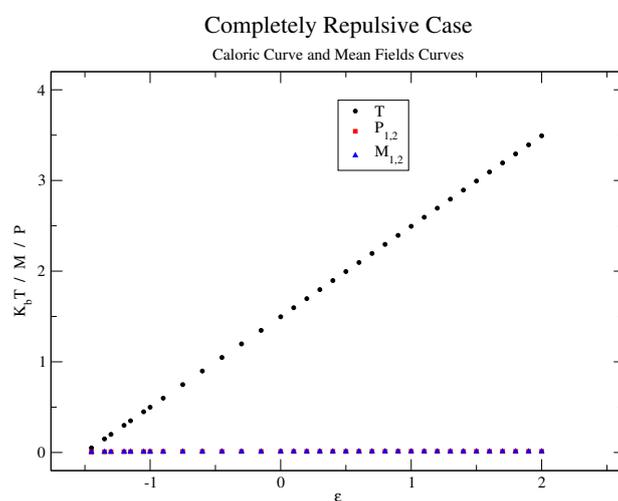


Figura 5.3 Gráfico da dependência da temperatura (preto) e dos campos médios - magnetização (azul) e polarização (vermelho)- com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso completamente repulsivo $c = d = -1$. Não há nenhuma transição de fase e os estados homogêneos são acessíveis a qualquer valor de energia.

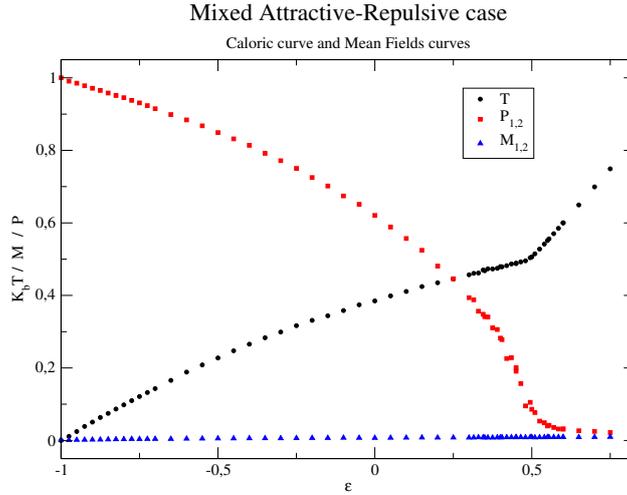


Figura 5.4 Gráfico da dependência da temperatura (preto) e dos campos médios - magnetização (azul) e polarização (vermelho)- com relação à energia no ensemble microcanônico para o caso misto atrativo repulsivo $c = -d = -1$. Para baixas energias, o sistema se encontra na fase TCP, com dois clusters homogeneamente distribuídos ao longo dos eixos x e y , mas alinhados ao longo das diagonais $x + y = k_+$ e $x - y = k_-$, levando a magnetizações nulas, mas polarizações não nulas.

Os resultados para o caso misto atrativo-repulsivo são reportados na figura (5.4). Os campos médios M_1 e M_2 foram escolhidos para serem repulsivos, enquanto que os campos médios P_+ e P_- foram escolhidos para serem atrativos. Devido à simetria do potencial com relação a rotações de $\pi/4$, a escolha inversa levaria a resultados similares.

No caso misto, a curva calórica é similar à curva calórica do modelo HMF unidimensional, apresentando duas fases e sem a presença de calor específico negativo. No entanto a natureza das fases é diferente [13]. Para baixos valores de energia ($-1 \leq \epsilon \leq U_C^M \approx 0.5$), uma fase bi-cluster (TCP, do inglês *Two Clustered Phase*) é observada, onde há a formação de dois clusters homogeneamente distribuídos ao longo dos eixos x e y , mas alinhados ao longo das diagonais $x + y = c_+$ e $x - y = c_-$, levando a magnetizações nulas, mas polarizações não nulas. E, para altas energias ($\epsilon \geq U_C^M$), uma fase completamente homogênea (HP, do inglês *Homogeneous Phase*) e uma transição de fase de segunda ordem com os campos médios P_1 e P_2 indo a zero continuamente à medida que aumenta-se a energia por valores menores do que U_C^M . A fase TCP possui dois regimes: um regime a baixas energias ($-1 \leq \epsilon \lesssim -0.45$) -como visto no painel à esquerda na figura 5.5, consistindo de partículas de baixa energia presas e oscilando nos clusters, que são o poço do potencial em (5.6); o segundo regime na região de energias intermediárias ($-0.45 \lesssim \epsilon \leq U_C^M$) que envolve três populações de partículas - partículas de baixa energia presas aos clusters, partículas de energia intermediária que saltam de um cluster para o outro e partículas de alta energia que se movem praticamente de maneira livre, como visto no painel à direita na figura 5.5.

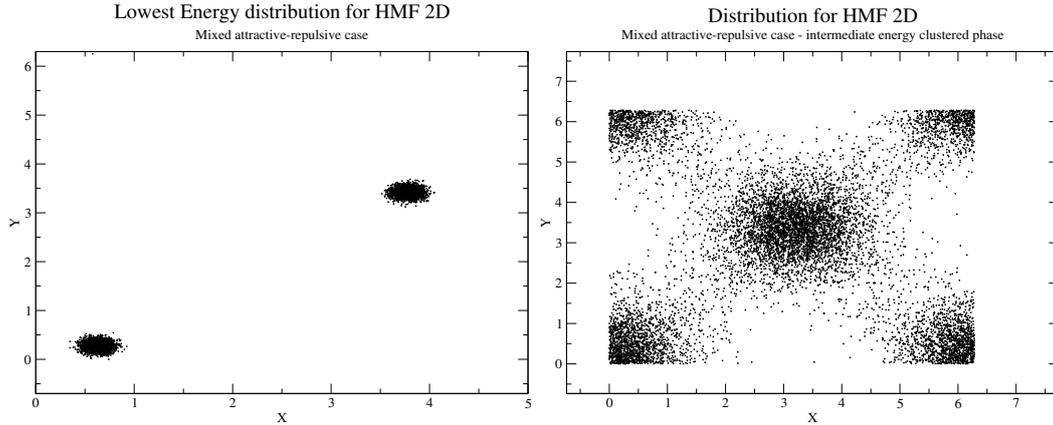


Figura 5.5 Distribuição espacial das partículas para os dois regimes da fase TCP, a) à direita o regime a baixas energias com partículas de baixa energia presas aos *clusters* e b) à esquerda o regime de energias intermediárias, com partículas mais energéticas que transitam entre os *clusters*.

5.2.1 Estrutura periódica no regime de baixas energias: Rede similar à *Bravais*

Devido à periodicidade do potencial, é possível aumentar o comprimento da condição de contorno periódica por múltiplos de 2π . Fazendo assim, o sistema forma uma estrutura periódica que pode ser vista como uma rede de *Bravais* bidimensional oblíqua com um conjunto de vetores primitivos $\mathbf{a}_1 = (\pi, \pi)$ e $\mathbf{a}_2 = (2\pi, 0)$, como mostra a figura 5.6. Isso leva $a_1 = \sqrt{2}\pi$, $a_2 = 2\pi$ e $\phi = \pi/4$, onde a_i é o módulo do vetor primitivo e ϕ o ângulo entre eles. Em física do estado sólido, a rede de *Bravais* especifica a estrutura periódica na qual as unidades de um cristal (no presente caso cluster de partículas) são arranjadas [71]. Desta maneira, a fase TCP pode ser vista como uma fase sólida [13].

5.3 Teoria linear no regime hidrodinâmico de Vlasov com partículas frias

Nesta seção iremos analisar a estabilidade das distribuições espaciais homogêneas do modelo HMF no regime de *Vlasov* no limite de partículas frias. Como definido no capítulo 1, seção 1.3.3 as equações hidrodinâmicas na situação em questão são dadas por (2.102):

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + 2[\nabla \cdot (n\mathbf{v})]\mathbf{v} + n(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} - \nabla \langle \Phi \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

Tomando as variáveis hidrodinâmicas definidas em (2.88) para partículas frias $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = n(\mathbf{r}, t)\delta(\mathbf{p} - \mathbf{v})$ e com distribuição espacial homogênea:

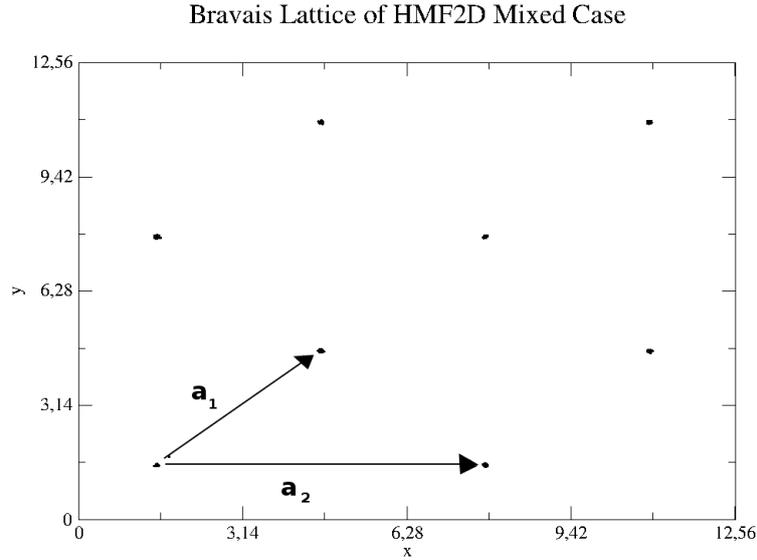


Figura 5.6 Estrutura periódica obtida no regime de menor energia da fase TCP do caso misto atrativo-repulsivo. A estrutura é semelhante a uma rede de *Bravais* obtida pelo conjunto de operações de translação descritas por $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$.

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &= n_0 + \delta n(\mathbf{r}) \exp(i\omega t) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) &= \delta \mathbf{v}(\mathbf{r}) \exp(i\omega t), \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde n_0 é uma distribuição homogênea e $\delta n(\mathbf{r})$ e $\delta \mathbf{v}(\mathbf{r})$ são pequenas perturbações que só dependem da posição. Assim, se ω for uma frequência puramente real, a solução homogênea é estável e se ω for uma frequência complexa, a solução homogênea é instável. Com as definições de (5.10) é possível calcular uma expressão para o campo médio em função das perturbações

$$\langle \Phi \rangle = \int d^2r' d^2p' f(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t) \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int dx' dy' n(\mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.11)$$

$$\langle \Phi \rangle = \int dx' dy' \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [n_0 + \delta n(\mathbf{r}) \exp(i\omega t)] \quad (5.12)$$

$$\langle \Phi \rangle = \delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle \exp(i\omega t) \quad (5.13)$$

É possível linearizar as equações hidrodinâmicas substituindo (5.10) e (5.13) em (5.9) e mantendo somente os termos lineares das perturbações:

$$\begin{aligned} i\omega \delta n + n_0 \nabla \cdot \delta \mathbf{v} &= 0 \\ i\omega \delta \mathbf{v} - \nabla (\delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle) &= 0. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Devido à periodicidade do potencial do modelo HMF bidimensional, é conveniente escrever as perturbações em termos das expansões de *Fourier*:

$$\begin{aligned}\delta n(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \\ \delta \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}'} \delta \mathbf{v}_{\mathbf{k}'} \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.15)$$

assim, as equações em (5.14) ficam:

$$\begin{aligned}i\omega \delta n_{\mathbf{k}} + n_0 \delta \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} &= 0 \\ i\omega \sum_{\mathbf{k}'} \delta \mathbf{v}_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} - \nabla(\delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle) &= 0.\end{aligned}\quad (5.16)$$

Introduzindo as expressões complexas e independentes do tempo para os campos médios definidos em (5.3) e (5.4):

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_1(\mathbf{r}) &= \int \int dx dy \exp(ix) \delta n(\mathbf{r}), \\ \mathcal{M}_2(\mathbf{r}) &= \int \int dx dy \exp(iy) \delta n(\mathbf{r}), \\ \mathcal{P}_+(\mathbf{r}) &= \int \int dx dy \exp(ix) \exp(iy) \delta n(\mathbf{r}), \\ \mathcal{P}_-(\mathbf{r}) &= \int \int dx dy \exp(ix) \exp(-iy) \delta n(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.17)$$

tomando as expansões de *Fourier* em (5.15), as expressões complexas para os campos médios em (5.17) ficam:

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_1(\mathbf{r}) &= 4\pi^2 \delta n_{(-1,0)}, \\ \mathcal{M}_2(\mathbf{r}) &= 4\pi^2 \delta n_{(0,-1)}, \\ \mathcal{P}_+(\mathbf{r}) &= 4\pi^2 \delta n_{(-1,-1)}, \\ \mathcal{P}_-(\mathbf{r}) &= 4\pi^2 \delta n_{(-1,1)}.\end{aligned}\quad (5.18)$$

Tomando a expressão complexa para os campos médios definida nestas equações de (5.18), a perturbação no força de campo médio fica:

$$(\nabla \delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle)_x = -4\pi^2 \text{Im} \left[c \delta n_{\mathbf{k}_1} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} + \frac{d}{2} (\delta n_{\mathbf{k}_+} e^{i\mathbf{k}_+ \cdot \mathbf{r}} + \delta n_{\mathbf{k}_-} e^{i\mathbf{k}_- \cdot \mathbf{r}}) \right], \quad (5.19)$$

$$(\nabla \delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle)_y = -4\pi^2 \text{Im} \left[c \delta n_{\mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} + \frac{d}{2} (\delta n_{\mathbf{k}_+} e^{i\mathbf{k}_+ \cdot \mathbf{r}} - \delta n_{\mathbf{k}_-} e^{i\mathbf{k}_- \cdot \mathbf{r}}) \right], \quad (5.20)$$

onde $(\nabla \delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle)_i$ é a componente do vetor $\nabla \delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle$ na direção i e :

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= (1, 0), \\
\mathbf{k}_2 &= (0, 1), \\
\mathbf{k}_+ &= (1, 1), \\
\mathbf{k}_- &= (1, -1),
\end{aligned} \tag{5.21}$$

da equação (5.16) temos que os únicos vetores \mathbf{k} que perturbarão o sistema são os pertencentes ao conjunto em (5.21), assim $\delta n_{\mathbf{k}} = 0$ e $\delta \mathbf{v}_{\mathbf{k}} = 0$ para todos os vetores \mathbf{k} que não pertecerem ao conjunto de (5.21).

Substituindo (5.19) nas equações em (5.16), obtêm-se:

$$\begin{aligned}
\left(\omega + \frac{c}{2\omega}\right) \delta n_{\mathbf{k}_1} &= 0, \\
\left(\omega + \frac{c}{2\omega}\right) \delta n_{\mathbf{k}_2} &= 0, \\
\left(\omega + \frac{d}{2\omega}\right) \delta n_{\mathbf{k}_+} &= 0, \\
\left(\omega + \frac{d}{2\omega}\right) \delta n_{\mathbf{k}_-} &= 0.
\end{aligned} \tag{5.22}$$

,

Desta maneira a estabilidade da distribuição homogênea para o modelo HMF bidimensional é condicionada pelo sinal das constantes c e d da interação:

$$\begin{aligned}
\omega^2 &= -\frac{d}{2} \\
\omega^2 &= -\frac{c}{2}
\end{aligned} \tag{5.23}$$

ou seja, se o campo médio for repulsivo ($c \leq 0$ ou $d \leq 0$) a distribuição homogênea é estável, se o campo médio for atrativo ($c \geq 0$ ou $d \geq 0$) a distribuição homogênea é instável e diverge com a taxa de crescimento linear $\gamma_L = \text{Im}(\omega) = 1/\sqrt{2}$. A figura 5.7 mostra a comparação entre os resultados teóricos e os obtidos por simulação de dinâmica molecular, mostrando uma boa previsão teórica.

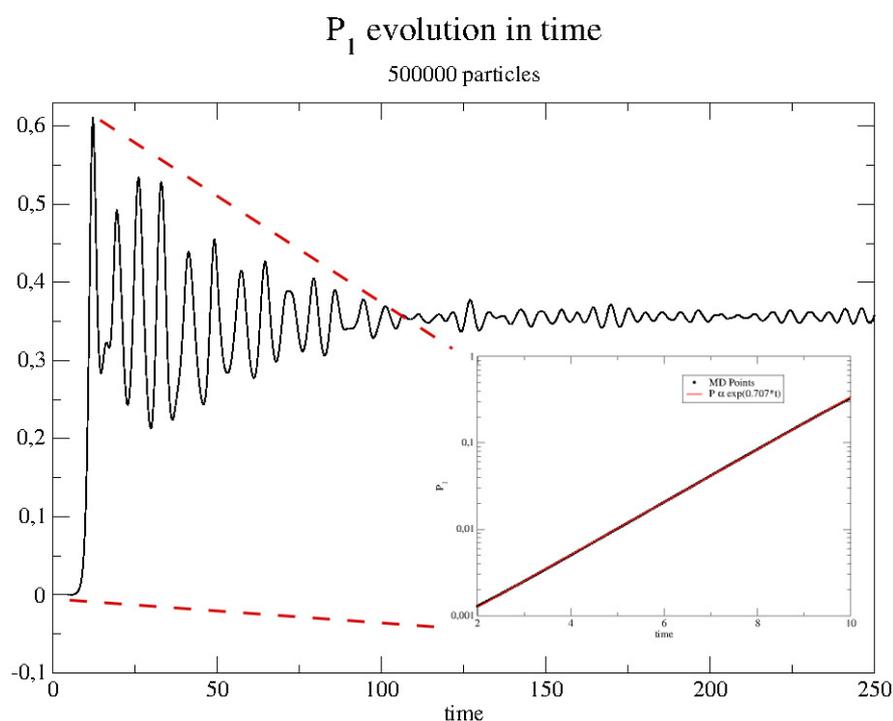


Figura 5.7 Resultado de simulação de dinâmica molecular para o model HMF no limite de partículas frias com distribuição inicial de uma *water-bag* homogênea no espaço e com $N = 100000$. O painel menor mostra uma ampliação nos tempos iniciais: o gráfico em vermelho mostra os resultados teóricos obtidos com a taxa de crescimento linear $\gamma_L = 1/\sqrt{2}$, mostrando uma boa concordância com os resultados da simulação.

Estados *quasi*-estacionários no modelo HMF bi-dimensional

Desde os trabalhos iniciais de *Boltzmann* e *Gibbs* [29] sabe-se que sistemas com partículas interagindo por meio de forças de curto alcance atingem um estado final estacionário que só depende das grandezas conservadas como energia e momentum e este estado estacionário corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico [30]. O equilíbrio termodinâmico é caracterizado pela distribuição gaussiana de velocidades e não depende das condições iniciais [31, 32, 29].

Quando há partículas interagindo por meio de forças de longo alcance o sistema fica preso em estados *quasi*-estacionários que não correspondem ao equilíbrio termodinâmico e cujo tempo de vida diverge com o número de partículas do sistema. A dificuldade principal em estudar os *QSS*'s é que tais estados dependem explicitamente da distribuição inicial das partículas no espaço de fase [1, 14, 4, 30, 33].

Embora a distribuição gaussiana dos momenta seja uma solução estacionária de *Vlasov*, ao contrário da equação de *Boltzmann*, ela não é um atrator global da dinâmica [1, 30] e o sistema não irá, necessariamente, evoluir ao equilíbrio termodinâmico. A relaxação não-colisional é, portanto, mais complexa do que a relaxação colisional de *Boltzmann* para forças de curto alcance [1, 13, 30]. A dinâmica de *Vlasov* é incompressível e reversível no tempo, assim, numa escala fina, a evolução da distribuição no espaço de fase leva a uma filamentação que fica cada vez menor com o tempo, i. e., uma evolução temporal de grão-fino que nunca relaxa a nenhum estado estacionário. Contudo, não é possível ter uma resolução infinita e, ao atingir uma resolução máxima no espaço de fase, o sistema parece ter atingido um estado estacionário de uma escala de grão-grosso - o *QSS* como mostrado na figura 6.1, que foi extraída do trabalho original de *Lynden-Bell* sobre relaxação violenta [14].

Foi observado que nos *QSS*'s, sistemas com interações de longo alcance apresentam a formação de estruturas com um aglomerado denso circundado por um halo difuso - estruturas *core-halo* [33, 34]. À medida em que a dinâmica do sistema evolui, ondas macroscópicas de densidade são formadas. Algumas partículas entram em ressonância com estas oscilações macroscópicas ganhando energia e formando o halo difuso às custas do movimento coletivo do sistema. Em contrapartida a perda de energia para as partículas do halo diminui a amplitude das oscilações coletivas de maneira que as partículas restantes condensam em estados de baixa energia resultando na formação do aglomerado denso [30, 33, 34]. Devido à incompressibilidade da dinâmica de *Vlasov*, as partículas não podem perder toda a sua energia cinética, mas o core terá uma densidade máxima permitida pela distribuição inicial, o sistema tenderá a ter o estado de menor energia completamente ocupado equivalente a um gás de *fermi* totalmente degenerado [30, 33, 34].

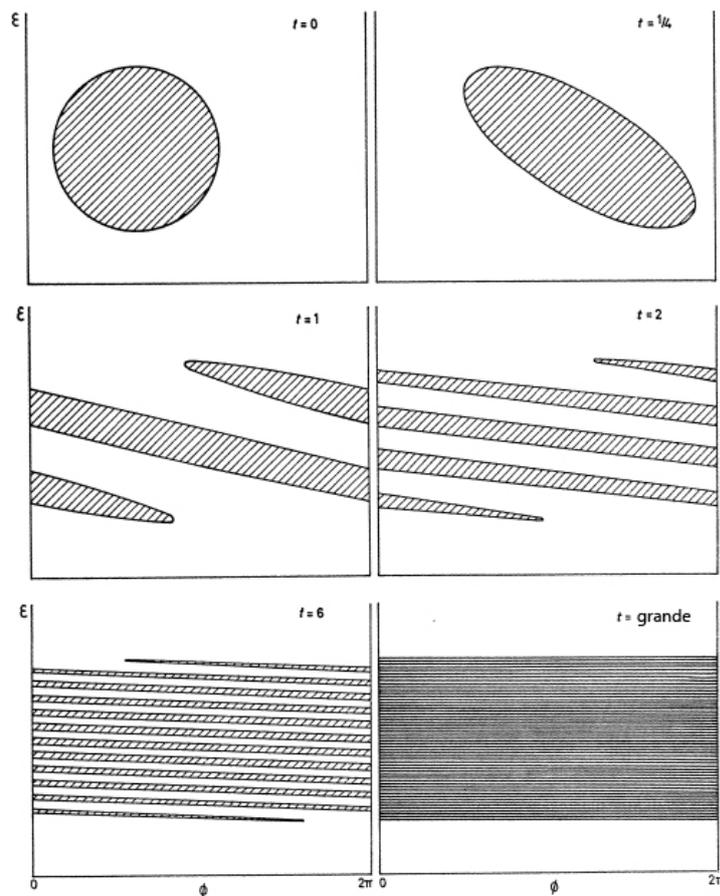


Figura 6.1 Filamentação da distribuição de grão fino, se uma resolução infinita fosse possível o sistema nunca relaxaria a um estado estacionário. Como não é possível ter esta resolução infinita, o sistema relaxa a um estado *quasi*-estacionário em uma escala de grão grosso.

Desde o trabalho seminal de *Lynden-Bell* [14], a comunidade científica tem empregado um grande esforço na tentativa de prever o *QSS* sem a necessidade de resolver explicitamente a dinâmica de muitos corpos ou a equação de *Vlasov* [30, 35]. A maioria das tentativas foi baseada na idéia de relaxação violenta [20, 19], no entanto, mesmo sendo úteis para uma primeira aproximação, nenhuma se mostrou realmente satisfatória [36].

Nesta última década, *Levin, Pakter e Teles* propuseram uma abordagem que apresenta resultados mais precisos [30, 33]. Qualitativamente, observaram que para diferentes sistemas e modelos, os *QSS*'s apresentavam a formação de uma estrutura *core-halo* e, baseados no teorema de *Jeans*, propuseram uma solução *ansatz* para a equação de *Vlasov* chamada distribuição *Core-Halo* [30, 33, 34]. Recentemente, Rocha Filho propôs uma melhoria baseada num princípio de maximização de entropia a fim de evitar a utilização de parâmetros da dinâmica dos sistemas [35].

Neste capítulo vou apresentar os resultados de dinâmica molecular para o modelo HMF bidimensional, que foi apresentado no capítulo anterior, no caso misto atrativo-repulsivo ($c = -d = -1$) com distribuição inicial do tipo *water-bag* com partículas frias e homogênea nas posições. O modelo HMF unidimensional tem sido um modelo paradigmático e extensivamente estudado para o entendimento dos *QSS*'s [1, 2, 28, 4, 16, 62, 25, 26, 64, 21, 30, 33, 34, 35], no entanto, poucos trabalhos foram feitos para o estudo dos estados *quasi*-estacionários do modelo HMF bidimensional e a maioria deles no caso atrativo [13, 17, 23]. Além disso, estudar a difusão em modelos unidimensionais implica estudar a difusão no espaço de ângulo-ação [13, 64], enquanto que no modelo bidimensional é possível estudar a difusão no espaço bidimensional real [13].

Na seção (5.1) irei apresentar a distribuição inicial utilizada nas simulações, na seção (5.2) os primeiros resultados dos *QSS*'s, a formação de uma estrutura *bi-cluster* (relacionada à rede de *Bravais* dos resultados de equilíbrio mostrados no capítulo anterior) com um fluxo constante e coerente de partículas entre os clusters. Na seção (5.3) apresentarei uma análise da difusão das partículas do *cluster* e do fluxo coerente e também discutirei o mecanismo de *hopping* que gera o fluxo coerente de partículas. Na seção (5.4) explicarei a teoria *core-halo* e apresentarei uma modificação no *ansatz* para a aplicação no modelo HMF bidimensional para uma distribuição com dois níveis de halo, também apresentarei os resultados obtidos por meio desta teoria - a densidade de partículas e de energia e a fração de partículas que estão no fluxo- e também associarei estes resultados com os resultados de um sistema físico experimental.

6.1 Distribuição *water-bag* com partículas frias

O interesse neste trabalho é estudar o caso misto atrativo-repulsivo e verificar o processo de formação da estrutura semelhante a rede de *Bravais* discutida no capítulo anterior. Para o estudo da dinâmica de relaxação violenta e dos estados *quasi*-estacionários do modelo HMF bidimensional utilizei um algoritmo de quarta ordem simplético de dinâmica molecular descrito no capítulo 3. O passo temporal foi ajustado para um erro relativo de 10^{-8} na conservação da energia e foram tomadas condições de contorno periódicas.

Como distribuição inicial das partículas utilizei uma função de distribuição chamada de *water-bag* [1, 30]. Esta se encaixa no estudo da estabilidade feita no capítulo anterior, i. e.,

uma distribuição que fosse homogênea nas coordenadas de posição e que tenha uma baixa dispersão de velocidades, levando a um regime de partículas frias. A distribuição *water-bag* é dada por:

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{8\pi^3(n\Delta p)^2} \Theta(2n\pi - x) \Theta(2n\pi - y) \Theta(\Delta p - p), \quad (6.1)$$

onde p é o módulo do vetor momentum \mathbf{p} com $\Delta p \ll 1$ e n é um número inteiro não-nulo. A utilização da constante n será importante para a análise da formação da estrutura similar à rede de *Bravais* estudada no contexto de equilíbrio no ensemble microcanônico no capítulo anterior e a simetria polar na distribuição dos momenta será útil para facilitar a integração da função de distribuição *Core-Halo* e obtenção das densidades de partícula e energia.

Da equação (5.5) é possível obter a seguinte expressão para a energia interna do modelo HMF-2D:

$$U = \frac{N\langle p^2 \rangle}{2} + N \left[2c + d - c(M_1^2 + M_2^2) - \frac{d}{2}(P_+^2 + P_-^2) \right]. \quad (6.2)$$

No caso estudado, os parâmetros c e d foram tomados como $c = -d = -1$. Os campos médios M_1 , M_2 , P_1 e P_2 foram definidos nas equações (5.4) e (5.3) e são, também, os parâmetros de ordem do sistema. Como a distribuição em (6.1) é uma distribuição homogênea no espaço, os quatro campos médios terão valores nulos. Para o cálculo da energia inicial ainda é necessário definir a energia cinética média:

$$\langle p^2 \rangle_{t=0} = \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} p^2 f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{(\Delta p)^2} \int_0^{\Delta p} dp p^3 = \frac{(\Delta p)^2}{4}. \quad (6.3)$$

Assim, podemos reescrever a energia média por partícula no caso estudado utilizando as relações em (6.2) e (6.3) como:

$$\varepsilon_0 = \frac{U_{f_0}}{N} = \frac{(\Delta p)^2}{8} - 1. \quad (6.4)$$

Nas simulações foi utilizado $\Delta p = 10^{-6}$, contudo, resultados para $\Delta p < 10^{-3}$ levaram ao mesmo estado *quasi*-estacionário, isto se dá porque a variação na energia média por partícula é muito pequena para qualquer valor abaixo da ordem de 10^{-3} , levando em conta a dependência quadrática de Δp em (6.4).

6.2 Estados *quasi*-estacionários - Estrutura bi-cluster

Foi mostrado no capítulo anterior que, no equilíbrio, o potencial misto atrativo e repulsivo leva à formação de uma rede silimar a de *Bravais* com aglomerados de partículas distribuídos homogêneamente nas direções x e y e inhomogêneamente nas direções diagonais $x + y = c_+$ (diagonais principais) e $x - y = c_-$ (diagonais secundárias).

Um outro estudo do capítulo anterior, sobre a estabilidade linear da distribuição homogênea no limite de partículas frias na dinâmica de *Vlasov*, mostrou que, para o caso em questão $c = -d = -1$, as taxas de crescimento em (5.23) implicam que a distribuição da equação (6.1) é estável nas direções x e y (onde as forças são repulsivas) e é instável nas diagonais principais e secundárias (onde as forças são atrativas) [13]. Isso leva a esperar que nos *QSS's* deste modelo haja a formação de estruturas coerentes distribuídas homogêneas nas direções x e y e inhomogêneas nas direções diagonais.

Este cenário levanta a questão sobre qual tipo de estrutura seria formada pela instabilidade linear da distribuição homogênea nas direções diagonais nos estados *quasi*-estacionários. A figura 6.2 mostra o resultado da simulação de dinâmica molecular para $N = 10^3$ e $n = 1$. É possível ver uma estrutura com dois aglomerados densos formados por partículas de baixa energia que ficam presas ao poço do potencial de campo médio do modelo HMF. Tomando um valor com $n > 1$, a estrutura periódica do potencial do modelo HMF leva à replicação desta estrutura bicluster formando a rede similar à rede de *Bravais*, como visto na figura 6.3. Na figura 6.2 é possível, também, verificar a existência de algumas partículas de energia alta que escapam do potencial de campo médio se movendo quase livremente pelo espaço. Uma terceira e mais intrigante estrutura é a formação de um fluxo de partículas entre os aglomerados densos, este fluxo é formado por partículas de energias intermediárias que podem escapar dos aglomerados, mas cujo movimento ainda está preso ao potencial de campo médio. O histograma da frequência relativa das partículas na figura 6.4 mostra os três tipos de partícula.

Os aglomerados se encontram distribuídos em uma disposição semelhante à rede de *Bravais* descrita no capítulo anterior: homogênea distribuídos em x e y e inhomogênea nas diagonais. O fluxo de partículas com energias intermediárias entre os aglomerados se encontra alinhado nas direções das diagonais principais e secundárias. Estes dois fatos levam a um valor nulo de magnetização e a um valor de polarização oscilando em torno de $P_{\pm} = 0.6$ (devido à simetria do potencial do modelo HMF em (5.5), temos que $P_+ \approx P_-$ quando $N \gg 1$).

As figuras 6.2 e 6.5 mostram que a estrutura bicluster não é fixa, mas se move. Contudo, o movimento dos aglomerados é mais lento do que o movimento das partículas do fluxo. Isso ocorre porque os clusters se movem de maneira a contrabalancear o movimento das partículas do fluxo para que haja conservação do momentum linear total que é nulo e este movimento não pode ser anulado mesmo com uma transformação canônica nas coordenadas, devido às condições de fronteira periódicas do sistema o centro de massa se move mesmo com a conservação do momentum total. Este comportamento remete a uma quebra espontânea de simetria dos modos de *Goldstone* [72], contudo um exame detalhado sobre isto ainda não foi feito. Com o valor dos moduli dos campos médios oscilando em torno de um valor de equilíbrio ($M_{1,2} = 0$ e $P_{\pm} = 0.6$), o movimento dos clusters se dá pela dependência temporal das fases ψ_{\pm} dos campos médios em (5.4) e (5.6). Mesmo com o movimento dos clusters, as distâncias entre os poços do potencial permanece fixa, sendo esta, uma característica do potencial na equação 5.6. As distâncias entre os clusters, que são centrados nos poços do potencial, determinam os vetores primitivos da rede de *Bravais* associada aos clusters, mostrados na figura 5.6, assim, o conjunto de vetores que caracteriza a rede de *Bravais* se mantém fixo. Dessa forma, mesmo com o movimento dos aglomerados, toda a rede se move de igual maneira, conservando os vetores primitivos da rede.

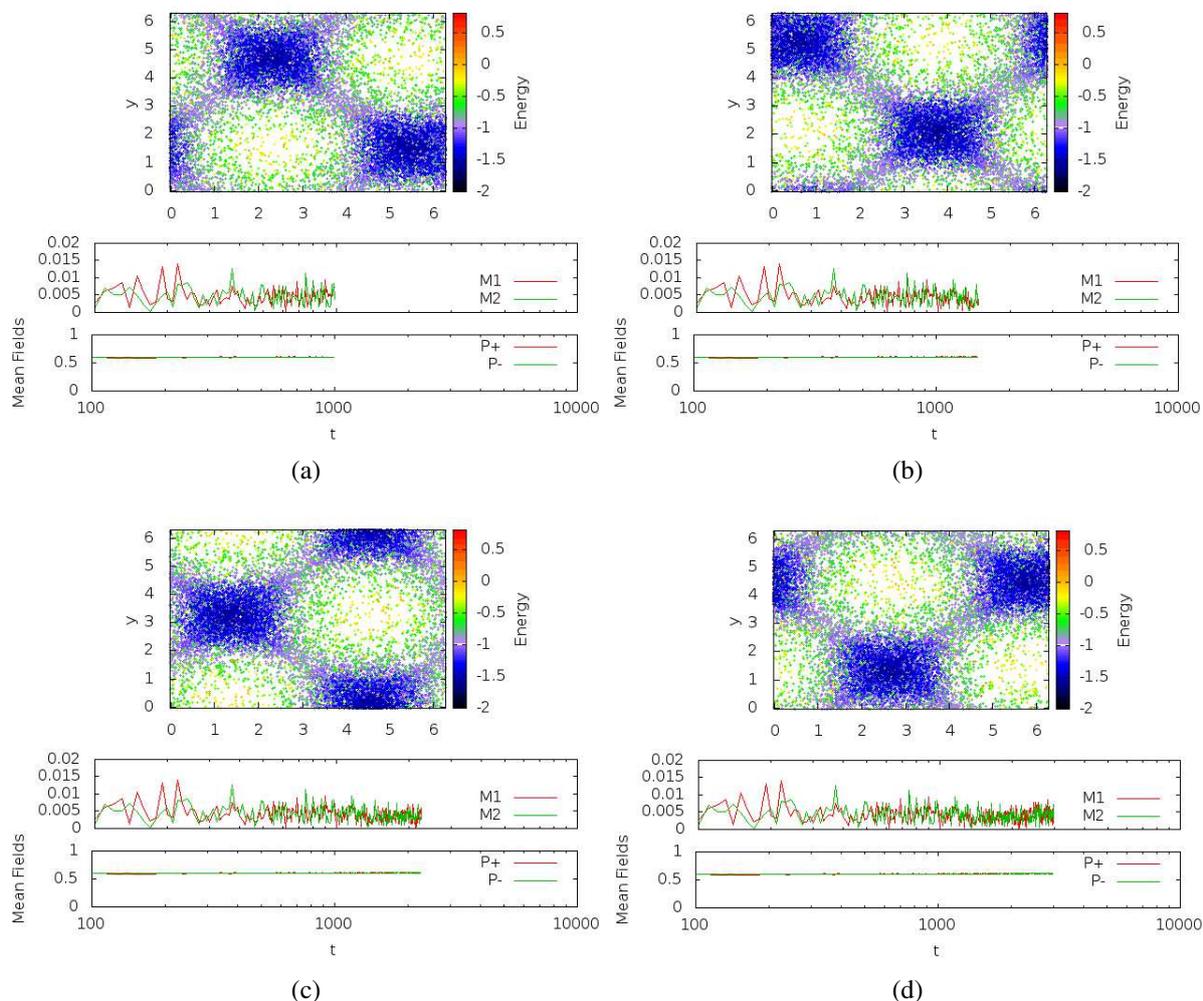


Figura 6.2 Evolução temporal da distribuição das partículas no espaço das posições do sistema descrito na seção anterior no estado *quasi*-estacionário. A simulação de dinâmica molecular foi executada com $N = 10000$ e $n = 1$. A escala temporal pode ser acompanhada no gráfico da evolução temporal dos campos médios, abaixo das figuras das configurações estantâneas e cuja escala é logarítmica. Os valores de magnetização e de polarização ficam oscilando próximo aos valores 0 e 0.6, respectivamente. As cores indicam a energia das partículas, as cores quentes (amarelo, laranja e vermelho) representam as partículas mais energéticas que se movem praticamente livre do potencial de campo médio, as cores verde e roxa são as partículas com energias intermediárias que formam o fluxo entre os aglomerados densos e as partículas em cores azul e preto são as partículas menos energéticas que ficam presas ao poço do potencial de campo médio e formam os aglomerados.

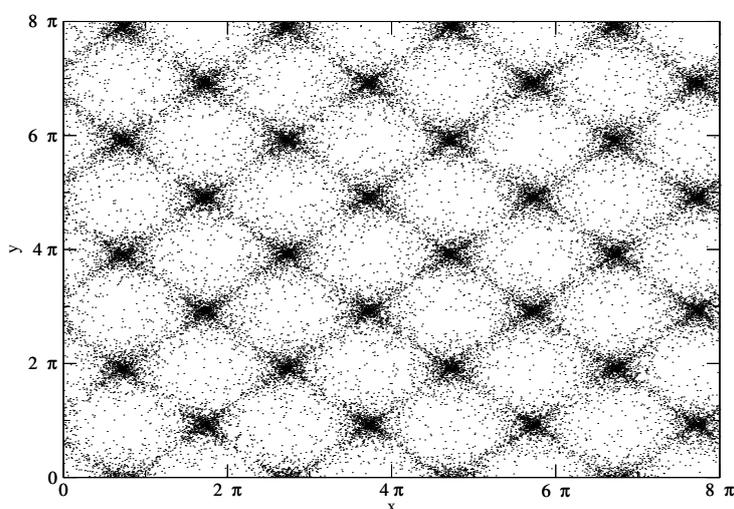


Figura 6.3 Distribuição espacial das partículas do sistema descrito na seção anterior no estado *quasi*-estacionário. A simulação de dinâmica molecular foi executada com $N = 100000$ e $n = 4$. A expansão para valores de $n > 1$ leva a replicação da estrutura bicluster formando uma estrutura periódica descrita pela rede de *Bravais* apresentada no capítulo anterior.

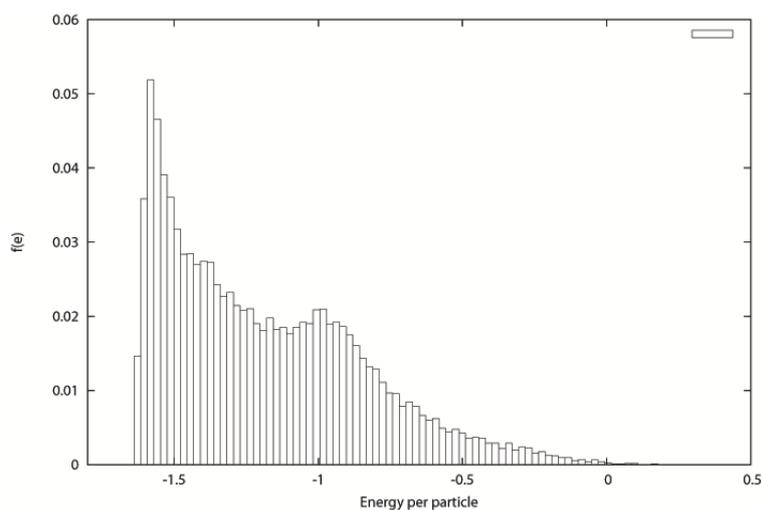


Figura 6.4 Histograma da frequência de energia do sistema para $t = 2000$. Há três tipos de partículas no sistema: partículas de baixa energia que formam os aglomerados densos - essas partículas estão associadas ao pico principal do histograma, partículas com energia intermediária, que formam um fluxo entre os aglomerados, essas partículas estão associadas ao pico secundário do histograma- e as partículas de alta energia que se movem de maneira aleatória e livre de influências do potencial.

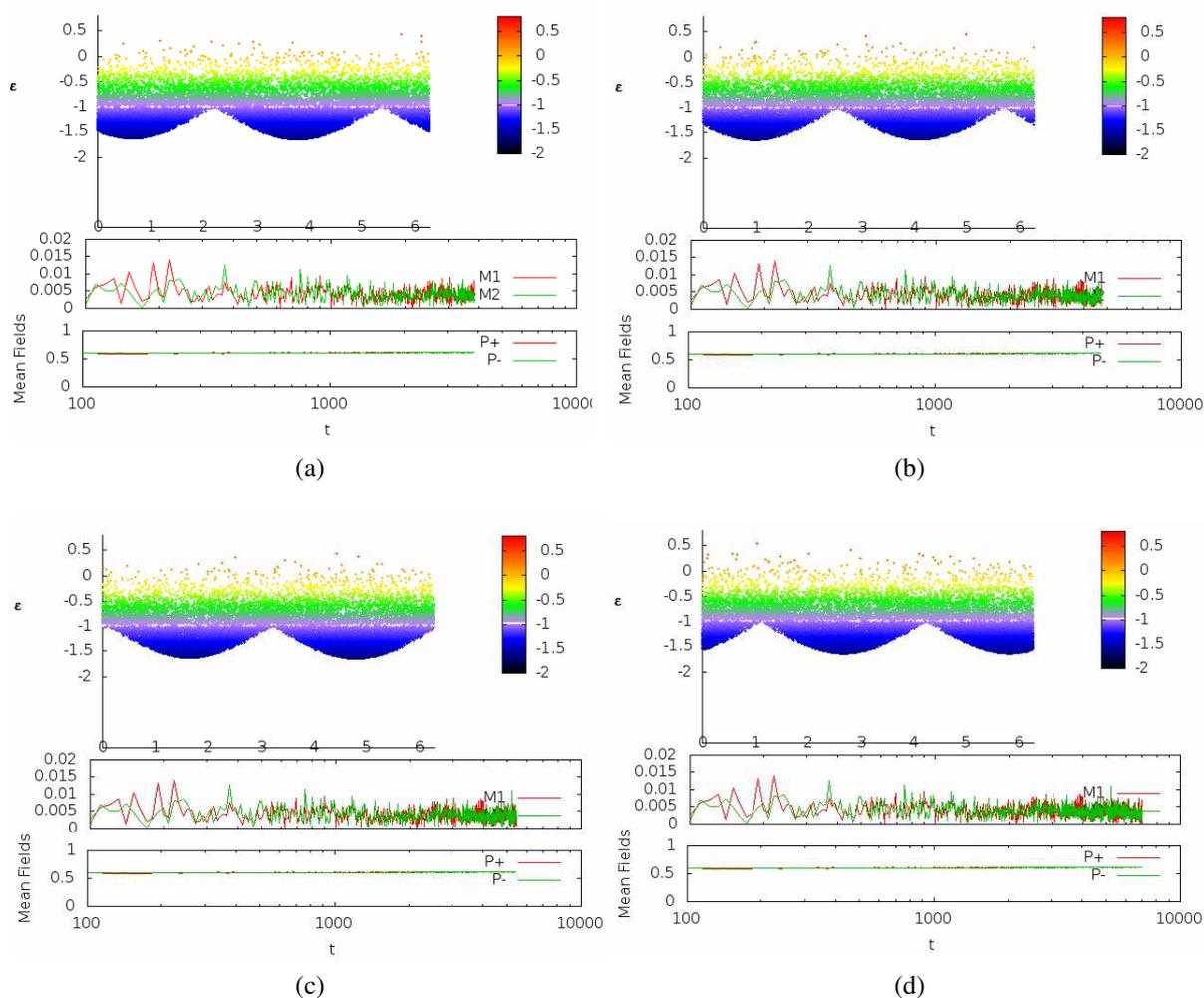


Figura 6.5 Mesma configuração da figura 6.2, mas agora mostrando em uma perspectiva diferente: o eixo horizontal é o eixo da coordenada x e o eixo vertical é o eixo da energia. A escala de cores foi mantida na mesma escala da figura 6.2.

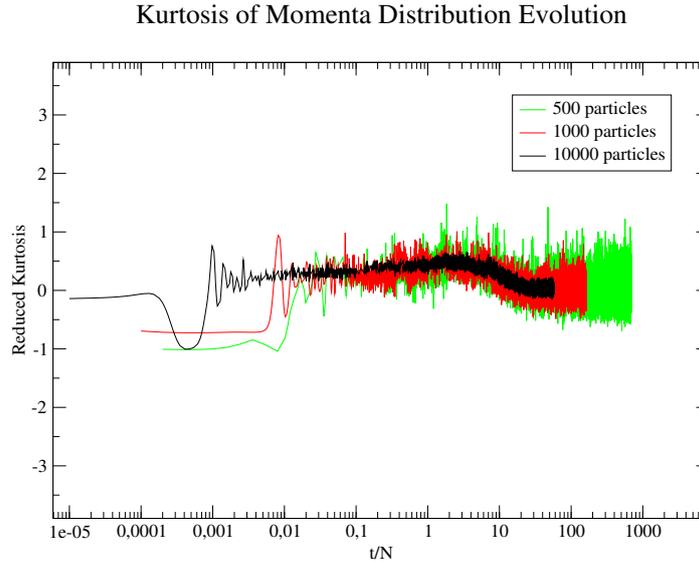


Figura 6.6 Gráfico da evolução temporal da curtose da distribuição dos momenta para o modelo HMF bidimensional no caso misto atrativo-repulsivo. A escala do eixo abcissas foi reescalado pelo número de partículas como t/N e o eixo das ordenadas foi reescalado de forma a obter a curtose reduzida, também chamada de curtose de excesso, que basicamente é a dada por $k' = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} - 3$, dessa forma, quando $k' = 0$ o sistema se encontra com uma distribuição gaussiana dos momenta, que corresponde à distribuição de equilíbrio.

6.3 Estados *quasi*-estacionários - Tempo de vida

Muito tem se discutido sobre a duração τ dos *QSS*'s e sua dependência com a quantidade de partículas N do sistema [1, 45, 46, 28, 26]. Em 2010, *Chavannis* deduziu, baseado em equações cinéticas, um tempo de duração dos *QSS*'s para sistemas bidimensionais que escala com o número de partículas na seguinte proporção $\tau \propto N$. No intuito de testar esse resultado e verificar o tempo de duração das estruturas discutidas na seção anterior, calculei a evolução temporal da curtose da distribuição no espaço dos momenta até o equilíbrio para três diferentes valores de N - a saber $N = 500$, $N = 1000$ e $N = 10000$. Os resultados são mostrados na figura 6.6 e confirmam os resultados analíticos obtidos por *Chavannis*. Portanto, o tempo de vida dos *QSS*'s de sistemas interagindo pelo potencial do modelo HMF bidimensional no caso misto atrativo-repulsivo tenderia a divergir linearmente com o número de partículas, enquanto sistemas reais, com $N \rightarrow \infty$, não atingiriam o equilíbrio termodinâmico, mas ficariam presos no *QSS*'s mantendo a estrutura discutida na seção anterior

6.4 Estados *quasi*-estacionários - Difusão

As partículas que formam o fluxo coerente entre os clusters não tem energia suficiente para escapar do potencial de campo médio, mas estão presas a este. Para entender o modo como ocorre a difusão entre as partículas do fluxo e comparará-lo com a difusão das partículas dos

cluster e das partículas livres, calculei o desvio médio quadrático da posição - MSD - da seguinte maneira: primeiramente executei uma primeira simulação de dinâmica molecular até o sistema passar pelo processo de relaxação violenta e atingir o estado *quasi*-estacionário em um tempo $t_0 = 2500$ e tomei o valor da configuração no espaço de fases $\{(x_i, y_i, p_{x_i}, p_{y_i})\}$; após esta primeira etapa, esta configuração no espaço de fases foi utilizada como distribuição inicial para uma simulação de dinâmica molecular a qual calculou, para cada faixa de energia das partículas (partículas do cluster $\varepsilon \leq -1,25$, partículas do fluxo $-1,25 < \varepsilon \leq -0,6$ e partículas livres $\varepsilon > -0,6$), o deslocamento médio quadrático das partículas com relação ao tempo t_0 :

$$MSD = \langle [x_i(t) - x_i(t_0)]^2 + [y_i(t) - y_i(t_0)]^2 \rangle_N, \quad (6.5)$$

onde os parenteses angulares $\langle \rangle_N$ denotam uma média de ensemble.

O resultado para o cálculo do deslocamento médio quadrático para os diferentes tipos energéticos de partícula obtido para $N = 10^4$ e $n = 10$ é mostrado na figura 6.7. Como as partículas do sistema têm seu movimento confinado a uma área $2n\pi \times 2n\pi$ no plano $x - y$, há um valor máximo que o MSD pode obter. O gráfico mostra que as partículas livres se difundem pelo espaço das posições, primeiramente, em um regime com difusão normal, $MSD \propto t$, para tempos pequenos ($t < 500$) e em seguida ($t > 500$), passando a um regime subdifusivo, onde $MSD \propto t^\alpha$ com $\alpha < 1$, um resultado esperado para sistemas com partículas confinadas [73], pois há um valor máximo para o deslocamento médio quadrático. O regime de difusão das partículas dos clusters é caracterizado por uma subdifusão vítrea com intervalos em que não há difusão, configurando uma alta viscosidade para as partículas dos clusters. Este comportamento vítreo é causado pela conservação do momento linear total, em que os clusters se movimentam de forma a contrabalancear o movimento das partículas do fluxo e, como já na seção sobre a estrutura bicluster, este movimento não altera as configurações da rede de *Bravais*. Sem este movimento de conservação do momentum total, o cluster não teria qualquer difusão tendo um valor constante para MSD . O gráfico da figura 6.7 ainda mostra que as partículas do fluxo se difundem da mesma maneira que as partículas livres, isso demonstra que as partículas do fluxo se difundem pela rede de *Bravais* de maneira independente dos clusters, mesmo presas ao potencial de campo médio.

6.4.1 Mecanismo de *Hopping*

Para entender melhor o mecanismo de difusão das partículas do fluxo, consideremos a figura 6.8. Nela é possível ver a evolução temporal do movimento das partículas que foi mostrada na figura 6.2, mas agora tendo as superfícies equipotenciais instantâneas plotadas juntamente à distribuição de partículas.

As oscilações coletivas das partículas do sistema levam às oscilações dos campos médios e estas oscilações dos campos médios implicam, também, em oscilações no potencial definido em (5.5). Conforme mostra a figura 6.8 as oscilações do potencial fazem com que as curvas das superfícies equipotenciais se toquem, permitindo que partículas presas a um aglomerado passem para outro aglomerado vizinho. Na prática, as oscilações do potencial funcionam como janelas na barreira do potencial, as quais permitem que partículas presas a um core possa transitar para outro como se estivessem tunelando pela barreira de potencial. Este mecanismo que

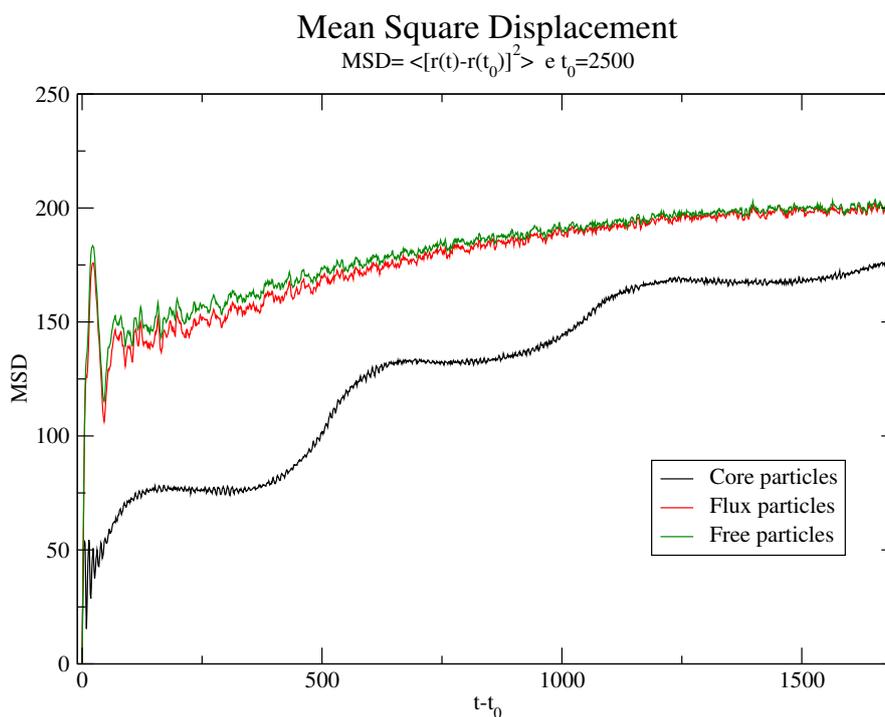


Figura 6.7 Evolução temporal da difusão média quadrática para $N = 10^4$ e $n = 3$. As partículas das cores apresentam uma subdifusão vítrea, caracterizada por intervalos sem difusão. As partículas livres e as partículas do fluxo apresentam um regime de difusão normal de sistemas confinado semelhante à difusão das partículas livres.

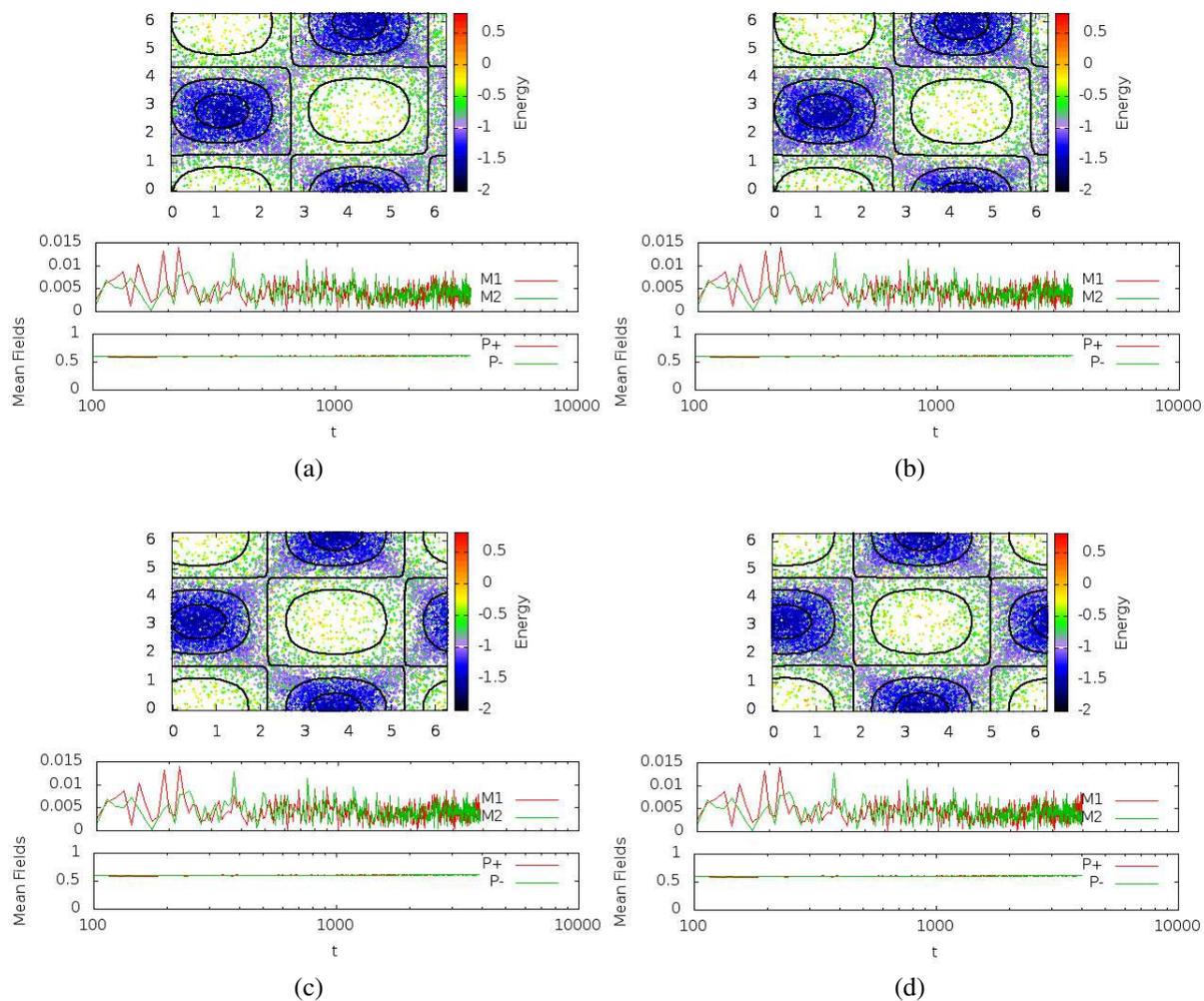


Figura 6.8 Evolução temporal da distribuição das partículas no espaço das posições do sistema. As linhas pretas são as linhas equipotencias instantâneas, que oscilam devido à oscilação do campo médio.

possibilita o fluxo das partículas com energias intermediárias.

6.5 Teoria *Core-Halo*

Qualitativamente, foi observado que sistemas com interações de longo alcance apresentam, nos *QSS*'s, uma formação de um aglomerado denso circundado por um halo difuso de partículas - as chamadas estruturas *core-halo* [30, 33, 34]. Estas estruturas são formadas por um processo de puramente dinâmico e similar ao processo de resfriamento evaporativo [30], em que algumas partículas ganham energia ao entrar em ressonância com as oscilações coletivas do sistema e formando o halo difuso, enquanto a perda de energia para as partículas do halo diminui a amplitude das oscilações coletivas do sistema levando à formação do core [30, 33]. Devido à incompressibilidade da dinâmica de *Vlasov* o sistema não pode colapsar completamente ao mí-

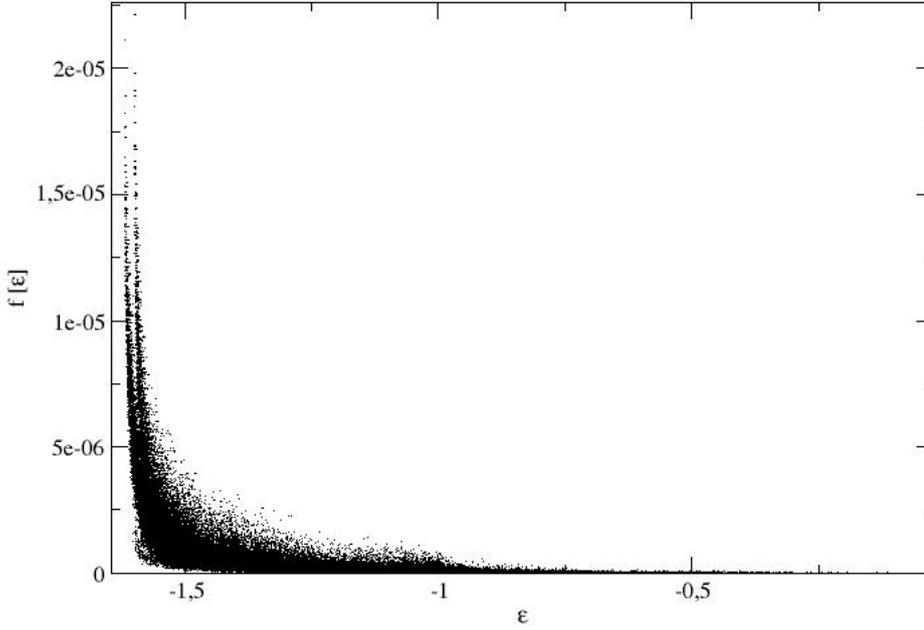


Figura 6.9 Função de distribuição $f(\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}))$ para $N = 10^5$ e $n = 4$. O tempo final de simulação foi $t_f = 20000$, tempo suficiente para o sistema perder memória da distribuição inicial (problema da filamentação mostrado na figura 6.1) e atingir uma melhor termalização.

nimo da energia potencial, mas os estados de menor energia, progressivamente, se aproximam da máxima densidade do espaço de fases permitida pela distribuição inicial [30].

Neste contexto e baseado no teorema de *Jeans*, o qual afirma que "qualquer estado estacionário solução da equação de Vlasov depende das coordenadas do espaço de fases somente em função das integrais de movimento do potencial e qualquer função de distribuição que dependa somente das integrais de movimento resulta em uma solução estacionária para a equação de Vlasov"; *Levin e Pakter* [30, 33] propuseram uma solução *ansatz* para a distribuição do estado *quasi-estacionário* da seguinte forma:

$$f_{C-H}[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] = \eta_0 [\Theta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})) + \chi \Theta(\varepsilon_h - \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})) \Theta(\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - \varepsilon_F)], \quad (6.6)$$

onde ε é a energia por partícula dada por $\varepsilon = p^2/2 + \langle v \rangle(\mathbf{r})$, com $\langle v \rangle$ sendo o potencial de campo médio por partícula, que depende da posição e Θ é a função degrau unitário de *Heaviside*. O primeiro termo da equação (6.6) corresponde ao core da distribuição e ε_F é chamada energia de *Fermi* e corresponde à máxima energia associada às partículas do core. O segundo termo da equação (6.6) corresponde ao halo da distribuição, ε_h é a chamada energia do halo e corresponde à máxima energia atingida pelas ressonantes do sistema, e é obtida pela equação de envelope, ou por simulações de dinâmica molecular.

Baseado nestes resultados, obtive com uma simulação de dinâmica molecular, o histograma para a distribuição das partículas no espaço de fases e plotei a sua dependência com relação à energia das coordenadas do espaço de fases do histograma. O resultado deste cálculo é mostrado na figura 6.9. Neste modelo com interações atrativas e repulsivas é possível notar

que há a formação do core denso a baixas energias ($\varepsilon < -1.5$) e a formação de dois níveis de halo- um halo bem rarefeito a altas energias ($\varepsilon > -0.9$) e outro menos difuso a energias intermediárias ($-1.5 < \varepsilon < -0.9$), associado às partículas do fluxo. Este resultado contrasta com o único halo obtido em modelos como o HMF unidimensional. Por esta razão utilizei um *ansatz* diferente com dois níveis de halo dado por:

$$f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] = \eta \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) + \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) + \chi \Theta(\varepsilon_h - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_s), \quad (6.7)$$

onde o primeiro termo corresponde ao core, o segundo termo com coeficiente ξ corresponde ao primeiro nível de halo a energias intermediárias (chamado aqui de fluxo) e o terceiro termo com coeficiente χ corresponde ao nível de halo a energias altas.

A constante η associada ao core é determinada pela distribuição inicial e tem valor $\eta^{-1} = 8\pi^3(n\Delta p)^2$, que é a constante de normalização da distribuição inicial na equação (6.1) e é a máxima densidade do espaço de fase que o core pode ter devido à incompressibilidade da dinâmica de *Vlasov*. Os parâmetros energéticos ε_F , ε_s e ε_h podem ser determinados pelo resultado da dinâmica molecular na figura 6.9. Assim tomamos $\varepsilon_F = -1.57$, $\varepsilon_s = -0.9$ e $\varepsilon_h = 0.7$. Por último as duas constantes ξ e χ são determinadas pelas equações de vínculo de conservação da normalização e da energia:

$$\begin{aligned} \int d^2r d^2p f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] &= 1, \\ \int d^2r d^2p \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] &= \varepsilon_0, \end{aligned} \quad (6.8)$$

onde ε_0 foi definido na equação (6.4) e tem valor $\varepsilon_0 = \frac{(\Delta p)^2}{8} - 1 \approx -1$ com $\Delta p \ll 1$. No caso do HMF bidimensional a energia ε é dada pela equação 5.6:

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} - 1 + M_1 \cos(x_i) + M_2 \cos(y_i) - \frac{1}{2}[P_+ \cos(x_i + y_i) + P_- \cos(x_i - y_i)]. \quad (6.9)$$

Dos resultados previamente obtidos da dinâmica molecular e discutidos nas seções anteriores, tem-se que nos *QSS* os campos médios M_1 e M_2 são nulos e que os campos médios das polarizações ficam oscilando próximo a um valor de equilíbrio tal que $P_{\pm} = 0,6$, assim podemos reescrever a equação (6.9) como:

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{p^2}{2} - 1 - P_{\pm} \cos(x) \cos(y), \quad (6.10)$$

onde p é o módulo do vetor momentum.

De posse destes parâmetros é possível resolver as integrais das equações em (6.8) numericamente e, assim, resolver o sistema gerado pelas duas equações de vínculo para obter ξ e χ . O resultado obtido foi $\xi = 2,8 \cdot 10^{-3}$ e $\chi = 2,7 \cdot 10^{-4}$, tendo:

$$f = 3,6\Theta(-1,57 - \varepsilon) + 0,0027\Theta(-0,9 - \varepsilon)\Theta(\varepsilon + 1,57) + 0,00028\Theta(0,7 - \varepsilon)\Theta(\varepsilon + 0,9), \quad (6.11)$$

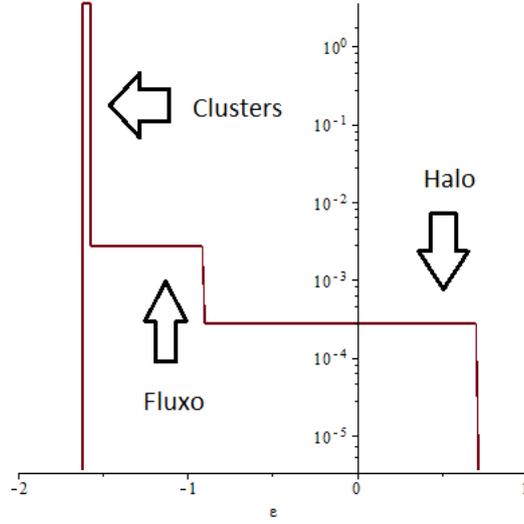


Figura 6.10 Função de distribuição obtida na equação (6.11). A escala do eixo das ordenadas está em escala logarítmica.

como função de distribuição. O gráfico de (6.11) é mostrado na figura 6.10 em escala logarítmica.

Para verificar a precisão da distribuição calculada com este *ansatz* teórico, utilizei as equações de campo médio:

$$\begin{aligned}
 M_1 &= \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} \cos(x) f\epsilon \\
 M_2 &= \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} \cos(y) f\epsilon \\
 P_{\pm} &= \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} \cos(x \pm y) f\epsilon,
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

O resultado obtido para as magnetizações foi $M_{1,2} = 0$, que está de acordo com os resultados obtidos na dinâmica molecular e no estudo de estabilidade linear da distribuição homogênea e para as polarizações foi $P_{\pm} = 0,59$, enquanto que os resultados da dinâmica molecular deram um resultado de $\langle P_{\pm} \rangle_t \approx 0.6$, onde os parenteses angulares $\langle \rangle_t$ representam uma média temporal. Este resultado portanto apresenta erro relativo de 1,67%, concordando bem com os resultados da simulação de dinâmica molecular.

O método para a determinação desta função de distribuição foi bem rudimentar e utilizou bastante elementos extraídos da dinâmica molecular. Recentemente, *Rocha Filho* desenvolveu um aprimoramento da teoria *core-halo* em que utiliza métodos variacionais para a maximização de uma entropia associada ao processo de filamentação do espaço de fases em que não é necessário utilizar nenhuma informação dinâmica do sistema [35], sendo uma perspectiva de trabalho futura aplicar este método neste sistema. Contudo, neste trabalho, será utilizado somente o método já apresentado.

6.5.1 Resultados - Densidades de partícula e de energia

As densidades de partícula e energia são definidas como:

$$\begin{aligned}\rho_N(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] \\ \rho_U(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})],\end{aligned}\quad (6.13)$$

onde ε é dado pela equação (6.10) e tem a seguinte forma:

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2} + V(x, y), \quad (6.14)$$

com $V(x, y) = -1 - P_{\pm} \cos(x) \cos(y)$. Utilizando a equação (6.7) e a definição em (6.14) é possível integrar de maneira analítica as equações (6.13), obtendo para a densidade de partícula:

$$\begin{aligned}\frac{\rho_N(\mathbf{r})}{2\pi} &= [\eta(\varepsilon_F - V(x, y)) + \xi(\varepsilon_s - \varepsilon_F)] \Theta(\varepsilon_F - V(x, y)) \\ &\quad + [\xi(\varepsilon_s - V(x, y)) + \chi(\varepsilon_h - \varepsilon_s)] \Theta(\varepsilon_s - V(x, y)) \Theta(V(x, y) - \varepsilon_F) \\ &\quad + \chi(\varepsilon_h - V(x, y)) \Theta(\varepsilon_h - V(x, y)) \Theta(V(x, y) - \varepsilon_s),\end{aligned}\quad (6.15)$$

e para a densidade de energia:

$$\begin{aligned}\frac{\rho_U(\mathbf{r})}{\pi} &= [\eta(\varepsilon_F^2 - (V(x, y))^2) + \xi(\varepsilon_s^2 - \varepsilon_F^2)] \Theta(\varepsilon_F - V(x, y)) \\ &\quad + [\xi(\varepsilon_s^2 - (V(x, y))^2) + \chi(\varepsilon_h^2 - \varepsilon_s^2)] \Theta(\varepsilon_s - V(x, y)) \Theta(V(x, y) - \varepsilon_F) \\ &\quad + \chi(\varepsilon_h^2 - (V(x, y))^2) \Theta(\varepsilon_h - V(x, y)) \Theta(V(x, y) - \varepsilon_s).\end{aligned}\quad (6.16)$$

A densidade de partículas definida na equação (6.15) e a densidade de energia obtida na equação (6.16) são plotadas para os resultados obtidos na seção anterior nas figuras 6.11 e 6.12, respectivamente.

A densidade de partículas mostram picos que correspondem às partículas que perderam energia para o processo de ressonância na relaxação violenta e colapsaram formando os clusters densos da distribuição core-halo. Os picos de densidade estão conectados por uma região de densidade intermediária (aproximadamente uma ordem de grandeza menor que dos picos) que corresponde às partículas que formam o fluxo obtido nos resultados da dinâmica molecular e, por último, a uma região bem rarefeita, com densidade até três ordens de grandeza menor, que correspondem às partículas livres que ganharam energia no processo de ressonância da relaxação violenta. Esses resultados estão de acordo com os resultados da dinâmica molecular, onde os clusters estavam interligados por um fluxo de partículas. Este fluxo é colimado pelos canais energéticos, mostrado nos gráficos da densidade de energia da figura (6.16), tendo sua coerência devido ao efeito colimador destes canais da densidade de energia. São também estes canais que permitem a difusão das partículas do fluxo conforme o perfil mostrado na figura 6.7

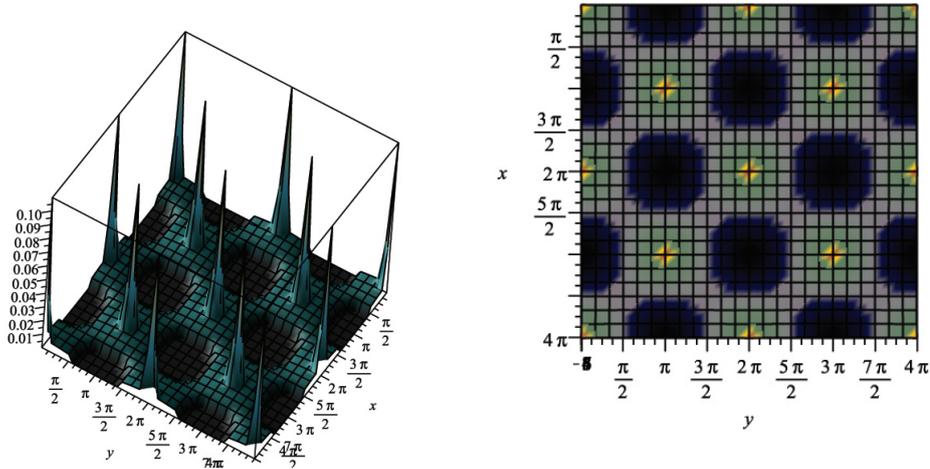


Figura 6.11 Densidade de energia obtida com a função de distribuição *core-halo* com dois níveis de halo. Ambos os gráficos mostram o mesmo resultado, variando somente a perspectiva. No gráfico à direita as cores mais escuras representam regiões menos densas, enquanto que as regiões em amarelo e vermelho representam as regiões mais densas. As regiões com maior densidade são interligadas por regiões de densidade intermediárias, este canal de ligação com densidade intermediária - região mais clara da figura - são as partículas do fluxo.

da seção 5.4, criando um escape para as partículas aprisionadas no poço de potencial, sendo uma outra maneira de entender a pulsação das superfícies equipotenciais. A posição dos picos de densidade de partícula e dos mínimos de densidade de energia mostram-se em uma disposição periódica que pode ser descrita pela mesma rede similar à rede de *Bravais* discutida no capítulo anterior com o conjunto de vetores primitivos $\mathbf{a}_1 = (\pi, \pi)$ e $\mathbf{a}_2 = (2\pi, 0)$, como foi mostrado na figura 5.6.

O comportamento peculiar de uma rede cristalina com propriedades de difusão tem sido objeto de um intenso debate científico por décadas [74, 37, 75, 38]. Originalmente proposto de maneira teórica por *Andreev* e *Lifshitz* [37] e *Legget* [38], esse fenômeno foi chamado de supersolidez, onde uma ordem cristalina de longo alcance coexiste em uma mesma fase com a presença de uma difusão de partículas pelos sítios da rede, configurando um caráter superfluido a um material sólido. Uma explicação para esta aparente contradição é que em um sólido bosônico ultra-resfriado, a função de onda tem um valor máximo no centro do sítio da rede cristalina, mas ao contrário de um sólido comum, a função de onda de um supersólido não se anula rapidamente para valores afastados do sítio da rede criando uma interconexão entre os sítios, com a possibilidade de as partículas constituintes da rede tunelarem para outros sítios. Essas partículas poderiam passar por um processo de condensação de *Bose-Einstein* e o comportamento coletivo do condensado levaria a um fluxo coerente de partículas tunelando pela rede, criando um superfluido de partículas tunelantes pela rede cristalina. Na última década foi proposto que forças de longo alcance dariam estabilidade a essa nova fase da matéria [76,

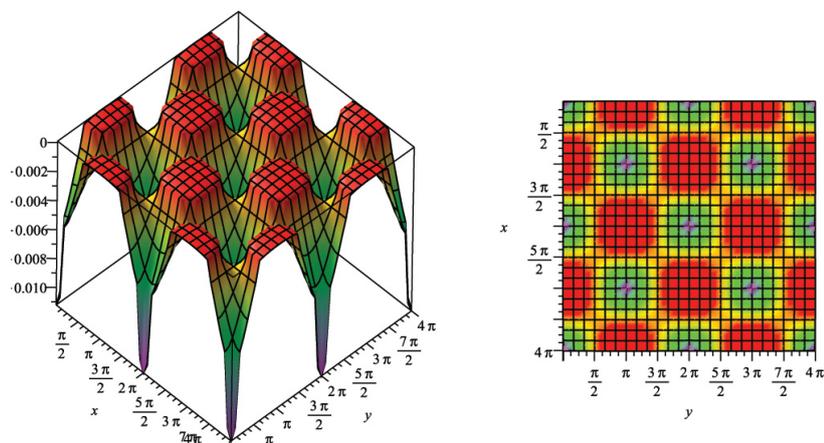


Figura 6.12 Densidade de energia obtida com a função de distribuição *core-halo* com dois níveis de halo. As cores mais quentes representam regiões mais energéticas e cores mais frias representam as regiões menos energéticas. Ambos os gráficos mostram o mesmo resultado, variando somente a perspectiva. É possível ver que as regiões com menor densidade de energia são interligadas por regiões de energia intermediária formando canais energéticos que funcionam como colimadores do feixe de partículas que forma o fluxo de partícula entre os clusters, aumentando, assim a coerência do fluxo.

77, 78]. No entanto, mesmo com muito esforço por parte da comunidade científica, o debate sobre a existência e sobre uma possível observação da fase supersólida não tem chegado a um consenso sobre esta nova e intrigante fase da matéria. Veja o apêndice D para uma discussão mais detalhada sobre o assunto

O fenômeno da supersolidez é um fenômeno puramente quântico e não pode ser explicado de maneira clássica. Contudo, há diversas analogias entre este fenômeno e o comportamento do *QSS* estudado aqui: a rede de aglomerados descrito pela rede similar a rede de *Bravais* possui uma analogia com a rede cristalina da estrutura sólida presente em super sólidos; o fluxo de partículas entre os clusters e que tem o movimento colimado pelos canais energéticos criando um fluxo coerente possui uma analogia com a condensação de *Bose-Einstein* e a consequente coerência das partículas que tunelam pela rede; as oscilações das superfícies equipotenciais criando o mecanismo de *hopping* das partículas entre os clusters, gerando o fluxo e o mecanismo de fluxo dos supersólidos, onde as partículas tunelam entre os clusters constituintes do sólido; os resultados e a distribuição de partículas no espaço também é muito similar ao supersólido obtido por *Cinti et al.* [77] com uma interação dipolar, que também é uma interação de longo alcance. E como toda analogia, também possui diversas diferenças como o fato de ser um modelo clássico, a difusão vítrea das partículas dos aglomerados, a presença de partículas livres, que tem energia suficiente para escapar dos efeitos do potencial, dentre outras.

Sendo um modelo com um comportamento análogo ao comportamento supersólido, o modelo HMF bidimensional no caso misto atrativo-repulsivo pode vir a desempenhar um papel de modelo simplificado no entendimento de algumas propriedades macroscópicas de supersólidos e sendo, também, um modelo de forças de longo alcance, este pode também ser um modelo simplificado para uma primeira aproximação no entendimento de como interações de longo alcance podem gerar a estabilidade dessa fase.

6.5.2 Fração de *Hopping*

Um cálculo interessante nesse sentido é calcular a fração de partículas do fluxo, com relação à quantidade total de partículas constituintes do sistema *Core - Fluxo*, excluindo as partículas livres que se movem de maneira aleatória e não estariam presentes no modelo quântico, definimos assim a fração de *hopping* F_H como:

$$F_H = \frac{\int d\mathbf{p} d\mathbf{q} \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F)}{\int d\mathbf{p} d\mathbf{q} \eta \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) + \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F)}. \quad (6.17)$$

A teoria *core-halo* confere um valor para fração supersólida $F_H = 2\%$. Alguns grupos experimentais que relataram ter conseguido obter uma fase supersólida obtiveram uma fração supersólida - fração de partículas superfluidas presentes na rede com relação à quantidade total de partículas- no intervalo de 2% a 20% [79, 80, 81, 82], e este é mais um resultado análogo ao modelo quântico.

Conclusões e perspectivas futuras

Neste trabalho foi possível ver a importância dos modelos simplificados no estudo das propriedades de sistemas com interações de longo alcance. Ao considerar modelos de menor dimensionalidade, tomando simetrias adicionais, ou ao tomar a descrição de gás de rede, esses modelos evitam uma série de dificuldades técnicas como divergência a curtas distâncias ou o alto desempenho computacional requerido para o cálculo do potencial de pares, mantendo características intrínsecas e importantes como a presença de calor específico negativo ou a rápida relaxação a um estado de *quasi*-equilíbrio seguido de uma relaxação lenta em direção ao equilíbrio termodinâmico.

No quarto capítulo, a introdução do potencial de partículas rígidas levou o efeito do tamanho das partículas ao cálculo das propriedades termodinâmicas. Utilizando uma nova prescrição do potencial que fosse pertinente ao caso das partículas rígidas, foi possível ver que a fração do volume total ocupado por partículas η desempenhava o mesmo papel do parâmetro de abrandamento ε , dando a este uma interpretação de uma densidade generalizada. A geometria do sistema, se linear ou circular, tem efeito quando η ou ε são grandes, enquanto a geometria circular no limite de η ou ε grandes tende ao comportamento do modelo HMF, o qual tem duas fases - uma homogênea e outra inomogênea com uma transição de fases de segunda ordem entre elas - a geometria linear tende ao comportamento do modelo planar o qual possui somente uma fase e não há transição de fases. As diferentes geometrias tendem ao mesmo comportamento para o limite de η ou ε pequenos, mantendo as características do comportamento termodinâmico de sistemas gravitacionais tridimensionais. A descrição de gás de rede constituiu uma simplificação ulterior e facilitou a aplicação do potencial de partícula rígida, uma vez que somente uma partícula podia ocupar cada sítio da rede. Os resultados da descrição de gás de rede tendem rapidamente ao mesmo resultado utilizando descrição de espaço contínuo à medida em que a quantidade de sítios da rede aumenta, ou à medida em que o tamanho da partícula diminui.

No quinto capítulo foi introduzido uma extensão bidimensional do modelo HMF. Apresenta a vantagem de estudar difusão no espaço real, ao invés do espaço de ângulo-ação. Enquanto há diversos estudos feitos sobre modelo HMF unidimensional, poucos estudos foram feitos sobre o modelo HMF bidimensional e a maioria foi feito no caso gravitacional, ou ferromagnético (onde todas as interações são atrativas). Neste trabalho estudamos o comportamento termodinâmico do modelo bidimensional em todos os casos - a) gravitacional, b) completamente repulsivo e c) no caso misto com interações atrativas e repulsivas. O caso a) mostra uma descrição de campo médio de um modelo gravitacional e compartilha características com os modelos unidimensionais estudados no capítulo anterior no limite de pequenos valores para η e ε : como duas fases, uma aglomerada a baixas energias e outra homogênea a altas energias com uma tran-

sição de fase de primeira ordem e também com a presença de uma região de calor específico negativo na fase aglomerada. O caso b) não apresenta nenhuma característica interessante, pois a fase homogênea é dinâmica e termodinamicamente estável, sem que haja qualquer transições de fase. O caso c) apresenta um comportamento termodinâmico similar ao comportamento do modelo HMF unidimensional no caso ferromagnético, com duas fases no equilíbrio, uma fase com distribuição espacial inhomogênea que forma uma estrutura periódica que pode ser descrita com uma rede de *Bravais*, podendo ser utilizada para estudos sobre propriedades de sólidos com interações de longo alcance e uma fase homogênea a altas temperaturas. Um estudo de estabilidade linear das distribuições homogêneas no limite de fluido ultra-frio na dinâmica de *Vlasov* também foi feito neste capítulo. O resultado obtido é que estas distribuições são estáveis nas direções onde as interações são repulsivas e são instáveis nas direções onde as interações são atrativas, como isto foi calculado, também, a taxa de crescimento linear da inhomogeneidade do sistema, tendo uma concordância precisa com os resultados de simulações de dinâmica molecular.

No sexto capítulo foi estudado as propriedades dos estados *quasi*-estacionários. Uma estrutura similar à estrutura periódica obtida no equilíbrio e descrita por uma rede de *Bravais* foi obtida também fora do equilíbrio, contudo com a diferença da presença de um fluxo coerente e contínuo de partículas entre os sítios de rede também estava presente. As partículas do fluxo não têm energia suficiente para escapar do potencial de campo médio, contudo um estudo de difusão utilizando o deslocamento médio quadrático mostrou que elas se difundem livremente pela rede em um regime de difusão normal para tempos curtos, enquanto as partículas dos cores apresentavam um comportamento vítreo, não difundindo pela rede. A difusão das partículas do fluxo se dá pela pulsação dos campos médios, que por sua vez levam à pulsação das equipotenciais, essa pulsação funciona como uma janela para que partículas com baixa energia possam transitar entre os clusters. Essa estrutura do estado *QSS* tem uma duração que escala linearmente com o número de partículas, sendo que para sistemas reais com $N \rightarrow \infty$ o sistema fica preso neste estado não indo ao equilíbrio termodinâmico. Por último foi desenvolvida uma solução *ansatz* baseado na teoria core-halo uma solução core-halo com dois níveis de halo, sendo o halo de energias intermediárias correspondente ao fluxo de partículas. De posse desta solução core-halo, calculei as densidades de partícula e de energia. A densidade de energia mostra canais energéticos entre os clusters que agem como colimadores do fluxo de partículas criando a coerência do fluxo. A densidade de partícula mostra a formação de uma rede "cristalina", mas cuja densidade não se anula rapidamente ao se afastar do centro do sítio. Estes resultados mostram que este estado *quasi*-estacionário possui um comportamento análogo ao comportamento de um supersólido. A supersolidez é um fenômeno quântico onde há a coexistência de uma rede cristalina e a superfluidez em uma mesma fase da matéria, e como um comportamento quântico não pode ser explicado de maneira clássica, no entanto o comportamento desse estado *quasi*-estacionário é análogo ao comportamento de um supersólido e tomando esta analogia, foi calculado uma fração de partículas do fluxo de 2%, enquanto que grupos de átomos frios relatam que em uma fase supersólida a fração de partículas superfluidas deve estar no intervalo entre 2% e 20%.

Como perspectivas de trabalho temos a aplicação do método desenvolvido por *Rocha Filho* para o cálculo da distribuição core-halo baseado em um método variacional de maximização

de uma entropia associada à perda de precisão gerada pelo processo de filamentação da função de distribuição de grão fino. Este método, ao contrário do método utilizado neste trabalho, não utiliza nenhuma informação dinâmica do sistema. Outra perspectiva futura é estudar fenômenos conhecidos de sistemas auto-gravitantes no estudo de sistemas auto-gravitantes unidimensionais e do HMF bidimensional, exemplos desses fenômenos são a segregação e ejeção de matéria.

Como perspectivas futuras sugeridas pela banca no dia da apresentação estão a análise dinâmica da formação da nova estrutura *Core-Fluxo-Halo* com uma ênfase especial na formação dinâmica do fluxo que não está presente na explicação original da teoria *Core-Halo*, calculando a separatriz entre as partículas presas e o mar caótico das partículas livres, e verificar o mecanismo de relaxação ao equilíbrio termodinâmico descrito por *Ettoumi e Firpo* [26], em que o sistema atinge a distribuição de *Maxwell-Boltzmann* quando todas as partículas tiverem cruzado a separatriz. Analisar o movimento e a difusão dos clusters por meio da quebra espontânea de simetria dos modos de *Goldstone*. Verificar se as colisões de partícula rígida termalizariam o sistema mais rapidamente ao equilíbrio termodinâmico e o desenvolvimento de uma dinâmica molecular simplético com a abordagem de gás de rede para sistemas com interações de longo alcance.

Divergência do Potencial Gravitacional a Curtas Distâncias

A dificuldade principal que surge nos potenciais atrativos do tipo $\Phi(r) \propto -r^{-1}$, como é o caso dos potenciais gravitacionais e coulombianos é a divergência a curtas distâncias [1, 2, 5].

A o volume do espaço de fases é dado por:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int \Theta[E - H(\{p_i\}, \{q_i\})] \prod_{i=1}^N d^d p_i d^d q_i, \quad (\text{A.1})$$

onde Θ é a função degrau unitário de *Heaviside*, $C(N)$ é uma constante que depende somente de N e $H(\{p_i\}, \{q_i\})$ é a hamiltoniana do sistema. Ao integrar no espaço dos momenta, temos como resultado:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int [E - \Phi(q)]^{\frac{dN}{2}-1} \Theta[E - \Phi(q)] d^{dN} q, \quad (\text{A.2})$$

onde $C'(N)$ é outra constante que depende somente de N .

O potencial gravitacional é um potencial de pares e pode ser escrito como:

$$\Phi = -\frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (\text{A.3})$$

o fator N foi introduzido como prescrição de *Kac* para restaurar a extensividade da hamiltoniana. Substituindo (A.3) em (A.2), temos:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int \left(E + \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^{\frac{dN}{2}-1} \Theta \left(E + \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) \prod_{k=1}^N d^d r_k. \quad (\text{A.4})$$

Fazendo uma mudança de variável do tipo $\mathbf{B} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ é possível reescrever a integral em (A.4) como:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int I(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \prod_{k=2}^N d^d r_k, \quad (\text{A.5})$$

onde

$$I(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = \int \left(E + \frac{Gm^2}{N|\mathbf{B}|} + \frac{1}{N} \sum_{j=3}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{B} + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_j|} + \frac{1}{N} \sum_{i,j=2}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^{\frac{dN}{2}-1} \times \\ \times \Theta \left(E + \frac{Gm^2}{N|\mathbf{B}|} + \frac{1}{N} \sum_{j=3}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{B} + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_j|} + \frac{1}{N} \sum_{i,j=2}^N \frac{Gm^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) d^d \mathbf{B}. \quad (\text{A.6})$$

Em $\mathbf{B} = 0$ o integrando em (A.6) é divergente e o termo dominante é $Gm^2/N|\mathbf{B}|$. Próximo a $\mathbf{B} = 0$ temos:

$$I'(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = \Omega_d \lim_{\xi \rightarrow 0} \int_0^\xi B^{d-1} \left(\frac{Gm^2}{|\mathbf{B}|} \right)^{\frac{dN}{2}-1} dB, \quad (\text{A.7})$$

$$I'(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \propto \lim_{\xi \rightarrow 0} \xi^{(d+1-\frac{dN}{2})}. \quad (\text{A.8})$$

Assim $I(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ divergirá para

$$N > 2 \left(\frac{d+1}{d} \right), \quad (\text{A.9})$$

ou $N \geq 3$ para $d = 3$, $N \geq 4$ para $d = 2$ e $N \geq 5$ para $d = 1$.

Se $I(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ diverge, então o volume do espaço de fase também diverge levando ao fenômeno conhecido como catástrofe gravotérmica [5, 7, 11]. Faz-se necessário o uso de artifícios que evitem a divergência a curtas distâncias.

Há basicamente dois tipos de sistemas gravitacionais [5]. O primeiro consiste em sistemas astrofísicos como galáxias, sistemas planetários, aglomerados estelares, dentre outros, são constituídos de partículas clássicas (exceto em alguns casos onde deve ser levado em conta correções relativísticas ao se aproximarem muito). O segundo consiste em sistemas com partículas elementares quânticas como halos de matéria escura, estrelas de nêutrons, anãs brancas, dentre outros.

Para o primeiro tipo, a divergência no potencial pode ser evitada com a introdução de um potencial de partícula rígida. Nesse caso, o tamanho das partículas é levado em consideração.

Para o segundo caso, correções quânticas são necessárias. Padmanabhan [5] mostrou que para tais sistemas há um estado fundamental de energia e, assim como sistemas coulombianos têm sua estabilidade devido a princípios da mecânica quântica como a incerteza e a exclusão de *Pauli*, sistemas gravitacionais também devem sua estabilidade a esses princípios. Para sistemas deste segundo tipo desenvolveram a idéia de parâmetro de amortecimento (*softening parameter* no inglês), consiste em uma regularização do potencial de forma que a partir de uma certa distância as partículas não mais interagem entre si, isto é, o potencial é modificado para a forma $\Phi(r) \propto -(r + \varepsilon)^{-1}$.

Implementação do método de Monte Carlo microcanônico

A implementação do algoritmo apresentado no capítulo 2 é apresentado a seguir [13]:

1. Escolhe-se uma partícula n com a posição original $\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n^0 = (x_n^0, y_n^0)$.
2. Escolhe-se uma nova posição $\mathbf{r}'_n = (x'_n, y'_n)$.
3. Calcula-se a energia cinética do sistema com a partícula n na configuração original $K(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n^0\}) = K^0$ com a relação $K(\{\mathbf{r}_i\}) = E - \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$.
4. Calcula-se a energia cinética do sistema com a partícula n na nova configuração $K(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_n = \mathbf{r}'_n\}) = K'$.
5. Se $K^0 \leq K'$, a nova configuração é aceita.
6. Se $K^0 \geq K'$, a nova configuração é aceita com a probabilidade $P(\mathbf{r}_n^0 \rightarrow \mathbf{r}'_n)$ definida em (3.5).
7. Refaz-se os passos 1 a 6 até que a energia cinética atinja um valor estável. Cada volta dos passos 1 a 6 completa é contada como uma interação de Monte Carlo.
8. Calcula-se as médias do sistema.

B.1 Gás de Rede

Nos modelos estudados no capítulo 3 foi utilizado uma abordagem de gás de rede: discretizou-se o espaço em N_c células de tamanhos iguais e o tamanho de cada partícula é o tamanho de uma célula. Se o potencial de pares tiver a introdução de potencial de partícula rígida, então cada célula pode ser ocupada por somente uma partícula. O limite contínuo é aproximado quando o N_c se torna muito grande.

B.2 Derivação do peso estatístico

No ensemble microcanônico, o volume do espaço de fases $\Gamma(E, V, N)$ é dado por [32, 55, 13]:

$$\Gamma(E, V, N) = \int_{E=H(\{p_i\}, \{q_i\})} d^{dN} p d^{dN} q = C(N) \int \delta[E - H(\{p_i\}, \{q_i\})] \prod_{i=1}^N d^d p_i d^d q_i, \quad (\text{B.1})$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de *Dirac* e $C(N)$ é uma constante que depende somente da quantidade de partículas N e o hamiltoniano H é dado por:

$$H(\{p_i\}, \{q_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + V(\{q_i\}). \quad (\text{B.2})$$

Considerando para a integração a não correlação entre os momenta das N partículas e a simetria radial do hamiltoniano com relação aos momenta:

$$\Gamma(E, V, N) = C''(N) \int \prod_{i=1}^N d^d q_i \left\{ \int_0^\infty dp p^{d-1} \delta \left[E - \frac{p^2}{2} - V(\{q_i\}) \right] \right\}^N, \quad (\text{B.3})$$

com $C''(N)$ sendo outra constante que depende somente de N . Fazendo uma transformação de variáveis do tipo $u = E - V(\{q_i\}) - \frac{p^2}{2}$:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int \prod_{i=1}^N d^d q_i \left\{ \int_{-\infty}^{E-V(\{q_i\})} du [E - V(\{q_i\}) - u]^{\frac{d}{2}-1} \delta(u) \right\}^N, \quad (\text{B.4})$$

e, finalmente

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int [E - V(\{q_i\})]^{\frac{dN}{2}-1} \Theta[E - V(\{q_i\})] \prod_{i=1}^N d^d q_i, \quad (\text{B.5})$$

em que $\Theta(x)$ é a função degrau unitário de *Heaviside*.

Teorema De *Jeans*

O teorema de *Jeans* afirma que [9]:

Teorema 1. *Qualquer estado estacionário solução da equação de Vlasov depende das coordenadas do espaço de fases somente em função das integrais de movimento do potencial e qualquer função de distribuição que dependa somente das integrais de movimento resultam em uma solução estacionária para a equação de Vlasov*

Demonstração. Supunhamos que f seja uma solução estacionária de *Vlasov* para um dado potencial, assim:

$$\frac{df}{dt} = 0, \quad (\text{C.1})$$

e que seja o conjunto $\{I_k(\mathbf{p}, \mathbf{q})\}$ o conjunto das n integrais de movimento do potencial em questão, tal que $\left\{\frac{dI_k}{dt}\right\} = \{0\}$. Logo:

$$\frac{d}{dt} f [I_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}), I_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}), I_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \dots I_n(\mathbf{p}, \mathbf{q})] = \sum_{k=1}^n \frac{\partial f}{\partial I_k} \frac{dI_k}{dt} = 0 \quad (\text{C.2})$$

da mesma forma, qualquer função de distribuição g que seja dependente de m integrais de movimento, com $m \leq n$, será uma solução estacionária de *Vlasov*:

$$\frac{d}{dt} g [I_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}), I_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}), I_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \dots I_m(\mathbf{p}, \mathbf{q})] = \sum_{k=1}^m \frac{\partial g}{\partial I_k} \frac{dI_k}{dt} = 0 \quad (\text{C.3})$$

□

Supersólidos

A questão sobre a existência e a possível observação do fenômeno da superfluidez em estruturas cristalinas tem sido objeto de um intenso debate científico por décadas [74, 37, 75, 38]. Originalmente conjecturado de maneira teórica por *Andreev e Lifshitz* [37] e *Legget* [38], este fenômeno, chamado supersolidez, é manifesto por meio de uma ordem cristalina de longo alcance - LRCO, do inglês *long range crystalline order*- e pelo momento de inércia não-clássico, ou momento de inércia faltante - NCRI, do inglês *non-classical rotation inertia*, i. e., a falta de uma fração do momento de inércia de uma amostra sólida em um experimento de oscilador torcional preenchido com uma amostra na fase sólida [38]. Contudo, esta nova fase não seria uma coexistência entre as fases superfluidas e sólidas, mas uma única fase onde coexistem as duas ordens - LRCO e NCRI.

Uma queda abrupta no período ressonante de um experimento de oscilador torcional preenchido com hélio ^4He sólido ao diminuir a temperatura abaixo de uma temperatura crítica que poderia caracterizar um indício de uma fase supersólida foi detectado primeiramente por *Chan e Kim* [83] e posteriormente por diferentes grupos experimentais utilizando diferentes geometrias e condições [79, 80, 81, 82]. Contudo, a ausência de uma explicação teórica consistente que pudesse explicar esses resultados experimentais [84, 85, 86] e a realização de alguns experimentos mostrando que o comportamento supersólido no ^4He era controverso e não uma propriedade universal deste elemento [79, 87, 88] levou alguns pesquisadores a atribuírem aqueles resultados a efeitos de elasticidade do ^4He [89, 90], pois o hélio sólido é um material elástico e a elasticidade também é dependente da temperatura. Para solucionar tal conflito, o mesmo pesquisador que relatou a queda abrupta no período ressonante refez, em 2012, o experimento do oscilador torcional eliminando os efeitos elásticos do ^4He [91] e não obteve o aumento da frequência de oscilação, confirmando a hipótese da elasticidade.

Visto que o ^4He não suporta uma observação clara e direta da fase supersólida [85] e que simulações de Monte Carlo de integral de caminho mostram que cristais ideais não podem passar por condensação de *Bose-Einstein* [92, 93], recentemente, a atenção tem se virado para o campo dos átomos ultra-resfriados [86]. Este campo não somente permite um controle experimental maior e mais preciso, mas também permite criar potenciais inter-partícula artificiais, que não existem na matéria condensada comum [54, 86, 77, 94]. Isto levanta as seguintes perguntas teóricas: existe algum potencial interpartícula que possa levar a uma fase supersólida? e qual tipo de potencial seria? [77]. Foi proposto [76], baseado num tratamento de campo médio, que excitações de rónons podem ser realizadas em um condensado de *Bose-Einstein* de átomos interagindo por um potencial efetivo de longo alcance regularizado a curtas distâncias. Neste contexto, *Cinti et al.* [77] propuseram um potencial de pares entre dipolos elétricos num regime quântico com um potencial de partículas *softcore* a curtas distâncias. No mesmo contexto, *Han*

et al. [78] também propuseram um potencial entre pares de dipolos magnéticos num regime quântico, mas com partículas rígidas e com uma interação anisotrópica - atrativa em uma direção e repulsiva na outra. Um ponto em comum entre estes potenciais propostos é que se encaixam na definição de interações de longo alcance.

Tentativas de descrever o fenômeno da supersolidez em uma abordagem hidrodinâmica utilizando teoria clássica de campos e em um contexto da teoria fenomenológica de *Ginzburg-Landau* também foram feitos [92, 95].

Em um primeiro momento pode ser contraditório a coexistência de uma alta localização das partículas em um sólido e a alta deslocalização das partículas em um superfluido. Contudo, algumas explicações teóricas têm sido propostas. A primeira, proposta por *Andreev, Lifschitz e Chester* [37, 75], é baseada nos defeitos pontuais de um cristal, que são termicamente ativados, mas que podem estar presentes mesmo em estados fundamentais de diversos sistemas. Estes defeitos, chamados de *zero-point defects* ou defeitos de temperatura zero, seriam deslocalizados, teriam uma alta mobilidade e seriam termicamente ativados, não sendo criados adicionando ou retirando partículas da rede. Um gás de tais defeitos poderia entrar em uma condensação de *Bose-Einstein* e se tornar superfluido a baixas temperaturas [85].

Outro cenário proposto para a explicação da aparente contradição é de que as partículas constituintes da rede cristalina são localizadas, mas também são deslocalizadas. Isto porque a função de onda das partículas do cristal tem seu estado mais provável no centro do sítio da rede cristalina, mas ao contrário de um cristal normal, a função de onda não se anula completamente entre os sítios da rede, isto implica que as partículas podem tunelar entre os sítios da rede [85, 77, 86, 96] com uma probabilidade muito baixa como mostra a figura D.1, que foi obtida na referência [96]. A baixas temperaturas, as partículas que tunelam pelos sítios da rede passam por uma condensação e se tornando superfluidas, gerando um fluxo coerente de partículas pela rede, e obtendo um perfil de densidade próximo a um cluster do sítio da rede como obtido por *Saccani et al.* [86] conforme mostra a figura D.2. Neste contexto, *Cinti et al.* utilizando simulações de Monte Carlo quântico de integral de caminho de um potencial dipolar com partículas penetráveis obteve uma fase supersólida com uma rede cristalina de aglomerado de partículas a qual foi chamada de *Droplet-Crystal* [77]. O resultado obtido por *Cinti et al.* é mostrado na figura D.3.

Mesmo com muito esforço por parte da comunidade científica, o debate sobre a existência e sobre uma possível observação da fase supersólida não tem obtido um consenso sobre os mecanismos que poderiam gerar o fluxo coerente na estrutura cristalina, ou sobre o tipo de potencial que poderia criar uma fase supersólida a baixas temperaturas.

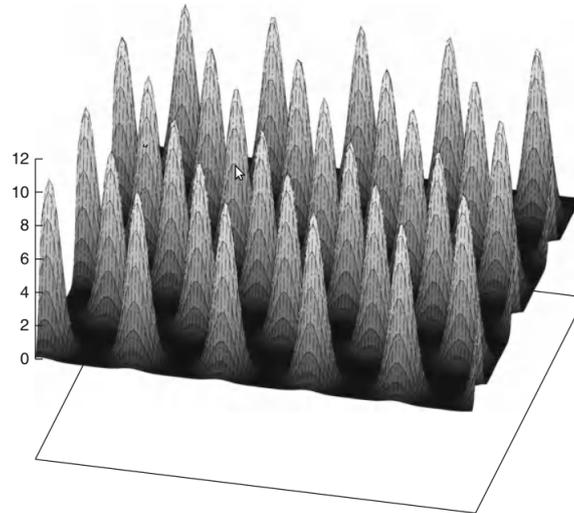


Figura D.1 A função de onda num supersólido não se anula completamente entre os sítios da rede cristalina. Figura obtida na referência [96]

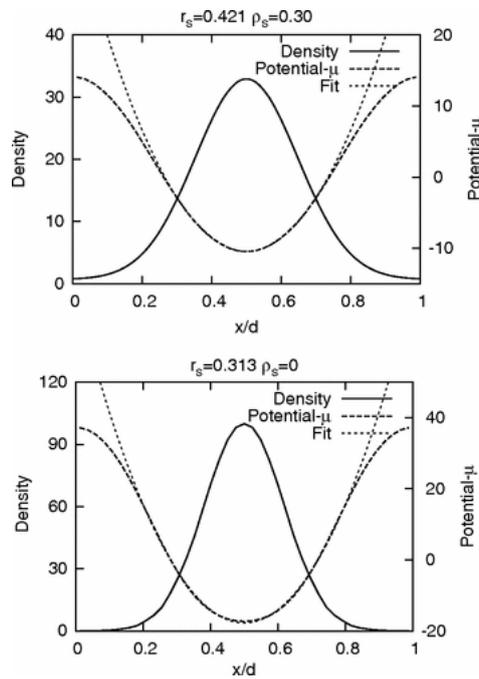


Figura D.2 O painel acima mostra o perfil de densidade de um supersólido, a densidade não se anula longe do centro core central, o que mostra o fluxo de partículas gerado pelo tunelamento entre os sítios da rede e a consequente deslocalização das partículas. O painel abaixo mostra o perfil de densidade de um sólido comum para comparação, a densidade se anula para valores afastados do core central do sítio, mostrando a alta localização das partículas no sólido comum. Figura obtida na referência [86]

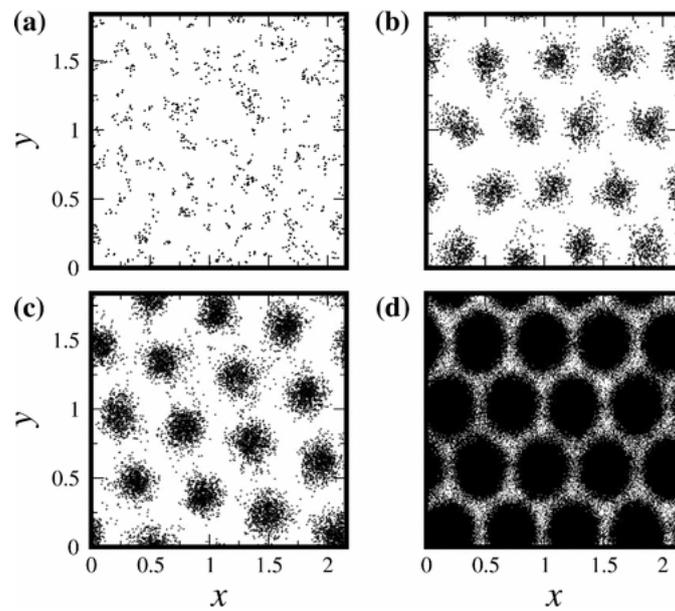


Figura D.3 Configurações instantâneas de uma simulação de Monte Carlo de um sistema de bósons interagindo por um potencial dipolar regularizado a curtas distâncias. Cada um das configurações instantâneas foram obtidas a uma temperatura diferente, decrescendo de(a) até (d) a uma taxa de uma ordem de magnitude do anterior. O painel (a) mostra configuração de um superfluido, o painel (b) uma configuração de um cristal sólido de aglomerados, o painel (c) uma configuração de um supersólido com baixa fração de partículas supersólidas e em (d) uma configuração de um supersólido com alta fração de partículas supersólidas. A figura obtida na referência [96]

Derivação da expressão das densidades

As densidades de partícula e energia são definidas como:

$$\begin{aligned}\rho_N(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] \\ \rho_U(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})],\end{aligned}\quad (\text{E.1})$$

onde ε é dado pela equação (6.10) e tem a seguinte forma:

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2} + V(x, y), \quad (\text{E.2})$$

com $V(x, y) = -1 - P_{\pm} \cos(x) \cos(y)$. Substituindo a expressão da equação (E.2) em (E.1):

$$\begin{aligned}\rho_N(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})], \\ \rho_U(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} \left(\frac{p^2}{2} + V(x, y) \right) f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})],\end{aligned}\quad (\text{E.3})$$

$$\begin{aligned}\rho_N(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})], \\ \rho_U(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{p} p^2 f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] + V(x, y) \int d\mathbf{p} f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})];\end{aligned}\quad (\text{E.4})$$

ou reescrevendo a dependência de $\rho_U(\mathbf{r})$ com relação a $\rho_N(\mathbf{r})$,

$$\begin{aligned}\rho_N(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{p} f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] \\ \rho_U(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{p} p^2 f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] + V(x, y) \rho_N(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (\text{E.5})$$

Sendo $f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})]$ escrita como a soma de três termos:

$$f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] = \eta \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) + \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) + \chi \Theta(\varepsilon_h - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_s), \quad (\text{E.6})$$

vamos aqui calcular as duas integrais de (E.5) separadamente para cada um dos três termos e tomando a simetria polar das integrais:

$$\int d\mathbf{p} \eta \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = 2\pi\eta \int_0^\infty dp p \Theta\left(K_F - \frac{p^2}{2}\right), \quad (\text{E.7})$$

onde $K_F = \varepsilon_F - V(x, y)$, é a energia cinética por partícula do core. Via uma transformação de coordenadas do tipo $u = K_F - \frac{p^2}{2}$:

$$\int d\mathbf{p} \eta \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = 2\pi\eta \int_{-\infty}^{K_F} du \Theta(u) = 2\pi\eta [\varepsilon_F - V(x, y)] \Theta[\varepsilon_F - V(x, y)], \quad (\text{E.8})$$

Para os outros dois termos a integração é feita de maneira análoga:

$$\int d\mathbf{p} \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \int_0^\infty dp p \Theta\left(K_s - \frac{p^2}{2}\right) \Theta\left(\frac{p^2}{2} - K_F\right), \quad (\text{E.9})$$

Aqui $K_s = \varepsilon_s - V(x, y)$. Utilizando a mesma transformação de variáveis na integral anterior com $u = K_s - \frac{p^2}{2}$:

$$\int d\mathbf{p} \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \int_{-\infty}^{K_s} du \Theta(u) \Theta(K_s - K_F - u), \quad (\text{E.10})$$

integrando a integral ao lado direito por partes:

$$\int d\mathbf{p} \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \left[K_s \Theta(K_s) \Theta(-K_F) + \int_{-\infty}^{K_s} du u \Theta(u) \delta(K_s - K_F - u) \right], \quad (\text{E.11})$$

$$\int d\mathbf{p} \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi [K_s \Theta(K_s) \Theta(-K_F) + (K_s - K_F) \Theta(K_s - K_F) \Theta(K_F)], \quad (\text{E.12})$$

como $K_s - K_F = \varepsilon_s - \varepsilon_F > 0$ então pode-se simplificar a expressão anterior como:

$$\int d\mathbf{p} \xi \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi [(\varepsilon_s - V(x, y)) \Theta(\varepsilon_s - V(x, y)) \Theta(V(x, y) - \varepsilon_F) + (\varepsilon_s - \varepsilon_F) \Theta(\varepsilon_F - V(x, y))]. \quad (\text{E.13})$$

De maneira análoga a integral do terceiro termo teria como resultado:

$$\int d\mathbf{p} \chi \Theta(\varepsilon_h - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_s) = 2\pi\chi [(\varepsilon_h - V(x, y)) \Theta(\varepsilon_h - V(x, y)) \Theta(V(x, y) - \varepsilon_s) + (\varepsilon_h - \varepsilon_s) \Theta(\varepsilon_s - V(x, y))]. \quad (\text{E.14})$$

Somando os resultados de (E.8), (E.13) e (E.14):

$$\begin{aligned} \frac{\rho_N(\mathbf{r})}{2\pi} &= [\eta(\varepsilon_F - V(x,y)) + \xi(\varepsilon_s - \varepsilon_F)] \Theta(\varepsilon_F - V(x,y)) \\ &+ [\xi(\varepsilon_s - V(x,y)) + \chi(\varepsilon_h - \varepsilon_s)] \Theta(\varepsilon_s - V(x,y))\Theta(V(x,y) - \varepsilon_F) \\ &+ \chi(\varepsilon_h - V(x,y)) \Theta(\varepsilon_h - V(x,y))\Theta(V(x,y) - \varepsilon_s). \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

Para o cálculo da densidade de energia, será utilizado o mesmo procedimento, separando a integral em três partes e tomando a simetria polar. A primeira será a integral do core:

$$\int d\mathbf{p} \eta p^2 \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = 2\pi\eta \int_0^\infty dp p^3 \Theta\left(K_F - \frac{p^2}{2}\right), \quad (\text{E.16})$$

utilizando a mesma transformação de variáveis da forma $u = K_s - \frac{p^2}{2}$ na integral

$$\int d\mathbf{p} \eta p^2 \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = 2\pi\eta \int_{-\infty}^{K_F} dp 2(K_s - u) \Theta(u), \quad (\text{E.17})$$

$$\int d\mathbf{p} \eta p^2 \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = 2\pi\eta (K_F)^2 \Theta(K_F) = 2\pi\eta (\varepsilon_F - V(x,y))^2 \Theta(\varepsilon_F - V(x,y)). \quad (\text{E.18})$$

A segunda integral é:

$$\int d\mathbf{p} \xi p^2 \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon)\Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \int_0^\infty dp p^3 \Theta\left(K_s - \frac{p^2}{2}\right) \Theta\left(\frac{p^2}{2} - K_F\right), \quad (\text{E.19})$$

$$\int d\mathbf{p} \xi p^2 \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon)\Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \int_{-\infty}^{K_s} dp 2(K_s - u) \Theta(u)\Theta(K_s - K_F - u), \quad (\text{E.20})$$

fazendo integração por partes, a integral à direita da equação se reduz a:

$$\int d\mathbf{p} \xi p^2 \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon)\Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \left[K_s^2 \Theta(K_s)\Theta(-K_F) + \int_{-\infty}^{K_s} du (2K_s - u)\Theta(u)\delta(K_s - K_F - u) \right], \quad (\text{E.21})$$

$$\int d\mathbf{p} \xi p^2 \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon)\Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi [K_s^2 \Theta(K_s)\Theta(-K_F) + \Theta(K_F)(K_s + K_F)(K_s - K_F)]. \quad (\text{E.22})$$

Substituindo os valores de K_F e K_S :

$$\int d\mathbf{p} \xi p^2 \Theta(\varepsilon_s - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_F) = 2\pi\xi \{ [\varepsilon_s - V(x,y)]^2 \Theta[\varepsilon_s - V(x,y)] \Theta[V(x,y) - \varepsilon_F] + \Theta[\varepsilon_F - V(x,y)] [\varepsilon_s + \varepsilon_F - 2V(x,y)] (\varepsilon_s - \varepsilon_F) \}. \quad (\text{E.23})$$

Analogamente, para o terceiro termo tem-se que:

$$\int d\mathbf{p} \chi p^2 \Theta(\varepsilon_h - \varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_s) = 2\pi\chi \{ [\varepsilon_h - V(x,y)]^2 \Theta[\varepsilon_h - V(x,y)] \Theta[V(x,y) - \varepsilon_s] + \Theta[\varepsilon_s - V(x,y)] [\varepsilon_h + \varepsilon_s - 2V(x,y)] (\varepsilon_h - \varepsilon_s) \}. \quad (\text{E.24})$$

Somando os três termos expressos pelas equações (E.18), (E.23) e (E.24):

$$\frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{p} p^2 f[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] = I_1 + I_2 + I_3,$$

onde

$$\begin{aligned} I_1 &= \Theta(\varepsilon_F - V(x,y)) \{ \eta [\varepsilon_F - V(x,y)]^2 + \xi [(\varepsilon_s^2 - \varepsilon_F^2) - V(x,y)(\varepsilon_s - \varepsilon_F)] \} \\ I_2 &= \Theta(\varepsilon_s - V(x,y)) \Theta(V(x,y) - \varepsilon_F) \{ \xi [\varepsilon_s - V(x,y)]^2 + \chi [(\varepsilon_h^2 - \varepsilon_s^2) - V(x,y)(\varepsilon_h - \varepsilon_s)] \} \\ I_3 &= \Theta(\varepsilon_h - V(x,y)) \Theta(V(x,y) - \varepsilon_s) \chi [\varepsilon_h - V(x,y)]^2. \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

O outro termo para a densidade de energia em (E.5) é dado pela equação (E.15)

$$V(x,y) \left(\frac{\rho_N(\mathbf{r})}{\pi} \right) = T_1 + T_2 + T_3 \quad (\text{E.26})$$

$$\begin{aligned} T_1 &= [\eta(\varepsilon_F - V(x,y)) + \xi(\varepsilon_s - \varepsilon_F)] V(x,y) \Theta(\varepsilon_F - V(x,y)) \\ T_2 &= [\xi(\varepsilon_s - V(x,y)) + \chi(\varepsilon_h - \varepsilon_s)] V(x,y) \Theta(\varepsilon_s - V(x,y)) \Theta(V(x,y) - \varepsilon_F) \\ T_3 &= +\chi(\varepsilon_h - V(x,y)) V(x,y) \Theta(\varepsilon_h - V(x,y)) \Theta(V(x,y) - \varepsilon_s). \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

Somando $I_1 + I_2 + I_3 + T_1 + T_2 + T_3$ obtém-se a densidade de energia expressa por:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_U(\mathbf{r})}{\pi} &= [\eta(\varepsilon_F^2 - (V(x,y))^2) + \xi(\varepsilon_s^2 - \varepsilon_F^2)] \Theta(\varepsilon_F - V(x,y)) \\ &+ [\xi(\varepsilon_s^2 - (V(x,y))^2) + \chi(\varepsilon_h^2 - \varepsilon_s^2)] \Theta(\varepsilon_s - V(x,y)) \Theta(V(x,y) - \varepsilon_F) \\ &+ \chi(\varepsilon_h^2 - (V(x,y))^2) \Theta(\varepsilon_h - V(x,y)) \Theta(V(x,y) - \varepsilon_s). \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

Referências Bibliográficas

- [1] Alessandro Campa, Thierry Dauxois, and Stefano Ruffo. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Physics Reports*, 480:57 – 159, 2009.
- [2] T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, and M. Wilkens. *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions*. Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [3] R Bachelard, T Manos, P de Buyl, F Staniscia, F S Cataliotti, G De Ninno, D Fanelli, and N Piovella. Experimental perspectives for systems based on long-range interactions. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(06):P06009, 2010.
- [4] A. Campa, T. Dauxois, D. Fanelli, and S. Ruffo. *Physics of Long-Range Interacting Systems*. Oxford University Press, 2014.
- [5] T. Padmanabhan. Statistical mechanics of gravitating systems. *Physics Reports*, 188(5):285 – 362, 1990.
- [6] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois, and S. Ruffo. Thermodynamics of the self-gravitating ring model. *Phys. Rev. E*, 71:056111, May 2005.
- [7] D. Lynden-Bell and R. Wood. The gravo-thermal catastrophe in isothermal spheres and the onset of red-giant structure for stellar systems. *MNRAS*, 138:495, 1968.
- [8] S.J. Aarseth. *Gravitational N-Body Simulations: Tools and Algorithms*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, 2003.
- [9] S. Tremaine J. Binney. *Galactic Dynamics*. Princetean University Press, Princeton, 2nd edition edition, 2008.
- [10] D. Heggie and P. Hut. *The Gravitational Million-Body Problem: A Multidisciplinary Approach to Star Cluster Dynamics*. Cambridge University Press, 2003.
- [11] V. Antonov. Most probable phase distribution in spherical star systems and conditions for its existence. *Vest. Leningrad Univ.*, 7:135, 1962. Tradução IAU Symposium 113, 525 (1985).

- [12] E. Lega, C. Froeschlé, and M. Guzzo. Diffusion in hamiltonian quasi-integrable systems. In Daniel Benest, Claude Froeschle, and Elena Lega, editors, *Topics in Gravitational Dynamics*, volume 729 of *Lecture Notes in Physics*, pages 29–65. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [13] J.M. Maciel, M.-C. Firpo, and M.A. Amato. Some statistical equilibrium mechanics and stability properties of a class of two-dimensional hamiltonian mean-field models. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 424:34 – 43, 2015.
- [14] D. Lynden-Bell. Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems. *MNRAS*, 136:101, 1967.
- [15] S. Chandrasekhar. *Principles of stellar dynamics*. Astrophysical monographs. Dover Publications, 1942.
- [16] M. Antoni and S. Ruffo. Clustering and relaxation in hamiltonian long-range dynamics. *Phys. Rev. E*, 52:2361–2374, Sep 1995.
- [17] M. Antoni and A. Torcini. Anomalous diffusion as a signature of a collapsing phase in two-dimensional self-gravitating systems. *Phys. Rev. E*, 57:R6233–R6236, Jun 1998.
- [18] Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa, and K. Maeda. Origin of scaling structure and non-gaussian velocity distribution in a self-gravitating ring model. *Phys. Rev. E*, 64:056133, Oct 2001.
- [19] Tadas K. Nakamura. Statistical mechanics of a collisionless system based on the maximum entropy principle. *The Astrophysical Journal*, 531:739, 2000.
- [20] F. H. Shu. On the statistical mechanics of violent relaxation. *The Astrophysical Journal*, 225:83–94, October 1978.
- [21] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, and A. Figueiredo. Nonequilibrium phase transitions and violent relaxation in the hamiltonian mean-field model. *Phys. Rev. E*, 85:062103, Jun 2012.
- [22] Toshinobu Yamashiro, Naoteru Gouda, and Masa-aki Sakagami. Origin of core-halo structure in one-dimensional self-gravitating system. *Progress of Theoretical Physics*, 88:269–282, 1992.
- [23] A. Torcini and M. Antoni. Equilibrium and dynamical properties of two-dimensional N -body systems with long-range attractive interactions. *Phys. Rev. E*, 59:2746–2763, Mar 1999.
- [24] H.L. Wright, B.N. Miller, and W.E. Stein. The relaxation time of a one-dimensional self-gravitating system. *Astrophysics and Space Science*, 84:421–429, 1982.
- [25] W Ettoumi and M-C Firpo. Linear theory and violent relaxation in long-range systems: a test case. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44:175002, 2011.

- [26] W. Ettoumi and M.-C. Firpo. Stochastic treatment of finite- n effects in mean-field systems and its application to the lifetimes of coherent structures. *Phys. Rev. E*, 84:030103, Sep 2011.
- [27] Charles J. Reidl and Bruce N. Miller. Population dependence of early relaxation. *Phys. Rev. E*, 51:884–888, Feb 1995.
- [28] T. M. Rocha Filho, A. E. Santana, M. A. Amato, and A. Figueiredo. Scaling of the dynamics of homogeneous states of one-dimensional long-range interacting systems. *Phys. Rev. E*, 90:032133, Sep 2014.
- [29] J.W. Gibbs. *The collected works of J. Willard Gibbs*. Number v. 2 in The Collected Works of J. Willard Gibbs. Yale University Press, 1928.
- [30] Renato Pakter and Yan Levin. Core-halo distribution in the hamiltonian mean-field model. *Phys. Rev. Lett.*, 106:200603, May 2011.
- [31] H. B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley and Sons, New York, 2nd edition edition, September 1985.
- [32] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 2nd edition edition, 1987.
- [33] Renato Pakter and Yan Levin. Topology of collisionless relaxation. *Phys. Rev. Lett.*, 110:140601, Apr 2013.
- [34] Yan Levin, Renato Pakter, and Tarcisio N. Teles. Collisionless relaxation in non-neutral plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 100:040604, Jan 2008.
- [35] T. M. Rocha Filho. Non-equilibrium Entropy and Dynamics in a System with Long-Range Interactions. *ArXiv e-prints*, December 2014.
- [36] I. Arad and D. Lynden-Bell. Inconsistency in theories of violent relaxation. *mnras*, 361:385–395, August 2005.
- [37] I. M. Lifshitz A. F. Andreev. Quantum theory of defects in crystals. *Soviet Physics JETP*, 29(6):1107, December 1969.
- [38] A. J. Leggett. Can a solid be "superfluid"? *Phys. Rev. Lett.*, 25:1543–1546, Nov 1970.
- [39] J. L. Safko H. Goldstein, C. P. Poole Jr. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, 2nd edition edition, 1980.
- [40] D. Lynden-Bell. Negative specific heat in astronomy, physics and chemistry. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 263(1):293 – 304, 1999.
- [41] D. H. Gross. *Microcanonical Thermodynamics: Phase Transitions in 'Small' Systems*. World Scientific Lecture Notes in Physics. World Scientific Pub. Co. Inc., Cingapura, January 2001.

- [42] R.L. Liboff. *Kinetic Theory - Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions*. Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer-Verlag New York, New York, 2003.
- [43] R. Balescu. *Statistical Dynamics: Matter Out of Equilibrium*. Imperial College Press, 1997.
- [44] A. A. Vlasov. On the kinetic theory of an assembly of particles with collective interaction. *Journal of Physics USSR*, 9(1):25–40, 1945.
- [45] S. Chandrasekhar. The statistics of the gravitational field arising from a random distribution of stars.iv. the stochastic variation of the force acting on a star. *Astrophysical Journal*, 99:47, 1944.
- [46] P.-H. Chavanis. Kinetic equations for systems with long-range interactions: a unified description. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(05):P05019, 2010.
- [47] C. R. Lourenço and T. M. Rocha Filho. Scaling of the dynamics of a homogeneous one-dimensional anisotropic classical Heisenberg model with long-range interactions. *ArXiv e-prints*, cond-mat.stat-mech(1412.7886), December 2014.
- [48] R. Lustig. Microcanonical monte carlo simulation of thermodynamic properties. *J. Chem. Phys.*, 109(20):8816, 1998.
- [49] D.P. Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2009.
- [50] Nicholas Metropolis and S. Ulam. The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341, 1949.
- [51] E.J. Newman and G.T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, 1999.
- [52] M.H. Kalos and P.A. Whitlock. *Monte Carlo Methods, Volume 1: Basics*. Monte Carlo Methods. Wiley, 2008.
- [53] M. Creutz. Microcanonical monte carlo simulation. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1411–1414, May 1983.
- [54] D. O’Dell, S. Giovanazzi, G. Kurizki, and V. M. Akulin. Bose-einstein condensates with $1/r$ interatomic attraction: Electromagnetically induced “gravity”. *Phys. Rev. Lett.*, 84:5687–5690, Jun 2000.
- [55] John R. Ray. Microcanonical ensemble monte carlo method. *Phys. Rev. A*, 44:4061–4064, 1991.
- [56] C. Scherer. *Métodos Computacionais da Física*. Editora Livraria da Física, 2005.

- [57] Ch. Schlier and A. Seiter. High-order symplectic integration: an assessment. *Computer Physics Communications*, 130:176 – 189, 2000.
- [58] H. Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150:262 – 268, 1990.
- [59] T. M. Rocha Filho. Molecular dynamics for long-range interacting systems on graphic processing units. *Computer Physics Communications*, 185:1364 – 1369, 2014.
- [60] M. R. Feix F. Hohl. One-dimensional model of stellar system evolution, using computer to calculate minimum energy configuration. *Astrophys. J.*, 147:1164–1181, 1967.
- [61] T M Rocha Filho, M A Amato, and A Figueiredo. A novel approach to the determination of equilibrium properties of classical hamiltonian systems with long-range interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(16):165001, 2009.
- [62] A. Pluchino, G. Andronico, and A. Rapisarda. A monte carlo investigation of the hamiltonian mean field model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 349:143 – 154, 2005.
- [63] A. Pluchino, A. Rapisarda, and C. Tsallis. A closer look at the indications of q-generalized central limit theorem behavior in quasi-stationary states of the {HMF} model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 387:3121 – 3128, 2008.
- [64] W. Ettoumi and M.-C. Firpo. Action diffusion and lifetimes of quasistationary states in the hamiltonian mean-field model. *Phys. Rev. E*, 87:030102, Mar 2013.
- [65] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, B. A. Mello, and A. Figueiredo. Phase transitions in simplified models with long-range interactions. *Phys. Rev. E*, 84:041121, Oct 2011.
- [66] Cesare Nardini and Lapo Casetti. Energy landscape and phase transitions in the self-gravitating ring model. *Phys. Rev. E*, 80:060103, Dec 2009.
- [67] Marco Pettini. *Geometry and Topology in Hamiltonian Dynamics and Statistical Mechanics*. Number 33 in Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer-Verlag New York, 2007.
- [68] Hiroko Koyama and Tetsuro Konishi. Emergence of power-law correlation in 1-dimensional self-gravitating system. *Physics Letters A*, 279:226 – 230, 2001.
- [69] Yoshiyuki Y. Yamaguchi. One-dimensional self-gravitating sheet model and lynden-bell statistics. *Phys. Rev. E*, 78:041114, Oct 2008.
- [70] Michael Joyce and Tirawut Worrakitpoonpon. Quasistationary states in the self-gravitating sheet model. *Phys. Rev. E*, 84:011139, Jul 2011.
- [71] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid state physics*. Science: Physics. Saunders College, 1976.

- [72] Jeffrey Goldstone, Abdus Salam, and Steven Weinberg. Broken symmetries. *Phys. Rev.*, 127:965–970, Aug 1962.
- [73] W. P. Ferreira D. L. Camarão. *Propriedades difusivas de sistemas clássicos confinados*. Universidade Federal do Ceará, 2011.
- [74] Eugene P. Gross. Unified theory of interacting bosons. *Phys. Rev.*, 106:161–162, Apr 1957.
- [75] G. V. Chester. Speculations on bose-einstein condensation and quantum crystals. *Phys. Rev. A*, 2:256–258, Jul 1970.
- [76] N. Henkel, R. Nath, and T. Pohl. Three-dimensional roton excitations and supersolid formation in rydberg-excited bose-einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 104:195302, May 2010.
- [77] F. Cinti, P. Jain, M. Boninsegni, A. Micheli, P. Zoller, and G. Pupillo. Supersolid droplet crystal in a dipole-blockaded gas. *Phys. Rev. Lett.*, 105:135301, Sep 2010.
- [78] Y.-H. Chan, Y.-J. Han, and L.-M. Duan. Supersolid and charge-density-wave states from anisotropic interaction in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 82:053607, Nov 2010.
- [79] Ann Sophie C. Rittner and John D. Reppy. Observation of classical rotational inertia and nonclassical supersolid signals in solid ^4He below 250 mk. *Phys. Rev. Lett.*, 97:165301, Oct 2006.
- [80] Y. Aoki, J. C. Graves, and H. Kojima. Oscillation frequency dependence of nonclassical rotation inertia of solid ^4He . *Phys. Rev. Lett.*, 99:015301, Jul 2007.
- [81] Andrey Penzev, Yoshinori Yasuta, and Minoru Kubota. Annealing effect for supersolid fraction in 4he . *Journal of Low Temperature Physics*, 148(5-6):677–681, 2007.
- [82] B. Hunt, E. Pratt, V. Gadagkar, M. Yamashita, A. V. Balatsky, and J. C. Davis. Evidence for a superglass state in solid 4he . *Science*, 324(5927):632–636, 2009.
- [83] M. H. W. Chan E. Kim. Probable observation of a supersolid helium phase. *Nature*, 427:225, 2004.
- [84] Sepúlveda, N., Josserand, C., and Rica, S. Superfluid density in a two-dimensional model of supersolid. *Eur. Phys. J. B*, 78(4):439–447, 2010.
- [85] Massimo Boninsegni and Nikolay V. Prokof'ev. *Colloquium* : Supersolids: What and where are they? *Rev. Mod. Phys.*, 84:759–776, May 2012.
- [86] S. Saccani, S. Moroni, and M. Boninsegni. Excitation spectrum of a supersolid. *Phys. Rev. Lett.*, 108:175301, Apr 2012.
- [87] James Day and John Beamish. Pressure-driven flow of solid helium. *Phys. Rev. Lett.*, 96:105304, Mar 2006.

- [88] Ann Sophie C. Rittner and John D. Reppy. Disorder and the supersolid state of solid ^4He . *Phys. Rev. Lett.*, 98:175302, Apr 2007.
- [89] John Beamish James Day. Low-temperature shear modulus changes in solid ^4He and connection to supersolidity. *Nature*, 450:853, 2007.
- [90] Humphrey J. Maris. Effect of elasticity on torsional oscillator experiments probing the possible supersolidity of helium. *Phys. Rev. B*, 86:020502, Jul 2012.
- [91] Duk Y. Kim and Moses H. W. Chan. Absence of supersolidity in solid helium in porous vycor glass. *Phys. Rev. Lett.*, 109:155301, Oct 2012.
- [92] A S Peletminskii. Classical and relativistic dynamics of supersolids: variational principle. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(4):045501, 2009.
- [93] Massimo Boninsegni, Nikolay Prokof'ev, and Boris Svistunov. Superglass phase of ^4He . *Phys. Rev. Lett.*, 96:105301, Mar 2006.
- [94] J. Barré, B. Marcos, and D. Wilkowski. Nonequilibrium phase transition with gravitational-like interaction in a cloud of cold atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 112:133001, Mar 2014.
- [95] Sergio Rica. Phenomenological ginzburg-landau theory for supersolidity. *Phys. Rev. B*, 84:184535, Nov 2011.
- [96] X. Leoncini and M. Leonetti. *From Hamiltonian Chaos to Complex Systems: A Nonlinear Physics Approach*. Nonlinear Systems and Complexity. Springer, 2013.