

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

O Modelo Esférico e a Hipótese Topológica sobre Transições de Fase*

Ana Carolina Ribeiro Teixeira

Dissertação realizada sob orientação do Dr. Daniel Adrián Stariolo e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

Maio - 2004

*Trabalho parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Aos meus avós, o meu começo...

Agradecimentos

Ao Daniel, orientador e amigo, por me ensinar que pesquisar é criar, colaborando e interagindo.

A todos meus professores.

Aos meus avós, Nilo, Cássia, Piquito, Ilga. A candura, o alento e a sabedoria.

À minha mãe, porque ela sempre esteve comigo, por me ensinar que os bons caminhos nem sempre são fáceis.

Ao meu pai, por sempre confiar em meu potencial e pela força incondicional.

À Laura, minha irmã, essa moça surpreendente e corajosa.

Ao Fabiano, pelo carinho e a inspiração.

Resumo

O presente trabalho apresenta a verificação da Hipótese Topológica (HT) sobre o Modelo Esférico ferromagnético. Esta hipótese sugere uma nova abordagem a transições de fase termodinâmicas (TF), apoiada na idéia recentemente proposta de que o mecanismo na origem das transições de fase seja uma quebra de difeomorficidade adequada do espaço de configurações dos sistemas no ponto da transição. Embora se saiba que nem toda transição topológica (TT) esteja ligada a uma TF, foi provado recentemente para uma classe de modelos que TTs são necessárias na presença de transições de fase de primeira e segunda ordem, pelo menos. Da termodinâmica do modelo esférico campo médio, sabe-se que este apresenta uma TF na ausência de campo magnético externo, e que esta é destruída para campo finito. Da evolução da topologia de subvariedades do espaço de configurações, definidas pela (função) energia potencial, resulta que, no caso sem campo externo, ocorre uma TT nestas variedades em uma energia potencial igual à energia potencial (média) crítica da transição de fase. Este resultado corrobora a HT no sentido da necessidade de uma TT em correspondência a uma TF. No entanto, a mudança observada na topologia não é particularmente “grande”, se considerada dentro do critério sugerido por trabalhos anteriores. Do caso com campo externo, resulta que uma TT idêntica à encontrada no caso sem campo persiste. Da termodinâmica do modelo, observa-se, no entanto, que a região de energias potenciais em que a TT ocorre não é acessível ao sistema físico, o que é consistente com a ausência de TF no modelo neste caso. Entretanto, o formalismo topológico sobre o espaço de configurações não se mostrou suficiente na caracterização deste comportamento do sistema, e esta conclusão só é alcançada dado o conhecimento prévio da termodinâmica do modelo. Apresentam-se também resultados parciais da aplicação da HT ao modelo esférico a dimensão finita.

Abstract

In the present work the verification of the Topological Hypothesis (TH) on the ferromagnetic Spherical Model is presented. This hypothesis suggests a new approach to phase transitions (PTs), based on the recently proposed idea that the mechanism at the origin of these phenomena might be a suitable break of diffeomorphicity of the systems configuration spaces at the respective transition points. Although it is known that any topological transition (TT) will in general not be linked to a PT, it was recently proved for a class of models the necessity of occurrence of a TT in the presence of (at least) first and second order PTs. From the thermodynamics of the mean field Spherical Model, we see that it presents a PT in vanishing external magnetic field, and that it is destroyed by the external field. From the topological evolution of suitable submanifolds in configuration space, defined by the potential energy function, results that, in zero external field, a TT occurs in these submanifolds in a value of potential energy which is the same as the critical (mean) potential energy. This result is in accordance with the TH in the extent of the necessity of a TT in correspondence with a PT. However, the observed TT is not particularly "strong", when considered in the criteria suggested by previous related works. From the finite field case, results that a TT identical to the one in the zero field case persists. From the thermodynamics of the model in the presence of a field, however, it is seen that the potential energy range in which this TT happens is not accessible to the physical system, which is still consistent with the absence of a PT in this case. Nevertheless, the formalism of Differential Topology has been proven insufficient in the characterization of this behaviour, and the conclusion above was only reached given the previous knowledge of the model's thermodynamics. Some partial results of the application of the TH to the Spherical Model in finite dimension are also presented here.

Sumário

Resumo	i
Abstract	ii
Introdução	1
1 Transições de Fase Termodinâmicas	5
1.1 Condições de estabilidade/instabilidade termodinâmicas e transições de fase	6
1.2 Transições de primeira ordem	9
1.3 Transições contínuas	12
1.4 Origem de transições de fase: teoria de Yang e Lee	20
2 A Hipótese Topológica	25
2.1 Geometrização da Dinâmica Hamiltoniana	26
2.2 Geometria e Dinâmica Caótica nas Transições de Fase	31
2.2.1 Expoente de Lyapunov	31
2.2.2 Observáveis Geométricos e Transições de Fase: Curvatura	34
2.2.3 Um resultado analítico: modelo XY campo médio	37
2.3 Transições de Fase e Topologia	39
2.3.1 Origem Topológica das Flutuações de Curvatura Singulares	39
2.3.2 Transições Topológicas e Termodinâmicas	52
2.4 A Hipótese Topológica	55

2.4.1	Confirmação da Hipótese Topológica em modelos físicos	57
2.4.2	Teorema sobre uma relação de necessidade	65
2.5	Questões abertas e Perspectivas	66
3	O Modelo Esférico e a Hipótese Topológica	70
3.1	Definição do modelo	70
3.2	Modelo esférico campo médio	74
3.2.1	Termodinâmica	75
3.2.2	Verificação da Hipótese Topológica sobre o modelo	80
3.3	Modelo Esférico a dimensão finita	90
3.3.1	Termodinâmica	90
3.3.2	Topologia	95
	Discussão e Conclusões	101
	Apêndice: Resumo de Teoria de Morse	104
	Referências Bibliográficas	111

Introdução

Transições de fase, do ponto de vista fenomenológico, são caracterizadas por mudanças nas propriedades físicas de sistemas.

O primeiro tipo de transições estudado foram as transições de fase termodinâmicas (TFs), isto é, aquelas em sistemas macroscópicos em equilíbrio (térmico e mecânico). Tais fenômenos podem ser caracterizados, do ponto de vista matemático, pela perda de analiticidade de funções termodinâmicas - energia livre de Gibbs, por exemplo - com respeito à temperatura, ou outro parâmetro intensivo, que se institui devido à violação, pela equação de estado do sistema, dos critérios de estabilidade termodinâmica, no ponto da transição - este definido pelos parâmetros intensivos.

O problema, há algumas décadas, consistia em explicar como funções termodinâmicas - macroscópicas -, resultantes de uma interação microscópica *única* poderiam apresentar singularidades em certos valores dos parâmetros intensivos, separando fases com comportamentos termodinâmicos distintos. O objetivo era a formulação de uma teoria consistente de equações de estado. A primeira teoria totalmente bem sucedida foi formulada por C. N. Yang e T. D. Lee [1], mostrando que a não-analiticidade das referidas funções na transição é acarretada pela ocorrência de raízes reais positivas da função de partição grã-canônica (no espaço de fugacidade), no limite de volume¹ infinito.

Desde então, outras abordagens a TFs foram elaboradas, como, por exemplo, por Dobrushin, Lanford e Ruelle, a partir do conceito de medida de Gibbs, em função da ocorrência ou não de uma medida única no sistema².

¹ou, equivalentemente, número máximo de graus de liberdade

²D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, Encyclopaedia of Mathematics and its Applications, (Addison-Wesley, New York, 1978).

Estas teorias, porém, se aplicam somente a sistemas infinitos (macroscópicos) e em equilíbrio termodinâmico. No entanto, transições dinâmicas (como, por exemplo, as vi-trosas), em sistemas fora do equilíbrio, caracterizadas por divergências em quantidades dinâmicas dos mesmos, começaram, a partir da década de 60, a ser amplamente estuda-das, e assim, melhor compreendidas e caracterizadas. De outra parte, nos últimos anos, a pesquisa experimental em sistemas finitos, ou não macroscópicos, - mesoscópicos, na-noscópicos ou ainda em *clusters* nucleares, atômicos e moleculares - forneceu evidências de transições de fase também nestes sistemas. Portanto, no intuito de uma eventual uni-ficação da fenomenologia de transições de fase, o caminho natural seria uma abordagem na escala dos mínimos componentes relevantes à descrição de um dado sistema, na busca por assinaturas das transições no âmbito “microscópico”. Primeiro, porque o processo de mediação na mecânica estatística, sob a suposição fundamental de ergodicidade da dinâ-mica microscópica dos sistemas, suprime informações na evolução e nas características dinâmicas destes. Assim, o estabelecimento de uma relação entre dinâmica e comporta-mento termodinâmico se pode dar somente em um nível “anterior” a médias e à definição de ensembles. Depois, porque, para sistemas finitos, pouco ou nenhum sentido têm as médias e os observáveis macroscópicos.

Outrossim, uma descrição das TFs em um nível mais básico poderia ser elucidativa no respeito à distinção entre transições de primeira ordem e contínuas, ao nível da inte-ração fundamental. Poderia contribuir a uma melhor compreensão destes fenômenos, e, em particular, à elaboração de uma teoria de análise quantitativa de transições de primeira ordem³, a exemplo da teoria do grupo de renormalização em fenômenos críticos, para transições contínuas.

Motivado pelo panorama acima exposto, o presente trabalho tem como tema central a chamada Hipótese Topológica (HT). Esta hipótese sugere uma nova abordagem a transi-ções de fase termodinâmicas, apoiada na idéia recentemente proposta de que o mecanismo na origem destas seja uma quebra de difeomorficidade adequada de subvariedades do es-

³Vale notar que a teoria de Ginzburg-Landau pode ser aplicada tanto a transições contínuas quanto de primeira ordem; no entanto, além da aproximação de campo médio, poucos resultados analíticos podem ser obtidos deste formalismo.

paço de configurações dos sistemas no ponto da transição. Embora se saiba que nem toda transformação descontínua ou não analítica (*não-difeomórfica*) na topologia está ligada a uma TF, foi provado recentemente para uma classe de modelos que transições topológicas (TTs) são necessárias na presença de TFs - de primeira e segunda ordem, pelo menos. A HT se aplica a sistemas macroscópicos, descritos por Hamiltonianos clássicos, em um espaço de coordenadas e momenta contínuos, e já foi confirmada em outros modelos, em especial o modelo XY e o modelo k -trigonométrico, ambos em aproximação de campo médio.

O presente trabalho apresenta a verificação da HT sobre o Modelo Esférico ferromagnético. Na aplicação da HT ao modelo, em particular na versão campo médio, resolveu-se primeiramente a sua termodinâmica, que apresenta uma TF na ausência de campo magnético externo, que é destruída quando se acrescenta o campo finito. Analisou-se então, no âmbito da Teoria de Morse, a evolução da topologia de subvariedades convenientes no espaço de configurações do modelo, definidas a partir da função energia potencial. Graças à simplicidade topológica do espaço de configurações, que é uma hipersfera de dimensão $(N-1)$, e à simplicidade da estrutura da matriz de interação, foi possível computar os números de Betti da família de subvariedades e obter uma compreensão bastante intuitiva da maneira pela qual este espaço vai sendo preenchido à medida em que se aumenta a energia do sistema. Em particular, a quebra espontânea de simetria no limite termodinâmico emerge facilmente desta análise, da não conectividade das variedades abaixo da energia crítica v_c . Resulta que, no caso sem campo externo, ocorre uma TT nestas variedades em uma energia potencial igual à energia potencial (média) crítica da TF, correspondendo ao ponto em que toda a esfera do espaço de configurações se torna acessível ao sistema, o que corrobora a Hipótese no sentido da necessidade de uma TT associada a uma TF. No entanto, a mudança observada na topologia não é particularmente “grande”, envolvendo a mudança de apenas dois números de Betti no ponto crítico, em contraste com o comportamento observado no modelo XY campo médio, em que a TT associada à TF envolve a mudança simultânea de $\mathcal{O}(N)$ números de Betti das respectivas subvariedades. A partir dos resultados do modelo XY campo médio, foi sugerido que as

condições de *suficiência* para que uma TT no espaço de configurações origine uma TF no sistema correspondente estejam ligadas à mudança $\mathcal{O}(N)$ referida. A TT no modelo esférico, no entanto, não preenche estes pré-requisitos, ainda que, em campo nulo, esteja associada a uma TF do sistema.

Quando se aborda a topologia do caso com campo externo, surge ainda um fato mais grave: a topologia das variedades no espaço configuracional não é sensivelmente afetada pelo campo, sendo o comportamento termodinâmico, ao contrário, dramaticamente diferente. O modelo não apresenta uma TF neste caso. No entanto, uma TT idêntica à encontrada no caso sem campo persiste. Da termodinâmica do modelo, contudo, observa-se que a região de potenciais em que a TT ocorre não é fisicamente acessível ao sistema, o que é consistente com a ausência de TF no modelo neste caso. O formalismo topológico sobre o espaço de configurações, porém, não se mostra suficiente na caracterização deste comportamento do sistema, e esta conclusão só é alcançada dado o conhecimento prévio da termodinâmica do modelo.

Em seqüência à análise em campo médio, apresenta-se a termodinâmica do Modelo Esférico em dimensão finita, com interação a vizinhos próximos, desenvolvida originalmente em [32]. A análise da HT sobre estes modelos está em andamento, portanto, apenas resultados parciais são apresentados.

A dissertação está estruturada da seguinte forma: dedica-se o Capítulo 1 a um resumo de transições de fase termodinâmicas, que constituem o pano de fundo e a motivação física deste trabalho; no Capítulo 2, faz-se uma síntese dos antecedentes, da elaboração da Hipótese Topológica, incluindo modelos e resultados que corroboram a proposta; o Capítulo 3 é dedicado à introdução do modelo esférico e suas variantes, apresentando sua termodinâmica, o desenvolvimento da análise topológica e os resultados obtidos até o momento; no último capítulo apresentam-se as discussões, conclusões e perspectivas do trabalho. Ao final da dissertação, incluiu-se um Apêndice com um resumo de conceitos e definições da topologia - e em particular, da teoria de Morse - que são utilizados ao longo do texto.

Capítulo 1

Transições de Fase Termodinâmicas

Na física, a compreensão de transições de fase, tanto do ponto de vista da descrição fenomenológica, quanto do ponto de vista mais básico de mecanismos que as regem e suas origens, tem uma importância central. No âmbito prático, transições de fase ocorrem em um conjunto amplo e variado de sistemas, de interesse em diversas áreas da ciência e da tecnologia, tendo, portanto, presença e papel decisivos. Mas também, as transições se mostram presentes ou relacionadas a questões fundamentais da física. Atribui-se a própria existência do Universo observável a uma transição de fase a partir de um estado de vácuo pré-existente, sendo toda a configuração do Universo existente associada a tal transição¹. Muitos aspectos dos fenômenos críticos associados a transições de fase, como a invariância de escala, são encontrados na meteorologia, sismologia, no estudo da evolução da vida na Terra. Ademais, existe um paralelo muito forte entre a teoria de fenômenos críticos em transições contínuas e a teoria quântica de campos, o que pode, de início, surpreender, visto que a primeira trata de sistemas macroscópicos, que podem ser tratados como infinitos, enquanto que a segunda estuda as partículas e os campos elementares. Outro conceito importante que surge no âmbito de transições de fase é a universalidade, que será abordada aqui.

As transições de fase termodinâmicas são definitivamente as melhor compreendidas. Este capítulo contém um resumo de aspectos e conceitos teóricos básicos do assunto.

¹Dowrick, N. J. et al. *The Theory of critical phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford University Publications, New York, 1998

O sentido dado a “microscópico”, aqui, é o da escala dos menores componentes relevantes à descrição do modelo, enquanto “macroscópico” está para a escala do sistema como um todo.

1.1 Condições de estabilidade/instabilidade termodinâmicas e transições de fase

Toda a informação termodinâmica sobre um sistema pode ser obtida sendo conhecida sua relação fundamental, isto é, a entropia S como função dos demais parâmetros extensivos do sistema. O mesmo, alternativamente, para a função energia interna U , dependente da entropia e demais parâmetros extensivos, ou, ainda, para algum dos potenciais transformados de U , como funções de suas variáveis naturais.

A relação fundamental deve obedecer a certas condições decorrentes do princípio de máxima entropia para que expresse os estados termodinâmicos do sistema². Este princípio exige, para os estados termodinâmicos, (além de $dS = 0$) que a entropia seja uma função côncava de seus parâmetros. Tais condições de concavidade (convexidade) são chamadas critérios de estabilidade local. Estes critérios também se aplicam na representação de energia: $U(S, V, N)$ deve ser uma função convexa de seus parâmetros para todo e qualquer estado de equilíbrio. Para as transformadas de Legendre de U , dentre elas, $F(T, V, N)$ (energia livre de Helmholtz), tem-se

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_{V,N} \leq 0, \quad \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_{T,N} \geq 0 \quad (1.1)$$

e para $G(T, P, N)$ (energia livre de Gibbs),

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{P,N} \leq 0, \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_{T,N} \leq 0 \quad (1.2)$$

Não raro, a partir de cálculos da mecânica estatística, ou interpolação de dados

²Este princípio, na mecânica estatística, é obtido como um resultado e é conhecido como Teorema H.

experimentais, obtém-se uma função para um potencial termodinâmico, definindo uma superfície no espaço de parâmetros adequado, em que certos pontos não são *globalmente* estáveis³. A região definida por tais pontos é uma região de coexistência de fases do sistema dado. Uma região de instabilidade (global) da relação fundamental, ou, equivalentemente, da função de um potencial termodinâmico acarreta, portanto, uma transição de fase.

Uma equação de estado pode ser obtida a partir de uma relação fundamental. Esta é uma relação funcional entre variáveis de estado do sistema, P , V e T , por exemplo, que reduz o número de graus de liberdade independentes na sua descrição. As soluções da equação de estado serão o conjunto de pontos $\{(P, v, T)\}$ (sendo $v = V/N$, o volume molar do sistema) dos estados de equilíbrio do sistema. Os respectivos diagramas de fases serão as projeções nos planos $P-v$, $T-P$, ou $v-T$ dos pontos em que o sistema sofre transição, onde há coexistência de diferentes fases. A fase que é realizada na natureza é aquela que minimiza a energia livre para P e T fixos.

As condições para o equilíbrio entre duas ou mais fases, ocorrendo em um mesmo ponto (P, T) , são dadas pela regra de Gibbs. Tome-se um sistema PVT puro (sem restrições quanto à troca de calor, pressão ou matéria entre as fases), a condição de equilíbrio entre duas fases I e II a mesma temperatura e pressão será a igualdade de seus potenciais químicos

$$\mu^I(P, T) = \mu^{II}(P, T), \quad (1.3)$$

que define uma curva $P = P(T)$ no diagrama de fases, a curva de coexistência. Para o sistema puro, três fases só podem coexistir em um ponto (P, T) do plano $P-T$, chamado ponto triplo. O sistema não pode existir em mais de três fases a mesma temperatura e pressão. Em geral, para um sistema composto de r diferentes tipos de partículas, teremos no máximo $r + 2$ fases coexistindo, diagramas de fases de dimensão maior, *superfícies* de coexistência, etc.

A igualdade dos potenciais químicos de duas fases diferentes para cada compo-

³O critério mais geral, que deve vigorar na relação fundamental, é o de estabilidade *global*, donde o conceito de estados globalmente estáveis. A construção de Maxwell garante que também o critério de estabilidade global seja obedecido.

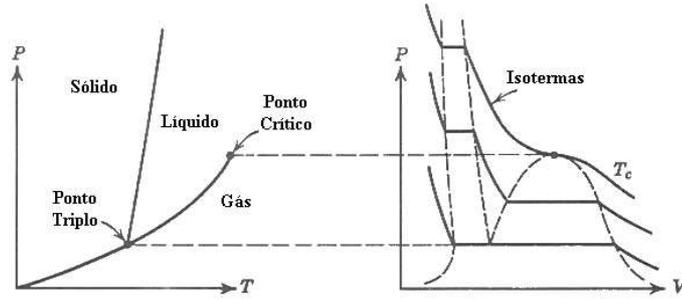


Figura 1.1: Diagramas P-T e P-V de um fluido típico. No diagrama P-V, as isotermas expressam os estados estáveis do sistema.[2]

nente do sistema corresponde à condição de continuidade nas derivadas da energia livre conveniente em relação a n_j :

$$\lim_{T \rightarrow T_t^+} \left(\frac{\partial G}{\partial n_j} \right)_{T,P} - \lim_{T \rightarrow T_t^-} \left(\frac{\partial G}{\partial n_j} \right)_{T,P} = 0, \quad j = 1, \dots, r, \quad (1.4)$$

onde n_j é o número molar do respectivo componente, e T_t é a temperatura da transição entre as fases de alta temperatura ($T \rightarrow T_t^+$) e a de baixa temperatura ($T \rightarrow T_t^-$). A energia livre acima referida é aquela cujas variáveis naturais, exceto $\{n_j\}$, são todas intensivas. Para um sistema PVT , é a energia livre de Gibbs, $G(T, P, \{n_j\})$. Nada garante, porém, que as derivadas da energia livre em relação à temperatura ou outro parâmetro intensivo devam ser contínuas. De fato, este é um aspecto importante de uma transição, tanto assim que é um dos critérios de classificação de TFs. As transições nas quais as derivadas da energia livre em relação à temperatura ou outra variável intensiva são descontínuas são denominadas transições de primeira ordem, as demais, são denominadas transições contínuas.

Como $(\partial G / \partial T)_P = -S$ e $(\partial G / \partial P)_T = V$ podem não ser contínuas na transição, as funções S e V poderão sofrer uma descontinuidade neste ponto. Assim, o ponto da transição é definido pelas variáveis intensivas, neste caso T e P .

Segue-se uma descrição de alguns aspectos básicos de transições de primeira ordem e contínuas.

1.2 Transições de primeira ordem

Os sistemas mais conhecidos a sofrerem transições de primeira ordem são os fluidos clássicos, dos quais o exemplo típico é a água, que pode existir na fase gasosa, líquida, e em muitas formas sólidas, distintas na estrutura cristalina. Este tipo de transição também ocorre em sistemas em que entram em jogo interações quânticas, como supercondutores na presença de um campo magnético finito (transição fase condutora normal - fase supercondutora), fluidos binários, como a mistura de ^3He e ^4He . As transições em fluidos clássicos (sistemas PVT) serão enfatizadas aqui por serem mais simples e familiares. Como visto acima, transições de primeira ordem representam uma mudança descontínua no estado do sistema: o volume molar v e a entropia molar s variam descontinuamente através da curva de coexistência.

Estas transições são marcadas por regiões finitas de instabilidade nas equações de estado ou potenciais termodinâmicos correspondentes.

Dos dois gráficos $G \times P$ (ou $\mu \times P$) e $v \times P$ (figuras (1.3), (1.4)), podem-se construir gráficos $G \times v$, tomando diferentes isotermas, ilustrando a natureza descontínua do estado (volume específico) do sistema em transições de primeira ordem (figura (1.2)).

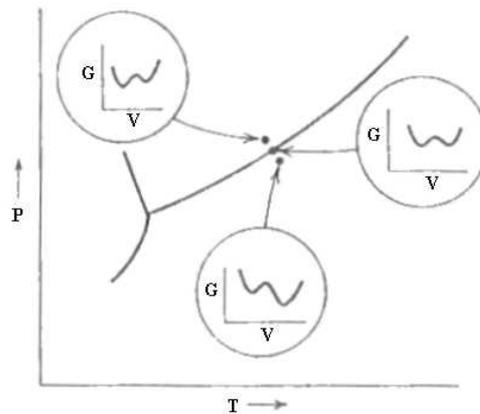


Figura 1.2: Comportamento de G em uma transição de primeira ordem. Abaixo da transição, $T < T_t$, o estado termodinâmico é v_0 , v_1 é um estado metaestável. Em $T = T_t$, os mínimos v_0 e v_1 correspondem a energias iguais, e as duas fases coexistem. Para $T > T_t$, o mínimo estável muda bruscamente de v_0 para v_1 , através de T_t . [3]

As flutuações de um observável do sistema em torno de seu equilíbrio (na transição)

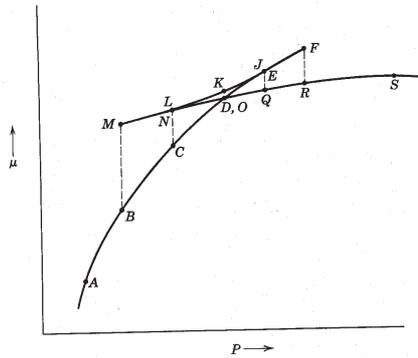


Figura 1.3: Isotermas $P \times v$ resultantes de uma equação de estado instável de um fluido clássico. Os estados O a M e F a D são localmente estáveis, mas globalmente instáveis. Os estados M a F são localmente instáveis.[3]

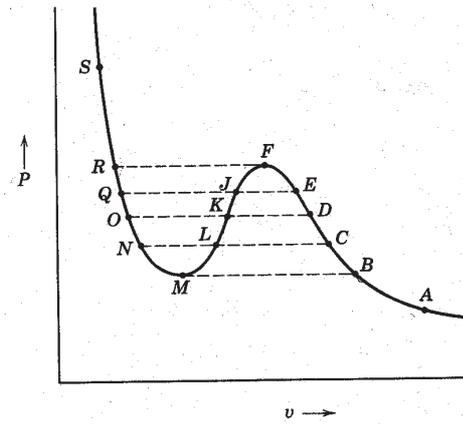


Figura 1.4: Isoterma $\mu \times P$. Os estados de equilíbrio são aqueles que minimizam $\mu = g = G/V$ para dado P . [3]

são profundamente influenciadas pelos detalhes (instabilidades) da relação fundamental, o seu valor médio, no entanto, reflete apenas o estado de equilíbrio estável. Na região de coexistência as flutuações se tornam maiores devido à diminuição da barreira, mas não se tornam particularmente grandes devido ao *calor latente*, que atua como um mecanismo “amortecedor”. Na região de instabilidade, ou de coexistência de fases, a equação de estado fornece pontos que não correspondem a estados de equilíbrio estável do sistema - alguns correspondem a estados metaestáveis, por terem energia livre maior, violando o critério de estabilidade global, mas não o local, outros correspondem a estados espúrios, não físicos, porque violam o critério de estabilidade local. Da isoterma, (figura (1.4)), em cada valor de P em que a função $g = G/V$ é “multivaluada”, o princípio de mínimo para o potencial de Gibbs seleciona o menor valor de g correspondente.

Assim, determinam-se os estados (trechos da isoterma) que de fato são estados termodinâmicos, sendo estes (figura (1.5)): os estados de S a O , a reta de O a D , e de D a A . Em D (O) a isoterma $g(P)$ cruza sobre si mesma e a derivada da curva estável é descontínua. Para determinar, no diagrama $P-v$, a que pressão e volume específico correspondem estes estados, entre os quais ocorre a transição, se faz uso da continuidade do potencial de Gibbs. Sendo $dg = -s dT + v dP$, e sobre a isoterma, $dT = 0$, temos

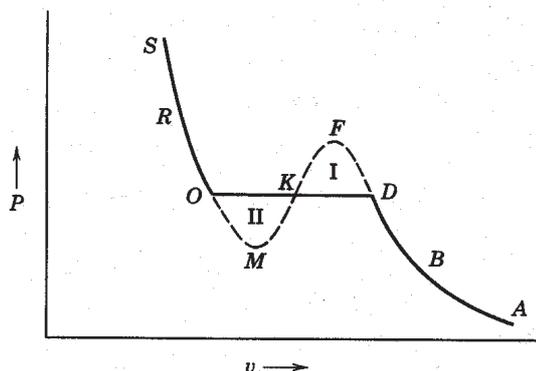


Figura 1.5: Isoterma estável (curva cheia) obtida a partir da isoterma instável (curva pontilhada) através da construção de Maxwell no diagrama $P-v$. [3]

$g_O - g_D = \int_D^O v(P)dP = 0$ e, separando a integral sobre a isoterma em integrais entre os estados intermediários, e rearrajando convenientemente os termos, obtém-se a condição:

$$\int_D^F v(P)dP - \int_K^F v(P)dP = \int_M^K v(P)dP - \int_M^O v(P)dP \quad (1.5)$$

que corresponde a igualar as áreas I e II indicadas na figura. Esta é a construção de Maxwell. Os estados E , F , M e N , localmente estáveis ou metaestáveis, são estados físicos possíveis, e eventualmente uma amostra sofrerá flutuações que o levem, por muito pouco tempo em geral (mas por vezes, por tempos “realmente” longos), a estes estados.

A principal característica a definir uma transição de primeira ordem é o calor latente, que é o calor emitido por uma dada substância quando uma unidade de massa passa da fase de temperatura mais alta (“fase I”) para a fase de temperatura mais baixa (“fase II”). Durante a transição, a temperatura permanece constante. O calor latente está expresso na descontinuidade da entalpia $h(s, P) = H(S, P, N)/N$ - onde $s = S/N$. A entalpia molar é dada por $h = g + Ts$, a energia livre de Gibbs é contínua inclusive no ponto da transição, assim o calor latente $\ell = \Delta h$ é dado por

$$\ell = T\Delta s = T(s^I - s^{II}) = T \left(\lim_{T \rightarrow T_t^-} \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{P,N} - \lim_{T \rightarrow T_t^+} \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{P,N} \right) \quad (1.6)$$

onde s^I e s^{II} estão para as entropias molares da fase I e II, respectivamente, no ponto

da transição, T_t . O calor latente está ligado à diferença nas entropias das duas fases, e portanto ligado ao grau de ordenamento das moléculas em uma e outra (fase). Pode-se dizer que a emissão de calor durante a transição de primeira ordem reflete a reorganização microscópica do sistema: a importância da energia de ligação entre as moléculas frente à sua energia térmica se torna maior na fase de baixa temperatura em relação à fase de alta temperatura, e isto se dá bruscamente ao atravessar-se a curva de coexistência. É possível mostrar também que o calor latente é sempre positivo (absorvido) na transição da fase de baixa para a de alta temperatura.

Da isoterma estável da figura (1.5), vê-se que o volume específico médio do sistema assume todos os valores entre O e D , mas a parcela do sistema na fase gasosa estará em O , e a parte líquida, em D^4 . Observa-se também que a compressibilidade do sistema a temperatura constante, $\kappa_T = -1/V(\partial V/\partial P)_T$, diverge como uma delta de Dirac na transição (além de sofrer uma descontinuidade: $\lim_{P \rightarrow P_t^+} \kappa_T \neq \lim_{P \rightarrow P_t^-} \kappa_T$). Isto, porém, não gera flutuações indefinidamente grandes no sistema (enquanto houver quantidades das duas fases coexistindo), porque, havendo uma variação infinitesimal de pressão no sistema, o vapor que em decorrência se condensa emite calor específico, o que aquece o sistema, tendendo a voltar para o estado inicial, de equilíbrio. O calor latente então se torna um mecanismo de “amortecimento” para flutuações no sistema.

1.3 Transições contínuas

Indo sobre a curva de vaporização no diagrama $P - T$ (figuras (1.1) e (1.6)), no sentido de temperatura (e pressão) crescente, as fases líquida e vapor se distinguem cada vez menos⁵, o calor latente ℓ , assim, vai diminuindo, e, se o sistema possui o volume específico adequado - $v_c - \ell$ vai continuamente a zero, no ponto terminal da curva, que é um ponto crítico, definido por (T_c, P_c, v_c) . A partir deste ponto, líquido e vapor não são mais fases distintas. Pontos críticos são aqueles em que ocorrem transições contínuas.

⁴o volume específico de todo o sistema dependerá das quantidades relativas das fases O e D .

⁵A distinção entre as duas fases se dá na diferença entre as respectivas entropias, volumes específicos, etc.

Nem sempre transições contínuas ocorrem associadas a transições de primeira ordem.

Além dos fluidos clássicos, também sofrem transições contínuas alguns materiais paramagnéticos (transições para fase ferromagnética ou anti-ferromagnética), fluidos quânticos, na transição da fase líquida normal para a superfluida, como ^3He e ^4He , misturas de fluidos imiscíveis em certa região de temperatura e pressão (fluidos binários), como por exemplo as misturas de ^3He e ^4He ou metano e hexano, e supercondutores na ausência de campo magnético externo (transição da fase condutora normal para a supercondutora).

Considerações gerais

O comportamento do potencial de Gibbs em função de v ao longo da curva de vaporização até seu ponto crítico e além deste, ilustrando a natureza contínua da transição do fluido no ponto crítico, é dado na figura (figura (1.6)).

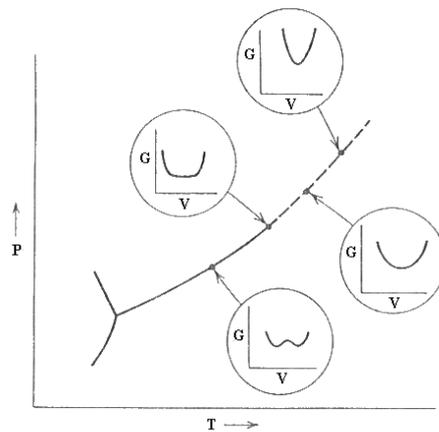


Figura 1.6: Comportamento de G em uma transição contínua. Em $T < T_c$, a energia possui dois mínimos diferentes e equivalentes, $v_g \neq 0$ (vapor) e $v_l \neq 0$ (líquido). Em T_c , os mínimos coincidem em $v_g = v_l = v_c$, formando um mínimo “achatado” (flutuações divergentes). Para $T > T_c$, o mínimo v_c é único e “normal”. [3]

Transições contínuas não envolvem calor latente, o que é logo percebido através de (1.6), já que a derivada em T do potencial de Gibbs é contínua nestas transições. Como conseqüência, o estado do sistema muda de forma contínua através do ponto da transição. O mecanismo de “amortecimento” das flutuações no estado do sistema (definido por v nos fluidos clássicos) conduzido pelo calor latente é ausente, sendo este fato responsável

pela ocorrência de flutuações divergentes. Estas estão ligadas à ocorrência de fenômenos notáveis, agregados sob a denominação de fenômenos críticos.

A teoria fenomenológica já desenvolvida para as transições contínuas é muito mais rica que para as transições de primeira ordem. No entorno de um ponto crítico as funções termodinâmicas do sistema poderão em geral ser descritas em termos de uma variável apenas (além dos parâmetros independentes), denominada *parâmetro de ordem*, que deve ter média nula em uma das fases. A identificação desta variável é particular a cada sistema e pode ser altamente não trivial, sua escolha podendo não ser única.

A transição paramagneto/ferromagneto

O paradigma de transição contínua é a transição paramagneto/ferromagneto. Os resultados originais desenvolvidos nesta dissertação, aliás, tratam do modelo esférico ferromagnético, isto é, um modelo de paramagneto que pode apresentar transição para o estado ferromagnético. Exemplos desta transição são encontrados em materiais como ferro, níquel e cobalto. Acima de T_c , o ferro é um paramagneto, isto é, possui magnetização (média) $\langle \mathbf{M} \rangle = \sum_{i=1}^N s_i$ nula na ausência de campo magnético externo \mathbf{B} , e, na presença de um campo \mathbf{B} fraco, sua magnetização média por spin obedece a $\langle \mathbf{m} \rangle = \mu \mathbf{B}$ ($\mu > 0$ é a constante de permeabilidade magnética), respondendo linearmente ao campo. Abaixo de T_c , o sistema é um ferromagneto, possui magnetização finita mesmo em campo externo nulo, e a magnetização sob ação de $\mathbf{B} \neq 0$ varia a fim de alinhar-se com o campo, sendo dada por: $\langle \mathbf{m} \rangle = \langle \mathbf{m}_0 \rangle + \mu \mathbf{B}$, onde $\langle \mathbf{m}_0 \rangle$ é a magnetização espontânea. Para este sistema, o parâmetro de ordem (médio) é o vetor magnetização média, $\langle \mathbf{M} \rangle$, ou, equivalentemente, $\langle \mathbf{m} \rangle$. Existem muitos modelos (alguns mais realísticos que outros) que descrevem sistemas paramagnéticos/ferromagnéticos, por exemplo: o modelo de Ising, o modelo XY (Heisenberg clássico), o modelo esférico, o modelo gaussiano. Em geral (mas não necessariamente) considera-se uma rede d -dimensional com uma dada disposição espacial de átomos (com momento de spin). O Hamiltoniano - parte do potencial -

típico de um ferromagneto é dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j}' J_{ij} s_i \cdot s_j - \sum_{i=1}^N H_i \cdot s_i \quad (1.7)$$

onde s_i , a variável de spin no sítio i , pode ser um vetor ou escalar, uma variável contínua ou discreta, ou um estado quântico. Os somatórios $\sum_{i,j}'$ podem ser tomados entre sítios primeiros vizinhos, vizinhos em segunda ordem, ou eventualmente de cada spin com todos os demais. Os elementos J_{ij} da matriz de interação são positivos ou nulos, H_i representa um campo magnético externo que pode ser variável de um sítio a outro e se acopla linearmente com o spin s_i .

Usualmente, o interesse é fazer H uma variável independente e poder calcular M pela derivada de $\log Q$ com respeito a H (onde Q é a função de partição). Para tal, acrescenta-se ao Hamiltoniano um termo $-HM = -H \sum_i s_i$, semelhante ao segundo termo de (1.7). A função de partição se torna uma função de H : $Q = Q(H, T)$. Desta maneira, a energia livre de Helmholtz molar para magnetos, $f = f(H, T) = -\frac{1}{Nk_bT} \log Q(H, T)$, será função de parâmetros intensivos apenas e coincidirá com o potencial químico μ . Dado o novo Hamiltoniano, obtém-se uma relação conveniente para a magnetização média $\langle m \rangle = -(\partial f / \partial H)_{H=0}$.

Em campo nulo, quando aquecemos o sistema além de T_c , o módulo da magnetização vai diminuindo continuamente até chegar a zero em T_c , sendo então nulo para $T > T_c$. Sua derivada, porém, é infinita em $T = T_c^-$ e cai para zero em $T = T_c^+$, possui portanto uma descontinuidade infinita (figura (1.7)). Este é o comportamento característico do parâmetro de ordem na transição contínua. A presença de um campo finito destrói a transição ferromagneto/paramagneto, pois neste caso a magnetização é uma função analítica da temperatura.

Simetria

Uma transição contínua sempre separa duas fases com simetrias espaciais diferentes. No caso acima descrito, o estado do sistema na fase paramagnética é rotacionalmente

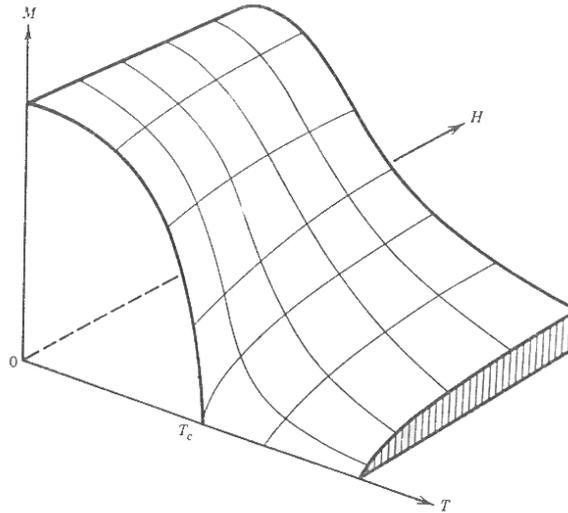


Figura 1.7: Diagrama $M-H-T$ de um paramagneto. O sistema sofre transição em $H = 0$. A superfície se estende simetricamente para $M, H < 0$. Em $H = 0$ região abaixo da curva $M(T)$ é inacessível.[2]

invariante, enquanto que no estado de ferromagneto, há uma direção preferencial⁶ definida pelo vetor magnetização espontânea e a invariância rotacional é conseqüentemente destruída. A redução de simetria na fase de baixa temperatura, processo denominado *quebra espontânea de simetria*, exige para sua descrição um parâmetro adicional, o parâmetro de ordem. A fase de maior simetria possui em geral a simetria do Hamiltoniano; na de menor simetria, portanto, não transparecem todas as propriedades deste, mas todo estado macroscópico deve de alguma forma expressá-la. A maneira pela qual a simetria se manifesta nesta fase é diferente: o sistema possui infinitos estados estáveis equivalentes (cada um com a mesma magnetização $|M|$, porém, em uma direção diferente) que são transformados uns nos outros pela operação de simetria. Porém, classicamente, o sistema pode existir em apenas um dos estados, e a simetria fica “escondida”. Um sistema macroscópico quântico também não poderá existir em uma combinação linear de estados fundamentais porque a transição de um estado fundamental para outro é realizada por um operador que muda simultaneamente os estados de todas as partículas do sistema, e este operador não existe no limite termodinâmico. Assim, a probabilidade do sistema realizar a transição (quântica) de um estado fundamental para outro é nula.

⁶Tal direção é determinada pelas flutuações aleatórias dos spins enquanto o magneto vai sendo resfriado em direção a T_c .

Funções de correlação

Um importante resultado da mecânica estatística é conhecido como *teorema de flutuação-dissipação*. Ele estabelece que flutuações de certos observáveis estão relacionadas a uma “susceptibilidade” apropriada, que lhes corresponde. Para as flutuações de energia, por exemplo, tem-se

$$(\delta U)^2 = \langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^2 \rangle = C_V k_b T^2 = c_v k_b N T^2 \quad (1.8)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann. Sendo $U = \langle \mathcal{H} \rangle$ extensiva, $\delta U/U \propto 1/\sqrt{N}$, e as flutuações na energia vão a zero no limite termodinâmico. Porém, quando c_v diverge, como acontece em um ponto crítico, as flutuações se tornam importantes.

Assim, além das médias de observáveis termodinâmicos, próximo a uma transição contínua, outras funções, relacionadas a flutuações do sistema, serão imprescindíveis a sua descrição. Supõe-se que o parâmetro de ordem médio seja função de um campo vetorial que fornece a densidade de momento magnético (magnetização), $m(\mathbf{x})$:

$$M = \langle \int d^d x m(\mathbf{x}) \rangle \quad (1.9)$$

A função de correlação (a dois pontos) é definida por:

$$G^{(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \langle m(\mathbf{x}') m(\mathbf{x}) \rangle \quad (1.10)$$

Entretanto, a função acima contém a contribuição das médias das magnetizações locais separadamente: $\langle m(\mathbf{x}') \rangle \langle m(\mathbf{x}) \rangle$ e será não nula mesmo para spins não interagentes, quando as flutuações nos spins forem independentes. Para isolar a parte da correlação devida às interações entre os spins, define-se a função de correlação (a dois pontos) conectada:

$$\begin{aligned} G_c^{(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) &= \langle m(\mathbf{x}') m(\mathbf{x}) \rangle - \langle m(\mathbf{x}') \rangle \langle m(\mathbf{x}) \rangle = \\ &= \langle (m(\mathbf{x}') - \langle m(\mathbf{x}') \rangle) (m(\mathbf{x}) - \langle m(\mathbf{x}) \rangle) \rangle. \end{aligned} \quad (1.11)$$

$G_c^{(2)}$ mede a correlação espacial entre os valores do parâmetro de ordem em diferentes pontos do sistema - e, portanto, entre as flutuações no mesmo - (notar semelhança com (1.8)). Admitindo-se invariância translacional ($G_c^{(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = G_c^{(2)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$, $\langle m(\mathbf{x}) \rangle = \langle m(0) \rangle$) e isotropia da rede ($G_c^{(2)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = G_c^{(2)}(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)$), e através de suposições simples, pode-se mostrar que esta função tem as seguintes propriedades, para $x = |\mathbf{x}|$ grande e $|t| \equiv |T - T_c|/T_c \ll 1$ ($|t| \neq 0$):

$$G_c^{(2)}(x) \sim \frac{e^{-x/\xi}}{x^{d-2+\eta}}, \quad (1.12)$$

onde ξ é o comprimento (característico) de correlação. A equação acima indica que próximo, mas *não sobre* T_c , o parâmetro de ordem flutua em blocos (de igual orientação de spin, aproximadamente) de dimensões lineares menores ou iguais a ξ , sendo blocos maiores muito raros. A dependência de ξ com a temperatura, derivada a partir do comportamento experimental de quantidades correlatas, na região em torno de T_c ($|t| \ll 1$), é:

$$\xi \sim t^{-\nu}, \quad (1.13)$$

onde $\nu > 0$ é um expoente crítico. Assim, em $t = 0$, ξ diverge e o comportamento assintótico da correlação é uma lei de potência em x :

$$G_c^{(2)}(x) \sim \frac{1}{x^{(d-2+\eta)}}, \quad t = 0, \quad x \text{ grande}, \quad (1.14)$$

onde d é a dimensão do sistema, e η é um expoente crítico igualmente. Como ξ diverge em T_c , flutuações em blocos de spin pequenos e grandes, de qualquer tamanho enfim, são igualmente prováveis. No ponto crítico, o comportamento do sistema é dominado por estruturas dinâmicas macroscópicas. A equação acima, por ser uma lei de potência, expressa a invariância de escala do sistema (o sistema tem a mesma “aparência” em qualquer escala em que seja observado).

Além dos expoentes críticos ν e η acima definidos, relacionados à dependência de ξ e de $G_c^{(2)}$ na temperatura reduzida, também se introduzem os expoentes das leis de

potência caracterizando o comportamento crítico de outras grandezas termodinâmicas, α , β , γ , δ :

$$\text{calores específicos} \quad c \sim |t|^{-\alpha} \quad (H = 0)$$

$$\text{parâmetro de ordem} \quad M \sim |t|^\beta \quad (t < 0, H = 0)$$

$$\text{isoterma crítica } (t = 0) \quad M \sim H^{-1/\delta}$$

“susceptibilidades”

$$\left\{ \begin{array}{ll} \chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (H = 0) & \text{magnetos} \\ \kappa_T \sim |t|^{-\gamma} \quad (t > 0) & \text{fluidos} \end{array} \right.$$

Como se vê, expoentes críticos descrevem o comportamento de quantidades termodinâmicas no entorno ou sobre a temperatura crítica, e é uma característica peculiar de transições contínuas o fato deste comportamento ser regido por leis de potência.

A universalidade emerge no contexto de fenômenos críticos, por exemplo, através de leis, ou relações, de *scaling* que relacionam os expoentes críticos de um sistema uns aos outros:

$$\text{lei de Fisher:} \quad \gamma = \nu(2 - \eta)$$

$$\text{lei de Rushbrooke:} \quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

$$\text{lei de Widom:} \quad \gamma = \beta(\delta - 1)$$

$$\text{lei de Josephson:} \quad \nu d = 2 - \alpha.$$

As teorias de Landau e do grupo de renormalização permitem a obtenção dos expoentes críticos de sistemas específicos. Estes expoentes caracterizam a transição de fase do sistema e, por extensão, o próprio sistema em função do tipo de transição que sofre. De fato, na teoria do grupo de renormalização, o conceito de classes de universalidade surge naturalmente, cada sistema pertencendo a uma dada classe de universalidade dependendo de seu comportamento crítico. Esta teoria, bem como a de Ginzburg-Landau, são de extrema importância no âmbito da teoria de fenômenos críticos. Entretanto, elas não serão abordadas aqui porque fogem ao contexto do trabalho.

Universalidade

As simetrias e propriedades invariantes nos sistemas físicos mostram-se de importância fundamental e básica na física, porque envolvem a sua busca primordial pela universalidade (ou universalidades). O conceito de universalidade é recorrente em fenômenos críticos, já que, na região crítica, o comportamento é ditado por grandes estruturas macroscópicas; sistemas com interações microscópicas (Hamiltonianos) muito diferentes, podem apresentar propriedades semelhantes. O conceito surge naturalmente no contexto do grupo de renormalização, que divide os sistemas em classes de universalidade.

Outra ocorrência de universalidade aparece no “colapso” das curvas de coexistência gás-líquido de diversos fluidos sobre uma curva comum, para as respectivas variáveis reduzidas ρ/ρ_c e T/T_c (ainda que os pontos críticos para os diferentes sistemas sejam distintos). Esta é a chamada lei dos estados correspondentes. O mesmo acontece para diferentes materiais magnéticos. O questionamento principal diante destas observações é: como, se as características microscópicas de sistemas estão, em última instância, na origem das suas transições de fase, as propriedades gerais que determinam seu comportamento nesta região podem ser independentes dos detalhes microscópicos?

1.4 Origem de transições de fase: teoria de Yang e Lee

O tema central deste trabalho é uma explicação alternativa à de Yang-Lee (e outras) para a origem de transições de fase, cujo estudo, espera-se, adicionará elementos à compreensão destes fenômenos. Assim, nesta seção, apresenta-se a abordagem a transições de fase de C. N. Yang e T. D. Lee [1], que explica a origem de TFs dentro do formalismo da mecânica estatística, através da função de grã-partição e suas propriedades. Uma teoria sobre a origem de TFs deve conseguir explicar como um sistema regido por uma única interação microscópica pode se apresentar em fases tão distintas macroscopicamente.

Considera-se um gás monatômico cujas partículas interagem sob o potencial:

$$U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \begin{cases} \infty, & \text{se } |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < a \\ \epsilon_{ij} & \text{se } a \leq |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \leq b \\ 0 & \text{se } |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > b \end{cases} \quad (1.15)$$

onde \mathbf{r}_i é o vetor posição da partícula de rótulo i . Apesar do potencial acima ser de curto alcance, é possível generalizar esta abordagem para potenciais que decaem lentamente com a distância.

Note-se que as partículas ocupam um volume finito, ou seja, possuem um “caroço” impenetrável, e, assim, haverá um número máximo M de partículas coexistindo em um volume V . A função de grã-partição é dada por:

$$\mathcal{Q}_V = \sum_{N=0}^M \frac{Q_N}{N!} y^N, \quad (1.16)$$

onde Q_N é a parte configuracional da função de partição para N partículas (considerando um Hamiltoniano clássico, quadrático nos momentos $\{p_i\}$, a parte dos momentos é trivialmente integrada e incorporada à variável y) e y é uma função da fugacidade:

$$Q_N = \int \cdots \int_V d^3r_1 \cdots d^3r_N \exp(-U/k_bT),$$

$$y = \left(\frac{2\pi m k_b T}{h^2} \right)^{3/2} e^{\mu/k_b T}. \quad (1.17)$$

Para volume V finito, \mathcal{Q} é um polinômio de ordem M na variável y estendida ao plano complexo (os valores físicos de y são os reais e positivos). A função de grã-partição pode ser fatorizada:

$$\mathcal{Q}_V = \prod_{i=1}^M \left(1 - \frac{y}{y_i} \right), \quad (1.18)$$

onde y_1, \dots, y_M são as raízes do polinômio \mathcal{Q} . Os coeficientes $Q_N/N!$ são todos positivos. Para V finito, portanto, as raízes não poderão ser reais positivas. Ao tomar-se o limite $V \rightarrow \infty$, o número de raízes, M , aumenta, e estas se movem no plano complexo y . Neste limite eventualmente algumas raízes tocarão o eixo real positivo, por exemplo, nos

pontos $y = t_1, t_2$. Os comportamentos do sistema nas regiões $y < t_i$ e $y > t_i$ vão diferir, e o sistema sofre uma transição de fase no ponto correspondente a cada raiz. A pressão e a densidade do sistema são dadas por:

$$\begin{aligned}\frac{P}{k_b T} &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \log \mathcal{Q}_V \\ \rho &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \log y} \frac{1}{V} \log \mathcal{Q}_V\end{aligned}\quad (1.19)$$

Os resultados da teoria são sintetizados pelos seguintes teoremas:

Teorema I: Para todos os valores reais positivos de y , no limite $V \rightarrow \infty$, ($V^{-1} \log \mathcal{Q}_V$) possui um limite independente da forma de V (para superfícies de V bem comportadas). Este limite, ainda, será uma função contínua, monotônica crescente de y .

Teorema II: Se, no plano complexo y , uma região R contendo um segmento do eixo real positivo não contém raízes (para qualquer valor de T ou V), então nesta região no limite $V \rightarrow \infty$ as quantidades:

$$\frac{1}{V} \log \mathcal{Q}_V, \left(\frac{\partial}{\partial \log y} \right) \frac{1}{V} \log \mathcal{Q}_V, \left(\frac{\partial}{\partial \log y} \right)^2 \frac{1}{V} \log \mathcal{Q}_V, \dots,$$

possuem limites analíticos em y . E neste caso, as operações $\left(\frac{\partial}{\partial \log y} \right)$ e $\lim_{V \rightarrow \infty}$ comutam em R ; assim:

$$\rho = \left(\frac{\partial}{\partial \log y} \right) \left(\frac{P}{k_b T} \right).\quad (1.20)$$

A pressão P então será sempre uma função contínua e monotônica crescente de y , no entanto suas derivadas poderão ser descontínuas nos pontos em que as raízes tocarem o eixo y real positivo. A densidade $\rho = 1/v$ será uma função monotônica crescente (e analítica) de y em uma região R livre de raízes. Em geral, sobre uma dada raiz real e positiva, a derivada de P , isto é, ρ , será descontínua e o sistema sofre uma transição de primeira ordem. Pode-se mostrar que ρ cresce na descontinuidade no sentido de y crescente.

À medida em que a temperatura do sistema é variada, as raízes reais e positivas se movem sobre o eixo real. Eventualmente, a uma determinada temperatura, alguma raiz

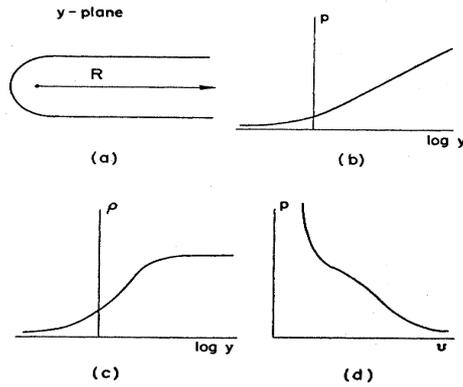


Figura 1.8: Comportamento da pressão P (gráficos (b) e (d)) e da densidade ρ (gráfico (c)), em uma região R que não contém raízes, a uma dada temperatura. P e ρ são funções analíticas de y , e a curva $P \times v = 1/\rho$ (gráfico (d)) é suave.[1]

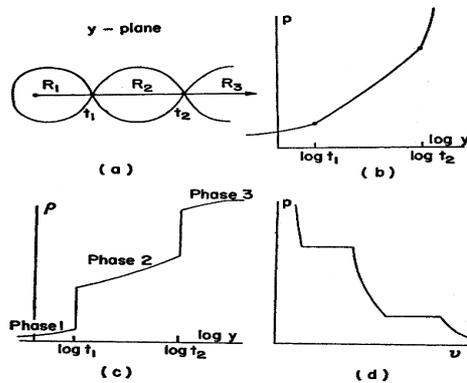


Figura 1.9: Comportamento da pressão P (gráficos (b) e (d)) e da densidade ρ (gráfico (c)), para um sistema que sofre transições de primeira ordem em $P(y = t_1, t_2)$ para uma dada temperatura. No domínio das regiões R_1, R_2 e R_3 , as funções são analíticas. P é contínua nas transições, ρ sofre uma descontinuidade finita. Os trechos horizontais da curva em (d) são regiões de coexistência das fases “adjacentes”. [1]

pode deixar de tocar o eixo y . Nesta temperatura, T_c , o sistema sofrerá uma transição contínua, e a densidade ρ será contínua sobre a raiz. Se a densidade for contínua sobre uma dada raiz em um intervalo finito de temperaturas, tem-se uma linha de transições contínuas. Se, alternativamente, duas raízes se encontram sobre o eixo real positivo em T_0 , tem-se um ponto triplo nesta temperatura.

A teoria pode ser generalizada para diferentes tipos de interações. Nesta abordagem, o estudo das equações de estado e transições de fase fica reduzido à investigação da distribuição de raízes da função de grã-partição sobre o plano complexo y . onde?.)

Outra abordagem à origem das transições de fase existe, no contexto do ensemble

canônico, e é devida a Dobrushin, Lanford e Ruelle⁷.

⁷D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, Encyclopaedia of Mathematics and its Applications (idem).

Capítulo 2

A Hipótese Topológica

As definições matemáticas correntes de transições de fase termodinâmicas são baseadas na perda de analiticidade - que rigorosamente acontece apenas no limite $N \rightarrow \infty$ - de observáveis termodinâmicos, vistas como consequência de singularidades nas medidas estatísticas que ocorrem na transição. Uma nova definição para transições de fase de equilíbrio em sistemas Hamiltonianos, que vem sendo explorada e investigada nos últimos anos, propõe que estas possam ser detectadas, explicadas e possivelmente até quantitativamente descritas pela análise da topologia e de mudanças convenientes na topologia de subvariedades no espaço de configurações. Dentro desta perspectiva, as singularidades nas medidas estatísticas seriam originadas por estas transições topológicas nas subvariedades.

Este capítulo contém uma síntese de resultados e evidências que conduzem a esta nova definição, e a justificam. O conteúdo desta proposta está contido na chamada Hipótese Topológica (HT), que será aqui apresentada, juntamente com resultados sobre modelos específicos que a corroboram [5].

A teoria se aplica a sistemas autônomos¹ clássicos, confinados, com Hamiltonianos da forma

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + V(q_1, \dots, q_N), \quad (2.1)$$

onde $\{q_i\}$ são as coordenadas, os N graus de liberdade do sistema, e $\{p_i\}$, os momenta

¹com Hamiltonianos independentes do tempo

conjugados ($i = 1, \dots, N$). A restrição sobre o Hamiltoniano é sobre a forma da energia cinética - quadrática nas velocidades² -, e sobre a função energia potencial $V(q)$, independente dos momenta. As variáveis q e p são contínuas; assim, define-se o espaço de fases do sistema, para o qual $\{q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N\}$ constituem uma base.

No âmbito da dinâmica conservativa de sistemas Hamiltonianos, o Hamiltoniano \mathcal{H} é uma integral do movimento, e o *locus* das trajetórias dinâmicas será o subconjunto de pontos $\{(q, p)\}$ do espaço de fases tais que $\mathcal{H}(q, p) = E$, onde E é a energia (constante) do sistema. O espaço de configurações acessível, M_E , é um subconjunto do espaço de configurações M , dado pela projeção em M do conjunto $\{(q, p)\}$ de estados com uma energia E fixa. Como a energia cinética é sempre positiva, M_E é definido por:

$$M_E = \{q \in M \mid V(q) \leq E\}, \quad (2.2)$$

que é naturalmente “folheado” pelas equipotenciais Σ_v :

$$\Sigma_v = \{q \in M \mid V(q) = v\}, \quad v \leq E. \quad (2.3)$$

As coordenadas (q_1, \dots, q_N) podem ser tomadas como coordenadas locais de M_E , a partir das quais se define uma estrutura diferenciável para a subvariedade.

Abordagens a transições de fase fazendo-se uso de conceitos e métodos de topologia já foram implementadas sobre o espaço de parâmetros termodinâmicos, *macroscópico*, de dimensão baixa.

A HT propõe, em contraste, a análise da topologia do *espaço de configurações* acessível do sistema, M_E , e investiga, assim, a origem *microscópica* das transições de fase.

2.1 Geometrização da Dinâmica Hamiltoniana

A aplicação do formalismo da Geometria Diferencial à dinâmica de sistemas Hamiltonianos clássicos com muitos graus de liberdade ($N \gg 1$) surgiu do intuito de inves-

²Estes sistemas são denominados *naturais*

tigar os regimes caóticos e regulares nos espaços de fases, e inclusive na fundamentação da Mecânica Estatística, através da teoria ergódica.

As soluções das equações de movimento de sistemas Hamiltonianos naturais, em que estão incluídos sistemas da forma (2.1), são regidas pelo princípio de Hamilton, que impõe que tais soluções, as trajetórias naturais dos sistemas, sejam os caminhos de integração $q = q(t)$ que extremizem o seguinte funcional:

$$\mathcal{S}_H = \int \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt, \quad (2.4)$$

onde $\mathcal{L}(q, \dot{q}) = T - V$ é o Lagrangiano do sistema (T é a energia cinética), ou, ainda, na forma de Maupertuis: $\mathcal{S}_M = 2 \int T dt$.

As geodésicas $\gamma(s)$ de uma variedade Riemanniana³, por sua vez, são os extremos do funcional:

$$\ell = \int_{\gamma(s)} ds, \quad (2.5)$$

onde ℓ é o comprimento da geodésica sobre a variedade e s é o parâmetro de comprimento de arco, e onde $ds^2 = \langle ds, ds \rangle = g_{ij} dq^i dq^j$, definido a partir da métrica g_{ij} no sistema de coordenadas locais (carta) (q^1, \dots, q^N) de M_E .

Uma métrica adequada para a geometrização da dinâmica é uma em que se impõe uma equivalência entre a ação de Hamilton \mathcal{S}_H (ou a de Maupertuis \mathcal{S}_M) e o comprimento de arco ℓ , que mapeie as trajetórias naturais dos sistemas físicos em geodésicas de variedades Riemannianas (ou suas projeções nos subespaços adequados). Partindo de \mathcal{S}_M , a “variedade mecânica” é identificada com M_E “equipada” com o tensor métrico $(g_J)_{ij} = [E - V(q)]\delta_{ij}$, (caso especial da) chamada métrica de Jacobi. Na métrica de Eisenhart [6], as trajetórias naturais, como extremos de \mathcal{S}_H , são projeções das geodésicas de um espaço de configurações ampliado ($\{q^0 \equiv t, \mathbf{q} = (q^1, \dots, q^N)\}$ mais uma coordenada real q^{N+1}), que satisfazem $ds^2 = C dt^2$, $C > 0$ (escolhe-se $C = 1$), onde $ds^2 = -2V(\mathbf{q})(dq^0)^2 + a_{ij}dq^i dq^j + 2dq^0 dq^{N+1}$ ($i, j = 1, \dots, N$, e aqui $a_{ij} = \delta_{ij}$). A partir da definição das métricas, se determina uma relação entre os parâmetros dt da dinâmica

³Em que o elemento de comprimento de arco (quadrático) ds^2 é definido e positivo. Quando ds^2 não é sempre positivo, a métrica é pseudo-Riemanniana (por exemplo, as métricas de Eisenhart e Minkowski).

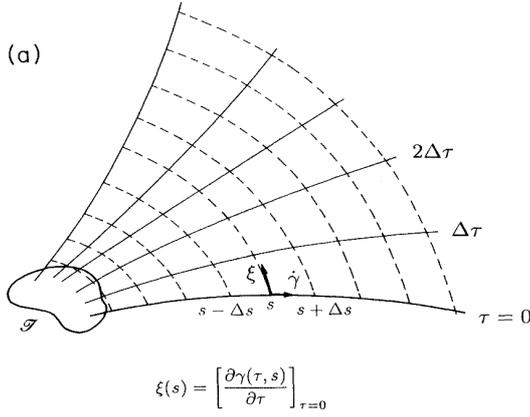


Figura 2.1: Ilustração qualitativa de um feixe de geodésicas, parametrizado por τ inicialmente distribuídas em uma vizinhança \mathcal{J} [7].

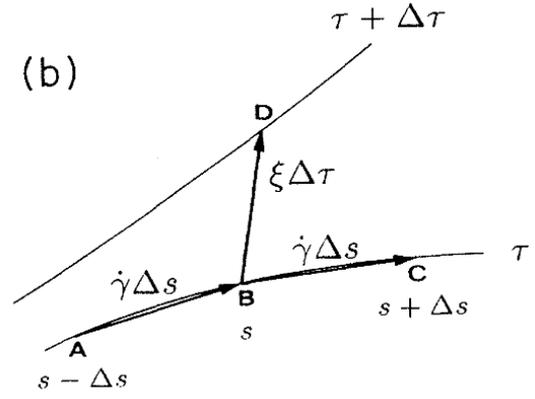


Figura 2.2: Representação do vetor separação ξ entre duas geodésicas, soluções das equações de movimento de um dado sistema. $\xi \Delta \tau$ é a distância entre os pontos B e D , ambos correspondendo a um mesmo valor do parâmetro de comprimento de arco s [7].

e ds das geodésicas da variedade, e entre as equações de movimento e as equações das geodésicas.

Para se estudar a estabilidade/instabilidade das trajetórias dinâmicas investiga-se a evolução do vetor separação $\xi^i = \tilde{q}^i - q^i$ entre duas trajetórias inicialmente próximas (ver figuras (2.1) e (2.2)). Sendo ambas trajetórias válidas do sistema, ambos $\tilde{q}^i(t)$ e $q^i(t)$ obedecerão às equações de movimento de Newton, donde a equação obedecida por ξ^i (em primeira ordem em ξ^i), é a equação da dinâmica tangente, $\ddot{\xi}^i = - \left(\frac{\partial^2 V(q)}{\partial q_i \partial q_j} \right)_{q=q(t)} \xi_j$. Se as soluções $|\xi|$ crescem exponencialmente com o tempo t , a trajetória é instável, e a dinâmica, caótica.

Da geometrização adequada da dinâmica, a instabilidade das trajetórias pode ser estudada através da instabilidade das geodésicas, ou seja, da evolução do vetor separação $J^i = \tilde{q}^i - q^i$ entre duas geodésicas $\tilde{q}^i(s)$ e $q^i(s)$ inicialmente próximas, que obedece à equação de Jacobi:

$$\frac{D^2 J^i}{ds^2} + \left(R_{jkl}^i \frac{dq^j}{ds} \frac{dq^l}{ds} \right) J^k = 0, \quad (2.6)$$

onde D/ds é a derivada covariante sobre a geodésica $q(s)$ e R_{jkl}^i são as componentes do tensor de curvatura de Riemann. Da mesma forma que $|\xi|$, a taxa de crescimento exponencial de $|J(s)|$ determinará a estabilidade ou instabilidade da geodésica. A equação de Jacobi depende apenas da curvatura da variedade, que por sua vez, dependerá da métrica

$[g_{ij}]$. Usando a métrica de Eisenhart, cada componente ξ^i pode ser identificada com cada componente J^i , e a equação (2.6) se reduz exatamente à equação da dinâmica tangente:

$$\frac{D^2 J^i}{ds^2} + R_{0k0}^i J^k = 0, \quad (2.7)$$

onde as únicas componentes não nulas do tensor de Riemann são $R_{0i0j} = \partial^2 V / \partial q^i \partial q^j$, $i, j = 1, \dots, N$.

A dinâmica caótica pode ser gerada por diversos mecanismos diferentes. Um dos mecanismos, que leva “trivialmente” à instabilidade das geodésicas, são valores negativos da curvatura seccional $K(P; \pi)$ ⁴. Para a grande maioria dos modelos físicos de sistemas com muitos graus de liberdade, observa-se, no entanto, que as curvaturas seccionais $K(P; \pi)$ das variedades correspondentes são quase sempre positivas, sendo as eventuais regiões com curvatura negativa reduzidas. Ainda assim, as geodésicas são na maioria instáveis. O mecanismo responsável pelo surgimento de caos nestes casos é denominado instabilidade paramétrica, que ocorrerá em variedades não isotrópicas, devido à sua curvatura *variável* ao longo das geodésicas. Este é um comportamento conhecido em soluções de equações diferenciais com coeficientes variáveis no tempo. Assim, o mecanismo gerador de caos ocorrendo com maior predominância em sistemas físicos com $N \gg 1$ estará relacionado a flutuações da curvatura $K(P; \pi)$, que não sejam desprezíveis, e até mesmo da ordem de $K(P; \pi)$.

Devido à grande dificuldade que representa o sistema de equações (2.6), algumas suposições devem ser feitas, que permitam uma análise da instabilidade das soluções J independentemente do conhecimento das trajetórias dinâmicas específicas [11]. As suposições essenciais são: (i) a variedade M_E é quase isotrópica, as componentes do tensor de Riemann ao longo de uma geodésica instável genérica podem ser aproximadas por $R_{ijkl} \sim \kappa(t)(g_{ik}g_{jm} - g_{im}g_{jk})$, onde $\kappa(t)$ é uma curvatura seccional efetiva (no caso isotrópico, a equação é exata e a curvatura seccional κ é uma constante (Teorema de Schur)); (ii) no limite de N grande a curvatura efetiva pode ser modelada por um processo estocástico Gaussiano e Markoviano, onde $\langle \kappa(t) \rangle_s$ e $\langle \delta^2 \kappa(t) \rangle_s^{1/2} = \sigma_K$ são dadas pela

⁴a curvatura seccional $K(P; \pi)$ no ponto P é relacionada à “projeção” do tensor de Riemann em um plano π gerado por dois vetores de $T_P M$, o espaço tangente a M_E no ponto P .

média e flutuações médias da curvatura de Ricci K_R ⁵. Admitida a ergodicidade das trajetórias, faz-se $\langle \cdot \rangle_s = \langle \cdot \rangle_\mu$, onde μ é a medida ergódica natural (a **microcanônica**). Substituindo a forma aproximada para R_{ijkl} na equação (2.7), obtém-se uma equação do tipo oscilador estocástico: $\frac{d^2\psi}{dt^2} + \kappa(t)\psi = 0$, onde ψ representa qualquer componente de J . Daí se obtém uma estimativa para o (maior) expoente de Lyapunov λ , ou a taxa de crescimento exponencial das soluções $|J|$ (no limite assintótico $t \rightarrow \infty$):

$$\lambda(k_0, \sigma_k, \tau) = \frac{1}{2} \left(\Lambda - \frac{4}{3} k_0 / \Lambda \right) \quad (2.8)$$

$$\Lambda = \left(\sigma_k^2 \tau + \sqrt{\left(\frac{4}{3}\right)^3 k_0^3 + \sigma_k^4 \tau^2} \right)^{1/3}, \quad (2.9)$$

onde $\tau = \tau(\kappa_0, \sigma_K)$ é o tempo de correlação do processo estocástico.

A dinâmica de sistemas Hamiltonianos não-lineares com $N \geq 3$, via de regra, não possuirá outra integral do movimento, que não a energia. O fato do número de integrais de movimento ser muito menor que N está relacionado à exploração e acessibilidade do espaço de fases às trajetórias, já que integrais de movimento estabelecem vínculos entre coordenadas e momentos, que confinam as trajetórias a certas regiões do espaço de fases. A não integrabilidade das equações de movimento, por sua vez, está relacionada ao comportamento caótico. Vê-se, assim, uma estreita relação entre dinâmica caótica⁶ e a propriedade de “phase mixing”⁷ da dinâmica, que dá suporte a toda a fundamentação da Mecânica Estatística. De fato, o grau de instabilidade dinâmica está ligado à eficiência da propriedade de “phase mixing”.

Transições de fase, inclusive as que não envolvem uma quebra de simetria óbvia, estão associadas com quebras da ergodicidade da variedade onde as trajetórias do sistema existem⁸. A ergodicidade é uma propriedade intrinsecamente dinâmica, e assim, a abordagem dinâmica pode ser adequada para estudar TFs.

Caos está, portanto, na origem do comportamento estatístico de sistemas Hamilto-

⁵A curvatura de Ricci $K_R(P, v)$ é dada pela soma das curvaturas seccionais $K(P, \pi_i)$ nos $(N - 1)$ planos π_i gerados pelo vetor v e todos os demais vetores da base ortonormal de $T_P M$.

⁶para a grande maioria das condições iniciais para uma trajetória no espaço de fases.

⁷Que garante a equivalência de médias temporais e de ensemble em *tempos finitos*.

⁸A quebra de ergodicidade ocorre quando a ergodicidade deixa de ser aplicada a toda a variedade, e passa a valer apenas em subvariedades desconexas desta.

nianos. Deste fato espera-se, em contrapartida, encontrar no comportamento do expoente de Lyapunov padrões peculiares na presença de transições de fase. Ademais, a geometrização da dinâmica de sistemas Hamiltonianos sugere que as variedades M_E , em que as trajetórias dinâmicas existem, devam apresentar por sua vez propriedades específicas na presença de TFs.

2.2 Geometria e Dinâmica Caótica nas Transições de Fase

2.2.1 Expoente de Lyapunov

A busca de assinaturas dinâmicas de transições de fase teve seu início na análise do comportamento do expoente de Lyapunov em função da temperatura T ou da densidade de energia $\epsilon = E/N$ para diferentes modelos. Embora o ensemble naturalmente associado à dinâmica seja o microcanônico, os resultados em função de T são qualitativamente equivalentes aos resultados obtidos em função de ϵ .

Na investigação do modelo de Heisenberg clássico, modelo XY, estudou-se o caso bidimensional, em que o sistema sofre uma transição do tipo Berezinsky-Kosterlitz-Thouless (BKT), que não envolve quebra espontânea de simetria, e separa uma fase desordenada de uma fase quase-ordenada⁹, juntamente com a versão tridimensional, que apresenta uma transição contínua “normal”, caracterizada pela quebra da simetria $O(2)$ da energia potencial [8] (o primeiro estudo do modelo $d = 2$ foi realizado por Butera e Caravati¹⁰ ainda na década de 80).

O Hamiltoniano deste modelo tem a forma (2.1) e sua energia potencial é dada por:

$$V(\phi) = - \sum_{\langle i,j \rangle} [\cos(\phi_i - \phi_j) - 1], \quad (2.10)$$

onde $\phi_i \in [0, 2\pi]$ são variáveis angulares, definidas nos sítios de uma rede hipercúbica d -dimensional, e $\langle i, j \rangle$ denota sítios primeiros vizinhos nas redes $d = 2, 3$. Na simulação numérica da dinâmica, calcula-se a temperatura como a média temporal da energia

⁹A transição BKT também é caracterizada como uma transição de ordem infinita, já que nenhuma derivada de ordem finita da energia livre é singular na transição.

¹⁰Butera, P.; Caravati, G. *Phys. Rev. A* **36** (1987) 962.

cinética do sistema para cada valor de energia $\epsilon = E/N$. O expoente de Lyapunov foi calculado numericamente para condições iniciais de equilíbrio, para cada valor de T . Os gráficos dos resultados numéricos de $\lambda \times T$ (figuras 2.3 e 2.4) mostram que o expoente de Lyapunov, embora não apresente comportamento singular em nenhum dos casos $d = 2, 3$, abaixo da transição se apresenta uma função rapidamente crescente e acima da transição se torna uma função lentamente decrescente. Em $d = 3$ a variação no comportamento de λ no ponto da TF é um tanto mais brusca. Pode-se dizer entretanto que os comportamentos em $d = 2, 3$, embora envolvendo diferentes tipos de transições, são bastante similares.

Outro modelo estudado, com Hamiltoniano da forma (2.1), foi o ϕ^4 em rede discreta, em dimensões $d = 2, 3$, tanto para variáveis ϕ escalares ([9], $d = 2$) quanto para variáveis vetoriais [10].

O modelo $d = 2$ com variáveis escalares foi abordado em [9], e sua energia potencial é dada por:

$$V = \sum_{\mathbf{i}} \left[\frac{J}{2} \sum_{\mu=1}^d (\phi_{\mathbf{i}+\mathbf{e}_\mu} - \phi_{\mathbf{i}})^2 - \frac{r^2}{2} \phi_{\mathbf{i}}^2 + \frac{u}{4!} \phi_{\mathbf{i}}^4 \right], \quad (2.11)$$

onde as variáveis $\phi_{\mathbf{i}} \in [-\infty, +\infty]$ são definidas sobre os sítios da rede bidimensional, e \mathbf{e}_μ são os vetores unitários na direção μ na rede. Os parâmetros r^2 e u são positivos. No presente caso com variáveis ϕ escalares, o modelo pertence à mesma classe de universalidade do modelo de Ising em mesma dimensão, por grupo de renormalização. O sistema sofre uma transição de fase contínua para $d > 1$. As equações de movimento, juntamente com as equações da dinâmica tangente foram resolvidas numericamente, fixados os parâmetros. Cada observável termodinâmico relevante (temperatura, calor específico, parâmetro de ordem) foi expresso pela média temporal de uma função de ϕ e $\pi = \dot{\phi}$. O comportamento crítico *termodinâmico* do sistema, obtido pela

abordagem *dinâmica* (temperatura, calor específico, parâmetro de ordem), reproduziu a transição de fase termodinâmica (reproduzindo expoentes críticos do modelo de Ising $d = 2$ - da mesma classe de universalidade - e os valores estimados para T_c e ϵ_c da

termodinâmica).

Na investigação das propriedades dinâmicas do sistema na transição de fase, o expoente de Lyapunov foi calculado numericamente para cada valor de ϵ . Para N grande, $\lambda(\epsilon)$ desenvolve um máximo que se aproxima de ϵ_c para valores crescentes de N , porém não há evidência de uma transição forte ou singular entre diferentes regimes em ϵ_c . Observou-se que λ cresce rapidamente com ϵ abaixo de ϵ_c , enquanto acima de ϵ_c se apresenta quase constante em ϵ (e eventualmente passa a ser uma função decrescente em direção a 0, pois o modelo é integrável em $\epsilon \rightarrow \infty$) (figura (2.5)). Ademais, observou-se que o comportamento de λ pode ser qualitativamente diferente, uma função monótona crescente de T ou desenvolver um máximo próximo a T_c , dependendo dos valores dos parâmetros r^2 e u .

A referência [10] trata do modelo ϕ^4 em três dimensões para variáveis escalares ($n = 1$) e vetoriais $n = 2, 4$ ¹¹. Neste caso a energia potencial é:

$$V = \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\alpha=1}^n \left[\sum_{\mu=1}^d (\phi_{\mathbf{i}+\mathbf{e}_\mu}^\alpha - \phi_{\mathbf{i}}^\alpha)^2 - \frac{m^2}{2} (\phi_{\mathbf{i}}^\alpha)^2 \right] + \frac{u}{4} \sum_{\mathbf{i}} \left[\sum_{\alpha=1}^n (\phi_{\mathbf{i}}^\alpha)^2 \right]^2, \quad (2.12)$$

onde as variáveis $\phi_i^\alpha \in [-\infty, +\infty]$, com $\phi_i = (\phi_i^1, \dots, \phi_i^n)$ são definidas sobre os sítios da rede tridimensional. m^2 e u são positivos. A energia potencial possui simetria $O(n)$. Estes sistemas sofrem transições de fase contínuas a temperaturas finitas correspondendo a uma quebra espontânea da simetria $O(1)$ discreta (\mathbf{Z}_2), e das simetrias contínuas $O(2)$ e $O(4)$.

Da integração numérica das equações de movimento para condições iniciais de equilíbrio em diferentes valores de ϵ , computou-se o (maior) expoente de Lyapunov λ através da média temporal de uma quantidade adequada. A evidência numérica é de uma mudança no comportamento de λ com T exatamente sobre a transição contínua, de uma função rapidamente crescente abaixo de T_c para uma função quase constante acima de T_c , e a função apresenta uma “bossa” em torno da temperatura de transição que para $N \rightarrow \infty$ pode se tornar uma singularidade. Entretanto, como se observa da figura (2.6), os comportamentos para as variantes do modelo, com simetrias $O(1)$, $O(2)$ e $O(4)$, não

¹¹ n é o número de componentes vetoriais do grau de liberdade ϕ .

são qualitativamente equivalentes.

Em [11] obteve-se um comportamento suave para $\lambda(T)$ em modelos em rede unidimensional com interações de curto alcance, os modelos FPU- β e XY, que *não* sofrem transição de fase de equilíbrio.

No que se refere a outros tipos de transição, foram estudados igualmente modelos com transições de fase do tipo líquido-sólido (de primeira ordem): em [12],[13], foram considerados um sistema de discos rígidos, um gás de Lorentz e um fluido com interações por potencial de Lennard-Jones em duas dimensões, nos quais o comportamento do maior expoente de Lyapunov em função da densidade do sistema se mostrou sensível à transição. O comportamento qualitativo de λ , no entanto, é muito variável de modelo a modelo.

Em conclusão aos resultados numéricos acima apresentados, supõe-se que o comportamento do expoente de Lyapunov de sistemas Hamiltonianos dinâmicos seja de fato sensível à presença de uma transição de fase no sistema. Entretanto, a dependência do comportamento de λ no tipo de transição de fase, por exemplo, não é mais notável que a dependência do comportamento nos diferentes modelos e até mesmo em valores dos parâmetros para um mesmo modelo, sendo assim difícil distinguir padrões indicadores de uma quebra espontânea de simetria, como no exemplo comparativo do modelo XY em $d = 2$ e $d = 3$. Em geral não há nenhum padrão universal aparente na mudança de regimes dinâmicos nas transições de fase. Em síntese, o expoente de Lyapunov, ainda que em geral acusativo de uma sensibilidade da dinâmica a transições termodinâmicas, não parece ser um observável adequado para a investigação da ocorrência de transições com quebra espontânea de simetria.

2.2.2 Observáveis Geométricos e Transições de Fase: Curvatura

No formalismo geométrico da dinâmica Hamiltoniana (seção 2.1), viu-se que o surgimento de caos está predominantemente ligado ao mecanismo ativado pelas flutuações da curvatura de Ricci, e, em particular, mostrou-se que estas possuem uma estreita relação com o expoente de Lyapunov da dinâmica. Nesta seção, serão apresentadas evidências de um comportamento não somente peculiar das flutuações de curvatura na presença de

transições de fase, mas certamente mais “distintivo” que o indicado pelo expoente de Lyapunov nos mesmos casos. Tais resultados sugerem, ademais, uma interpretação topológica da própria origem das transições de fase (pelo menos para aquelas envolvendo quebra espontânea de simetria).

Os resultados nesta seção enfocam as evidências da quebra espontânea de simetria característica de transições contínuas “convencionais”, em contraste com a transição BKT particularmente, que, apesar de contínua, não apresenta quebra de simetria.

No âmbito da métrica de Eisenhart, o observável dinâmico que corresponde à curvatura de Ricci ao longo de uma geodésica é o Laplaciano da energia potencial, $\nabla^2 V$. No caso do modelo XY, com a energia potencial dada por (2.10), obtém-se, para a curvatura de Ricci:

$$K_R = 2N - 2V = 2 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j). \quad (2.13)$$

A flutuação quadrática média de K_R , por grau de liberdade, é dada por:

$$\sigma_K = \frac{1}{N} (\langle K_R^2 \rangle - \langle K_R \rangle^2)^{1/2}. \quad (2.14)$$

As quantidades $\langle K_R \rangle$ e σ_K foram computadas numericamente, para cada valor de T , como médias temporais - independentemente portanto de medidas estatísticas - para os modelos XY $d = 2, 3$ em [8]. $\langle K_R \rangle$ apresentou comportamentos similares nos casos $d = 2$ e $d = 3$, apesar das transições em cada caso serem diferentes. Em particular, $\langle K_R \rangle$ inverte sua convexidade na região das transições, e, portanto, é influenciada pela presença das mesmas. O resultado mais interessante esteve nos comportamentos contrastantes de σ_K para $d = 2, 3$.

No modelo ϕ^4 com simetria $O(n)$, a curvatura de Ricci para a variedade “equipada” com a métrica de Eisenhart, é dada por:

$$K_R = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 V}{\partial (\phi_i^\alpha)^2} = Nn(2Jd - r^2) + u(n+2) \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (\phi_i^\alpha)^2. \quad (2.15)$$

A simulação numérica de $\langle K_R \rangle$ e σ_K , ao longo de trajetórias dinâmicas, como médias

temporais, foi realizada em [10, 9]. O comportamento de $\langle K_R \rangle$ como função da densidade de energia ϵ para o modelo ϕ^4 bidimensional, $n = 1$ [9] é qualitativamente análogo ao dos casos do modelo XY $d = 2, 3$ acima mencionado: $\langle K_R \rangle$ inverte sua convexidade próximo de ϵ_c . No entanto, este comportamento não se reproduz qualitativamente em outros modelos (que apresentam igualmente transições de fase com quebra espontânea de simetria) como os modelos ϕ^4 $d = 3$ com simetrias $O(n)$, $n = 1, 2, 4$ [10], em que as curvaturas de Ricci médias $\langle K_R \rangle$ de fato sofrem uma inversão de convexidade próximo ou sobre as transições, porém, diferentemente do caso acima descrito, também apresentam um mínimo em ou próximo de T_c . O comportamento de $\langle K_R \rangle$ é portanto altamente dependente dos modelos estudados.

Os resultados mais significantes destas análises [8, 10, 9] se apóiam nos comportamentos singulares das flutuações de curvatura σ_K , computadas numericamente para valores finitos de N , na presença de transições com quebra espontânea de simetria (modelo XY $d = 3$, fig.(2.7), modelo ϕ^4 $O(1)$ bidimensional, fig.(2.8) e modelos ϕ^4 $O(1)$, $O(2)$ e $O(4)$ tridimensionais, fig.(2.9)). Estas apresentam um pico acentuado, possivelmente singular, que, dentro da margem de erro numérico, ocorre em T_c ou ϵ_c .

Na ausência de quebra espontânea de simetria, nos modelos XY $d = 2$ [8] (fig.(2.10)) e ϕ^4 $d = 2$ com simetria $O(2)$ [10] (fig.(2.11)), não há nenhum comportamento singular, embora σ_K ainda se mostre sensível à presença da transição. Este comportamento pode ser qualificado como “intermediário” entre a ausência de transições e a ocorrência de transições com quebra espontânea de simetria. Não há evidências contrárias aos padrões observados.

Diferentemente do expoente de Lyapunov, as flutuações de curvatura se mostram observáveis adequados, por exemplo, para a investigação da existência de TFs com quebra de simetria, pois seu comportamento se mostrou, dentro dos exemplos acima descritos, qualitativamente o mesmo para diferentes modelos sofrendo os mesmos tipos de transições de fase, e dramaticamente diferente entre transições com e sem quebra espontânea de simetria. A sensibilidade do expoente de Lyapunov a transições de fase, assim, baseado na relação (2.9), pode ser entendida como consequência dos resultados expostos

nesta seção.

Em [9], a mesma análise para as médias temporais dos observáveis geométricos foi realizada com a métrica de Jacobi, em que foram calculadas a curvatura escalar \mathcal{R} através de sua expressão em função de observáveis dinâmicos, e a flutuação quadrática média $\sigma_{\mathcal{R}}$ de \mathcal{R} . Não se apresentam aqui as figuras correspondentes, porém vale notar que com a métrica de Jacobi a curvatura média ainda exibe um comportamento suave próximo a ϵ_c , ainda que seja afetado pela transição, enquanto a flutuação da curvatura mostra novamente um pico acentuado no ponto da transição com quebra de simetria. A persistência do comportamento das flutuações de curvatura na região crítica com métricas diferentes reforça a idéia, que será mais adiante explicada, de que a origem deste comportamento e, conseqüentemente, a origem de transições de fase (pelo menos as contínuas de ordem finita), esteja em um nível mais fundamental, isto é, nas propriedades topológicas das variedades dos sistemas.

2.2.3 Um resultado analítico: modelo XY campo médio

O modelo XY campo médio é de particular importância neste estudo, porque, além das assinaturas dinâmicas e geométricas da transição serem bastante fortes e inequívocas, este modelo também permite, como mais tarde se verá, uma descrição analítica das propriedades topológicas das variedades do espaço de configurações.

O modelo consiste de um sistema de rotores planares clássicos igualmente conectados, descrito por um Hamiltoniano da forma (2.1) com energia potencial dada por:

$$V(\phi) = \frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\phi_i - \phi_j)] - h \sum_{i=1}^N \cos \phi_i, \quad (2.16)$$

onde $\phi \in [0, 2\pi]$ representa o ângulo do rotor i com relação a uma direção fixada pelo vetor \mathbf{h} , o campo externo. A termodinâmica dos modelos ferromagnético e antiferromagnético foi resolvida em [14]. Considera-se aqui o caso ferromagnético $J > 0$, fazendo $J = 1$. Neste caso, no limite $h \rightarrow 0$, o sistema sofre uma transição contínua, com expoentes críticos clássicos, em $T_c = 1/2$ ou $\epsilon_c = 3/4$.

O expoente de Lyapunov λ , calculado numericamente como função de ϵ [15], para valores finitos de N , é positivo para $0 < \epsilon < \epsilon_c$, onde a dependência em ϵ é bastante independente de N , apresenta um máximo (acentuado) imediatamente abaixo de ϵ_c , e, no limite termodinâmico, vai abruptamente a zero exatamente sobre a transição, permanecendo nulo em todo o intervalo de energias acima de ϵ_c , já que nesta fase, o sistema é integrável, sendo equivalente a um conjunto de rotores desacoplados.

Em [16], confirmaram-se os resultados numéricos acima pela estimativa de $\lambda(\epsilon)$ através da relação (2.9). Da geometrização da dinâmica, se obteve analiticamente os comportamentos de $\langle K_R \rangle$ e $\sigma_K = \langle \delta^2 k_R \rangle$ em função de ϵ , no limite termodinâmico. Estas quantidades apresentaram comportamentos singulares em ϵ_c , como mostra a figura (2.13) para σ_k , em particular.

2.3 Transições de Fase e Topologia

As evidências descritas na seção anterior sugerem que o expoente de Lyapunov, calculado numericamente sobre trajetórias dinâmicas de equilíbrio, seja sensível à presença de transições de fase em geral, como consequência das propriedades de observáveis geométricos. As flutuações de curvatura de M_E , σ_K ou $\sigma_{\mathcal{R}}$, como médias temporais sobre as referidas trajetórias, demonstram sinais notáveis na presença das transições: um comportamento muito distinto para diferentes tipos de transições, em particular, em relação à presença ou ausência de quebra de simetria, sendo tal comportamento qualitativamente uniforme em modelos com transições similares.

Partindo-se deste comportamento bastante peculiar das flutuações de curvatura, perseguiu-se uma compreensão mais profunda do mesmo, e, por extensão, de transições de fase.

2.3.1 Origem Topológica das Flutuações de Curvatura Singulares

É possível encontrar uma correspondência entre o comportamento singular de flutuações de curvatura de uma variedade e uma mudança na topologia da mesma em modelos geométricos abstratos e simples de variedades [8, 10, 5].

Uma mudança na topologia de uma família de superfícies \mathcal{S}_ϵ , parametrizada por $\epsilon \in \mathbf{R}$, ocorre em um ϵ_c quando as superfícies $\mathcal{S}_{\epsilon < \epsilon_c}$ não são difeomórficas às superfícies $\mathcal{S}_{\epsilon > \epsilon_c}$, isto é, as primeiras não podem ser continuamente deformadas ou mapeadas nas últimas (ver Apêndice).

Em [8, 10, 5] estudaram-se as propriedades geométricas e topológicas de duas famílias de superfícies de revolução em dimensão 2 (dois). Uma superfície de revolução imersa no \mathbf{R}^3 pode ser obtida pela rotação de uma curva C (gráfico de $y = f(x)$) em torno de um dos eixos do plano Cartesiano. Em forma paramétrica, as coordenadas Cartesianas dos pontos de uma superfície de revolução podem ser expressas por:

$$\mathcal{S}(u, v) \equiv (x(u, v), y(u, v), z(u, v)) = (a(u) \cos v, a(u) \sin v, b(u)), \quad (2.17)$$

onde $a(u) = f(u)$ e $b(u) = u$ para a curva C rotada em torno do eixo vertical, e $a(u) = u$, $b(u) = f(u)$ para a curva C rotada em torno do eixo horizontal. u e v são coordenadas locais em \mathcal{S} , sendo $v \in [0, 2\pi]$ e u contido no domínio de definição de f .

As duas referidas famílias de superfícies estudadas são:

$$\mathcal{F}_\epsilon = (f_\epsilon(u) \cos v, f_\epsilon(u) \sin v, u) \quad (2.18)$$

$$\mathcal{G}_\epsilon = (u \cos v, u \sin v, f_\epsilon(u)), \quad (2.19)$$

parametrizadas por ϵ através de f_ϵ , onde

$$f_\epsilon(u) = \pm \sqrt{\epsilon + u^2 - u}. \quad (2.20)$$

As superfícies \mathcal{F}_ϵ e \mathcal{G}_ϵ são formadas a partir da revolução dos dois ramos (\pm) de f_ϵ . O intervalo de ϵ no qual $f_\epsilon \in \mathbf{R}$ é $[-1/4, +\infty)$.

As duas famílias de superfícies sofrem transições topológicas em um valor de ϵ , $\epsilon_c = 0$ para ambas. As variedades \mathcal{F}_ϵ são topologicamente equivalentes a um toro bidimensional, \mathbf{T}^2 (característica de Euler $\chi = 0$), para $\epsilon < \epsilon_c$, e tornam-se difeomórficas a uma esfera \mathbf{S}^2 ($\chi = 2$) para $\epsilon > \epsilon_c$. As variedades \mathcal{G}_ϵ , por sua vez, são difeomórficas a duas esferas ($\chi = 4$) para $\epsilon < \epsilon_c$, e a uma esfera ($\chi = 2$) para $\epsilon > \epsilon_c$.

Definida a métrica induzida de \mathbf{R}^3 sobre as superfícies¹², o comportamento das flutuações médias de curvatura nas transições topológicas, é analisado através da curvatura Gaussiana K das variedades¹³, que, para dimensão 2 coincide com a curvatura de Ricci. As médias são definidas como integrais sobre as variedades. As figuras (2.15) mostram que σ_K se torna singular em $\epsilon \rightarrow \epsilon_c$ para ambas famílias de superfícies, embora suas propriedades geométricas médias e topológicas sejam bastante distintas.

A mesma correspondência pôde ser estabelecida em uma generalização dos modelos acima para $\dim(M)$ (M sendo a referida variedade) grandes. O contexto natural para esta generalização é a Teoria de Morse, uma síntese da qual se encontra no Apêndice.

¹²Para uma superfície de dimensão k imersa no \mathbf{R}^n , parametricamente definida pelas equações $x^i = x^i(z^1, \dots, z^k)$, $i = 1, \dots, n$, onde (z^1, \dots, z^k) são coordenadas locais na superfície, a métrica induzida do \mathbf{R}^n na superfície é dada por $g_{ij}(z^1, \dots, z^k) = \sum_{m=1}^n \frac{\partial x^m}{\partial z^i} \frac{\partial x^m}{\partial z^j}$.

¹³A curvatura Gaussiana é o produto da recíproca de dois raios de curvatura da variedade.

Os resultados aqui descritos motivam o estudo da topologia e das propriedades geométricas de curvatura do espaço configuracional de um sistema físico. Neste caso, deve-se tomar o espaço de configurações como a variedade M relevante, e sua função energia potencial V , suave e com limite inferior finito, como uma função de Morse sobre esta variedade. Define-se uma métrica g sobre a mesma.

Quando $v(q)$ é uma função de Morse (ver Apêndice), as transições topológicas das variedades $M_u = \{q \in M \mid V(q) \leq u\}$ estão em correspondência biunívoca com os pontos críticos da função. Assim, se u_c é um valor crítico de V , as variedades $M_{u < u_c}$ não serão difeomórficas às variedades $M_{u > u_c}$. Deste modo, a determinação da estrutura topológica das variedades para todo u exige a determinação de todos os pontos críticos da função V , juntamente com os respectivos índices de Morse, o que, para N grande, pode ser um problema bastante complexo.

Uma alternativa à análise de toda a variedade M_u é tomarem-se apenas as equipotenciais Σ_u , com u na vizinhança de um valor crítico de $V(q)$, u_c [17]. Em uma generalização dos exemplos bidimensionais citados no início desta seção, parametrizou-se por u a família das equipotenciais correspondentes às funções (2.18)-(2.20), Σ_u , redefinindo-se $u_c = 0$. Computou-se numericamente a flutuação da curvatura Gaussiana σ_K ¹⁴ destas superfícies, $\sigma_K = \langle K^2 \rangle_{\Sigma_u} - \langle K \rangle_{\Sigma_u}^2$ como função de u na vizinhança de $u = u_c$.

Isto é possível independentemente da forma funcional específica de V , porque, sendo esta uma função de Morse, sempre existe, na vizinhança de um ponto crítico $x_0 \in M$ (sob uma rotação apropriada do sistema), um sistema de coordenadas locais, chamado carta (ou mapa) de Morse, tal que V poderá ser expressa por $V(x) = V(x_0) - \sum_{i=1}^k x_i^2 + \sum_{i=k+1}^N x_i^2$. k na equação é o índice de Morse do ponto crítico (número de autovalores negativos do Hessiano de $V(q)$ no ponto crítico). Na vizinhança de um ponto crítico, portanto, as $\Sigma_u \subset M_u$ são, geometricamente, quádricas não-degeneradas (hiperbolóides, elipsóides), que se tornam degeneradas em x_0 .

A figura (2.16) mostra que σ_K desenvolve um pico singular no valor crítico $u = 0$, correspondendo à superfície crítica. As propriedades (geométricas) das variedades (M_u, g) , estão de fato estreitamente ligadas às propriedades das superfícies $\{\Sigma_u\}_{u \leq u_c}$ ($u_c > 0$), o que é expresso na equação (redefinindo $u_{min} = 0$, $u_c > 0$):

$$\int_{M_u} f d\eta = \int_0^u dV \int_{\Sigma_V} f |_{\Sigma_V} \frac{d\omega}{\|\nabla V\|}, \quad (2.21)$$

¹⁴Mais especificamente, computaram-se as flutuações da curvatura de Gauss-Kronecker do modelo, que é uma generalização da curvatura Gaussiana para $dim(M) > 2$.

onde $d\omega$ é a medida induzida (por f) em Σ_V e f é uma função genérica.

Os resultados acima não estabelecem uma relação de necessidade da ocorrência de singularidades das flutuações de curvatura na presença de mudanças da topologia, e apenas sugerem a suficiência de (certas) transições topológicas para originar essas singularidades, também para variedades em dimensões altas.

Ademais, os exemplos aqui tratados não relacionam diretamente transições topológicas a transições de fase, apenas apresentam um fato comum a ambos fenômenos: assim como as transições de fase (pelo menos as com quebra espontânea de simetria)

em sistemas Hamiltonianos clássicos são acompanhadas por singularidades nas flutuações de curvatura (de Ricci) das variedades M_E , também transições topológicas de variedades Riemannianas M_u podem engendrar singularidades nas flutuações de curvatura (Gauss-Kronecker) das mesmas. Esta coincidência impõe uma forte sugestão heurística: a de que transições de fase com quebra espontânea de simetria estejam associadas a transições topológicas das variedades do espaço configuracional do sistema.

Entretanto, há também uma outra possibilidade independente para a origem de singularidades em σ_k associadas às transições de fase. As flutuações de curvatura na seção 2.2.2 foram obtidas como médias no tempo ao longo das trajetórias dinâmicas dos respectivos sistemas Hamiltonianos. As médias temporais nos trabalhos acima referidos se mostraram consistentes com as expectativas da Mecânica Estatística (quanto a observáveis termodinâmicos e estimativas relativas às transições), e portanto, coincidem em geral com médias de ensembles¹⁵. Assim, poder-se-ia argumentar que os padrões singulares encontrados para as flutuações de curvatura apenas refletem a tendência das medidas estatísticas de equilíbrio (de qualquer dos ensembles estatísticos) de se tornarem singulares na presença de transições de fase. E, se assim for, a hipótese topológica não é uma premissa necessária para o fenômeno das singularidades de σ_K nas transições de fase. A seção que segue se dedica à elucidação deste ponto.

¹⁵Desde que os tempos sejam suficientemente grandes, e, no caso do ensemble canônico, N seja suficientemente grande...

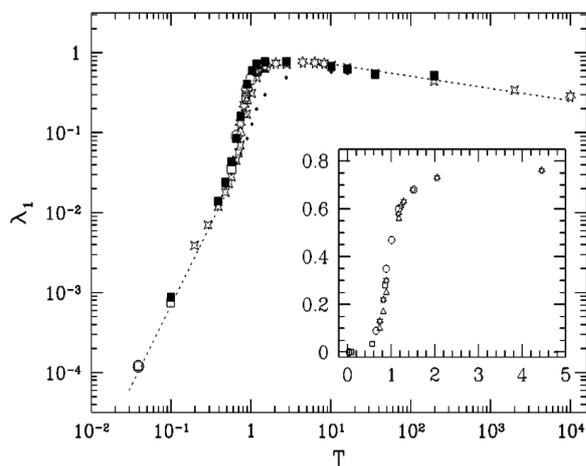


Figura 2.3: Expoente de Lyapunov λ contra T para o modelo XY $d = 2$. Os quadrados vazados estrelados se referem à simulação $N = 10 \times 10$, triângulos vazados, à rede $N = 20 \times 20$, as estrelas vazadas, a $N = 40 \times 40$, os quadrados vazados, a $N = 50 \times 50$, e os círculos vazados, a $N = 100 \times 100$. Os quadrados cheios correspondem a pontos obtidos analiticamente, assim como a curva pontilhada, em diferentes aproximações. $T_c \simeq 0.95$. [8]

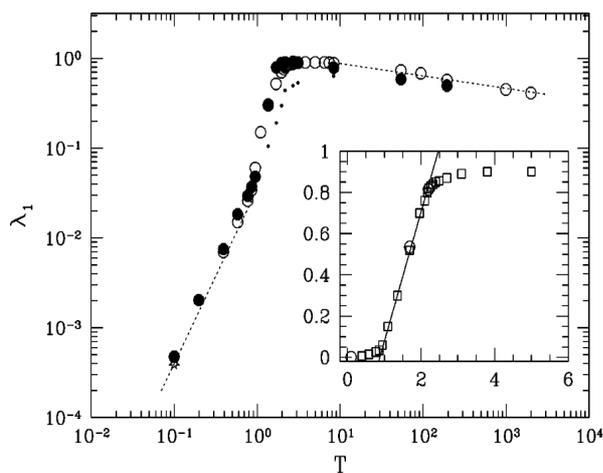


Figura 2.4: Expoente de Lyapunov λ contra T para o modelo XY $d = 3$. Os círculos vazados se referem à simulação $N = 10 \times 10 \times 10$, e as estrelas vazadas, a $N = 15 \times 15 \times 15$. Círculos cheios e a curva pontilhada referem-se a cálculos analíticos, em diferentes aproximações. Na inserção, quadrados vazados correspondem a $N = 10 \times 10 \times 10$ e círculos vazados, a $N = 15 \times 15 \times 15$. A transição de segunda ordem ocorre em $T_c \simeq 2.15$. [8]

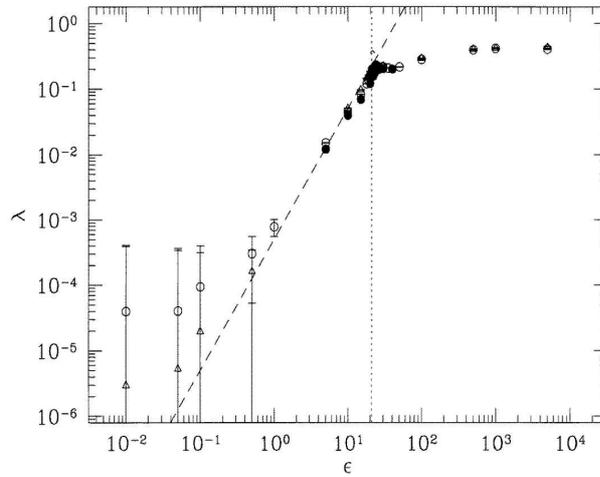


Figura 2.5: Expoente de Lyapunov λ contra energia por partícula ϵ para o modelo $\phi^4 O(1)$, $d = 2$. Círculos se referem à simulação $N = 100$, círculos vazios, a $N = 400$, os triângulos sólidos, a $N = 900$, e os triângulos vazios, a $N = 2500$. A linha vertical pontilhada marca a transição contínua, e a linha tracejada, a lei de potência $\lambda \propto \epsilon^2$. [9]

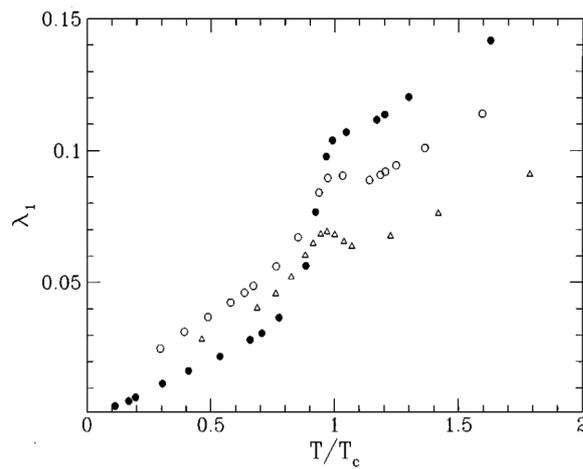


Figura 2.6: Expoente de Lyapunov λ contra ϵ para o modelo ϕ^4 $d = 3$. Os círculos sólidos se referem ao caso $O(1)$ (escalar), os círculos vazios, ao caso $O(2)$, e triângulos vazios, ao caso $O(4)$. $N = 8 \times 8 \times 8$. [10]

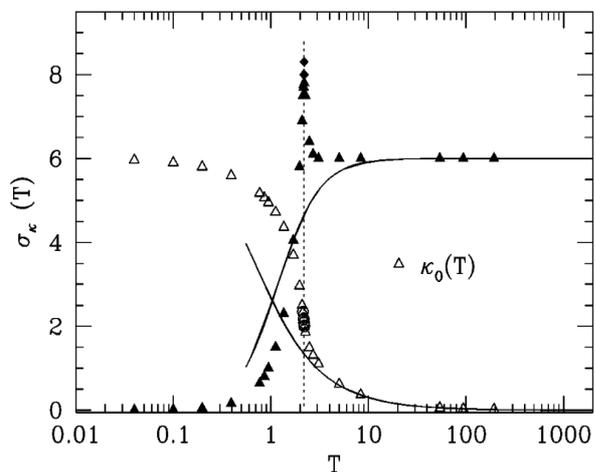


Figura 2.7: Flutuações da curvatura de Ricci (métrica de Eisenhart), $\sigma_K(T)$, contra T para o modelo XY tridimensional, representadas pelos triângulos cheios para a rede $N = 10^3$. Na mesma rede, triângulos vazados representam a curvatura de Ricci $\kappa_0(T)$. Às flutuações para a rede $N = 15^3$ correspondem os losangos cheios, e à curvatura de Ricci para a mesma rede, os círculos vazados. A curva sólida é uma estimativa microcanônica obtida por expansão de altas temperaturas. A transição contínua ocorre em $T_c \simeq 2.15$. [8]

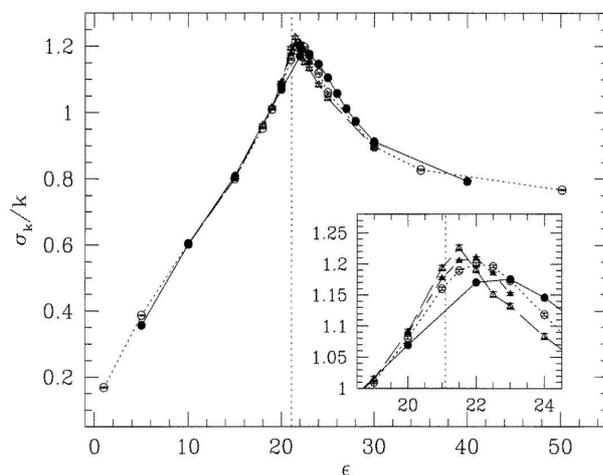


Figura 2.8: Flutuações de curvatura σ_K (métrica de Eisenhart), normalizada pela curvatura média k_0 , contra a temperatura T para o modelo ϕ^4 bidimensional $O(1)$, da simulação numérica nas redes quadradas $N = 100$ (círculos sólidos), $N = 400$ (círculos vazios), $N = 900$ (triângulos sólidos), $N = 2500$ (triângulos vazios).[9]

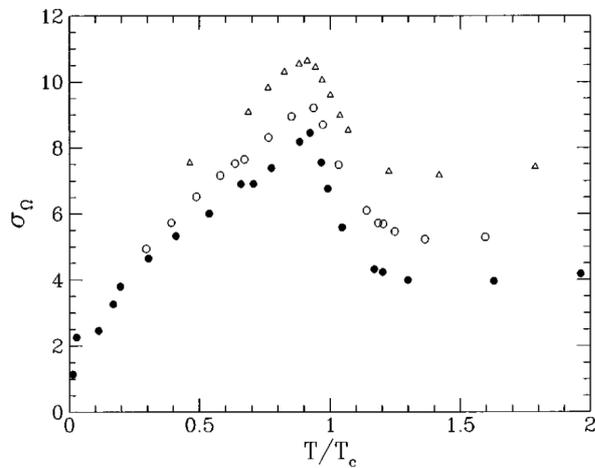


Figura 2.9: Flutuações da curvatura médias $\sigma_K(T)$ contra T/T_c para o modelo ϕ^4 tridimensional. Os círculos sólidos correspondem a $O(1)$, círculos vazios, ao caso $O(2)$, e triângulos vazios, ao caso $O(4)$. Simulações realizadas na rede cúbica $N = 8 \times 8 \times 8$. O comportamento de cúspide ocorre em $T \simeq T_c$, e parece tornar-se mais suave à medida que a dimensão n do grupo de simetria $O(n)$ cresce. [10]

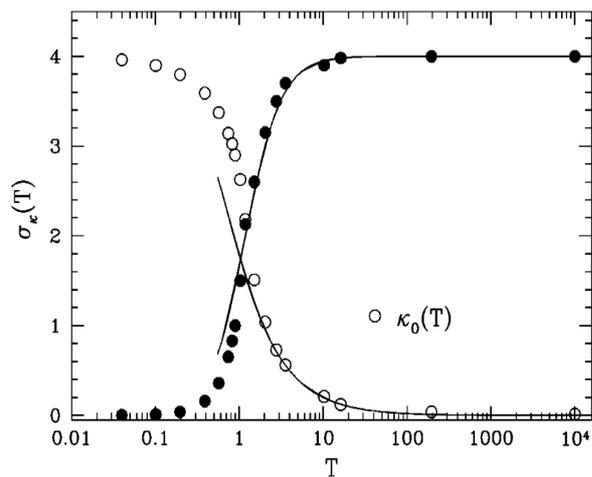


Figura 2.10: Flutuações da curvatura de Ricci (métrica de Eisenhart), $\sigma_K(T)$, contra T para o modelo XY bidimensional. Os círculos sólidos são resultados da simulação para $N = 40 \times 40$. Círculos vazios representam a curvatura de Ricci para a mesma rede. A linha sólida é a estimativa microcanônica. $T_c \simeq 0.95$. [8]

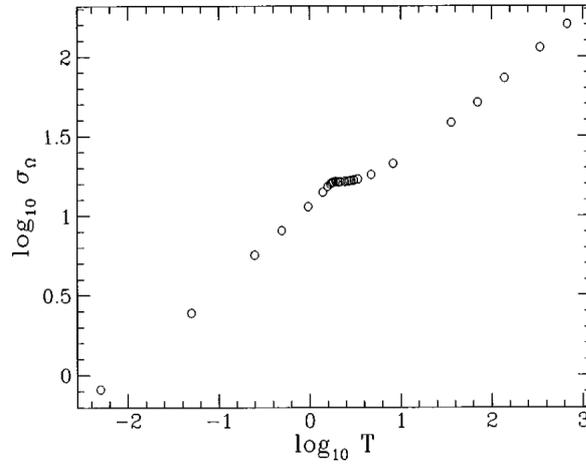


Figura 2.11: Flutuações de curvatura de Ricci médias σ_Ω contra T para o modelo ϕ^4 bidimensional $O(2)$, da simulação numérica na rede quadrada $N = 30 \times 30$. A temperatura crítica da transição BKT é $T_c \simeq 1.5$ e a cúspide não ocorre, σ_Ω cresce monotonicamente com T apesar da função parecer sensível à presença da transição. [10]

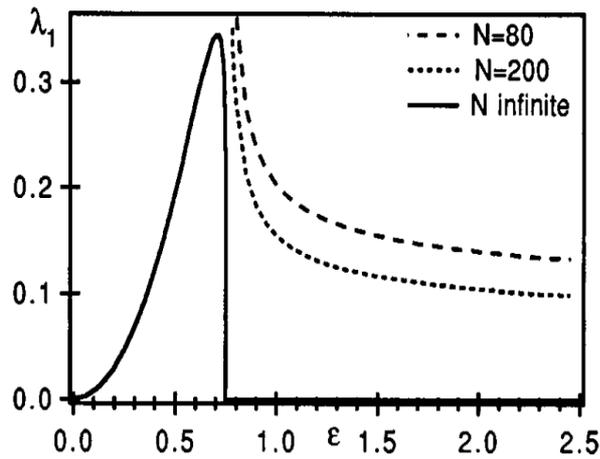


Figura 2.12: Expoente de Lyapunov λ contra ϵ para o modelo XY campo médio (curva sólida), eq.(2.9). As curvas tracejadas são correções analíticas ao limite de campo médio nas redes finitas $N = 80$ e 200 . Estas curvas tendem à curva sólida como $\lambda \propto N^{-1/3}$. A energia crítica da transição é $\epsilon_c = 0.75$. [16]

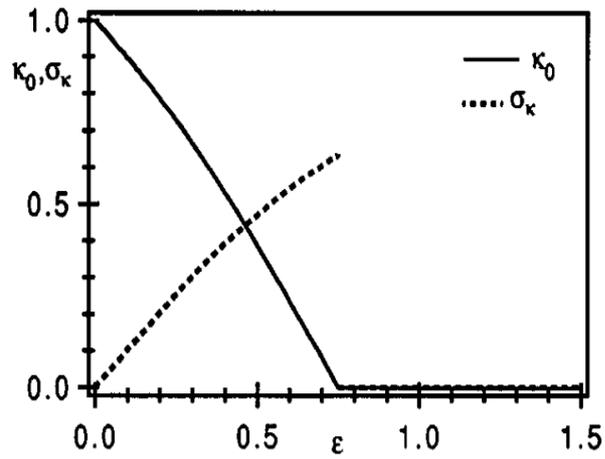


Figura 2.13: Curvatura de Ricci $K_R(\epsilon)$, analiticamente computada no ensemble microcanônico (curva sólida), e suas flutuações σ_K para o modelo XY campo médio. [16]

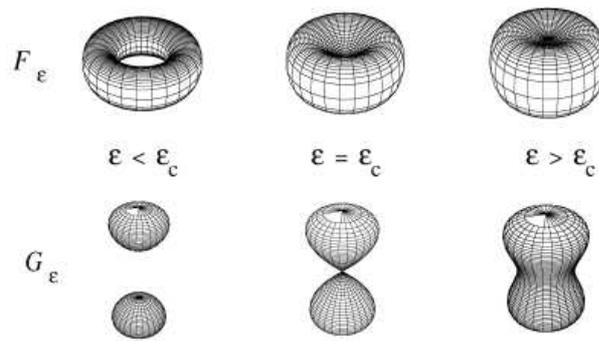
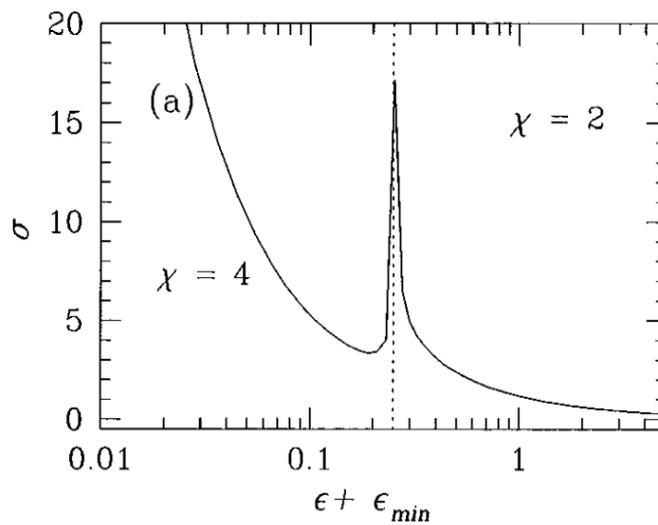


Figura 2.14: Representações das famílias \mathcal{F}_ϵ e \mathcal{G}_ϵ . Cada família é dividida em duas subfamílias pela superfície crítica correspondendo a $\epsilon_c = 0$. Os membros dentro de cada subfamília são difeomórficos entre si, enquanto que as duas subfamílias não são difeomórficas uma à outra. [5]



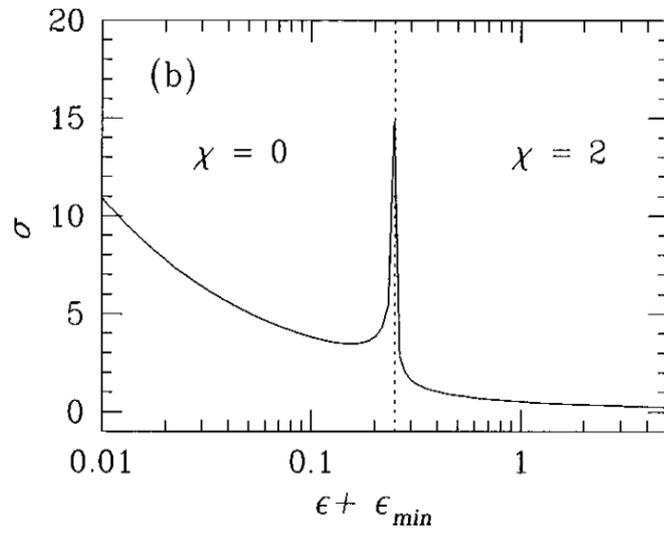


Figura 2.15: Flutuações σ_K da curvatura Gaussiana para as superfícies \mathcal{G}_ϵ em (a) e \mathcal{F}_ϵ em (b). A transição topológica em $\epsilon = 0$ ($\epsilon + \epsilon_{min} = 0.25$) é marcada por uma singularidade de σ_K . [10]

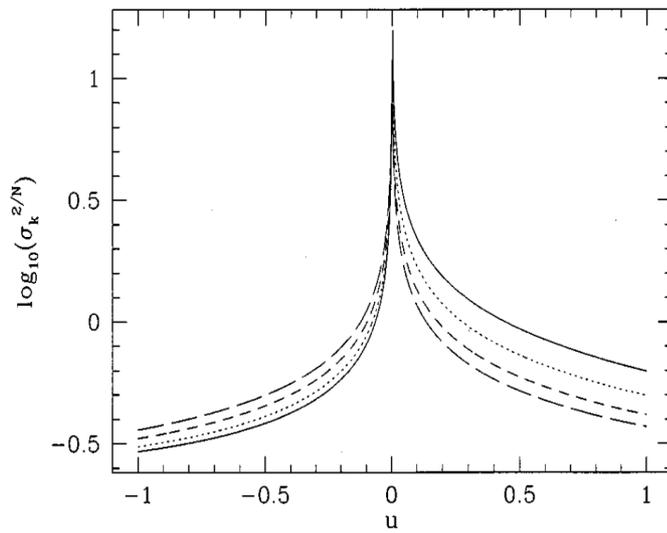


Figura 2.16: Flutuações σ_K da curvatura de Gauss-Kronecker de hipersuperfícies $V^{-1}(u)$ contra u na vizinhança de um valor crítico u_c . $\dim(V^{-1}(u)) = 100$, e os índices de Morse para cada curva são: $k = 1$ (sólida), $k = 15$ (pontilhada), $k = 33$ (tracejada), $k = 48$ (tracejado longo). [17]

2.3.2 Transições Topológicas e Termodinâmicas

Comprovação Indireta da Hipótese Topológica

Para determinar sem ambigüidades o efeito das transições topológicas das variedades do espaço configuracional no comportamento singular das flutuações de curvatura, singularidades estas que ocorrem nas transições de fase, considera-se aqui um modelo físico específico, porém desta vez, a medida definida para a média é puramente geométrica, sem nenhuma contrapartida estatística.

Considera-se o espaço de configurações M de um sistema Hamiltoniano com N graus de liberdade, que sofre uma transição de fase a uma temperatura finita T_c em $N \rightarrow \infty$. A sua energia potencial por grau de liberdade é denotada por $\nu(\phi) = V(\phi)/N$. Os objetos geométricos relevantes são as partes de M abaixo de um nível u de $\nu(\phi)$, M_u , já definidas na seção anterior.

Escolhe-se arbitrariamente uma métrica Riemanniana g sobre as variedades M_u , determinando-se assim o elemento invariante de volume de (M_u, g) : $d\eta = \sqrt{\det(g)} dq^1 \cdots dq^N$, que é independente de qualquer medida estatística. Definem-se as hipersuperfícies $\Sigma_u = \nu^{-1}(u)$, os conjuntos de nível¹⁶ de ν , que são os contornos ∂M_u de M_u . As topologias dos conjuntos de pontos M_u e Σ_u são determinadas pelas próprias definições.

A detecção de singularidades das flutuações da curvatura de Gauss-Kronecker de Σ_u é uma forma indireta de comprovar a ocorrência de transições topológicas na família $\{(M_u, g)\}$ em u_c [17].

Trabalhando com a curvatura escalar \mathcal{R} , e admitindo a estreita relação entre Σ_u e M_u , as simulações foram realizadas sobre $\mathcal{R} = g^{kj} R_{kij}^l$ das variedades (M_u, g) , para as flutuações $\sigma_{\mathcal{R}}$ [17].

Considera-se o modelo físico ϕ^4 escalar (simetria \mathbf{Z}_2 discreta) em rede d -dimensional \mathbf{Z}^d para $d = 1$ (que não sofre transição de fase), e em $d = 2$ (que sofre uma transição com quebra espontânea de simetria). Três métricas $g^{(k)}$ arbitrárias (numericamente tratáveis) foram escolhidas para o cálculo de $\sigma_{\mathcal{R}} \times u$: $g^{(1)}$ dada pela transformação conforme da

¹⁶Tradução literal do inglês “level sets”.

métrica plana Euclidiana, envolvendo $V(\phi)$, dada pela eq.(2.11); $g^{(2)}$ e $g^{(3)}$ sendo métricas não conformes, e não envolvendo o potencial físico.

A computação numérica de $\sigma_{\mathcal{R}}$ para os modelos $d = 1$ e $d = 2$ foi feita para as métricas $g^{(1)}$, $g^{(2)}$ e $g^{(3)}$. O observável a que corresponde \mathcal{R} é diferente em cada métrica, da mesma forma para $\sigma_{\mathcal{R}}$. Apesar disto, os resultados para as três diferentes métricas mostram que $\sigma_{\mathcal{R}}$ apresenta picos (que eventualmente se tornam singulares em $N \rightarrow \infty$, que não pode ser reproduzido numericamente) em um mesmo valor de u , u_c , para o modelo em duas dimensões, e apresenta um comportamento suave para o caso unidimensional (figuras (2.17) e (2.18)). Estes padrões, obtidos independentemente da mecânica estatística do modelo, se mostram igualmente independentes da estrutura geométrica dada à família $\{(M_u, g)\}$ através das diferentes métricas. Ademais, estes picos “singulares” de $\sigma_{\mathcal{R}}$ podem ser considerados comprovações *indiretas* da presença de uma (certa) mudança topológica da família $\{M_u\}$ no caso $d = 2$. As evidências sugerem, portanto, uma origem topológica (e não intrinsecamente geométrica) para as “singularidades” das flutuações.

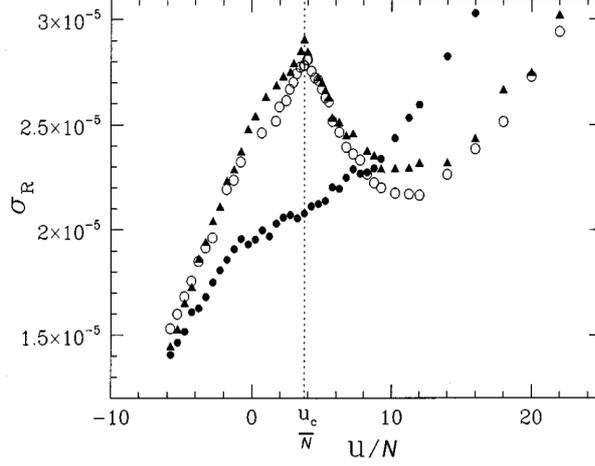


Figura 2.17: Variância da curvatura escalar de M_u com a métrica $g^{(1)}$, como função de u/N , para o modelo ϕ^4 . Círculos cheios correspondem ao caso 1-d para $n = 400$; para o caso 2-d, círculos vazios correspondem à rede com $N = 20 \times 20$, e triângulos cheios, à rede $N = 40 \times 40$ (valores reescalados). [17]

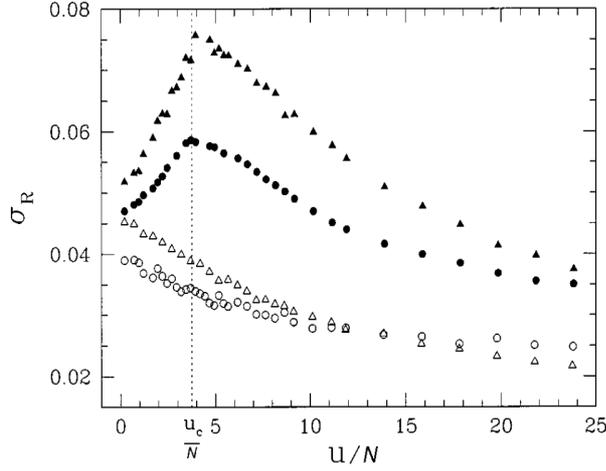


Figura 2.18: $\sigma_{\mathcal{R}}(u)$ de M_u para o modelo ϕ^4 com a métrica $g^{(2)}$: em 1-d, $N = 400$ (triângulos vazios), em 2-d, $N = 20 \times 20$ (triângulos cheios); com a métrica $g^{(3)}$: em 1-d, $N = 400$ (círculos vazios), em 2-d, $N = 20 \times 20$ (círculos cheios). [17]

A energia potencial média por grau de liberdade, $v(T) = \langle \nu(\phi) \rangle$ foi calculada numericamente, para cada valor de temperatura, no ensemble canônico, e pela dinâmica Hamiltoniana (médias temporais), e os resultados por ambos métodos coincidiram. A energia potencial média crítica obtida foi $v_c \simeq 3.75$. Das figuras (2.17) e (2.18) v_c , dentro da margem de erro numérico, coincide com o valor do parâmetro u_c onde ocorrem as singularidades de $\sigma_{\mathcal{R}}$.

Em síntese, tendo concluído que as “singularidades” de $\sigma_{\mathcal{R}}$ coincidem com a transição de fase contínua do modelo ϕ^4 , $d = 2$, também este fenômeno deve ter origem em

uma transição topológica das variedades M_u .

2.4 A Hipótese Topológica

Todo o formalismo e resultados expostos neste capítulo dizem respeito a sistemas Hamiltonianos naturais da forma (2.1), com variáveis $\{p_i\}$ e $\{q_i\}$ contínuas e cujo potencial $V(q)$ possui um limite inferior. No âmbito da Mecânica Estatística, em particular do ensemble canônico, o comportamento de equilíbrio destes sistemas pode ser completamente determinado através da função de partição canônica [5, 8, 21]:

$$\begin{aligned} Q_N(\beta) &= \int d^N p d^N q e^{-\beta \mathcal{H}(p,q)} = \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{N/2} \int d^N q e^{-\beta V(q)} \\ &= \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{N/2} \int_0^\infty du e^{-\beta u} \int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde $\beta = 1/T$, $\Sigma_u = \{(q_1, \dots, q_N) \in \mathbf{R}^N \mid V(q_1, \dots, q_N) = u\}$ são as equipotenciais do espaço de configurações, e $d\sigma$ é o elemento invariante de volume definido pela métrica induzida em Σ_u por \mathbf{R}^N . Da mesma forma no ensemble microcanônico para o volume no espaço de fases [20]:

$$\begin{aligned} \Omega_N(E) &= \int_0^E d\eta \int d^N q \Theta[V(q) - (E - \eta)] \int d^N p \delta\left(\sum_i \frac{1}{2} p_i^2 - \eta\right) \\ &= \int_0^E d\eta \int_0^{E-\eta} du \int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|} \int d^N p \delta\left(\sum_i \frac{1}{2} p_i^2 - \eta\right) \\ &= \int_0^E d\eta \frac{(2\pi\eta)^{N/2}}{\eta \Gamma(N/2)} \int_0^{E-\eta} du \int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Das equações (2.22) e (2.23) observa-se que para sistemas Hamiltonianos da forma considerada, os objetos não triviais estão contidos nas integrais $\int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|}$. Toda a informação sobre a medida estatística está contida nas demais integrais, já que a métrica $d\sigma$ tem origem puramente geométrica, e é determinada pela folheação natural do espaço de configurações nas equipotenciais Σ_u , assim que se define a função da energia potencial $V(q)$. Esta propriedade é o ponto de partida da Hipótese Topológica. Sabe-se ainda que

quanto maior N , menores são as flutuações de observáveis estatísticos do sistema em torno de suas médias. Assim, mais a projeção do suporte da medida microcanônica sobre o espaço de configurações “colapsa” a uma hipersuperfície $\Sigma_u = \Sigma_{\langle u(E) \rangle}$. Além disto, da equivalência dos ensembles estatísticos, também o suporte efetivo da medida canônica no espaço de configurações é $\Sigma_u = \Sigma_{\langle u(\beta) \rangle}$ (ver discussão no final do capítulo). Disto e como síntese dos resultados e evidências até aqui relatados, enuncia-se [5, 21]:

Hipótese Topológica (HT): A origem fundamental de uma transição de fase está em uma mudança topológica *adequada* da família $\{\Sigma_u\}$, em uma dada energia potencial por partícula $u_c(\beta_c)$ ($u_c(E_c)$), que coincide com o ponto crítico. Esta mudança topológica nas equipotenciais Σ_u , suporte efetivo da medida estatística, produz uma mudança na própria medida estatística, donde a origem do comportamento singular de observáveis termodinâmicos na transição.

Mudanças topológicas "abruptas" nestas variedades - suporte efetivo das medidas estatísticas - podem originar derivadas singulares no volume microcanônico $\Omega(E)$ ⁽¹⁷⁾ [18, 24]. Se este fato persiste a N crescente, esta mudança topológica resultará na perda de analiticidade de observáveis termodinâmicos em $N \rightarrow \infty$. Do ponto de vista desta hipótese, a singularidade da medida estatística na transição de fase, em u_c , é consequência das transições topológicas ocorrendo neste ponto.

A Hipótese conjectura a necessidade de transições topológicas no ponto da transição de fase, porém, não esclarece completamente as condições de *suficiência*. Os resultados da verificação da HT em modelos específicos, alguns descritos na seqüência do capítulo, fornecem algumas pistas neste sentido.

Investigação da topologia das variedades Σ_u

As *mudanças topológicas* das hipersuperfícies equipotenciais Σ_u ⁽¹⁸⁾ estão no sentido de uma *quebra de difeomorficidade* da família $\{\Sigma_u\}$ para o(s) respectivo(s) valor(es)

¹⁷O mesmo vale para o ensemble canônico (e grã-canônico), já que a função de partição canônica (e grã-canônica) é a transformada de Laplace de $\Omega(E)$ [27].

¹⁸Não necessariamente associadas a uma transição de fase.

da energia potencial por partícula u (Apêndice).

A investigação da topologia destas variedades se dá através de um conjunto suficientemente grande de objetos ou estruturas matemáticas convenientes, invariantes sob difeomorfismos, isto é, invariantes topológicos, definidos sobre as variedades Σ_u , capazes de caracterizar a topologia destas de forma unívoca e as variações de topologia dentro da família como função de u (ver Apêndice). Pela limitação prática óbvia da aplicação desta idéia à investigação de sistemas físicos específicos, a análise da topologia baseou-se em geral em um único invariante, em especial, a característica de Euler-Poincaré, χ , um invariante topológico cuja computação se torna possível através de resultados da Teoria de Morse, que é a ferramenta teórica utilizada na investigação (analítica). Ademais, no âmbito da Teoria de Morse as variedades naturalmente investigadas são as $\{M_u\}$, e dada a estreita relação já referida entre as variedades Σ_u e M_u , é sobre a última que se baseiam os trabalhos sobre a HT tratados adiante, com exceção do caso do modelo ϕ^4 , em que a computação de $\chi(u)$ foi numérica.

2.4.1 Confirmação da Hipótese Topológica em modelos físicos

No contexto do que foi proposto acima, a presente seção relata resultados de confirmações diretas da HT em modelos específicos.

Modelo ϕ^4

Para determinar quais as condições em que uma transição topológica origina uma transição de fase em uma dada energia potencial (média) v_c - e se isto de fato ocorre -, deve-se analisar o comportamento de um invariante topológico conveniente em função do parâmetro u .

Para o modelo ϕ^4 escalar, em $d = 1, 2$, escolheu-se a característica de Euler como invariante topológico, devido à disponibilidade de um teorema, o teorema de Gauss-Bonnet-Hopf, que permite a computação de $\chi(\Sigma_u)$ através da curvatura de Gauss-Kronecker

total das superfícies Σ_u [21]:

$$\chi(\Sigma_u) = \gamma \int_{\Sigma_u} K d\sigma, \quad (2.24)$$

que é válido para hipersuperfícies de dimensão *par* ($\dim(\Sigma_u) = N - 1$) imersas no \mathbf{R}^N , onde $\gamma = 2/\text{Vol}[\mathbf{S}_1^n]$ e $d\sigma$ é o elemento invariante de volume definido pela métrica induzida em Σ_u por \mathbf{R}^N . A computação de $\chi(\Sigma_u)$ através de (2.24) foi realizada portanto independentemente de qualquer medida estatística.

Os resultados, expressos nas figuras (2.19), (2.20) e (2.21), mostram, para o caso da rede unidimensional (sem transição), exceto por algum ruído numérico, um comportamento monotonicamente decrescente (em média) de $\chi(v/N)$ (v/N energia potencial por grau de liberdade). No caso bidimensional, em que ocorre a transição com quebra de simetria, $\chi(v/N)$ apresenta uma mudança abrupta na taxa de variação da topologia (uma mudança de “segunda ordem”) com v/N em um valor v_c/N . As simulações foram realizadas com os valores dos parâmetros da seção (2.3.2), e o ponto no qual ocorre a singularidade de $\chi(v/N)$, $v_c/N \simeq 3.75$, coincide com a energia potencial crítica calculada naquela seção para o mesmo modelo.

O comportamento não-constante de $\chi(v/N)$ no caso unidimensional induz à conclusão de que transições na topologia estão presentes ainda que não haja transição de fase. Ademais, o comportamento observado para o caso $d = 2$ sugere que seja uma mudança abrupta *na taxa de variação* da topologia que esteja na origem de transições de fase. Entretanto, o tipo (ou o “tamanho”) de transição topológica envolvida nesta descontinuidade na derivada de $\chi(v/N)$ não pode ser inferido somente do comportamento do invariante.

Modelo XY campo médio e unidimensional

O primeiro modelo a fornecer uma comprovação direta da Hipótese Topológica foi de fato o modelo XY campo médio (ferromagnético) [22]-[24]. Apresenta-se o desenvolvimento de forma mais detalhada porque os resultados sobre a HT neste modelo servirão de paradigma para comparação dos resultados obtidos no Modelo Esférico campo médio

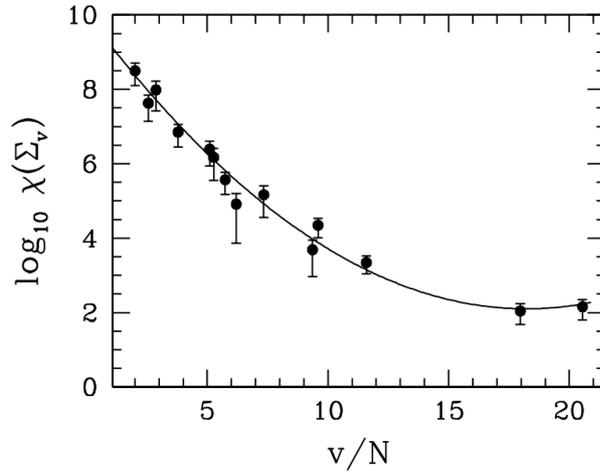


Figura 2.19: Característica de Euler $\chi(\Sigma_v)$ em função de v/N para o modelo ϕ^4 1-d, $N = 1 \times 49$. Parâmetros como na seção 2.3.2. [21]

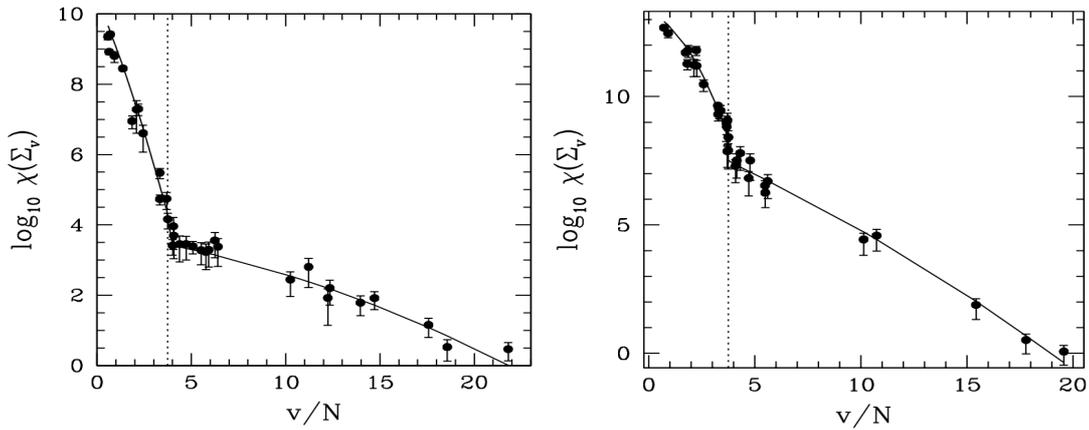


Figura 2.20: Característica de Euler $\chi(\Sigma_v)$ para o modelo ϕ^4 2-d, na rede $N = 7 \times 7$. A linha pontilhada vertical foi computada separadamente para a seção. 2.3.2 [21]

N muito grande, localiza de forma precisa a transição de fase. A linha sólida serve apenas de guia. Parâmetros como na seção 2.3.2. [21]

(Capítulo3). Neste caso é possível mostrar analiticamente que uma mudança topológica no espaço de configurações existe e pode ser relacionada com a transição de fase termodinâmica (descrita na seção 2.2.3).

Relembra-se que a energia potencial por partícula deste sistema é dada por:

$$\nu(\phi) = \frac{V(\phi)}{N} = \frac{J}{2N^2} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\phi_i - \phi_j)] - \frac{h}{N} \sum_{i=1}^N \cos(\phi_i), \quad (2.25)$$

onde novamente ϕ_i são variáveis angulares com valores dentro do intervalo $[0, 2\pi]$, e h é um campo magnético externo. Fixa-se $J = 1$. A energia potencial possui limites inferior e superior: $-h \leq \nu(\phi) \leq 1/2 + h^2/2$. Este sistema sofre uma transição de fase contínua com quebra espontânea de simetria no limite $h \rightarrow 0$, em $\epsilon_c = E_c/N = 3/4$ ou $T_c = 1/2$.

Como na seção 2.3.2, no presente caso fazendo-se uso da Teoria de Morse, investigou-se a topologia das variedades M_v , que, como já comentado, estão estreitamente relacionadas às equipotenciais Σ_v , e esta relação é tanto mais próxima quanto maior N (ver eq.(2.21)).

O espaço de configurações M do modelo é um N -toro \mathbf{T}^N (as variáveis são angulares), e a função definida sobre este é $\nu(\phi)$, que para campo $h \neq 0$, em que a invariância $O(2)$ de (2.25) é quebrada, é uma função de Morse própria. De acordo com a Teoria de Morse, transições topológicas na família $\{M_v\}$ ocorrem somente em correspondência com pontos críticos da função definida sobre as variedades (e, no caso de uma função de Morse, a correspondência é um-a-um), e as mudanças na topologia são completamente caracterizadas pelo número e índice dos pontos críticos (Apêndice). As variedades M_v , $v < -h$ são vazias, e M_v para $v > 1/2 + h^2/2$ devem ser difeomórficas a $M = \mathbf{T}^N$.

As soluções encontradas para os pontos críticos da função $\nu(\phi)$ são isoladas para $v \leq 1/2 < 1/2 + h^2/2$, e possuem em geral multiplicidade $\mathcal{O}(N!)$. Entre $v = 1/2$ e $v = 1/2 + h^2/2$ não ocorrem pontos críticos, e os pontos críticos em $v = 1/2 + h^2/2$ podem ser degenerados, e sua multiplicidade é pelo menos $\mathcal{O}(N!)$.

As variações na topologia para $v < 1/2 + h^2/2$ foram investigadas através da característica de Euler, que é dada por: $\chi(M_v) = \sum_{k=0}^N (-1)^k b_k(M_v) = \sum_{k=0}^N (-1)^k \mu_k(M_v)$, onde a segunda equação vale para funções de Morse, sendo μ_k o número de pontos críticos

de índice k que ocorrem em M_v . Do cálculo dos índices dos pontos críticos para campo h suficientemente pequeno, resulta que em cada nível crítico no intervalo $v < 1/2 + h^2/2$, ocorrem apenas pontos críticos com um mesmo único índice e que neste intervalo este índice nunca é maior que $N/2$. Assim, $\mu_k(v) = 0, \forall k > \frac{N}{2}$. Sabe-se, no entanto, que o toro se completa em $v = 1/2 + h^2/2$ e que os números de Betti b_k do N -toro completo são $b_k = \binom{N}{k} > 0$ para todo $k = 0, \dots, N$. Das desigualdades de Morse $b_k \leq \mu_k, k = 0, \dots, N$ conclui-se que, em $v = 1/2 + h^2/2$, $\binom{N}{k}$ k -células para cada $k \in [N/2 + 1, N]$ devem ser agregadas à variedade M_v em $v = 1/2 + h^2/2$, assim que não só ocorre uma transição topológica em $v = 1/2 + h^2/2$, como esta transição topológica corresponde a uma mudança em números de Betti de $\mathcal{O}(N)$ diferentes ordens, o que em [23] caracterizou-se como sendo uma transição topológica “grande”, principalmente em relação às demais transições ocorrendo em $v < 1/2 + h^2/2$.

A transição de fase ocorre no limite $h \rightarrow 0$, e assim a transição topológica acima referida ocorrerá em $v = v_c = 1/2$. No limite termodinâmico a temperatura T , a densidade de energia ϵ e a energia potencial média por partícula $u = \langle \nu \rangle$ obedecem a $\epsilon = T/2 + u(T)$, donde a energia potencial média crítica, correspondente à transição de fase é $u_c = v_c = 1/2$. A transição topológica “grande” acima descrita corresponde portanto à transição de fase do modelo.

A figura (2.22) mostra o gráfico de $\log(|\chi(M_v)|)/N$ contra v para diferentes valores de N , fazendo uso explícito do fato de que a variedade M , o N -toro, se completa em $v = 1/2 + h^2/2$, e, sendo $\chi(\mathbf{T}^N) = 0$ o gráfico sofre uma descontinuidade finita em $v = 1/2 + h^2/2$, de um valor finito (valor grande de $|\chi|$), para 0.

Em [22, 23] também se trata comparativamente o comportamento de $\chi(v)$ do modelo XY unidimensional com interações a vizinhos próximos, cuja variedade M_v sofre transições topológicas muito similares ao caso campo médio, mas que não sofre transição de fase. O Hamiltoniano é da forma (2.1) e a energia potencial por partícula é dada por ($J = 1$):

$$\nu(\phi) = \frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N [1 - \cos(\phi_{i+1} - \phi_i)] - \frac{h}{N} \sum_{i=1}^N \cos \phi_i. \quad (2.26)$$

Neste caso o espaço de configurações M ainda é um N -toro, a função sobre M , $\nu(\phi)$

é que se modifica. As soluções de pontos críticos são as mesmas do caso anterior para $v < 1/2 + h^2/2$, exceto que agora a sua multiplicidade é diferente. Em particular, o valor crítico máximo $v = 1/2$ agora, no lugar de corresponder a um número rapidamente crescente com N de pontos críticos, corresponde a apenas duas configurações.

A mudança na topologia que ocorre em cada valor crítico de ν corresponde aqui à “agregação” de células do mesmo tipo. E neste caso não há uma transição topológica “grande” como a que ocorre em v_c no caso campo médio. Comparando as figuras (2.22) e (2.23), vê-se que neste caso a característica de Euler não sofre nenhuma descontinuidade.

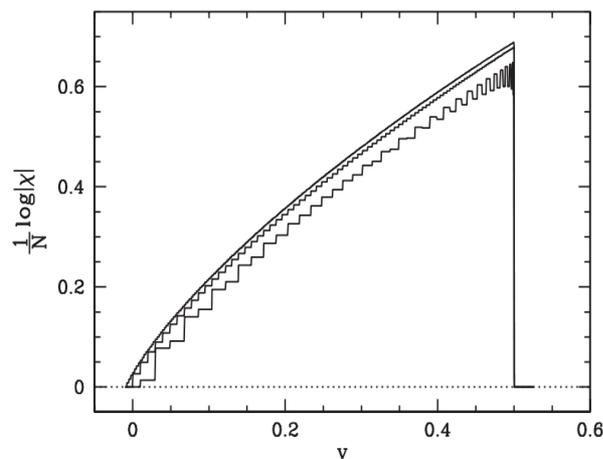


Figura 2.22: Modelo XY campo médio. Gráfico de $\log(|\chi|(M_v))/N$ contra v . $N = 50, 200, 800$ (respectivamente, para as curvas de baixo para cima) e $h = 0.01$; $v_c = 0.5 + \mathcal{O}(h^2)$. [23]

Neste trabalho, a inclusão do campo externo $h \neq 0$ na energia potencial teve como único objetivo a simplificação analítica da análise. Os mesmos resultados com respeito à

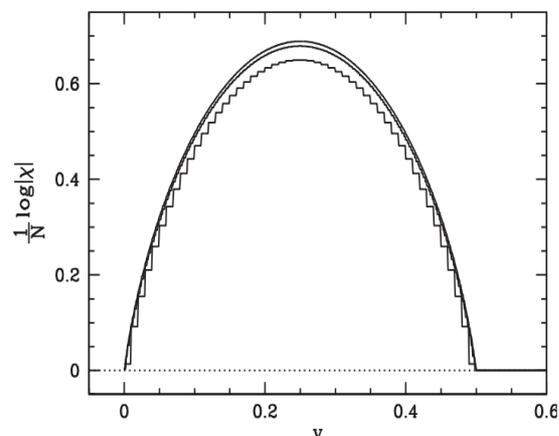


Figura 2.23: Modelo XY unidimensional. Gráfico de $\log(|\chi|(M_v))/N$ contra v . $N = 50, 200, 800$ (respectivamente, para as curvas de baixo para cima) e $h = 0$. [23]

presença e natureza das transições de fase foram encontrados para $h = 0$. Eventualmente, com $h \neq 0$, o conjunto dos valores críticos correspondentes às mudanças topológicas não associadas à transição de fase se torna denso no intervalo $[v_{min}, 1/2]$ quando $N \rightarrow \infty$. O valor crítico v_c , porém, antes de $h \rightarrow 0$, permanece isolado dos demais. Este aspecto que surge da inclusão de um campo não-nulo parece ser uma contrapartida topológica à questão da não comutatividade dos limites $N \rightarrow \infty$ e $h \rightarrow 0$, na obtenção da transição de fase na mecânica estatística, em que se observa uma quebra espontânea de simetria ao se assumir um campo não nulo e tomar-se $h \rightarrow 0$ apenas após $N \rightarrow \infty$.

Entretanto, há um outro aspecto um tanto negativo: a transição de fase termodinâmica só acontece após $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty}$, quando o campo é estritamente nulo. No entanto, como se vê da figura (2.22), o comportamento singular em $\log(|\chi|)/N$ já acontece tanto para N finito quanto h finito (de fato os dois limites estão “amarrados”), quando não há transição de fase associada e esta transição topológica “grande” não muda qualitativamente nos limites $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty}$, quando há.

Modelo k -trigonométrico

Uma outra confirmação analítica direta da HT foi obtida para o modelo k -trigonométrico em campo médio, com Hamiltoniano da forma (2.1) [25]. Este modelo permite testar a HT tanto para uma transição contínua quanto para uma de primeira ordem, e fornece um exemplo de comparação com o caso sem transição. A energia potencial possui similaridades funcionais com a do modelo XY campo médio:

$$V_k(q) = \frac{\Delta}{N^{k-1}} \sum_{i_1, \dots, i_k} [1 - \cos \frac{2\pi}{L} (q_{i_1} + \dots + q_{i_k})], \quad (2.27)$$

que define interações de k -corpos, onde Δ e L são escalas de energia e comprimento, respectivamente, as somas nos i_α vão de 1 a N , e os termos com coordenadas q_i repetidas são subextensivos. Para $k = 1$ o modelo se reduz ao Modelo Trigonométrico (Madan e Keyes) para Superfícies de Energia Potencial de líquidos simples que formam vidros.

A termodinâmica do modelo foi resolvida dentro do ensemble microcanônico, e as curvas calóricas T/Δ contra e/Δ ($k_B = 1$) mostram a ausência de transição no caso

$k = 1$ (o que é esperado pois neste caso não há interação entre os graus de liberdade), e $T(e)$ é uma função contínua e suave; no caso $k = 2$, a função $T(e)$ desenvolve uma derivada descontínua em uma energia e_c , indicando uma transição de segunda ordem (contínua), e no caso $k = 3$, a curva $T(e)$ é descontínua em um valor diferente da energia, indicando uma transição de primeira ordem (figura (2.24)). O valor da energia potencial nas transições $\forall k \geq 2$ é $v_c = \Delta$. No ponto da transição e_c , a simetria C_{kv} é quebrada, sendo o parâmetro de ordem a “magnetização” $m = \langle |c + is| \rangle$; abaixo da energia crítica e_c há k estados transformados uns nos outros pela ação do grupo de simetria. Neste caso a quebra de simetria também ocorre para a transição de primeira ordem.

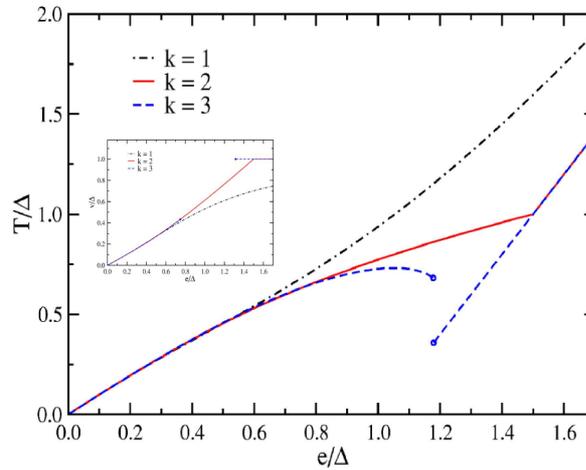


Figura 2.24: Temperatura microcanônica como função da energia para $k = 1, 2, 3$. No detalhe, a energia potencial v contra a energia total e ; o ponto da transição é $v_c = \Delta$, $\forall k$. A região $v > 1$ nunca é acessada pelo sistema.[25]

Na investigação topológica o ferramental teórico foi o da Teoria de Morse. Portanto foram analisadas as mudanças de topologia nas subvariedades M_v do espaço de configurações em função de v , através do cálculo analítico da característica de Euler $\chi(M_v)$.

Na figura (2.25) grafica-se, como no modelo XY acima, $\sigma(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log |\chi(v)|$.

Do quadro no detalhe da fig.(2.24), para v/Δ contra e/Δ , observa-se que a região $v > \Delta$ não é acessível ao sistema, e da fig.(2.25), que tal região corresponde a $\sigma'(v) < 0$. Vê-se que na ausência de transição ($k = 1$) σ é uma função regular, analítica de v ; para $k = 2$, onde ocorre uma transição contínua, a derivada primeira de $\sigma(v)$ é descontínua em $v_c = v(e_c) = \Delta$, e a derivada segunda é negativa em torno do ponto crítico; finalmente, para $k = 3$, em que ocorre a transição de primeira ordem, a derivada primeira de $\sigma(v)$ também

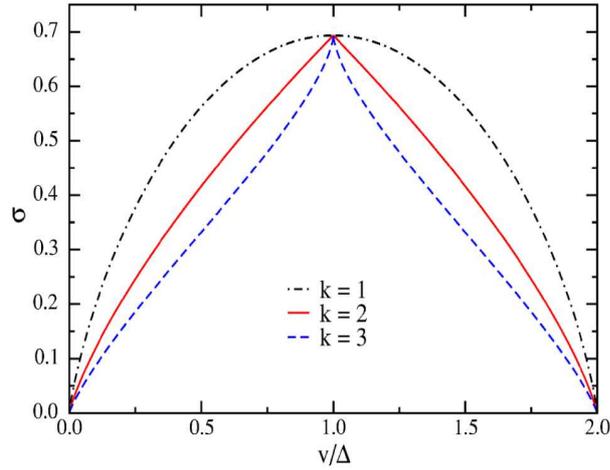


Figura 2.25: $\sigma(v)$ (característica de Euler logarítmica) contra v/Δ . A transição de fase é assinalada por uma singularidade de $\sigma'(v_c)$, em $v_c = \Delta$. O sinal da segunda derivada em torno do ponto crítico diferencia as ordens das transições.[25]

apresenta uma descontinuidade em v_c , porém sua derivada segunda é positiva em torno de v_c . Percebe-se neste caso que transições de diferentes tipos (ordens) possivelmente apresentam assinaturas topológicas próprias. Este trabalho, sendo o primeiro a verificar a Hipótese Topológica para uma transição de primeira ordem¹⁹, é de particular importância na validação desta hipótese como uma possível teoria para transições de fase.

2.4.2 Teorema sobre uma relação de necessidade

Comenta-se aqui uma importante contribuição teórica ao formalismo da HT. Trata-se de um teorema, provado em [26, 27]²⁰, que estabelece a *necessidade* de uma transição topológica na família de hipersuperfícies equipotenciais $\{\Sigma_v\}_{v \in \mathbb{R}}$, em um dado valor v_c da energia potencial, para a ocorrência de uma transição de fase de primeira ou segunda ordem neste mesmo ponto v_c . O teorema se aplica a potenciais “suaves”, confinantes, não singulares, envolvendo interações de alcance finito, com limite inferior (finito), funções de coordenadas contínuas. A prova consiste em mostrar que o difeomorfismo entre equipotencias Σ_v em um certo intervalo de v garante que a seqüência de energias livres de Helmholtz $\{F_N(\beta)\}_{N \in \mathbb{N}}$ seja uniformemente convergente, tendo um limite F_∞ bem definido e sendo pelo menos de classe \mathcal{C}^2 , duas vezes diferenciável, de modo que tran-

¹⁹É válido notar que a transição de primeira ordem neste modelo apresenta quebra espontânea de simetria.

²⁰Ver substituição posterior do artigo [27] nas versões mais recentes [28, 29].

sições de primeira ou segunda ordem não podem ocorrer no intervalo de temperaturas correspondente.

As condições de *suficiência*, definindo uma classe de transições topológicas em correspondência um-a-um com transições de fase, ainda não foram determinadas.

2.5 Questões abertas e Perspectivas

O teorema referido na seção anterior valida a Hipótese Topológica e parece fazer intuir para uma classe ampla de potenciais físicos, que a Topologia Diferencial é a estrutura teórica adequada no estudo das transições de fase, pelo menos das de primeira e segunda ordem. Não há, no entanto, nenhuma prova das condições de *suficiência* para que transições topológicas ocorrendo em um dado valor da energia potencial originem uma transição de fase, e, por extensão, a rigor, também não há garantia de que este formalismo matemático, aplicado ao espaço configuracional de sistemas físicos, seja suficiente na descrição de suas transições de fase. O que é certo é que, com base nos resultados expostos neste capítulo, em particular na seção 2.4.1, apesar de necessária uma quebra de difeomorficidade na família $\{\Sigma_u\}$ no ponto da transição, uma transição topológica qualquer em geral não conduzirá a uma transição de fase. A prova de uma relação um-a-um entre transições de fase e uma certa classe de transições topológicas é providencial ao desenvolvimento desta prolífica área de pesquisa.

A abordagem topológica fornece um campo comum para a dinâmica e a termodinâmica. De fato, as trajetórias dinâmicas do sistema em equilíbrio no espaço de fases são restritas ao suporte da medida estatística, e a topologia das variedades que compõem este suporte, que se mostrou na origem mesmo das transições de fase, influenciará também as trajetórias dinâmicas. De fato, a pesquisa que conduziu à HT começou na busca de assinaturas dinâmicas de transições de fase. Como o estudo da dinâmica engloba equivalentemente (micro)estados de equilíbrio e metaestáveis, esta abordagem pode adicionar à compreensão de transições de fase em sistemas complexos como por exemplo vidros de spin - sistemas que apresentam desordem congelada - ou vidros estruturais - com desor-

dem auto-induzida -, que se supõe possuírem uma fase termodinâmica real desordenada - sem ordem de longo alcance - a baixas temperaturas.

As teorias correntes [1, 4] sobre transições de fase termodinâmicas são baseadas na perda de analiticidade de observáveis termodinâmicos no âmbito de ensembles estatísticos. Esta perda de analiticidade entra em conflito com a regularidade e analiticidade das medidas estatísticas geradas a partir das interações microscópicas dos sistemas. Assim, a única maneira de levantar este aparente paradoxo é levar o sistema ao limite termodinâmico. Sistemas macroscópicos, ainda que contendo um número finito de graus de liberdade, são bem aproximados pelo comportamento no limite $N \rightarrow \infty$.

Porém, transições de fase são observadas em muitos sistemas finitos ($N \ll$ número de Avogadro): em *clusters* nucleares, atômicos e moleculares, em polímeros e proteínas (como no processo de denaturação do DNA) e em flocos de neve, que sofrem fusão para água líquida. No contexto da HT, as transições topológicas ocorrem para qualquer N , oferecendo uma nova perspectiva para o estudo de transições de fase em sistemas finitos. Em particular, a HT foi recentemente verificada em um modelo de DNA sofrendo denaturação [30].

Da relação observada entre topologia e termodinâmica, é de se esperar que exista uma relação entre quantidades topológicas e observáveis termodinâmicos. Uma relação, ainda que aproximada, foi encontrada em [18] entre o inverso da temperatura e os números de Betti de Σ_E , porém, ainda há uma contribuição de natureza não topológica a $1/T(E)$. De forma análoga, uma contribuição topológica à entropia é proposta em [23]. Neste trabalho, foi possível estimar esta contribuição para o modelo XY campo médio e unidimensional. Mostrou-se que esta quantidade apresenta comportamentos condizentes aos de uma entropia: é monotonicamente crescente com a energia potencial até o valor máximo de v , acima do qual permanece constante, como se espera de uma entropia configuracional. Ademais, a contribuição topológica à entropia do modelo campo médio apresenta uma derivada descontínua no ponto da transição v_c , o que sugere ser a origem da perda de analiticidade da entropia total na transição, enquanto no modelo unidimensional a função é suave. No caso do modelo k -trigonométrico [25], conjectura-se uma relação

entre a entropia e $\sigma(v)$ em torno da transição (seção 2.4.1): $s(e) \sim \sigma(v(e)) + \mathcal{R}(e)$. De fato, em torno da transição de primeira ordem, a derivada segunda de $\sigma(v)$ é positiva, e $\partial^2 S/\partial E^2 > 0$ corresponde a um calor específico negativo, uma região termodinamicamente instável. Neste sentido, o salto na derivada segunda de $\sigma(v)$ corresponde a um salto no calor específico na transição.

A dinâmica dos sistemas aqui considerados é conservativa, isto é, está confinada às superfícies de energia constante Σ_E no espaço de fases. Parece natural investigar a relação entre a topologia destas hipersuperfícies no espaço de fases e as transições de fase nos sistemas. Entretanto, a HT se refere à topologia das equipotenciais Σ_u no espaço de configurações. Existe de fato uma relação entre as mudanças topológicas nas superfícies (equienergéticas) no espaço de fases Σ_E , e as mudanças topológicas nas equipotenciais Σ_u no espaço de configurações. As trajetórias de sistemas Hamiltonianos são restritas às hipersuperfícies Σ_E . Ao tomar-se Σ_E como a variedade ambiente, o Hamiltoniano \mathcal{H} (energia potencial mais energia cinética) do sistema assumiria o papel da função de Morse sobre a variedade. Porém, os pontos críticos de \mathcal{H} são dados por $\{(\phi, \pi) \in \Gamma \mid \pi_i = 0 \text{ e } \nabla_i V(\phi) = 0, \forall i\}$, correspondendo a energia cinética nula. Assim, se a análise topológica "correta" abrangesse as hipersuperfícies Σ_E , no lugar de restringir-se às equipotenciais Σ_u - sem menção à energia cinética neste caso -, a energia *potencial* média crítica deveria coincidir com a energia *total* média crítica, o que de fato não acontece.

Aliado a isto, as flutuações relativas das energias cinética e potencial, $\langle \delta^2 K \rangle^{1/2} / \langle K \rangle$ e $\langle \delta^2 V \rangle^{1/2} / \langle V \rangle$, são $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$. Portanto, a uma dada energia E e para N grande, a variedade produto $\Sigma_{u(E)}^{N-1} \times \mathbf{S}_{t(E)}^{N-1}$ ⁽²¹⁾ - com $u(E) = \langle V \rangle / N$, $t(E) = \langle K \rangle / N$ e $u + t = E$ -, do ponto de vista físico, modela bastante bem a parte da variedade Σ_E que é acessada com muito maior probabilidade pela dinâmica e se constitui no suporte²² efetivo da medida microcanônica em Σ_E . A uma dada energia total E , a dinâmica do sistema acaba ficando quase certamente confinada à variedade $\Sigma_{u(E)}^{N-1} \times \mathbf{S}_{t(E)}^{N-1} \subset \Sigma_E$, a microestados com energia

²¹Pela forma do Hamiltoniano (2.1), pode-se concluir que as superfícies de energia cinética constante são hipersferas \mathbf{S}^{N-1} .

²²O suporte de uma distribuição \mathcal{P} em um espaço U é o menor conjunto fechado em U fora do qual \mathcal{P} é zero [19].

potencial $\langle V \rangle/N$ e energia cinética $\langle K \rangle/N$. Como as subvariedades de energia cinética constante são hipersferas \mathbf{S}_t^{N-1} para qualquer t , a variedade $\Sigma_u^{N-1} \times \mathbf{S}_t^{N-1}$ sofrerá uma transição topológica se e somente se a família de equipotenciais $\{\Sigma_u\}$ sofrer uma transição na sua topologia. Restringe-se assim a investigação topológica às subvariedades N -dimensionais do espaço de configurações $M: \{\Sigma_u\}$ [18, 5].

No contexto desta argumentação pode surgir ainda uma questão: se as flutuações de quantidades termodinâmicas em transições de fase contínuas são divergentes mesmo no limite termodinâmico, é lícito afirmar, como foi argumentado acima, que justamente nos pontos críticos a análise topológica dever-se-ia restringir às equipotenciais Σ_u no espaço de configurações?

Capítulo 3

O Modelo Esférico e a Hipótese

Topológica

Este capítulo traz a aplicação da Hipótese Topológica sobre o Modelo Esférico ferromagnético, em particular, na aproximação de campo médio¹, e os resultados parciais do modelo a dimensão finita. Desenvolve-se primeiramente a termodinâmica do modelo em campo magnético externo nulo, localizando a transição de fase. A seguir, o mesmo desenvolvimento é feito para o modelo na presença de um campo externo (não-nulo), que destrói a transição. Apresenta-se então o estudo da topologia das variedades M_u no âmbito da Teoria de Morse, sem e com campo externo, analisando as transições topológicas da família $\{M_u\}$ com a variação do parâmetro u . Testa-se assim a HT sobre este modelo, pela comparação da termodinâmica e da topologia, donde surgem resultados interessantes, que, por uma parte corroboram o teorema provado em [27], e por outra, fornecem evidências inesperadas com respeito à questão da suficiência das transições topológicas na origem de transições de fase.

3.1 Definição do modelo

Dispõem-se N spins sobre uma rede regular, com uma dada geometria, descritos

¹Ribeiro Teixeira, Ana C.; Stariolo, Daniel A. a ser publicado em *Phys. Rev. E* - referência definitiva em [31].

pelas variáveis ϵ_i , onde $i=1, \dots, N$ denota um sítio nesta rede. O modelo esférico em dimensão finita foi proposto, juntamente com o modelo Gaussiano, em [32], como uma variação do modelo de Ising no limite de graus de liberdade contínuos.² O modelo esférico reproduz algumas características do modelo de Ising, como $\langle \epsilon_i \rangle = 0$ (fase paramagnética), $\langle \epsilon_i^2 \rangle = 1$. No espaço Cartesiano das variáveis de spin $\{\epsilon_i\}$, as configurações acessíveis ao sistema, em ambos modelos, obedecem à equação:

$$\sum_{i=1}^N \epsilon_i^2 = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \dots + \epsilon_N^2 = N, \quad (3.1)$$

entretanto, o modelo de Ising descreve configurações restritas aos vértices de um hiper-cubo N -dimensional definidas por $\{\epsilon_i = \pm 1\}$ (variáveis discretas), e o modelo esférico, configurações restritas a uma hipersfera N -dimensional (“circunscrevendo” o hiper-cubo): $\epsilon_i \in (-\sqrt{N}, +\sqrt{N})$. A resolução da termodinâmica do modelo de Ising em duas dimensões é bastante trabalhosa³, e o caso tridimensional, que possui transição de fase em temperatura finita, não possui solução analítica até o momento. A “vantagem” teórica do modelo esférico, bem como do modelo Gaussiano, é a de serem exatamente solúveis. E ainda, o modelo esférico é bem definido sobre todo o intervalo de temperaturas, enquanto a função de partição do modelo Gaussiano, por exemplo, diverge para $T < T_c$ (T_c , a temperatura crítica), e este modelo falha nesta região.

A energia potencial dos três modelos, em particular para o modelo esférico, dentro das respectivas definições e restrições para as variáveis de spin, descreve uma interação de pares, dada por:

$$V = -\mathcal{J} \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j - H \sum_{i=1}^N \epsilon_i, \quad (3.2)$$

onde $\sum'_{i,j}$ denota a soma sobre todos os pares de interação consistentes com a geometria da rede, \mathcal{J} é a constante de interação entre os spins devidamente normalizada, e H é um campo magnético externo homogêneo (no qual foi absorvido o momento de spin μ_0). Para o modelo esférico, considera-se o caso ferromagnético, $\mathcal{J} > 0$.

²Ising, E. *Z. Phys.*, v. **31** (1925) 253.

³Onsager, L. *Phys. Rev.*, v. **65** (1944) 117.

A função de partição do modelo esférico é dada por:

$$Q_N(\beta) = A_N^{-1} \int \cdots \int_{\sum_{j=1}^N \epsilon_j^2 = N} d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N \exp\left[K \sum_{i,j}' \epsilon_i \epsilon_j + h \sum_{i=1}^N \epsilon_i\right], \quad (3.3)$$

onde $K = \mathcal{J}/k_B T = \beta \mathcal{J}$ e $h = H/k_B T$.

$$A_N = \int \cdots \int_{\sum_{j=1}^N \epsilon_j = N} d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N = 2\pi^{N/2} N^{\frac{1}{2}(N-1)} / \Gamma(N/2) \quad (3.4)$$

é o volume do espaço de configurações acessível (superfície da hipersfera de raio \sqrt{N}).

Uma forma de restringir as variáveis de spin à hipersfera do espaço de configurações, é impor o vínculo esférico (3.1) à função de partição através de uma delta de Dirac:

$$Q_N(\beta) = A_N^{-1} \int \cdots \int d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N e^{[K \sum_{i,j}' \epsilon_i \epsilon_j + h \sum_{i=1}^N \epsilon_i]} \delta\left(N - \sum_{j=1}^N \epsilon_j^2\right). \quad (3.5)$$

Usando a representação integral da função delta (sua transformada de Fourier):

$$Q_N(\beta) = A_N^{-1} \int \cdots \int d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N e^{[K \sum_{i,j}' \epsilon_i \epsilon_j + h \sum_{i=1}^N \epsilon_i]} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{[is(N - \sum_{j=1}^N \epsilon_j^2)]}. \quad (3.6)$$

Mudando o caminho de integração no plano s complexo do eixo real para o eixo imaginário, $is \rightarrow s$, $ds \rightarrow -i ds$,

$$Q_N(\beta) = A_N^{-1} \int \cdots \int d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N e^{[K \sum_{i,j}' \epsilon_i \epsilon_j + h \sum_{i=1}^N \epsilon_i]} \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} ds e^{[s(N - \sum_{j=1}^N \epsilon_j^2)]}. \quad (3.7)$$

A fim de inverter a ordem das integrações em s e em $\{\epsilon_i\}$, é necessário que (todas) as integrais sejam absolutamente convergentes. Uma integral $\int_0^\infty f(x) dx$ é absolutamente convergente quando $\lim_{X \rightarrow \infty} \int_0^X |f(x)| dx$ existe e é finito. Ora, a forma quadrática $K \sum_{i,j}' \epsilon_i \epsilon_j$ não é definida negativa (e s é imaginário). Contudo, pode-se usar o vínculo

esférico (que é aplicado na integração em s), e escrever:

$$\begin{aligned} K \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j &= N\alpha_0 - N\alpha_0 + K \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j \\ &= N\alpha_0 - \alpha_0 \sum_{j=1}^N \epsilon_j^2 + K \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Escolhendo-se α_0 real e positivo, e suficientemente grande, faz-se o argumento do integrando $e^{[K \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j - s \sum_{i=1}^N \epsilon_i^2]}$ definido negativo. Assim:

$$Q_N(\beta) = \frac{A_N^{-1}}{2\pi i} \int_{\alpha_0 - i\infty}^{\alpha_0 + i\infty} ds e^{sN} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N \exp \left[-s \sum_{j=1}^N \epsilon_j^2 + K \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j + h \sum_{i=1}^N \epsilon_i \right], \quad (3.9)$$

onde $s = \alpha_0$ é uma linha no plano s -complexo à direita de todas as singularidades do integrando $e^{sN} \int d\epsilon e^{[-s \sum_{j=1}^N \epsilon_j^2 + K \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j + h \sum_{i=1}^N \epsilon_i]}$, como função de s , geradas pela integração nos $\{\epsilon_i\}$.

Agora, a matriz de interação \mathbf{M} , definida por $\epsilon^T \cdot \mathbf{M} \cdot \epsilon = \sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j$ (onde $\epsilon = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_N)$ é um vetor coluna) é uma matriz real e simétrica, donde existe uma transformação ortogonal \mathbf{V} que a diagonaliza, sendo

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{V}_k = \lambda_k \mathbf{V}_k, \quad \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}, \quad (3.10)$$

onde \mathbf{V}_k é a coluna k da matriz de transformação e \mathbf{I} , a matriz identidade. Aplicando tal transformação sobre os fatores da forma quadrática:

$$(\epsilon^T \cdot \mathbf{V}) \cdot (\mathbf{V}^T \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{V}) \cdot (\mathbf{V}^T \cdot \epsilon) = \sum_{j=1}^N \lambda_j y_j^2, \quad (3.11)$$

onde λ_j é um autovalor da matriz \mathbf{M} e $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \epsilon$ é o vetor que descreve o estado do sistema na base dos autovetores $\{\mathbf{V}_k\}$. Os autovalores e autovetores da matriz \mathbf{M} dependem da rede estudada.

Fazendo no momento $h = 0$, a integração nos $\{\epsilon_i\}$ se torna:

$$\begin{aligned}
& \int \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \cdots dy_N \exp\left[\sum_{j=1}^N (-s + K\lambda_j) y_j^2\right] \\
&= \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j \exp[(-s + K\lambda_j) y_j^2] \\
&= \pi^{N/2} \left[\prod_{j=1}^N (s - K\lambda_j) \right]^{-1/2} \\
&= \pi^{N/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln(s - K\lambda_j)\right], \tag{3.12}
\end{aligned}$$

onde é claro a definição de α_0 exige que $\Re(s - K\lambda_j) > 0, \forall j$, o que pode ser expresso por $\alpha_0 > K|\lambda_{max}|$. Obtém-se portanto:

$$Q_N(\beta) = \frac{A_N^{-1} \pi^{N/2}}{2\pi i} \int_{\alpha_0 - i\infty}^{\alpha_0 + i\infty} ds \exp\left[Ns - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln(s - K\lambda_j)\right]. \tag{3.13}$$

Fazendo $s = 2Kz$, obtém-se:

$$Q_N(\beta) = \frac{A_N^{-1} \pi^{N/2}}{2\pi i} 2K e^{-\frac{N}{2} \ln 2K} \int_{z_0 - i\infty}^{z_0 + i\infty} dz \exp\left[2KNz - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln\left(z - \frac{\lambda_j}{2}\right)\right], \tag{3.14}$$

onde $z_0 > \frac{1}{2}\lambda_{max}$.

Nas próximas seções se tratará da versão campo médio do modelo, e mais adiante, o modelo em rede a dimensão finita será abordado.

3.2 Modelo esférico campo médio

No caso campo médio cada spin é igualmente acoplado com todos os demais, isto é, o número de coordenação da rede é N e a rede não possui geometria espacial definida. Os somatórios na função $V(\epsilon)$ (3.2) são irrestritos, cada spin interage igualmente com todos os outros (a auto-interação de cada spin consigo mesmo é subextensiva e portanto não é explicitamente excluída).

3.2.1 Termodinâmica

A resolução da termodinâmica da versão campo médio do modelo esférico segue aproximadamente o raciocínio do desenvolvimento para o caso em rede a dimensão finita, apresentado em [32].

Campo externo nulo

Define-se:

$$\begin{aligned} f(z) &= \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=1}^N \ln\left(z - \frac{1}{2}\lambda_j\right), \\ g(z) &= 2Kz - \frac{1}{2}f(z). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Assim:

$$Q_N(\beta) = \frac{A_N^{-1} \pi^{N/2}}{2\pi i} 2K e^{-\frac{1}{2}N \ln 2K} \int_{z_0 - i\infty}^{z_0 + i\infty} dz e^{Ng(z)}. \quad (3.16)$$

Sendo $f(z)$ e $g(z)$ $\mathcal{O}(1)$, pelo método do ponto de sela [33], expandindo $e^{Ng(z)}$ em torno de z_s :

$$Q_N(\beta) \simeq \frac{2K \pi^{N/2} e^{-\frac{1}{2}N \ln 2K + Ng(z_s)}}{A_N [2\pi N (\partial^2 g / \partial z^2)_{z_s}]^{1/2}}, \quad (3.17)$$

onde o ponto de sela z_s é o máximo absoluto de $g(z)$ sobre o caminho de integração. Ora, $g(z)$ é analítica na região $\Re(z) \geq z_0$. O caminho de integração aqui é uma reta “paralela” ao eixo imaginário. Das condições de Cauchy sobre funções analíticas, o máximo da função $g(z)$ sobre o caminho de integração será seu mínimo sobre o eixo real. Assim, o ponto de sela z_s é definido por:

$$\left(\frac{\partial g}{\partial z}\right)_{z_s} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}\right)_{z_s} > 0, \quad (3.18)$$

e o caminho de integração foi deformado de maneira que $z_0 = z_s$.

Faz-se necessário agora especificar a matriz M através da forma quadrática $\sum'_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j$. O caso aqui considerado é o campo médio, isto é, em que todos os spins são igualmente

acoplados. Assim:

$$K \sum_{i,j}' \epsilon_i \epsilon_j = \beta \mathcal{J} \sum_{i,j=1}^N \epsilon_i \epsilon_j (1 - \delta_{ij}), \quad (3.19)$$

em que foram excluídos os termos de auto-interação dos spins. Agora, \mathcal{J} é a constante de interação entre spins devidamente normalizada. No caso campo médio, a normalização apropriada é $\mathcal{J} = \frac{J}{2N}$, onde J é a interação “real” de cada par de spins, o fator 1/2 compensa a contagem de cada par duas vezes no somatório duplo, e o fator N , o número de coordenação, é necessário a fim de que a energia potencial V seja extensiva. É conveniente então redefinirem-se as quantidades: $\mathcal{J} = \frac{J}{2N} \rightarrow \mathcal{J} = \frac{J}{2}$ e $\lambda_j \rightarrow \frac{1}{N} \lambda_j$.

Desta maneira, a matriz \mathbf{M} terá a seguinte forma:

$$\frac{1}{N} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 0 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

que é uma matriz do tipo Toeplitz, cujos autovalores, arranjados em ordem decrescente, são:

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{(N-1)}{N} \\ \lambda_i = -\frac{1}{N}, \quad i = 2, \dots, N \end{cases} \quad (3.21)$$

e os correspondentes autovetores na base “dos spins”:

$$\mathbf{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V}_i = \begin{matrix} i \rightarrow \\ i+1 \rightarrow \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad i > 1. \quad (3.22)$$

A transformação \mathbf{V} é ortogonal, assim, a forma do vínculo esférico se conserva na base $\{\mathbf{V}_i\}$: $\sum_{i=1}^N y_i^2 = N$.

Voltando às equações do ponto de sela (3.18), tem-se:

$$2K = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)_{z_s}. \quad (3.23)$$

Ademais

$$\frac{\partial^2 g}{\partial z^2} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=1}^N \frac{1}{(z - \frac{\lambda_j}{2})^2} \quad (3.24)$$

é positiva em todo o intervalo $z \in (\frac{1}{2}\lambda_{max}, +\infty)$. Assim, se existir o mínimo de $g(z)$ sobre o intervalo, este será único.

Substituindo os autovalores λ_j (eq.(3.21)) na expressão para $f(z)$ (eq.(3.15)):

$$2K = \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=1}^N \frac{1}{(z_s - \frac{\lambda_j}{2})} \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \left(\frac{N-1}{(z_s + \frac{1}{2N})} + \frac{1}{(z_s - \frac{(N-1)}{2N})} \right) \quad (3.26)$$

donde

$$z_s = \frac{1}{4K} - \frac{1}{2N}. \quad (3.27)$$

Vê-se que z_s diminui com a temperatura T decrescente, e, em particular, $z_s \rightarrow \infty$ quando $T \rightarrow \infty$ ou $K \rightarrow 0$.

Existindo z_s , usa-se a função de partição (3.17) e a expressão (3.4) para A_N , e a energia livre de Helmholtz por partícula $\psi(\beta)$ será dada por:

$$\begin{aligned} \beta\psi(\beta) &= - \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Q_N(\beta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln 4K - g(z_s) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln 4K - 2Kz_s + \frac{1}{2}f(z_s). \end{aligned} \quad (3.28)$$

A função $f(z_s)$ é singular em $z_s = \lambda_{max}/2 = \lambda_1/2$, e portanto a energia livre $\psi(\beta)$ também será. Assim, o ponto crítico, se existir, ocorrerá em $(z_s)_c = \frac{\lambda_1}{2}$. Da equação (3.27), observa-se que o ponto crítico de fato existe, pois ocorre em uma temperatura crítica $T_c = \frac{J}{2} \frac{1}{K_c}$ ($k_B = 1$) finita:

$$T_c = J. \quad (3.29)$$

O ponto de sela z_s existe no intervalo $T_c \leq T < \infty$, portanto. Para analisar o comporta-

mento de z_s na região $T < T_c$ ($K > K_c$), sendo $f(z)$ analítica no plano complexo com corte sobre o eixo real de $z = \lambda_1/2$ a $z = -\infty$, expandem-se $f(z)$ e $g(z)$ em torno do valor crítico do ponto de sela, $(z_s)_c = \lambda_1/2$, usando a eq.(3.27):

$$f(z) = f((z_s)_c) + 4K_c(z - (z_s)_c) - (4K_c)^2(z - (z_s)_c)^2 \quad (3.30)$$

$$g(z) = g((z_s)_c) + 2(K - K_c)(z - (z_s)_c) + 8K_c^2(z - (z_s)_c)^2. \quad (3.31)$$

Todas as contribuições a $g(z)$ para $K > K_c$ são positivas (já que a região $z_s < \lambda_1/2$ é proibida), donde em $T < T_c$ o ponto de sela existe e é dado por $(z_s)_c$.

A energia interna por partícula, $v(\beta) = d(\beta\psi)/d\beta$, fazendo uso de

$$z_s = \begin{cases} \frac{1}{4K} - \frac{1}{2N}, & T < T_c \\ \frac{(N-1)}{2N}, & T > T_c \end{cases}$$

no limite termodinâmico é dada por:

$$v = \begin{cases} \frac{1}{2\beta} - \frac{J}{2}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \quad (3.32)$$

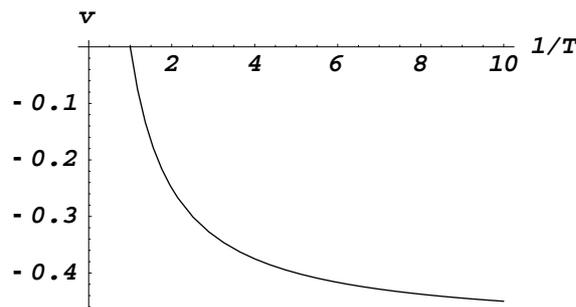


Figura 3.1: Energia potencial por partícula como função da temperatura inversa no modelo esférico campo médio com $H = 0$ e $J = 1$ [31].

Campo externo não-nulo

A matriz de interação M é a mesma neste caso. Dos autovetores (3.22), observa-se

que:

$$\sum_{i=1}^N \epsilon_i = \sqrt{N} y_1. \quad (3.33)$$

Com isto, retornando à eq.(2.22) e convertendo-a à base $\{\mathbf{V}_i\}$ dos autovetores:

$$\begin{aligned} Q_N(\beta) &= \frac{A_N^{-1}}{2\pi i} \int_{\alpha_0 - i\infty}^{\alpha_0 - i\infty} ds e^{sN} \int dy_1 \cdots dy_N \exp \left[\sum_{j=1}^N (-s + K\lambda_j) y_j^2 + h\sqrt{N} y_1 \right] \\ &= \frac{A_N^{-1}}{2\pi i} \int_{\alpha_0 - i\infty}^{\alpha_0 - i\infty} ds e^{sN} \int dy_1 \cdots dy_N \exp \left[\sum_{j=2}^N (-s + K\lambda_j) y_j^2 \right] \times \\ &\quad \times \exp \left[- \left(\sqrt{s - K\lambda_1} y_1 - \frac{h\sqrt{N}}{2\sqrt{s - K\lambda_1}} \right)^2 \right] \exp \left[\frac{h^2 N}{4(s - K\lambda_1)^2} \right], \end{aligned}$$

que resulta em:

$$Q_N(\beta) = \frac{A_N^{-1}}{2\pi i} \int_{\alpha_0 - i\infty}^{\alpha_0 - i\infty} ds \exp \left[sN + \frac{h^2 N}{4(s - K\lambda_1)} \right] \frac{\pi^{N/2}}{(s - K\lambda_1)^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=2}^N \ln(s - K\lambda_j) \right]. \quad (3.34)$$

Fazendo $s = 2Kz$:

$$\frac{A_N^{-1}}{2\pi i} \pi^{N/2} 2K e^{-1/2 N \ln 2K} \int_{z_0 - i\infty}^{z_0 - i\infty} dz \exp \left[N \left(2Kz + \frac{h^2 N}{8K(z - \lambda_1/2)} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln(z - \lambda_j/2) \right) \right]. \quad (3.35)$$

Definindo agora:

$$\begin{aligned} f(z) &= \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=1}^N \ln(z - \lambda_j/2) \\ g(z) &= 2Kz + \frac{h^2}{8K(z - \lambda_1/2)} - \frac{1}{2} f(z), \end{aligned} \quad (3.36)$$

sendo a expressão para a função de partição, pelo método do ponto de sela, dada por

$$Q_N(\beta) \simeq \frac{2K \pi^{N/2} e^{-\frac{1}{2} N \ln 2K + N g(z_s)}}{A_N (z_s - \frac{1}{2} \lambda_1)^{1/2} [2\pi N (\partial^2 g / \partial z^2)_{z_s}]^{1/2}}, \quad (3.37)$$

resulta para a energia livre de Helmholtz por partícula $\psi(\beta)$:

$$\beta\psi = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln 4K - 2Kz_s - \frac{h^2}{8K \left(z_s - \frac{(N-1)}{2N} \right)} + \frac{N^{-1}}{2} \left[(N-1) \ln \left(z_s + \frac{1}{2N} \right) + \ln \left(z_s + \frac{N-1}{2N} \right) \right], \quad (3.38)$$

onde o ponto de sela z_s é o mínimo absoluto de $g(z)$ sobre o eixo real, e é definido implicitamente no limite termodinâmico pela equação:

$$2\beta J - \frac{\beta h^2}{2J} \frac{1}{(z_s - 1/2)} - \frac{1}{z_s} = 0. \quad (3.39)$$

A energia interna por partícula é dada por

$$v = \frac{d\beta\psi}{d\beta} = \left(\frac{\partial\beta\psi}{\partial\beta} \right)_{z_s} + \frac{dz_s}{d\beta} \left(\frac{\partial\beta\psi}{\partial z_s} \right)_{\beta}. \quad (3.40)$$

Ora, a expressão para $(\partial\beta\psi/\partial z_s)_{\beta}$ é duas vezes o lado direito da eq.(3.39), e portanto é igual a zero, donde:

$$v = \frac{1}{2\beta} - Jz_s - \frac{h^2}{4J} \frac{1}{(z_s - 1/2)}. \quad (3.41)$$

Da equação (3.39), vê-se imediatamente que para $h \neq 0$, o termo dependente de h diverge à medida em que $z_s \rightarrow \lambda_{max}/2$, o valor crítico do ponto de sela ($\lambda_{max}/2 = \lambda_1/2 \rightarrow 1/2$ no limite termodinâmico). Assim, $z_s > \lambda_1/2$ para toda temperatura não nula ($K < \infty$), e assim, o sistema não sofrerá transição de fase.

Ademais, observa-se da figura (3.2), da energia interna v como função de $\beta = 1/T$ ($J = 1, h = 1$), que, para $\beta \rightarrow \infty, v \rightarrow -3/2$, que é a energia do estado fundamental. Para $\beta \rightarrow 0, v \rightarrow 0$, um valor abaixo da energia máxima por partícula, que, neste caso, como será visto mais tarde, é $h^2/2J = 1/2$.

3.2.2 Verificação da Hipótese Topológica sobre o modelo

Analisa-se a seguir, através da teoria de Morse, a evolução da topologia da família

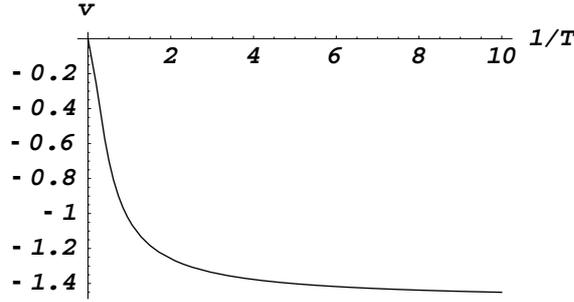


Figura 3.2: Energia potencial por partícula como função da temperatura inversa no modelo esférico campo médio com $h = 1$ e $J = 1$ [31].

de variedades $\{M_u\}$ como função de u , primeiramente através da característica de Euler, de modo a comparar o comportamento deste invariante com o encontrado em trabalhos anteriores sobre outros modelos [21, 23, 25], e, posteriormente, analisando explicitamente os números de Betti característicos das variedades M_u em cada classe de difeomorfismos, o que se faz possível aqui graças à simplicidade da topologia do modelo⁴.

As configurações acessíveis ao sistema são dadas pelo vínculo esférico, que, na base dos autovetores da matriz de interação é:

$$\sum_{i=1}^N y_i^2 = N. \quad (3.42)$$

O espaço de configurações M é a esfera $(N - 1)$ -dimensional, \mathcal{S}^{N-1} , de raio \sqrt{N} . Será investigada a topologia das variedades $M_u = \{\mathbf{y} \in M \mid \nu(\{y_i\}) \leq u\}$, os setores de M abaixo de u , onde $\nu = V/N$ é a função energia potencial por partícula. Como nos modelos XY e k -trigonométrico, descritos no Capítulo 2, isto se fará pela análise dos pontos críticos da função potencial V , definida sobre M , no contexto da teoria de Morse. Na base $\{\mathbf{V}_i\}$, dos autovetores da matriz de interação \mathbf{M} :

$$V = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i^2 - h\sqrt{N} y_1 \quad (3.43)$$

$$= -\frac{J(N-1)}{2N} y_1^2 + \frac{J}{2N} \sum_{i=2}^N y_i^2 - h\sqrt{N} y_1. \quad (3.44)$$

⁴Ribeiro Teixeira, A. C.; Stariolo, D. A., a ser publicado em *Phys. Rev. E*.

Para determinar os pontos críticos de V , no domínio das configurações acessíveis, introduz-se um multiplicador de Lagrange μ a fim de impor o vínculo esférico, definindo a função F :

$$F = V + \mu \left(\sum_{i=1}^N y_i^2 - N \right). \quad (3.45)$$

Campo externo nulo

Para campo h nulo, os pontos críticos da função F são as soluções de:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial y_1} &= 2 \left(\frac{-J(N-1)}{2N} + \mu \right) y_1 = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial y_k} &= 2 \left(\frac{J}{2N} + \mu \right) y_k = 0, \quad k = 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.46)$$

As soluções não triviais são:

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{J(N-1)}{2N}, \quad \mathbf{y} = \left\{ y_1 = \pm\sqrt{N}, y_{i>1} = 0 \right\} \\ \mu &= -\frac{J}{2N}, \quad \mathbf{y} = \left\{ y_1 = 0, \sum_{i=2}^N y_i^2 = N \right\}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

A primeira solução corresponde a dois pontos isolados, ocorrendo em $u = -\frac{J(N-1)}{2N}$, que, no limite termodinâmico é $u = -J/2 + J/2N \rightarrow -J/2$ para $N \rightarrow \infty$, o mínimo da energia potencial por partícula ν , sobre M . A segunda solução corresponde a toda uma variedade crítica, a uma esfera $(N-2)$ -dimensional, ocorrendo em $u = J/2N \rightarrow 0$ para $N \rightarrow \infty$, que corresponde ao máximo de ν . Não ocorrem pontos de sela. Graças à alta degenerescência dos autovalores de M neste caso, é possível compreender intuitivamente a evolução das variedades M_u à medida em que se varia o parâmetro u . As equipotenciais neste caso são superfícies quádricas, em particular, hiperbolóides com (curvatura) negativa na direção y_1 . A figura (3.3) ilustra, para $N = 2$, $J = 1$, o espaço de configurações M (neste caso uma esfera \mathbf{S}^1 , ou um círculo), e as curvas hiperbólicas, representando as equipotenciais, ou os conjuntos de nível de V . Neste caso, a direção horizontal representa a coordenada y_1 e a vertical, qualquer das $(N-1)$ demais coordenadas.

No quadrante superior à esquerda, $u < -1/4$, as duas curvas equipotenciais não

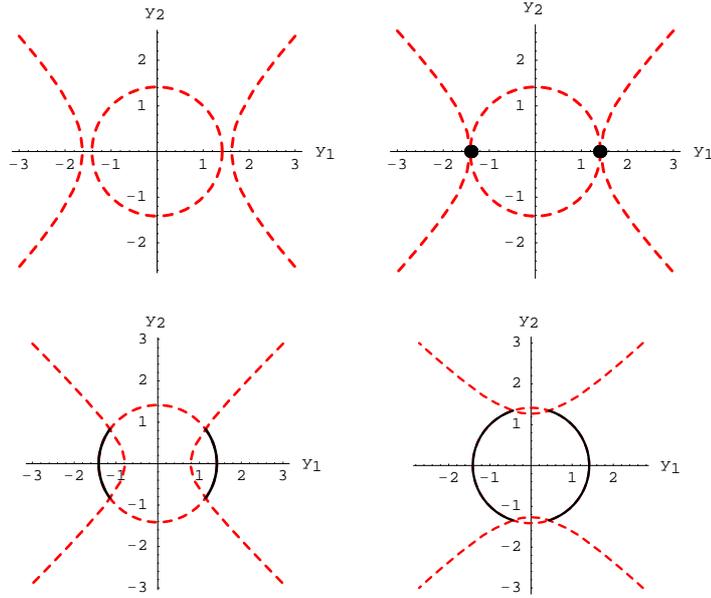


Figura 3.3: Representação da evolução das variedades M_u em $N = 2$ ($J = 1$) para quatro valores crescentes de u . As variedades M_u são dadas pelas curvas sólidas. O círculo representa o vínculo esférico M , e as hipérbolas representam os conjuntos de nível de ν [31].

interceptam M , a variedade M_u é vazia e o sistema não existe nesta região de potenciais. Em $u = -1/4$ (quadrante superior direito), as equipotenciais tocam o círculo em dois pontos isolados, correspondendo aos estados fundamentais do sistema. Ao atravessar $u = -1/4$, as variedades M_u sofrem sua primeira transição topológica e passam a ser difeomórficas a dois discos desconexos de dimensão $(N - 1) = 1$. Transições topológicas nas variedades M_u apenas ocorrerão em níveis críticos da energia potencial (Apêndice), isto é, naqueles valores de potencial em que ocorram pontos críticos da função V . Assim, não há outras transições topológicas até $u = J/2N = 1/4$, em que ocorre a variedade crítica - esfera $(N-2)$ -dimensional -, que apenas na representação com $N = 2$ corresponde a dois pontos isolados (quadrante inferior direito). Esta transição ocorre no valor máximo de ν sobre M , pois, acima deste valor, as equipotenciais não interceptam mais a variedade M . Para $u \geq J/2N$, portanto, não ocorrem mais pontos críticos em ν , as variedades M_u coincidem com a hipersfera $(N-1)$ -dimensional, e assim toda a variedade M se torna acessível. Em $u = J/2N$, os dois discos desconexos $(N-1)$ -dimensionais se “fundem”, completando a hipersfera S^{N-1} .

No limite termodinâmico, o valor de potencial em que ocorre esta última tran-

sição topológica é $\nu = 0$, que coincide com o valor da energia potencial por partícula crítica, $v_c = 0$, calculada na seção (3.2.1). Este fato está em acordo com o teorema provado em [27, 26], sobre a necessidade de uma transição topológica no espaço de configurações no ponto de uma transição de fase. A evolução da topologia das variedades M_u em função de u , em particular, a não conectividade das variedades M_u abaixo de $J/2N$, ilustra também a quebra espontânea de simetria que ocorre na transição de fase, em T_c ou v_c . No limite termodinâmico, apenas um dos discos $(N-1)$ -dimensionais são dinamicamente acessíveis ao sistema abaixo de T_c : pode-se ver facilmente de (3.22) que a magnetização $M = \sum_i \epsilon_i = \sqrt{N}y_1$. Em $u = v_c$, os dois discos se encontram e completam a hipersfera, e toda variedade M se torna acessível ao sistema para $T \geq T_c$.

Graças à simplicidade das topologias aqui envolvidas, é possível reconhecer sem ambigüidades a topologia da família $\{M_u\}$ diretamente através dos seus números de Betti, b_k , que podem ser definidos como o número de k -células que compõem M_u (Apêndice). A partir de $u = -J/2 + J/2N$, as variedades M_u são difeomórficas a dois discos $(N-1)$ -dimensionais. Os números de Betti de um disco são: $b_0 = 1$, $b_k = 0$, $\forall k \neq 0$. Em $u = J/2N$, a variedade M_u se torna difeomórfica à esfera $(N-1)$ -dimensional. Os números de Betti da esfera S^{N-1} são: $b_0 = 1$, $b_{N-1} = 1$, $b_k = 0$, $\forall k \neq 0, (N-1)$. Neste nível, portanto, ocorre de fato uma transição topológica, já que para $u < J/2N$ os números de Betti são $\{b_0 = 2, b_{k>0} = 0\}$ e para $u \geq J/2N$ os números de Betti são dados por $\{b_0 = 1, b_{N-1} = 1, b_k = 0, \forall k \neq 1, (N-1)\}$. Entretanto, em contraste com os resultados no modelo XY campo médio [23], em que a transição topológica associada à transição de fase envolvia a mudança nos números de Betti de $\mathcal{O}(N)$ diferentes ordens, e cada b_k modificado mudava de uma quantidade $\binom{N}{k}$, neste caso, apenas dois números de Betti se modificam em correspondência com a transição de fase do sistema, b_0 muda de 2 para 1, e b_{N-1} muda de 0 para 1. Estes comportamentos diferem dramaticamente.

Para o cálculo da característica de Euler, bastam os números de Betti. Entretanto, a fim de completar a análise dos pontos críticos (dos dois mínimos, ao menos), calcula-se o Hessiano da função potencial V sobre M .

A característica de Euler é definida pela soma alternada dos números de Betti:

$$\chi(M_u) = \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^k b_k(M_u). \quad (3.48)$$

Para M_u com u abaixo do valor máximo de energia potencial, em que só ocorrem pontos críticos isolados, a característica de Euler pode ser dada por $\chi(M_u) = \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^k \mu_k(M_u)$, onde $\mu_k(M_u)$ é o número de pontos críticos de índice k , na variedade M_u .

Para $u < -J/2$, as variedades M_u são vazias, e $\chi = 0$, portanto.

Em $u \geq -J/2$, ocorrem os pontos $\{y_1 = \pm\sqrt{N}, y_i = 0, i > 1\}$. O índice dos pontos críticos é dado pelo número de autovalores negativos do Hessiano de V sobre M nestes pontos. Nestes pontos, o eixo y_1 coincide com a direção normal à variedade M , se pensada como uma imersão no \mathbf{R}^N , e pertence portanto ao espaço normal a M . Assim, é lícito eliminar a dependência da função V na coordenada y_1 sobre estes pontos críticos, obtendo-se assim, a matriz $(N-1)$ -dimensional do Hessiano sobre a variedade M . Do vínculo esférico (3.42), tem-se $y_1 = \pm\sqrt{N - \sum_{k \neq 1} y_k^2}$. Os elementos H_{ij} , $i, j \neq 1$ da matriz são portanto:

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \left[-\frac{J(N-1)}{2N} \left(N - \sum_{k=2}^N y_k^2 \right) + \frac{J}{2N} \sum_{k=2}^N y_k^2 \right] \\ &= J\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (3.49)$$

para $i, j = 2, \dots, N$. O Hessiano neste caso é diagonal e, como esperado, não possui autovalores negativos, já que $J > 0$. Assim, os pontos críticos $\{y_1 = \pm\sqrt{N}, y_i = 0, i > 1\}$, ocorrendo em $\nu = -J/2$, possuem índice zero e são de fato mínimos. Não há outros pontos críticos para $-J/2 \leq u < J/2N$. A característica de Euler neste intervalo é dada pela contribuição dos dois mínimos: $\mu_0 = 2$, $\mu_k = 0, \forall k > 0 \Rightarrow \chi(M_u) = 2$, ou, equivalentemente, por $\chi(M_u) = \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^k b_k(M_u) = 2$.

Em $u = J/2N$, ocorre a variedade crítica $\{y_1 = 0, \sum_{i=2}^N y_i = N\}$. Neste nível crítico, a função V não é mais uma função de Morse, e, neste caso, a correspondência entre transições topológicas e pontos críticos não é um-a-um, assim, a equação que relaciona χ

a $\{\mu_k\}$ deixa de valer.

Sabe-se que todas as variedades M_u para $u \geq J/2N$ são topologicamente equivalentes à hipersfera $M = \mathbf{S}^{N-1}$. Assim, para $u \geq J/2N \rightarrow 0$, $\chi(M_u) = \chi(\mathbf{S}^{N-1})$, e com os números de Betti da esfera:

$$\chi(M_u) = \begin{cases} 0, & N \text{ par} \\ 2, & N \text{ ímpar} \end{cases} \quad (3.50)$$

O invariante de Euler acusa de fato uma transição topológica, pois sofre uma variação em $u = J/2N$, para $\dim(M) = (N - 1)$ ímpar. O fato de χ permanecer constante no caso $\dim(M) = (N - 1)$ par não é contraditório, já que o comportamento de um único invariante pode não ser suficiente na caracterização topológica de uma variedade (Apêndice) e, ademais, as transições topológicas nos casos $\dim(M)$ par ou ímpar são idênticas/análogas. Mesmo para N par, o comportamento de χ em correspondência com a transição de fase neste modelo, em $u = v_c$, no limite termodinâmico, difere do observado nos modelos XY campo médio e k -trigonométrico na presença da transição de fase, já que nestes ocorre uma singularidade finita na quantidade $\log |\chi|/N$.

Campo externo finito

No caso $h \neq 0$, os pontos críticos da função F (3.45) são soluções do sistema:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial y_1} &= 2 \left(\frac{-J(N-1)}{2N} + \mu \right) y_1 - \sqrt{N}h = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial y_i} &= 2 \left(\frac{J}{2N} + \mu \right) y_i = 0, \quad i = 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (3.51)$$

conseqüentemente:

$$\begin{aligned} \mu &\neq -\frac{J}{2N}, \quad \mathbf{y} = \left\{ y_1 = \pm\sqrt{N}, y_{i>1} = 0 \right\} \\ \mu &= -\frac{J}{2N}, \quad \mathbf{y} = \left\{ y_1 = -\frac{\sqrt{N}h}{J}, \sum_{i=2}^N y_i^2 = N(1 - h^2/J^2) \right\}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

A primeira solução corresponde aos mesmos dois pontos isolados do caso anterior, porém, neste caso, $\left\{ y_1 = \sqrt{N}, y_{i>1} = 0 \right\}$ ocorrerá em $u_1 = -\frac{J(N-1)}{2N} - h$, enquanto

$\{y_1 = -\sqrt{N}, y_{i>1} = 0\}$ ocorrerá em $u_2 = -\frac{J(N-1)}{2N} + h > u_1$ (para $h > 0$). A segunda solução é novamente uma variedade crítica, a hipersfera $(N-2)$ -dimensional, ocorrendo em $u_3 = h^2/2J + J/2N \rightarrow h^2/2J$ em $N \rightarrow \infty$. Esta solução será real para $|h| < J$ apenas.

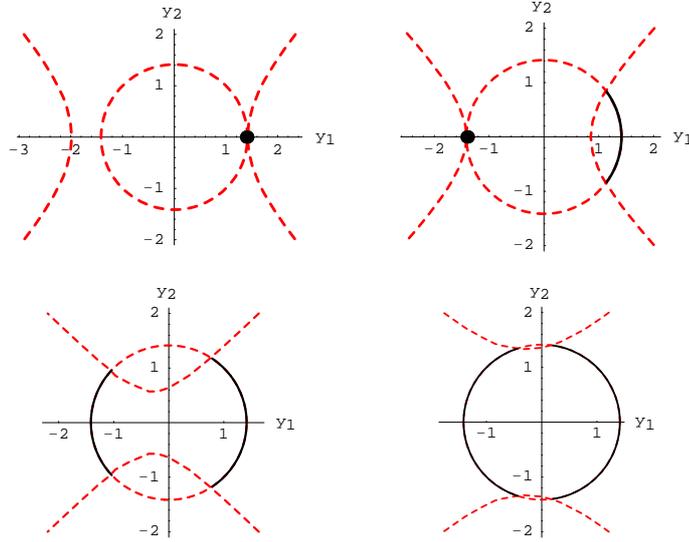


Figura 3.4: Representação da evolução das variedades M_u em $N = 2$ ($J = 1$) para quatro valores crescentes de u em campo $h = 0.1$. As variedades M_u são dadas pelas curvas sólidas. O círculo representa o vínculo esférico M , e as hipérbolas representam os conjuntos de nível de ν [31].

A representação da evolução das variedades M_u para diferentes valores de u em $N = 2$ está na figura (3.4), $J = 1$, para h suficientemente pequeno ($h = 0.1$). Para $u < u_1$, as variedades M_u são vazias. No quadrante superior esquerdo, $u = u_1$, e a variedade M_{u_1} se constitui de um ponto apenas, caracterizando a quebra de simetria introduzida pelo campo h . À medida em que u cresce, ainda abaixo de u_2 , as variedades M_u são equivalentes a um disco $(N-1)$ -dimensional. O segundo ponto crítico surge no nível crítico u_2 (quadrante superior direito), no qual as variedades M_u sofrem uma transição topológica, tornando-se equivalentes a dois discos desconexos, sendo apenas um dinamicamente acessível no limite termodinâmico. O nível máximo corresponde ao “encontro” dos dois discos inicialmente desconexos, quando a hipersfera M se completa, e ocorre em $u_3 \rightarrow h^2/2J$ no limite termodinâmico.

Esta última transição topológica é equivalente à transição topológica associada à transição de fase no caso $h = 0$. Entretanto, da termodinâmica do modelo na pre-

sença de um campo externo h , sabe-se que a energia potencial média por partícula v atinge seu valor máximo, $v = 0$, em temperatura infinita. Assim, a transição topológica correspondente ao fechamento da esfera S^{N-1} nunca ocorre no sistema físico. O nível máximo termodinamicamente acessível ao sistema é dado por $u = J/2N = 1/4$ na figura (quadrante inferior direito). Assim, no intervalo de potenciais acessíveis ao sistema físico, ocorrem apenas as transições topológicas correspondentes aos mínimos isolados, que também ocorrem no caso $h = 0$ abaixo da transição de fase. O fato do sistema físico não atingir a transição topológica em u_3 está de acordo com a exigência do teorema em [26, 27]; de fato, não ocorrendo a transição topológica, não ocorre a transição de fase. Entretanto, para concluir-se que a transição topológica é inacessível ao sistema físico, foi necessário o conhecimento da termodinâmica do sistema. Caso apenas a topologia estivesse sendo analisada, da comparação entre os casos com e sem campo, concluir-se-ia a ocorrência de uma transição de fase em campo finito.

Os números de Betti (ver Apêndice) da família $\{M_u\}$, no caso $|h| < J$, são: a partir de $u = u_1$, $\{b_0 = 1, b_{k>0} = 0\}$, enquanto $u < u_2$; em $u = u_2$, $\{b_0 = 2, b_{k>0} = 0\}$; em $u = u_3$, fisicamente inacessível ao sistema, $\{b_0 = 1, b_{N-1} = 1, b_k = 0, \forall k \neq 0, (N-1)\}$. Neste caso, ainda, examinando as mudanças nos números de Betti, vê-se que a transição que ocorre no valor intermediário de energia potencial, u_2 , não é significativamente menor que a transição que conduz à transição de fase no caso sem campo. No caso $h > J > 0$, a esfera se completa em $u = u_2 = -\frac{J}{2} + \frac{J}{2N} + h$, que é maior que a energia potencial média por partícula máxima atingida pelo sistema. O número de Betti b_{N-1} neste caso muda diretamente de $b_{N-1} = 0$ para $b_{N-1} = 1$.

Da mesma forma que no caso $h = 0$, examina-se o comportamento da característica de Euler das M_u como função de u . Para $u < u_1$, $\chi(M_u) = 0$.

Mais uma vez, nos pontos críticos $\{y_1 = \pm\sqrt{N}, y_{i>1} = 0\}$, a direção normal à variedade M coincide com o eixo y_1 , e elimina-se a dependência de V em y_1 através da mesma substituição: $y_1 = \pm\sqrt{N - \sum_{k \neq 1} y_k^2}$. Os elementos H_{ij} , $i, j \neq 1$ do Hessiano de

V são dados por:

$$\begin{aligned}
H_{ij} &= \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \left[-\frac{J(N-1)}{2N} \left(N - \sum_{k=2}^N y_k^2 \right) \mp h\sqrt{N} \sqrt{N - \sum_{k=2}^N y_k^2} + \frac{J}{2N} \sum_{k=2}^N y_k^2 \right] \\
&= \left(J \pm \frac{h}{\sqrt{1 - 1/N \sum_{k \neq 1} y_k^2}} \right) \delta_{ij} \pm \frac{h y_i y_j}{N \left(1 - 1/N \sum_{k \neq 1} y_k^2 \right)^{3/2}}, \quad (3.53)
\end{aligned}$$

onde o sinal $+$ corresponde a $y_1 = \sqrt{N}$ e o sinal $-$, a $y_1 = -\sqrt{N}$. Os autovalores do Hessiano são:

$$\begin{aligned}
J \pm h \pm \frac{h}{N} \sum_{k \neq 1} y_k^2, & \quad \text{multiplicidade } 1 \\
J \pm h, & \quad \text{multiplicidade } (N-2). \quad (3.54)
\end{aligned}$$

Agora, nos pontos críticos $\sum_{k=2}^N y_k^2 = 0$. No caso do primeiro ponto crítico ($h > 0$), ocorrendo em u_1 , os $(N-1)$ autovalores do Hessiano são $J + h > 0$ e, portanto, este ponto crítico corresponde ao mínimo absoluto de V sobre M , com índice 0 portanto. Já os autovalores do segundo ponto crítico, ocorrendo em u_2 , são todos dados por $J - h$, e serão positivos para $0 < h < J$, isto é, se a hipersfera crítica \mathbf{S}^{N-2} em u_3 for uma solução real, e serão negativos caso $h > J$. Assim, para $h < J$, o segundo ponto crítico, será um mínimo local, com índice 0, e para $h > J$, será um máximo.

No caso $h < J$, tem-se $\chi(M_u) = 1$ para $u_1 \leq u < u_2$, e $\chi(M_u) = 2$ para $u_2 \leq u < u_3$. Neste caso, as variedades M_u se tornam difeomórficas à hipersfera M em u_3 , e, assim, para $u \geq u_3$, $\chi(M_u) = 0$ para N ímpar, e $\chi(M_u) = 2$ para N par. Conclui-se da mesma forma que antes, a ocorrência de transições topológicas nas variedades M_u em u_3 que, no entanto, não ocorrem na realização física do modelo.

No caso $h > J$, tem-se $\chi(M_u) = 1$ para $u_1 \leq u < u_2$, e, para $u \geq u_2$, $\chi(M_u)$ igual a 0 ou 2 dependendo se N é par ou ímpar, respectivamente.

3.3 Modelo Esférico a dimensão finita

O trabalho sobre o modelo esférico em dimensão finita encontra-se em andamento. Abaixo, seguindo-se à apresentação da termodinâmica do modelo, se apresentam resultados parciais, e perspectivas de possíveis desenvolvimentos futuros.

3.3.1 Termodinâmica

A termodinâmica do modelo a dimensão finita foi apresentada originalmente em [32].

Desta vez, define-se:

$$f_d(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=2}^N \ln(z - \lambda_j/2), \quad (3.55)$$

onde d rotula a dimensão da rede e se separou o termo com λ_1 , que apresenta a singularidade. Novamente $g_d(z) = 2Kz - \frac{1}{2}f(z)$. Assim:

$$Q_N(\beta) = \frac{A_N^{-1} \pi^{N/2}}{2\pi i} 2K e^{-\frac{1}{2}N \ln 2K} \int_{z_0 - i\infty}^{z_0 + i\infty} dz \left(z - \frac{1}{2}\lambda_j\right)^{-1/2} e^{Ng_d(z)}. \quad (3.56)$$

Resolvendo a integral pelo método do ponto de sela, resulta:

$$Q_N(\beta) \simeq \frac{2K \pi^{N/2} e^{-\frac{1}{2}N \ln 2K + Ng_d(z_s)}}{A_N (z_s - \frac{1}{2}\lambda_1)^{1/2} [2\pi N (\partial^2 g_d / \partial z^2)_{z_s}]^{1/2}}, \quad (3.57)$$

onde, como no caso anterior, z_s é definido por: $(\partial g_d / \partial z)_{z_s} = 0$, $(\partial^2 g_d / \partial z^2)_{z_s} > 0$.

Se a solução do ponto de sela existir, a energia livre de Helmholtz por partícula será novamente dada por:

$$\beta\psi_d = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln 4K - 2Kz_s + \frac{1}{2}f_d(z_s). \quad (3.58)$$

As propriedades da matriz de interação M , que entram no problema através dos seus autovalores, dependerão da geometria da rede. Assim, os casos das redes unidimensional,

bidimensional (quadrada) e tridimensional (cúbica) serão apresentados separadamente. As condições de contorno utilizadas são as helicoidais, que são equivalentes a condições de contorno periódicas (convencionais) no limite termodinâmico. Nestes casos, as componentes dos autovetores \mathbf{V}_k são dadas por:

$$V_{ks} = N^{-1/2} \left[\cos \frac{2\pi}{N}(k-1)(s-1) + \sin \frac{2\pi}{N}(k-1)(s-1) \right], \quad (3.59)$$

e os estados $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N)$ do sistema na base $\{\mathbf{V}_k\}$ são dados por $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \boldsymbol{\epsilon}$, com \mathbf{V} uma transformação ortogonal (Jacobiano igual a 1), e tem-se, novamente:

$$\boldsymbol{\epsilon}^T \mathbf{M} \boldsymbol{\epsilon} = \sum_{p=1}^N \lambda_p y_p^2, \quad \sum_{p=1}^N \epsilon_p^2 = \sum_{p=1}^N y_p^2. \quad (3.60)$$

Rede unidimensional

Neste caso, os autovalores da matriz \mathbf{M} são dados por:

$$\lambda_p = 2 \cos \frac{2\pi(p-1)}{N}, \quad p = 1, \dots, N. \quad (3.61)$$

Definindo $\Delta\omega_1 \equiv 2\pi/N$ e $\omega_1 \equiv (p-1)\Delta\omega_1$, tem-se $N^{-1} \sum_{p=2}^N \ln(z - \lambda_p/2) = 1/2\pi \sum_{\omega_1=\Delta\omega_1}^{2\pi-\Delta\omega_1} \ln(z - \cos \omega_1) \Delta\omega_1$ que, no limite termodinâmico se torna:

$$f_1(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{p=2}^N \ln[z - \lambda_p/2] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 \ln[z - \cos \omega_1]$$

$$f_1(z) = \ln \frac{1}{2} [z_s + (z_s^2 - 1)^{1/2}]. \quad (3.62)$$

A equação para o ponto de sela z_s é:

$$4K = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 [z_s - \cos \omega_1]^{-1} = (z_s^2 - 1)^{-1/2} \implies z_s = [1 + (4K)^{-2}]^{1/2}. \quad (3.63)$$

Desta equação, z_s decresce quando K aumenta ou T diminui, e $z_s \rightarrow 1$ no limite $T \rightarrow 0$. De (3.62), a singularidade de $f_1(z_s)$ ocorre em $z_s = 1$, que nunca é alcançado em temperatura finita. A energia livre (3.58) é portanto uma função regular da temperatura

para $0 < T < \infty$, e não há transição de fase no caso unidimensional.

Rede bidimensional quadrada

Os autovalores da matriz de interação \mathbf{M} para a rede quadrada $N = n_1 n_2$, com condições periódicas helicoidais, são:

$$\lambda_p = 2 \cos \frac{2\pi(p-1)}{N} + 2 \cos \frac{2\pi n_1(p-1)}{N}, \quad p = 1, \dots, N. \quad (3.64)$$

Fazendo $(p-1) = p_2 + p_1 n_2$, com $p_1 = 0, 1, \dots, n_1 - 1$ e $p_2 = 0, 1, \dots, n_2 - 1$, resulta:

$$\frac{\lambda_p}{2} = \cos \left(\frac{2\pi}{n_1 n_2} p_2 + \frac{2\pi}{n_1} p_1 \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{n_2} p_2 \right), \quad (3.65)$$

que no limite termodinâmico será equivalente aos autovalores

$$\frac{\lambda_{i,j}}{2} = \cos \left(\frac{2\pi}{n_1} (i-1) \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{n_2} (j-1) \right), \quad (3.66)$$

$i = 1, \dots, n_1, \quad j = 1, \dots, n_2$

em condições de contorno periódicas (ver por exemplo [34]).

Partindo da expressão (3.65), tem-se:

$$N^{-1} \sum_{p=2}^N \ln(z - \lambda_p/2) = N^{-1} \sum_{\substack{p_2=1 \\ (p_1=0)}}^{n_2-1} \ln(z - \lambda_{p_2+1}/2) + N^{-1} \sum_{p_1=1}^{n_1-1} \sum_{p_2=0}^{n_2-1} \ln(z - \lambda_{p_2+p_1 n_2+1}/2). \quad (3.67)$$

Define-se então $\Delta\omega_2 \equiv 2\pi/n_2$, $\omega_2 \equiv p_2 \Delta\omega_2 \in [0, 2\pi]$, e $\Delta\omega_1 \equiv 2\pi/n_1$ e $\omega_1 \equiv p_1 \Delta\omega_1 \in [0, 2\pi]$ e no limite termodinâmico obtém-se, para a função $f_2(z)$:

$$f_2(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{p=2}^N \ln[z - \lambda_p/2] = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 \ln[z - (\cos \omega_1 + \cos \omega_2)]. \quad (3.68)$$

A equação para o ponto de sela z_s é:

$$4K = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 [z_s - \cos \omega_1 - \cos \omega_2]^{-1} = (2/\pi z_s) \mathcal{K}(2/z_s), \quad (3.69)$$

onde $\mathcal{K}(u)$ é a integral elíptica completa:

$$\mathcal{K} = \int_0^1 dt [(1-t^2)(1-u^2t^2)]^{-1/2}. \quad (3.70)$$

Quando K aumenta ou T diminui, z_s decresce. Expandindo-se convenientemente a função $\mathcal{K}(2/z_s)$ em torno de $z_s = \lambda_1/2 = 2$, ponto em que $f_2(z)$ é singular, obtém-se que $\mathcal{K}(2/z_s) \rightarrow \infty$ quando $z_s \rightarrow 2$, o que significa que z_s nunca alcançará a singularidade de $f_2(z)$ para temperaturas finitas, e, de (3.58), a energia livre será uma função regular em todo o intervalo de temperaturas $0 < T < \infty$. Novamente não ocorre transição de fase.

Rede tridimensional cúbica

Os autovalores da matriz de interação \mathbf{M} para a rede cúbica com $N = n_1 n_2 n_3$, com condições periódicas helicoidais, são:

$$\lambda_p = 2 \cos \frac{2\pi/(p-1)}{N} + 2 \cos \frac{2\pi n_1(p-1)}{N} + 2 \cos \frac{2\pi n_1 n_2(p-1)}{N} \quad p = 1, \dots, N. \quad (3.71)$$

Fazendo $(p-1) = tn_2 n_3 + un_3 + q$, com $t = 0, 1, \dots, n_1 - 1$, $u = 0, 1, \dots, n_2 - 1$, e $q = 0, 1, \dots, n_3 - 1$ resulta:

$$\frac{\lambda_p}{2} = \cos \left(\frac{2\pi t}{n_1} + \frac{2\pi u}{n_1 n_2} \right) + \cos \left(2\pi t + \frac{2\pi u}{n_2} \right) + \cos \left(\frac{2\pi q}{n_3} \right), \quad (3.72)$$

que no limite termodinâmico será equivalente aos autovalores

$$\frac{\lambda_{i,j,k}}{2} = \cos \left(\frac{2\pi}{n_1}(i-1) \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{n_2}(j-1) \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{n_3}(k-1) \right) \quad i = 1, \dots, n_1, \quad j = 1, \dots, n_2, \quad k = 1, \dots, n_3, \quad (3.73)$$

em condições de contorno periódicas.

Partindo-se da expressão (3.72) para os autovalores, definem-se $\Delta\omega_3 \equiv 2\pi/n_3$, $\omega_3 \equiv q\Delta\omega_3 \in [0, 2\pi]$, e $\Delta\omega_2 \equiv 2\pi/n_2$, $\omega_2 \equiv u\Delta\omega_2 \in [0, 2\pi]$, e $\Delta\omega_1 \equiv 2\pi/n_1$ e

$\omega_1 \equiv t\Delta\omega_1 \in [0, 2\pi]$ no limite termodinâmico obtém-se, para a função $f_3(z)$:

$$\begin{aligned} f_3(z) &= \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{p=2}^N \ln[z - \lambda_p/2] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 \ln[z - (\cos \omega_1 + \cos \omega_2 + \cos \omega_3)]. \end{aligned} \quad (3.74)$$

A equação para o ponto de sela z_s é:

$$4K = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 [z_s - \cos \omega_1 - \cos \omega_2 - \cos \omega_3]^{-1}. \quad (3.75)$$

À medida em que T decresce, z_s decresce e se aproxima do valor $z_s = \lambda_1/2 = 3$, que é onde ocorre a singularidade de $f_3(z)$. No caso $d = 3$, em contraste com os anteriores, a integral em (3.75) converge em $z_s = 3$, donde:

$$4K_c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 [3 - \cos \omega_1 - \cos \omega_2 - \cos \omega_3]^{-1} = 0.50546. \quad (3.76)$$

Portanto, certamente existirá um ponto de sela no intervalo $T_c \leq T < \infty$, onde $T_c = 3.9568J$ ($k_B = 1$) é a temperatura crítica, finita, da transição de fase. Para $T > T_c$, tem-se:

$$\beta\psi_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln(4K) - 2Kz_s + \frac{1}{2}f_3(z_s), \quad (3.77)$$

com z_s dado por (3.75).

Dado que $f_3(z)$ é analítica no plano complexo com o corte sobre o eixo real de $z = 3$ a $z = -\infty$, expande-se $f_3(z)$ em torno de $z = 3$ (ponto de sela em T_c), que resulta:

$$\begin{aligned} f_3(z) &= f_3(3) + 4K_c(z - 3) - (\sqrt{2}/3\pi)(z - 3)^{3/2} + \mathcal{O}([z - 3]^2) \\ g_3(z) &= g_3(3) + 2(K - K_c)(z - 3) + (\sqrt{2}/3\pi)(z - 3)^{3/2} + \mathcal{O}([z - 3]^2). \end{aligned} \quad (3.78)$$

Assim, vê-se que todas as contribuições a $g_3(z)$ para $K > K_c$ são positivas, donde em $T < T_c$ o ponto de sela existe e é dado por $(z_s)_c$. Na região $T < T_c$, a energia livre é dada

por:

$$\beta\psi_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln(4K) - 6K + \frac{1}{2} f_3(3). \quad (3.79)$$

3.3.2 Topologia

Na rede em dimensão finita, a topologia das variedades $\{M_u\}$ já não é mais tão simples quanto o é em campo médio, assim, seguindo a linha de trabalhos anteriores [21, 25], parte-se da investigação do comportamento da característica de Euler no intuito de analisar a evolução topológica das variedades M_u . Este trabalho ainda está em andamento. Apresentam-se os resultados obtidos até o momento.

Rede unidimensional

Relembrando os autovalores da matriz de interação \mathbf{M} na cadeia unidimensional com condições de contorno periódicas:

$$\lambda_p = 2 \cos \frac{2\pi(p-1)}{N}. \quad (3.80)$$

A energia potencial por partícula na base dos autovetores da matriz de interação, $\{\mathbf{V}_k\}$, é dada por:

$$\nu(y) = -\frac{2J}{N} \sum_{p=1}^N 2 \cos \frac{2\pi(p-1)}{N} y_p^2. \quad (3.81)$$

Examinando (3.80), vê-se que todos os autovalores são duas vezes degenerados, exceto λ_1 e $\lambda_{N/2}$ (considerando N par), que não são degenerados:

$$\lambda_p = \lambda_{N-p}, \quad \forall p \neq 1, N/2. \quad (3.82)$$

A fim de se impor o vínculo esférico sobre os pontos críticos de $\nu(y)$, através de um multiplicador de Lagrange, introduz-se a função F :

$$F(y; \mu) = V(y) + \mu \left(\sum_{q=1}^N y_q^2 - N \right), \quad V(y) = N\nu(y). \quad (3.83)$$

Os pontos críticos de F são dados por:

$$\frac{\partial F}{\partial y_r} = 2 \left(2 \cos \frac{2\pi(r-1)}{N} + \mu \right) y_r = 0, \quad r = 1, \dots, N. \quad (3.84)$$

As possíveis soluções para cada uma das equações são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu = -\lambda_r = -2 \cos \frac{2\pi}{N}(r-1) \\ \text{ou} \\ y_r = 0 \end{array} \right. \quad (3.85)$$

Quando, para um dado p (tal que $1 < p < N/2$), $\mu = -\lambda_p$, obtém-se $y_r = 0$, $\forall r \notin \{p, (N-p)\}$ nas soluções dos pontos críticos correspondentes. Do vínculo esférico $\sum_{q=1}^N y_q^2 = N$, tem-se que os correspondentes níveis críticos e soluções de pontos críticos serão:

$$\begin{aligned} \mu &= -\lambda_p \\ \mathbf{y}_{crit} &= \{y_p^2 + y_{N-p}^2 = N, \quad y_r = 0, \forall r \notin \{p, N-p\}\} \\ u &= -\frac{2J}{N} \sum_{q=1}^N 2 \cos \frac{2\pi(q-1)}{N} y_q^2 \Big|_{\mathbf{y}_{crit}} = -2J \cos \frac{2\pi(p-1)}{N}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

As soluções \mathbf{y}_{crit} nestes casos representam variedades críticas, esferas \mathbb{S}^1 (círculos).

Para $\mu = -\lambda_1$, as soluções de (3.84) são dois pontos críticos isolados: $\mathbf{y}_{crit} = \{y_1 = \pm\sqrt{N}, \quad y_r = 0, \forall r \neq 1\}$, correspondendo ao nível crítico mínimo $u = -2J$. Analogamente, para $\mu = -\lambda_{N/2}$, as soluções serão dois pontos críticos isolados: $\mathbf{y}_{crit} = \{y_{N/2} = \pm\sqrt{N}, \quad y_r = 0, \forall r \neq N/2\}$, correspondendo ao nível crítico máximo $u = 2J$.

Ocorrerão $(N/2 + 1)$ valores diferentes de μ (N par), cada um correspondendo a um valor crítico, u , diferente de $\nu(y)$. O cálculo do índice das variedades críticas exige o cálculo do espectro do Hessiano de $\nu(y)$ no subespaço normal às variedades críticas.

No caso das soluções às equações (3.84) representarem pontos críticos degenerados, isto é, *variedades* críticas, em um dado nível crítico, a contribuição destas variedades à série de Morse $\mathcal{M}_t(\nu)$ (Apêndice) é calculada através de uma extensão à teoria sobre

funções de Morse (que são funções com pontos críticos isolados). Sobre estas variedades críticas, no presente caso dadas por $C = \{y_p^2 + y_{N-p}^2 = N, y_r = 0, \forall r \neq p, N-p\}$, os autovalores do Hessiano serão nulos. A contribuição destas a $\mathcal{M}_t(\nu)$ será portanto

$$(t)^{\gamma_C} P_t(C), \quad (3.87)$$

onde γ_C é o índice da variedade crítica, isto é, o número de autovalores negativos do Hessiano no subespaço normal a C , e $P_t(C)$ é a série de Poincaré de C (ver Apêndice). Dado que C é uma esfera S^1 , com números de Betti dados por $\{b_0 = 1, b_1 = 1\}$, ocorre que $P_t(C) = 1 + t$. A característica de Euler $\chi(M_u) = \mathcal{M}_{-1}(\nu)$, e, assim, sendo $P_{-1}(C) = 0$, a contribuição de qualquer variedade crítica a χ será nula.

Apenas os níveis críticos mínimo e máximo de $\nu(y)$ poderão contribuir a $\chi(M_u)$ (N par). Os pontos críticos nestes níveis são dados por: $\{y_p = \pm\sqrt{N}, y_r = 0, \forall r \neq p\}$, onde $p = 1$ no nível mínimo e $p = N/2$ no nível máximo.

Da mesma forma que no caso campo médio, considerando M uma imersão no \mathbf{R}^N , nestes pontos críticos, a coordenada y_p pertencerá ao subespaço normal a M - $p = 1$ no nível mínimo, $p = N/2$ no nível máximo. Elimina-se assim a dependência de $V(y)$ em y_p , através do vínculo esférico $y_p = \pm\sqrt{N - \sum_{r \neq p} y_r^2}$:

$$\begin{aligned} V(y) &= -J \sum_{r=1}^N \lambda_r y_r^2 = -J \sum_{r \neq p} \lambda_r y_r^2 - J \lambda_p \left(N - \sum_{r \neq p} y_r^2 \right) \\ &= -J \lambda_p N + J \sum_{r \neq p} (\lambda_p - \lambda_r) y_r^2. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Calculam-se os elementos $H_{rs} = \partial^2 V / \partial y_r \partial y_s$ do Hessiano $(N-1)$ -dimensional, com $r, s \neq p$:

$$H_{rs} = 2J(\lambda_p - \lambda_r) \delta_{rs}. \quad (3.89)$$

Substituindo em (3.88) as coordenadas dos pontos críticos, obtém-se $u = -J \lambda_p N$, onde $p = 1, N/2$, para os respectivos valores críticos, mínimo e máximo, de $V(y)$. A contribuição de cada ponto crítico isolado, P , à característica de Euler é: $(-1)^{\gamma_P}$.

Agora, para $p = 1$, $\lambda_p = \lambda_1 = \lambda_{max}$. Assim, os pontos $\{y_1 = \pm\sqrt{N}, y_q = 0, \forall q \neq 1\}$ terão índice zero e serão os mínimos de $V(y)$ (ou, equivalentemente, $\nu(y)$), como se esperava. Abaixo do nível mínimo de $\nu(y)$, $u < -2J$, as variedades M_u serão vazias, e $\chi(M_u) = 0$. Os mínimos contribuirão em $u = -2J$ a $\chi(M_u)$, quando emergem as variedades M_u : $\chi(M_u) = 2$.

Para $p = N/2$, $\lambda_p = \lambda_{N/2} = \lambda_{min}$. Os pontos críticos $\{y_{N/2} = \pm\sqrt{N}, y_r = 0, \forall r \neq N/2\}$ terão índice $(N - 1)$ e serão os máximos de V . Contribuirão no nível $u = 2J$, em -2 à característica de Euler (já que $(N - 1)$ é ímpar) e, para $u \geq 2J$, resulta: $\chi(M_u) = 0$.

No caso de N ímpar, no nível crítico máximo ocorre uma variedade crítica S^1 , que não contribui a χ . Entretanto, este fato reflete o mesmo aspecto comentado no caso do campo médio sobre a eventual insuficiência da descrição topológica através de um único invariante.

O comportamento de χ como função de u neste modelo, que não sofre transição de fase, não se mostrou qualitativamente distinto do encontrado para o modelo de campo médio, em que ocorre transição de fase. Isto indica que a universalidade no comportamento deste invariante frente à presença ou ausência de transições de fase, sugerida por outros trabalhos [21, 23, 25], não se verifica no modelo esférico, e que χ pode não ser, algumas vezes, um invariante topológico adequado na descrição topológica. Faz-se necessária uma investigação mais profunda da topologia deste modelo (através de outros invariantes topológicos) e dos modelos em $d = 2$ e $d = 3$, de modo a completar a verificação da Hipótese Topológica nos mesmos.

Rede bidimensional quadrada

Em dimensão maior que 1, surge um problema maior: a degenerescência dos autovalores tende ao infinito de maneira não trivial no limite termodinâmico. A análise no limite $N \rightarrow \infty$ não se constitui em uma extensão analítica da análise a N finito.

Ilustra-se aqui, com $d = 2$, o que acontece.

Faz-se $n_1 = n_2 = L$. Os autovalores em condições de contorno periódicas são

dados por:

$$\lambda_{p,q} = 2 \cos \frac{2\pi(p-1)}{L} + 2 \cos \frac{2\pi(q-1)}{L}, \quad p, q = 1, \dots, L. \quad (3.90)$$

Em N finito, estes autovalores podem ter degenerescência 2, 4 ou 8, devido às propriedades de simetria dos cossenos e de sua soma sobre os valores discretos dos índices p e q . Entretanto, no limite termodinâmico, $\frac{2\pi}{L}(p-1) \rightarrow \omega_1$, e $\frac{2\pi}{L}(q-1) \rightarrow \omega_2$, sendo as variáveis ω_1 e ω_2 contínuas. O conjunto dos autovalores $\lambda(\omega_1, \omega_2)$ se torna denso no intervalo $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$, sua distribuição em função de ω_1 e ω_2 se torna contínua, assim como sua degenerescência.

Definindo novamente a função $F = V + \mu(\sum_k y_k^2 - N)$, as equações de seus pontos críticos serão:

$$\frac{\partial F}{\partial y_{r,s}} = 2(\lambda_{r,s} + \mu)y_{r,s} = 0, \quad r, s = 1, \dots, L. \quad (3.91)$$

Novamente, uma dada solução de ponto crítico terá $\mu = -\lambda_{r,s}$ e todos os $y_{p,q}$ com autovalores $\lambda_{p,q} \neq \lambda_{r,s}$ serão nulos neste ponto crítico, enquanto, do vínculo esférico, tem-se que a soma dos quadrados dos $y_{m,n}$ correspondentes a autovalores iguais a $\lambda_{r,s}$ será igual a N . O correspondente valor crítico da energia potencial por partícula será $u = -J\lambda_{r,s}$, e a variedade crítica será uma hipersfera, cuja dimensão, no limite termodinâmico, não se conhece. Esta dimensão é dada pela degenerescência do autovalor $\lambda_{r,s}$.

O gráfico da figura (3.5) mostra a superfície definida por $\lambda(\omega_1, \omega_2)$. Os cortes transversais da superfície são curvas de λ constante. Em cada ponto (ω_1, ω_2) da superfície, deve haver uma direção normal a estas curvas $\nabla \lambda$.

Para o cálculo da característica de Euler em função de u , devem-se conhecer os níveis críticos de potencial, as dimensões das variedades críticas e o índice das variedades críticas. Da forma das soluções críticas, calculam-se imediatamente os níveis críticos da energia potencial: para $\mu = -\lambda_{r,s}$, $u = -J\lambda_{r,s}N$, como no caso unidimensional.

Agora, uma proposta tentativa para a “dimensão” de uma variedade crítica, correspondente a um nível crítico $u = -J\lambda_{r,s}$, seria a integral da densidade linear de λ sobre a curva $\lambda = \lambda_{r,s}$: $\oint_{\lambda=\lambda_{r,s}} \sigma(\omega_1, \omega_2) ds$, onde $\sigma(\omega_1, \omega_2)$ é a função densidade de autova-

lores, e $ds = ds(\omega_1, \omega_2)$ é o elemento de arco sobre a curva. Ora, sabe-se que cada par de índices (p, q) corresponde a um e apenas um autovalor $\lambda_{p,q}$. Ademais, da definição de ω_i : $\Delta\omega_i = \frac{2\pi}{L} = cte$. Assim, a distribuição de λ sobre a curva $\lambda = cte$ é uniforme, e a degenerescência, proporcional ao comprimento do caminho de integração.

Transpor a dificuldade em determinar a degenerescência dos autovalores λ no limite termodinâmico é o que se torna de imediato necessário ao avanço do presente trabalho, para, por fim, calcular a característica de Euler deste modelo.

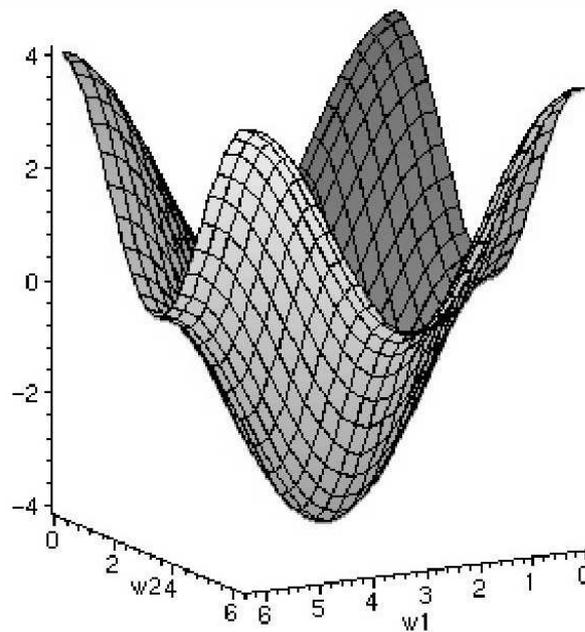


Figura 3.5: Representação da superfície definida pela função dos autovalores no limite contínuo, $\lambda(\omega_1, \omega_2)$.

Discussão e Conclusões

A proposta da Hipótese Topológica é de que transições de fase em sistemas físicos clássicos, com Hamiltonianos da forma (2.1) estejam associadas a transições topológicas nos respectivos espaços de configurações. Sugere também que estas transições topológicas seriam os mecanismos mesmo na origem das referidas transições de fase, de modo que o formalismo da Topologia Diferencial seria suficiente na descrição destes fenômenos termodinâmicos.

Resultados anteriores em outros modelos termodinâmicos corroboraram esta tese. No trabalho no modelo ϕ^4 [21], o comportamento da característica de Euler não se mostra de nenhuma forma ambíguo: no caso $d = 2$, em que há transição de fase, o invariante apresenta uma singularidade no ponto da transição; já no caso $d = 1$, sem transição de fase, o invariante possui um comportamento suave e regular, contrastante com o primeiro caso. No modelo k -trigonométrico, a singularidade do invariante nos pontos das transições contínua ($k = 2$) e de primeira ordem ($k = 3$) é ainda mais forte, pois a quantidade $\sigma(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \log |\chi(v)|/N$ é singular. No caso $k = 1$, sem transição de fase, a função $\sigma(v)$ é analítica. Ademais, $\sigma(v)$ possui propriedades, como a concavidade, distintas nas transições contínua e de primeira ordem. O exemplo mais significativo, porém, está nos resultados do modelo XY. Neste modelo, a mesma quantidade $\log |\chi|/N$ é calculada e apresenta uma singularidade no caso campo médio, em correspondência com a transição contínua, e apresenta um comportamento regular no caso unidimensional, sem transição de fase. Além disto, no modelo XY campo médio foi possível uma descrição mais “explícita” das transições topológicas ocorrendo abaixo e sobre a energia potencial crítica, em função da mudança nos números de Betti em cada nível. Nesta descrição, se percebe que a transição topológica associada à transição de fase envolve a mudança nos números de

Betti de $\mathcal{O}(N)$ diferentes ordens.

Os resultados no modelo esférico campo médio, desenvolvidos e apresentados nesta dissertação, estão de acordo com a necessidade de uma transição topológica associada à transição de fase, porém, sugerem que a análise topológica não seja suficiente na “predição” da ocorrência ou não de uma transição de fase. De fato, a transição de fase se mostra ligada à presença de uma transição topológica nas variedades M_u contidas no espaço de configurações M . Entretanto, a análise topológica se mostra ambígua no objetivo de detectar a transição de fase já que a mesma transição topológica presente em M_u no modelo sem campo externo continua presente no modelo a campo finito. Ora, a termodinâmica dos dois modelos é definitivamente distinta, já que na ausência de campo externo o modelo sofre uma transição de fase, que é destruída pela presença do campo no segundo modelo. A conclusão de que a região de potenciais correspondente a essa transição topológica, no caso do campo finito, não é realizada no sistema físico, em acordo com a ausência de transição de fase, exige a recorrência à informação termodinâmica sobre o modelo. A presença do campo externo não altera significativamente a topologia do espaço de configurações, enquanto representa um comportamento termodinâmico completamente distinto. Estes resultados sugerem fortemente que o mecanismo topológico descrito pela HT não seja o único na origem da transição de fase, ainda que as mudanças na topologia do espaço de configurações estejam relacionadas a transições de fase termodinâmicas.

Em um recente trabalho [35], a conclusão é bastante semelhante à obtida no caso do modelo esférico campo médio. Considerando um modelo analiticamente solúvel com duas variantes, no primeiro caso ocorrendo uma transição de fase, no segundo, não, mostrou-se, da análise da topologia das variedades M_v no espaço de configurações, que as transições topológicas nos dois casos não diferem significativamente, concluindo-se assim, a inexistência de um critério exclusivamente topológico - baseado na associação direta de uma certa classe de transições topológicas a transições de fase - a fim de comprovar a ocorrência ou não de transições de fase em sistemas termodinâmicos.

Uma alternativa possível à HT seria a consideração de um espaço ampliado para a

análise topológica, isto é, a análise da topologia das hipersuperfícies de energia constante Σ_E , às quais a dinâmica conservativa é restrita, no espaço de fases completo: $\{p, q\}$. De fato, o argumento sobre o colapso do suporte efetivo da medida estatística, no limite termodinâmico, sobre a variedade produto $\Sigma_{u,\beta} \times \mathbf{S}_{k,\beta}^N$, apresentado no final do Capítulo 2, pode vir a falhar justamente sobre o ponto da transição de fase, já que nas transições de fase, as flutuações de quantidades termodinâmicas podem ser divergentes.

Outra alternativa possível seria considerar a topologia das hipersuperfícies de energia livre constante, que não contém apenas a informação da parte configuracional do modelo, mas sim incorpora informação de toda a termodinâmica. Uma estratégia para tal desenvolvimento poderia basear-se na formulação de equações para as magnetizações locais, definindo-se assim uma energia livre do tipo TAP (Thouless-Anderson-Palmer) [36]

A abordagem topológica a transições de fase traz muitas possibilidades quanto à ampliação da abrangência das descrições destes fenômenos. Uma abordagem semelhante à da HT pode ser útil no estudo de sistemas com efeitos térmicos fracos, como vidros e sistemas com dinâmica congelada em geral, em particular na descrição da transição vítrea. O mesmo pode ser dito para transições de fase em sistemas finitos. A própria HT já foi confirmada em um modelo de denaturação de DNA [30].

Apêndice: Resumo de Teoria de Morse

Descrições da Teoria de Morse podem ser encontradas em [37, 38, 39]. Este resumo é essencialmente baseado em [37] e no Apêndice que se encontra em [5].

A idéia central da Topologia é estudar espaços que sejam continuamente “deformáveis” uns nos outros, a fim de classificá-los a partir de suas propriedades topológicas. O conceito matemático de deformação contínua de um espaço em outro é o de homeomorfismo, que é um mapa:

$$\alpha : T_1 \rightarrow T_2, \tag{3.92}$$

contínuo e com inversa contínua. Em especial, quando a aplicação α entre duas variedades diferenciáveis é diferenciável sobre T_1 e α^{-1} é diferenciável sobre T_2 , esta é um difeomorfismo. A relação difeomórfica é simétrica, reflexiva e transitiva, e se constitui portanto em uma relação de equivalência. Isto implica em que, se existe um difeomorfismo entre duas variedades diferenciáveis, estas são topologicamente equivalentes, e que conjuntos de variedades (diferenciáveis) podem ser partidos em classes de equivalência invariantes sob difeomorfismos.

O objetivo da teoria de Morse, por sua vez, é estudar a relação entre pontos críticos de funções reais, analíticas, definidas em M :

$$f : M \rightarrow \mathbf{R}, \tag{3.93}$$

e a topologia das variedades M . Consideram-se aqui variedades compactas e de dimensão finita, porém os resultados podem ser estendidos para variedades não-compactas e de dimensão infinita.

Considera-se a variedade M como uma decomposição, folheação ou estratificação nos “conjuntos de nível”⁵ da função f , sendo um conjunto de nível a dado por:

$$f^{-1}(a) = \{x \in M \mid f(x) = a\}. \quad (3.94)$$

Sendo M compacta, toda função f sobre esta definida terá um mínimo, f_{min} e um máximo f_{max} : pode-se assim “construir” M a partir de $f^{-1}(f_{min})$, adicionando os conjuntos de nível $f^{-1}(a)$ ($f_{min} \leq a \leq f_{max}$), variando-se continuamente a até $f^{-1}(f_{max})$. Para um valor intermediário de a , esta “construção” define os setores, conjuntos, de M abaixo de a ⁶:

$$M_a = f^{-1}(-\infty, a] = \{x \in M \mid f(x) \leq a\}. \quad (3.95)$$

À medida em que a cresce de f_{min} até f_{max} , as variedades M_a cobrem gradualmente toda a variedade M .

Considera-se no momento a função f uma função de Morse. Isto significa que os pontos críticos da função f , definida sobre a variedade n -dimensional M : $x_c \in M$, $df(x_c) = 0$, são isolados (ou não degenerados). A matriz do Hessiano de f em x_c , cujos elementos em coordenadas locais são dados por:

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^i \partial x^j}, \quad (3.96)$$

é ordem n , ou seja, não possui autovalores nulos. O valor $f(x_c)$ é chamado valor crítico de f , e o conjunto de nível $f^{-1}(x_c)$, nível crítico.

Na vizinhança $N(P)$ de um ponto regular (não crítico), sempre existirá um sistema de coordenadas locais de M em que f pode ser escrita como sua expansão de Taylor em primeira ordem. Definindo a origem do sistema de coordenadas em P :

$$f(x) = f(0) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x^i} x^i + \dots \quad \forall x \in N(P). \quad (3.97)$$

⁵Tradução literal do inglês “level sets”.

⁶As variedades M_a não são subvariedades de M .

Este resultado diz que na vizinhança de um ponto regular os conjuntos de nível de f são localmente deformáveis em hiperplanos do \mathbf{R}^n . Analogamente, a partir do Lema de Morse, sabe-se que na vizinhança $N(P)$ de um ponto crítico P , sempre existirá um sistema de coordenadas locais (denominado carta de Morse), tal que f é dada pela sua expansão de Taylor em segunda ordem, que, após uma “rotação” conveniente do sistema de coordenadas, pode ser colocada sob a forma diagonal:

$$f(y) = f(0) - \sum_{i=1}^{\lambda} (y^i)^2 + \sum_{i=\lambda+1}^n (y^i)^2 + \dots \quad \forall y \in N(P). \quad (3.98)$$

Na vizinhança do ponto crítico P , os conjuntos de nível de f equivalem aos conjuntos de nível de funções quadráticas, isto é, equivalem a quádricas. O número de autovalores negativos do Hessiano de f em P , dado por λ , é chamado o *índice* do ponto crítico P .

Os principais resultados da teoria de Morse são as desigualdades de Morse (apresentadas a seguir) e o seguinte teorema:

Teorema (Bott-Morse-Smale) *A variedade M_a é difeomórfica a M_b se não existirem pontos críticos de f no intervalo $[a, b]$. Alternativamente, se (a, b) contiver apenas um ponto crítico de índice λ , então $M_b \simeq M_a \cup e_\lambda$.*

Assim, à medida em que a varia, a topologia de M_a não muda até que a passe por um valor crítico de f , onde então a variedade M_a tem “agregada” a ela ou “retirada” da mesma uma célula de ordem λ , e_λ , onde λ é o índice do ponto crítico: $M_c \simeq M_b \cup e_\lambda$ (c é um valor de f logo acima do ponto crítico, e b , um valor de f logo abaixo do ponto crítico). \simeq significa uma relação difeomórfica⁷. Considera-se a variedade M como sendo decomposta ou estratificada em um conjunto de células

$$M = \bigcup_{\lambda} e_\lambda, \quad (3.99)$$

sendo o número de células, no que diz respeito a pontos críticos não degenerados, igual ao número de pontos críticos e a dimensão das células dada pelo índice dos pontos críticos.

⁷Na verdade, a relação é a de equivalência homotópica, que é um pouco mais abrangente que o a de equivalência difeomórfica.

Aplicam-se agora as idéias acima ao exemplo do toro \mathbf{T}^2 , imerso em \mathbf{R}^3 , isto é, visto como um pneu “pronto para rolar”, equilibrado sobre sua “borda”, sendo definida sobre o mesmo a função f , dada pela altura de um ponto de M em relação ao nível de seu ponto de apoio. Esta função possui quatro pontos críticos não degenerados, marcados na figura (3.6) por c_0, c_1, c_2 e c_3 , e cada um definindo um nível crítico diferente de f , respectivamente a_0, a_1, a_2 e a_3 . A figura (3.7) ilustra a decomposição do toro em suas células primitivas e_λ , que são agregadas nos respectivos níveis críticos: para $a < 0$, a variedade M_a é vazia. Em $a = a_0 = 0$, cruza-se o primeiro, mínimo valor crítico de f , correspondendo ao ponto crítico c_0 , de índice zero, em que emerge a variedade M_a pelo “agregamento” de uma célula e_0 : M_a , com $a_0 < a < a_1$, é difeomórfica a um disco (em particular, $a = a_0$ M_a é um ponto, que é homotopicamente equivalente, mas não difeomórfico, a um disco). Em a_1 ocorre o segundo ponto crítico, c_1 , de índice 1, e neste nível crítico se agrega portanto uma célula e_1 (“faixa”) ao disco que constituía as $M_{a < a_1}$, resultando assim as variedades $M_{a > a_1}$, que se assemelham a uma “cesta”, equivalente por sua vez a um “tubo” em “U”. No terceiro nível crítico a_2 , em que ocorre o ponto crítico c_2 , de índice 1, se agrega às variedades $M_{a \simeq a_2}$ uma nova célula e_1 , e as variedades $M_{a > a_2}$ passam a ser equivalentes a um toro sem seu pólo superior. Finalmente em a_3 , ocorre o último ponto crítico, c_3 , que tem índice 2, em que se agrega à variedade uma célula e_2 que é o mesmo que uma célula e_0 , ou seja, um disco, que completa o toro \mathbf{T}^2 .

A decomposição do toro bidimensional em suas células “primitivas” e_k só foi possível devido à escolha muito especial para a função f (f é uma função de Morse “perfeita”). Em geral, no entanto, esta decomposição será um tanto complexa, às vezes impossível. Recorre-se então à caracterização das classes de equivalência de variedades/espacos topológicos através de um número suficiente de invariantes topológicos, de modo a especificar univocamente cada classe. Invariantes topológicos são objetos ou propriedades matemáticas invariantes sob difeomorfismos. Estes podem ser números inteiros (como a dimensão das variedades ou os números de Betti), números reais (como a característica de Euler), grupos (grupo de Homotopia, Homologia, Cohomologia). Assim a investigação da topologia de variedades se dá de forma indireta. Um invariante topológico é constante sobre

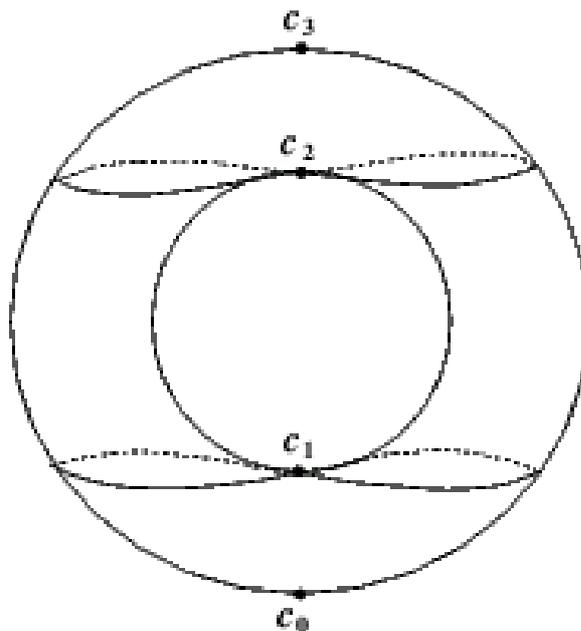


Figura 3.6: Toro bidimensional com os pontos e níveis críticos da função f indicados.[5]

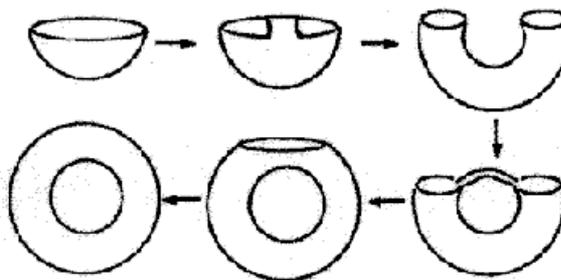


Figura 3.7: Construção do toro bidimensional através de sua estratificação nos conjuntos de nível de f . [5]

todas as variedades pertencentes a uma mesma classe, porém, nem sempre será diferente para classes diferentes. Daí a requisição de um número suficiente de invariantes na caracterização de uma dada classe.

A fim de caracterizar a topologia (ou a classe de equivalência) de uma variedade M através da função f , pode-se fazer uso da teoria de Morse, mais precisamente, das desigualdades de Morse. Associa-se à função f a série de Morse definida por:

$$M_t(f) = \sum_{\text{todos } P} t^{\lambda_P} = \sum_i \mu_i t^i, \quad (3.100)$$

onde P é um ponto crítico genérico de f , de índice λ_P e μ_i , chamado número de Morse, é o número de pontos críticos de f com índice i . A série sempre convergirá. A topologia

de M entra através de $P_t(M)$, que é a sua correspondente série de Poincaré, dada por

$$P_t(M) = \sum_{i=0}^n b_i t^i, \quad (3.101)$$

onde b_i é o número de Betti de ordem i de M , ou o número de células e_i em M .

Algumas das chamadas desigualdades de Morse são:

$$\begin{aligned} M_t(f) &\geq P_t(M), \\ \mu_i &\geq b_i, \quad i = 0, \dots, n \\ \pm \mu_0 + \sum_{i=1}^{j < n} (-1)^i \mu_i &\geq \pm b_0 + \sum_{i=1}^{j < n} (-1)^i b_i. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Pode-se mostrar, em particular, através destas desigualdades:

$$M_{-1}(f) = P_{-1}(M) = \sum_{i=0}^n (-1)^i b_i = \chi(M), \quad (3.103)$$

onde $\chi(M)$ é a característica de Euler-Poincaré da variedade M , que é um invariante topológico. Resulta que $M_{-1}(f)$ é uma quantidade completamente independente da função f que se define sobre M .

Estes resultados em particular podem ser estendidos a funções contendo pontos críticos degenerados, isto é, variedades críticas C . Sobre uma variedade crítica C (no espaço tangente a C), os autovalores do Hessiano se anulam. Uma variedade crítica $C \subset M$ será não degenerada se o Hessiano não possuir autovalores nulos nas direções normais a C . Considerando-se o fibrado normal a C , $N(C)$, o índice da variedade crítica C , definida uma métrica Riemanniana sobre esta, é definido através da decomposição de $N(C)$ em um subespaço com “direções” correspondentes a autovalores negativos do Hessiano, $N(C)^-$ e um subespaço das “direções” correspondentes a autovalores positivos, $N(C)^+$: $N(C) = N(C)^- \oplus N(C)^+$. Desta forma o índice da variedade crítica C , λ_C , é dado pela ordem (“dimensão”) do fibrado $N(C)^-$, sendo a contribuição de C à série de Morse $M_t(f)$ será um polinômio:

$$t^{\lambda_C} P_t(C), \quad (3.104)$$

onde $P_t(C)$ é a série de Poincaré em C . Quando C colapsa a um ponto P , esta contribuição recai no monômio t^{λ_P} , donde se generaliza:

$$M_t(f) = \sum_{\text{todos } C} t^{\lambda_C} P_t(C), \quad (3.105)$$

e continuam valendo as desigualdades de Morse acima.

Referências Bibliográficas

- [1] C. N. Yang, T. D. Lee, *Phys. Rev.* **87** (1952) 404. T. D. Lee, C. N. Yang, *Phys. Rev.* **87** (1952) 410.
- [2] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, New York.
- [3] H. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, John Wiley & Sons, New York, 1985.
- [4] D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, Encyclopaedia of Mathematics and its Applications, Addison-Wesley, New York, 1978.
- [5] L. Casetti, M. Pettini, E. G. D. Cohen, *Phys. Rep.* **337** (2000) 237-341.
- [6] L. P. Eisenhart, *Math. Ann.* **30** (1929) 591.
- [7] M. Pettini, *Phys. Rev. E* **47** (1993) 828.
- [8] L. Caiani, L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini, *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 4361.
- [9] L. Caiani, L. Casetti, M. Pettini, *J. Phys. A* **31** (1998) 3357.
- [10] L. Caiani, L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini, G. Pettini, R. Gatto, *Phys Rev. E* **57** (1998) 3886.
- [11] L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini, *Phys. Rev. E* **54** (1996) 5969.
- [12] Ch. Dellago, H. A. Posch, W. G. Hoover, *Phys. Rev. E* **53** (1996) 1485.
- [13] Ch. Dellago, H. A. Posch, *Physica A* **230** (1996) 364.

- [14] M. Antoni, S. Ruffo, *Phys. Rev. E* **52** (1995) 2361.
- [15] V. Latora, A. Rapisarda, S. Ruffo, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 692; V. Latora, A. Rapisarda, S. Ruffo, *Physica D* **131** (1999) 38.
- [16] M.-C. Firpo, *Phys. Rev. E* **57** (1998) 6599.
- [17] R. Franzosi, L. Casetti, L. Spinelli, M. Pettini, *Phys. Rev. E* **60** (1999) R5009.
- [18] M. Cerruti-Sola, C. Clementi, M. Pettini, *Phys. Rev. E* **61** (2000) 5171.
- [19] Y. Choquet-Bruhat , C. de Witt-Morette , M. Dillard-Bleick , *Analysis, Manifolds and Physics*, North-Holland Publishing Company, New York, 1977.
- [20] M. Pettini, R. Franzosi, L. Spinelli, *Topology and Phase Transitions: towards a proper mathematical definition of finite N transitions*, pre-print cond-mat / 0104110.
- [21] R. Franzosi, M. Pettini, L. Spinelli, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 2774.
- [22] L. Casetti, E. G. D. Cohen, M. Pettini, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 4160.
- [23] L. Casetti, M. Pettini, E. G. D. Cohen, *J. Stat. Phys.* **111** Issue 5 (2003) 1091-1123.
- [24] L. Casetti, E. G. D. Cohen, M. Pettini, *Phys. Rev. E* **65** (2002) 036112.
- [25] L. Angelani, L. Casetti, M. Pettini, G. Ruocco, F. Zamponi, *Europhys. Lett.* **62** (2003) 775.
- [26] R. Franzosi, M. Pettini, *Phys. Rev. Lett.* **92** 060601 (2004).
- [27] R. Franzosi, M. Pettini, L. Spinelli, *Topology and Phase Transitions: Theorem on a necessary relation* pre-print math-ph / 0305032.
- [28] R. Franzosi, M. Pettini, L. Spinelli, *Nuclear Physics B* **782** (3), 189 (2007).
- [29] R. Franzosi, M. Pettini, *Nuclear Physics B* **782** (3), 219 (2007).
- [30] P. Ginza, A. Mossa, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 158102.
- [31] Ana C. Ribeiro Teixeira, D. A. Stariolo, *Phys. Rev. E* **70**, 16113 (2004).

- [32] T. H. Berlin, M. Kac, *Phys. Rev.* **86** (1952) 821.
- [33] A. G. Sveshnikov, A. N. Tikhonov, *The Theory of Functions of a Complex Variable*, (Mir Publishers, Moskow, 1971).
- [34] N. J. Dowrick, J. J. Binney, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of critical phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford University Publications, New York, 1998.
- [35] M. Kastner, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 150601.
- [36] D. J. Thouless, P. W. Anderson, R. G. Palmer, *Philos. Mag.* **35** (1977) 593.
- [37] C. Nash, *Differential topology and quantum field theory*, 2. ed., Academic Press, London, 1991.
- [38] J. Milnor, *Morse Theory*, Annals of Mathematics Studies, Princeton University Press, New Jersey, 1973.
- [39] C. Nash; S. Sen, *Topology and Geometry for Physicists*, Academic Press, London, 1983.