

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

Propriedades termodinâmicas de um gás ideal em superfícies hiperbólicas compactas

Diego Flôor

Dissertação realizada sob orientação da Professora Dra. Sandra Prado (IF UFRGS) e colaboração do Professor Dr. Fernando Kokubun (IMEF FURG) e apresentada ao instituto de física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

Julho - 2012

Propriedades termodinâmicas de um gás
ideal em superfícies hiperbólicas compactas

Sumário

Abstract	v
Resumo	vii
Agradecimentos	ix
Introdução	xi
1 Tensores, geometria e espaços compactos	1
1.1 Introdução	1
1.2 Tensores	2
1.3 Derivadas e símbolo de Christoffel	4
1.4 Tensor de Riemann e curvatura	9
1.5 Geometria hiperbólica	11
1.5.1 Introdução histórica e postulados	11
1.5.2 Modelos de geometria hiperbólica	13
1.6 Espaços compactos	22
1.6.1 O octógono regular	27
2 Mecânica Quântica na pseudoesfera	31
2.1 Dinâmica quântica no octógono compacto	33
2.1.1 Equação de Schrödinger em espaços curvos	33
2.1.2 Equação de Schrödinger em uma superfície definida por um potencial confinante	35
2.1.3 Partícula livre e o espectro de energia no plano hiperbólico	41
2.2 A dinâmica e o espectro no octógono compacto	43
2.3 Cálculos numéricos	45

2.3.1	Algoritmo mais direto	51
2.3.2	Problemas de estabilidade	53
3	Termodinâmica no limite assintótico	57
3.1	Fundamentos de termodinâmica e estabilidade	58
3.2	Equações de estado	61
3.3	Estabilidade termodinâmica em superfícies genéricas	63
4	Comentários finais	69

Abstract

In this work we investigate some thermodynamic properties of ideal gas systems in curved compact surfaces of constant negative curvature. Surfaces with similar properties arise, for example, in fluids embedded in curved spaces. We have studied the thermodynamic stability, using the following condition

$$-\left(\frac{\partial P}{\partial A}\right)_\beta = \frac{1}{A\kappa_T} > 0,$$

where κ_T is the isothermal compressibility. The analysis is based in the asymptotic canonical partition function:

$$Z(A, \beta) \simeq \frac{mA}{2\pi\hbar^2\beta} + \frac{\chi}{6} + \frac{\pi\hbar^2\beta}{120m} \int K^2 dA$$

where $\beta = 1/(k_B T)$ and A , K , χ are area, gaussian curvature and Euler characteristic number, respectively.

Our results show that there are certain constraints between curvature and temperature that have to be satisfied in order to reach the required thermodynamical stability. It is important to notice that the curvature is related to the Euler characteristic by $KA = 2\pi\chi$ for hyperbolic surfaces.

Given the current techniques of handling nanostructures with distinct topology (eg. Möbius strip) and geometry (surfaces of nanotubes, nanocavities and so on) and the dependence of $Z(A, \beta)$ on the geometry (A) and topology (χ) in the limit of high temperatures, it is worth asking whether thermodynamic properties of nanostructures can be more prominently affected by their geometry and topology.

Resumo

Neste trabalho investigamos algumas propriedades termodinâmicas de gases ideais em superfícies compactas de curvatura constante e negativa. Superfícies com propriedades similares aparecem, por exemplo, em líquidos integrados em espaços curvos. Nós estudamos estabilidade termodinâmica, dada pela seguinte condição

$$-\left(\frac{\partial P}{\partial A}\right)_\beta = \frac{1}{A\kappa_T} > 0,$$

aonde κ_T é a compressibilidade isoterma. A análise é baseada na função de partição canônica assintótica:

$$Z(A, \beta) \simeq \frac{mA}{2\pi\hbar^2\beta} + \frac{\chi}{6} + \frac{\pi\hbar^2\beta}{120m} \int K^2 dA$$

aonde $\beta = 1/(k_B T)$ e A , K , χ são a área, a curvatura gaussiana e o número característico de Euler, respectivamente.

Nossos resultados mostram que existem alguns vínculos entre temperatura e curvatura que devem ser satisfeitos para que o sistema seja estável. É importante notar que a relação entre a curvatura gaussiana está relacionada com o número de Euler por $KA = 2\pi\chi$ para superfícies hiperbólicas.

Dadas as técnicas atuais para manipular nanoestruturas com distintas topologias (eg. faixa de Möbius) e geometrias (superfícies de nanotubos, nanocavidades etc.) e a dependência de $Z(A, \beta)$ na geometria (A) e topologia (χ) no limite de altas temperaturas, é interessante perguntar se as propriedades termodinâmicas de nanoestruturas podem ser proeminentemente afetadas pela geometria e topologia.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer à Profa. Dra. Sandra Prado e ao Prof. Dr. Fernando Kokubun pela orientação e amizade. Esta dissertação de mestrado não seria possível sem as várias conversas que direcionaram meu estudo, leituras e releituras do texto ou sem todo o trabalho de desenvolvimento de contas (te devo um natal, Fernando!) e simulações que eu, sozinho, não conseguiria. Não menos importante foram os cafezinhos com piadas e histórias.

Agradeço à CAPES pelo suporte financeiro, que foi suficiente para me sustentar em uma cidade de custo de vida elevado como Porto Alegre, e ao PPGFis pelo profissionalismo.

Agradeço também às minhas colegas de longa data, desde o primeiro ano da graduação até o mestrado, Cecília e Danusa (em ordem alfabética) pela grande amizade. Além de mostrarem todos os caminhos das pedras da UFRGS, nossa convivência tornou o mestrado mais agradável.

Agradeço à minha família, por todo o amor, carinho e apoio incondicional. Inclusive uma leitura e revisão da dissertação pelo meu pai, que é engenheiro agrônomo (obrigado, pai! ler esta dissertação deve ter sido horrível). Com vocês do meu lado, eu enfrento mestrado ou qualquer outro desafio que a vida me apresente.

Muitas das minhas conquistas, incluindo este mestrado, eu devo à minha namorada, Tatiana. Agradeço por tudo, principalmente por ter sempre acreditado na minha capacidade.

Agradeço aos vários amigos que me ajudaram nos momentos de *stress*. Tenho sorte de ter mais amigos que espaço suficiente para agradecê-los individualmente.

Introdução

Quando um sistema é imerso em um espaço de curvatura não-zero, suas quantidades termodinâmicas são, tipicamente, fortemente modificadas [38]. A geometria esférica implica diretamente em espaços finitos, enquanto que propriedades genuínas de longas distâncias são acessíveis na geometria hiperbólica, caracterizadas por curvaturas constantes negativas. Recentemente, a termodinâmica de fluidos no plano hiperbólico tem suscitado uma certa atenção. Mais do que uma curiosidade matemática, fluidos em plano hiperbólico têm sido principalmente considerados no contexto de formação de vidros em líquidos. A razão para isso vem do conceito de "frustração geométrica" que apareceu na descrição geométrica de vidros e sólidos amorfos.

As razões para se estudar a dinâmica de fluidos, líquidos e estados mais densos em espaços curvos são pelo menos bilaterais: de um lado, espaços curvos fornecem um parâmetro de controle adicional, a curvatura, para trazer alguma luz no entendimento do comportamento de sistemas de interesse no espaço euclidiano. Exemplos são importantes no contexto da já referida frustração geométrica, que nada mais é que uma incapacidade geométrica de formar estruturas compactas, que leva ao surgimento de defeitos e buracos. Há muitos exemplos em físico-química, matéria condensada e ciência dos materiais, nos quais uma superfície bidimensional curva é permeada por uma camada de partículas livres para se moverem, de modo a cobrir toda a superfície do substrato. Há uma rica literatura nos casos em que a geometria do substrato é fixa e os desenvolvimentos mais teóricos são apresentados para o caso de variedades homogêneas bidimensionais de curvatura gaussiana constante, em especial, a superfície esférica S^2 e o plano hiperbólico H^2 [33].

As geometrias não-euclidianas trazem sutilezas na mecânica estatística de sistemas de partículas, quando comparadas ao caso padrão euclidiano. Em suma, a curvatura tem um efeito negligenciável ou fraco, no comportamento do fluido em alta temperatura e/ou baixa densidade. Contudo, curvaturas

não-nulas têm fortes conseqüências em densidades mais altas, quando podem induzir ou frustrar ordem. Neste último caso, elas abaixam a taxa de relaxação e permitem a formação de vidro. Curvaturas não-nulas têm também influência marcante em interações de longo alcance [33]. Seria muito desejável a descrição de líquidos e fluidos em substratos com curvatura variável ou mesmo com curvaturas flutuantes, como as encontradas em membranas, mas esse problema é, tanto física quanto matematicamente, muito complexo [38].

Uma pergunta aparentemente mais simples que pode ser colocada aqui é se as propriedades termodinâmicas de um gás são influenciadas pela geometria de seu recipiente. Este é um velho problema travestido em uma nova roupagem. Embora possam parecer muito diferentes em um primeiro momento, as questões "*Can an ideal gas feel the shape of its container?*" [22] e "*Can one hear the shape of a drum?*" [25] são intimamente ligadas. Ambas perguntas podem ser reduzidas, matematicamente, ao problema de se encontrar os autovalores da equação de Helmholtz,

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + \lambda\phi(\mathbf{r}) = 0 \tag{1}$$

com condições de contorno de Dirichlet sobre o domínio da dada geometria.

A motivação para a pergunta de Kac [25] é devida ao fato de que fenômenos ondulatórios que estão no cerne de oscilações em membranas são, de fato, bastante gerais. A equação de ondas estacionárias que descreve esses problemas aparece em vários campos da física, como acústica, sismologia, hidrodinâmica e propagação de calor. Mais recentemente, pesquisas em ciências dos materiais, física da matéria condensada e química mostram que efeitos de superfície e interface têm papel dominante nas propriedades mecânicas, térmicas, ópticas e eletrônicas. Esses sistemas nanométricos caem, em geral, em duas categorias: aquelas tendo nanoestruturas com curvatura positiva e aquelas tendo curvatura negativa. As nanoestruturas com curvatura negativa (nanocavidades, nanotubos) têm atraído a atenção por causa de suas aplicações em física mesoscópica e na fabricação de dispositivos nanométricos. Como exemplo, a nucleação em nanotubos com curvatura negativa é favorecida pela energia livre de Gibbs [33].

Em geral, as propriedades físicas e químicas de um sistema macroscópico podem ser bem caracterizadas pela termodinâmica, que relaciona quantidades mensuráveis diretamente com estímulos aplicados como pressão, temperatura e campos externos. Em adição, efeitos quânticos são importantes

na escala atômica e as grandezas físicas e químicas podem ser calculadas resolvendo-se as relevantes equações de Schrödinger. De qualquer modo, na escala nanométrica, ambos os métodos envolvem dificuldades. Encontrar métodos efetivos para se lidar com essas dificuldades tem sido um grande desafio.

De fato, uma termodinâmica na escala nano tem se tornado cada vez mais necessária, à medida que as dimensões dos dispositivos eletrônicos se aproximam dessa escala. O desenvolvimento experimental tem mostrado que nanoestruturas com curvatura negativa, como materiais porosos com pequenos buracos, são caracterizados por uma prodigiosa área de superfície que pode aumentar as taxas de reações químicas. Além disso, estas nanoestruturas podem ainda permitir que somente moléculas únicas ou agrupamentos de alguns tipos e tamanhos de moléculas se movam através de seus poros. São vários os exemplos que mostram que a possibilidade do uso da curvatura negativa tem alterado muitas propriedades químicas e físicas, em relação às propriedades de bulk e de nanoestruturas com curvatura positiva [33].

Nesta dissertação mostramos a análise dos efeitos da curvatura e topologia para a estabilidade termodinâmica de um gás de partículas não-interagentes, confinado a uma superfície de curvatura constante negativa e topologia (genus) arbitrária, em temperaturas não-frias. Os resultados apresentados no capítulo 3 e discutidos no capítulo 4 levantam questões interessantes sobre o efeito da curvatura e topologia no regime quântico. Considerando-se que Mecânica Quântica em espaços não-euclidianos não é, tipicamente, assunto corrente em cursos de graduação, essa dissertação foi organizada da seguinte maneira: no capítulo 1 apresentamos uma breve introdução a conceitos de geometria e cálculo diferencial em espaços curvos, desenvolvemos os conceitos necessários de tensores para trabalharmos com o operador de Laplace nesses espaços. Apresentamos também o procedimento de construção de espaços bidimensionais compactos. No capítulo 2 desenvolvemos a dinâmica quântica de uma partícula livre no disco de Poincaré, discutimos os algoritmos estudados e nossas dificuldades com as simulações numéricas para obtenção dos autovalores de energia. Para contornar esse problema, abordamos no capítulo 4, a termodinâmica do gás ideal em superfícies de curvatura negativa, no limite de altas temperaturas. Nesse regime, pode-se encontrar na literatura, uma expressão assintótica para a função de partição da partícula única [24]. Com essa expressão semiclassica, foi possível fazer uma análise da condição de estabilidade termodinâmica para o gás ideal.

Capítulo 1

Tensores, geometria e espaços compactos

1.1 Introdução

Neste capítulo introduziremos alguns conceitos de geometria e cálculo diferencial em espaços não euclidianos, com o objetivo de expor as ferramentas mínimas necessárias para trabalharmos com modelos de geometria hiperbólica. Na seção 1.2 desenvolvemos os conceitos necessários para introduzir tensores, com o objetivo de obter o operador de Laplace em espaços curvos (seção 1.3) e o tensor de Riemann (seção 1.4), que caracteriza a curvatura do espaço. Essas sessões foram baseadas na referência clássica Landau e Lifshitz [29]. Na seção 5 faremos uma breve introdução à geometria hiperbólica, através de uma abordagem histórica, e introduziremos alguns sistemas de representação de superfícies hiperbólicas. Essa sessão é baseada em *Non-euclidean geometry*, Coxeter [15], para a parte introdutória, e em Balazs e Voros [7] para os modelos. Por fim, na seção 4, apresentamos o procedimento de construção de espaços compactos, em particular, espaços bidimensionais (superfícies) compactas. Essa última seção é baseada em [7] e em *Periodic boundary conditions on the pseudosphere*, de Sausset e Tarjus [35].

1.2 Tensores

No caso euclidiano tridimensional, a distância entre dois pontos \mathbf{p} e \mathbf{q} é dada pelo teorema de Pitágoras, isto é:

$$d(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sqrt{p_x q_x + p_y q_y + p_z q_z} , \quad (1.1)$$

e essa distância é invariante sob transformações ortogonais. Para espaços euclidianos de dimensão n , a distância infinitesimal entre dois pontos é dada por:

$$ds = \sqrt{\sum_{a,b=1}^n \delta_{ab} dx^a dx^b} , \quad (1.2)$$

aonde $\delta_{ij} = 1$ para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$. Ao efetuarmos uma mudança de coordenadas representada por $x^a = x'^b$ os deslocamentos infinitesimais se transformam como

$$dx^a = \sum_b \frac{\partial x^a}{\partial x'^b} dx'^b . \quad (1.3)$$

Definimos *vetor contravariante* como um objeto que se transforma como (1.3) ao efetuarmos uma mudança de coordenadas, isto é, um vetor contravariante transforma como

$$A^a = \sum_b \frac{\partial x^a}{\partial x'^b} A'^b . \quad (1.4)$$

Notemos que tanto a soma de vetores contravariantes $A^a + B^b$ quanto o produto de um vetor contravariante por um escalar αA^a transformam da mesma maneira.

Considerando que ds^2 é um produto escalar, sabemos que é invariante sob transformações de coordenadas, i.e., $ds^2 = ds'^2$. Utilizando (1.3) em (1.2) obtemos

$$ds^2 = \sum_{c,d} \left(\sum_{a,b} \delta_{ab} \frac{\partial x^a}{\partial x'^c} \frac{\partial x^b}{\partial x'^d} \right) dx'^c dx'^d , \quad (1.5)$$

que pode ser escrita de uma forma mais compacta, utilizando-se a convenção de Einstein ¹ como

$$ds^2 = g_{ab} dx'^a dx'^b , \quad (1.6)$$

¹Sempre que houverem índices repetidos em cima e em baixo no mesmo lado da equação uma somatória está sendo realizada nestes índices.

aonde

$$g_{ab} \equiv \delta_{cd} \frac{\partial x^c}{\partial x'^a} \frac{\partial x^d}{\partial x'^b} \quad (1.7)$$

são os componentes covariantes do tensor métrico, usualmente denominadas de maneira simplificada por métrica. Notemos que quando utilizamos uma base ortogonal, por exemplo \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 tal que $\delta_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b$, a distância infinitesimal pode ser escrita como

$$ds^2 = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b dx^a dx^b . \quad (1.8)$$

Neste caso a métrica nada mais é do que o produto escalar dos vetores de base, e que vale mesmo quando a base não é ortogonal, isto é, em geral

$$g_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b \quad (1.9)$$

para qualquer base.

A métrica g_{ab} tem uma inversa, que representamos por g^{ab} , e deve satisfazer a condição

$$g_{ab} g^{ab} = \delta_a^b . \quad (1.10)$$

Dados dois vetores \mathbf{A} e \mathbf{B} , o produto escalar de \mathbf{A} e \mathbf{B} , denotado por $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$, pode ser calculado por

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = g_{ab} A^a B^b . \quad (1.11)$$

É conveniente definir um novo tipo de vetor da seguinte maneira

$$A_a = g_{ab} A^b , \quad (1.12)$$

de forma que podemos re-escrever o produto escalar como

$$g_{ab} A^a B^b = A_a B^a = A^a B_a . \quad (1.13)$$

Considerando-se que o produto escalar é invariante sob transformações de coordenadas, isto é,

$$A_a B^a = A'_a B'^a , \quad (1.14)$$

e conhecendo-se como o vetor contravariante B'^a se transforma, temos que

$$A_a B^a = A'_a \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} B^b . \quad (1.15)$$

Portanto, podemos definir *vetor covariante* como o objeto que se transforma da seguinte maneira:

$$A_a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} A'_b . \quad (1.16)$$

Essa notação de índices é muito conveniente, podemos usar a métrica para transformar uma componente contravariante em covariante usando g^{ab} ou vice-versa, usando g_{ab} , isto é

$$A_a = g_{ab} A^b \quad A^a = g^{ab} A_b . \quad (1.17)$$

Os vetores covariantes e contravariantes são exemplos de tensores de primeira ordem. Dizemos que o vetor covariante é um tensor do tipo $(1, 0)$ e o vetor contravariante é um tensor do tipo $(0, 1)$. Um tensor de ordem maior é representado com um número maior de índices. O primeiro índice em (k, l) representa o número de índices covariantes, e o segundo representa o número de índices contravariantes presentes em um tensor. Um tensor aonde $k, l \neq 0$ é dito tensor misto de ordem $k + l$. No nosso contexto, é suficiente definir tensores simplesmente como um conjunto de objetos identificadas pelos seus índices. Um tensor de ordem (k, l) é representado por

$$T_{a_1 a_2 \dots a_k}{}^{b_1 b_2 \dots b_l} . \quad (1.18)$$

A convenção de somatório de Einstein e a aplicação da métrica, que é um tensor de ordem $(0, 2)$, devem ser respeitadas.

1.3 Derivadas e símbolo de Christoffel

No espaço euclidiano existe um espaço vetorial natural, onde cada ponto corresponde a um vetor desse espaço vetorial. Em espaços curvos perde-se esse espaço vetorial natural. Nesta seção vamos mostrar como trabalhar com espaços curvos definindo espaços vetoriais locais e uma conexão entre os mesmos. Considerando o caso de uma superfície curva inserida no espaço euclidiano tridimensional, os vetores contravariantes definidos aqui são, na realidade, vetores tangentes à superfície. Portanto, cada ponto do espaço tem seu próprio espaço vetorial (espaço tangente) e a derivada covariante, que veremos a seguir, age como uma conexão entre cada ponto do espaço.

Uma operação importante que efetuamos é a de calcular a derivada de um vetor, que consiste basicamente em comparar dois vetores, um no ponto

p e outro em $p + dp$. No espaço euclidiano o ponto p pode ser levado (transportado) para o ponto $p + dp$ de uma forma natural. Mas em espaços mais gerais não existe uma maneira natural de se efetuar esse transporte, podendo resultar no vetor sendo rotacionado, dependendo do valor do vetor no ponto e também do seu deslocamento. Com isso, a diferença entre dois vetores nos pontos p e $p + dp$ possui, além do termo correspondente à variação do vetor dA^a , uma variação introduzida pelo transporte do vetor de um ponto a outro. Essa diferença pode ser escrita como (o sinal negativo é convencional)

$$\delta A^a = -\Gamma^a_{bc} A^b dx^c, \quad (1.19)$$

onde Γ^a_{bc} são coeficientes a serem determinados. Desta forma, ao compararmos o vetor nos dois pontos devemos subtrair esse termo δA^a , obtendo a diferença DA^a :

$$DA^a = dA^a + \Gamma^a_{bc} A^b dx^c. \quad (1.20)$$

Com isso, definimos a chamada *derivada covariante* como

$$\nabla_c A^a = \frac{\partial A^a}{\partial x^c} + \Gamma^a_{bc} A^b, \quad (1.21)$$

e os coeficientes Γ^a_{bc} são as componentes do *símbolo de Christoffel* [40]. É interessante observar que em geral o símbolo de Christoffel não se comporta como um tensor. Podemos definir uma forma totalmente covariante da seguinte maneira:

$$\Gamma_{abc} = g_{ad} \Gamma^d_{bc} \quad (1.22)$$

Para vetores covariantes, vamos aplicar a derivada covariante no produto $A_a B^a$, lembrando que a derivada covariante deve obedecer a regra de Leibniz, isto é,

$$\nabla_b (A_a B^a) = A_a \nabla_b B^a + B^a \nabla_b A_a. \quad (1.23)$$

Considerando que, aplicada em uma grandeza escalar, a derivada covariante se reduz à derivada ordinária, e usando a definição da derivada covariante em um vetor contravariante, obtemos que a derivada covariante aplicada em um vetor covariante é dada por:

$$\nabla_b B_a = \frac{\partial B_a}{\partial x^b} - \Gamma^c_{ab} B_c. \quad (1.24)$$

Porém, a derivada covariante ainda não é única, mas vamos encontrar uma condição adicional em breve.

Para podermos estabelecer uma analogia entre espaços curvos e o espaço euclidiano, vamos colocar o espaço euclidiano sob o mesmo tratamento que os espaços não euclidianos, isto é, descartando o espaço vetorial natural e atribuindo um espaço vetorial a cada ponto, onde a conexão é trivialmente dada pelos componentes do símbolo de Christoffel iguais à zero. Dessa maneira temos uma idéia razoavelmente clara do que significa mover um vetor ao longo do espaço ou de uma curva no espaço (ver figura 1.1 b). A operação que queremos generalizar é denominada *transporte paralelo*. De uma certa maneira, queremos que um vetor paralelamente transportado ao longo de uma curva seja constante em relação a conexão do espaço. Ou, de forma mais direta, um vetor X^b paralelamente transportado ao longo de uma curva, onde t^a é o vetor tangente à curva, obedece a seguinte relação:

$$t^a \nabla_a X^b = 0 \quad (1.25)$$

i.e., a derivada de X^b ao longo de t^a é nula. Podemos re-escrever (1.25) como

$$t^a \partial_a X^b + t^a \Gamma^b_{ca} X^c = 0 . \quad (1.26)$$

Aonde introduzimos a notação ∂_a para representar $\partial/\partial x_a$.

Consideremos dois vetores, v^a e w^b , que são invariantes ao serem paralelamente transportados ao longo de uma curva. Vamos impor que o produto escalar entre v^a e w^b também seja invariante ao ser paralelamente transportado ao longo de uma curva. Isto é

$$t^a \nabla_a (g_{bc} v^b w^c) = 0 , \quad (1.27)$$

que pode ser re-escrito utilizando-se a regra de Leibniz:

$$t^a v^b w^c \nabla_a g_{bc} + g_{bc} (t^a \nabla_a v^b) w^c + g_{bc} v^b (t^a \nabla_a w^c) = 0 . \quad (1.28)$$

Como $t^a \nabla_a v^b = 0$ e $t^a \nabla_a w^c = 0$ temos que:

$$t^a v^b w^c \nabla_a g_{bc} = 0 \quad (1.29)$$

que será válido para todas as curvas e vetores transportados paralelamente se e somente se

$$\nabla_a g_{bc} = 0 . \quad (1.30)$$

Dessa maneira, a derivada covariante se torna unicamente definida [40]. Vamos utilizar esta condição para encontrar uma expressão do símbolo de Christoffel em função da métrica.

Observamos que a ação da derivada covariante sobre um tensor de ordem $(0, 2)$ possui a forma

$$\nabla_c T_{ab} = \partial_c T_{ab} - \Gamma^d_{ac} T_{db} - \Gamma^d_{bc} T_{ad} . \quad (1.31)$$

Substituindo (1.31) em (1.30) e utilizando (1.22) temos:

$$\partial_a g_{bc} = \Gamma_{cba} + \Gamma_{bca} . \quad (1.32)$$

Podemos substituir os índices para obtermos também

$$\partial_b g_{ac} = \Gamma_{cba} + \Gamma_{acb} \quad (1.33)$$

e

$$\partial_c g_{ab} = \Gamma_{bca} + \Gamma_{abc} . \quad (1.34)$$

Somando-se as equações (1.32) e (1.33), e então subtraindo (1.34), e observando que Γ é simétrico no segundo e terceiro índices, obtemos

$$\partial_a g_{bc} + \partial_b g_{ac} - \partial_c g_{ab} = 2\Gamma_{cab} . \quad (1.35)$$

Aplicando o tensor métrico g^{cd} em (1.35) e após um rearranjo nos índices, obtemos uma relação entre o símbolo de Christoffel e o tensor métrico, que é dada por

$$\Gamma^c_{ab} = \frac{1}{2} g^{cd} (\partial_a g_{bd} + \partial_b g_{ad} - \partial_d g_{ab}) . \quad (1.36)$$

Com a obtenção da derivada covariante e do símbolo de Christoffel, podemos determinar o laplaciano em coordenadas generalizadas.

O operador de Laplace é definido como o divergente do gradiente de um campo escalar, para obtermos o operador vamos precisar do diferencial de $g \equiv \det [g^{ab}]$. Do cálculo matricial, a fórmula de Jacobi [30] fornece o diferencial do determinante de uma matriz:

$$dg = g g^{ab} dg_{ab} . \quad (1.37)$$

Outras maneiras de escrever (1.37) que serão úteis ao longo deste trabalho são:

$$d(\sqrt{g}) = -\frac{1}{2} \sqrt{g} g_{ab} dg^{ab} \quad (1.38)$$

$$\frac{1}{g} dg = g^{ab} dg_{ab} \quad (1.39)$$

$$dg_{ab} = g_{ab}d(\ln g) . \quad (1.40)$$

A contração é a operação de somar em dois índices iguais, um superior e um inferior, de um tensor. Usando a equação (1.36), a contração do símbolo de Christoffel no primeiro e terceiro índices é dada por:

$$\Gamma^c{}_{ac} = \frac{1}{2}g^{cd} [\partial_c g_{ad} - \partial_d g_{ac}] + \frac{1}{2}g^{cd} \partial_a g_{cd} \quad (1.41)$$

Pode ser verificado que o termo entre parênteses é nulo trocando-se a ordem dos índices c e d . Dessa forma temos:

$$\Gamma^c{}_{ac} = \frac{1}{2}g^{cd} \partial_a g_{cd} = \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_a (\sqrt{g}) \quad (1.42)$$

O conceito de divergente de um vetor A^c é generalizado como a contração

$$\nabla_c A^c = \partial_c A^c + \Gamma^a{}_{ca} A^c \quad (1.43)$$

e, usando (1.42), pode ser re-escrito como

$$\nabla_c A^c = \partial_c A^c + \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_a (\sqrt{g}) A^a = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_a (\sqrt{g} A^a) . \quad (1.44)$$

Finalmente, escreveremos o operador de Laplace aplicado em um campo escalar ϕ

$$\nabla_c \nabla^c \phi = \nabla_c (\partial^c \phi) = \nabla_c (g^{ca} \partial_a \phi) \quad (1.45)$$

ou

$$\nabla_c \nabla^c \phi = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_c (\sqrt{g} g^{ca} \partial_a \phi) . \quad (1.46)$$

O conceito de geodésica, que introduziremos neste momento, será útil quando discutirmos os modelos de geometria hiperbólica. Dados dois pontos num espaço qualquer, a curva com menor distância que conecta esses dois pontos é chamada de geodésica. No nosso contexto, temos uma definição equivalente: uma curva $x^a(s)$ é chamada de geodésica, quando os vetores tangentes $\dot{x}^a = dx^a/ds$ são preservados ao serem paralelamente transportados ao longo de si mesmos. Isto é,

$$\dot{x}^a \nabla_a \dot{x}^b = 0 , \quad (1.47)$$

que resulta em

$$\frac{d^2 x^b}{ds^2} + \Gamma^b{}_{ca} \frac{dx^a}{ds} \frac{dx^c}{ds} = 0 . \quad (1.48)$$

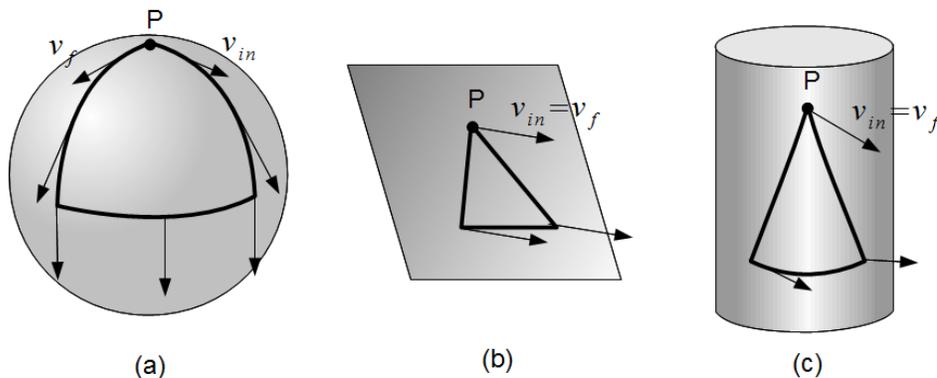


Figura 1.1: Transporte paralelo de um vetor ao longo de uma curva fechada. v_{in} é o vetor inicial e v_f é o vetor após o transporte paralelo, em três superfícies: (a) esfera, (b) plano e (c) cilindro. A perspectiva pode dificultar a visualização, portanto vale ressaltar que todos os vetores são tangentes a superfície.

1.4 Tensor de Riemann e curvatura

Na figura (1.1) vemos algumas curvas fechadas (triângulos formados por geodésicas) e o transporte paralelo de vetores ao longo desse caminho. Fica claro que em espaços curvos o vetor final não coincide com o vetor inicial. No nosso argumento geodésicas são usadas apenas para melhor ilustrar a relação entre transporte paralelo ao longo de caminhos fechados. Porém, transporte paralelo ao longo de qualquer caminho fechado possui esse comportamento, embora o quanto o vetor muda dependa do caminho.

No espaço euclidiano sabemos que, se A^a for suave,

$$\frac{\partial^2 A^a}{\partial x^b \partial x^c} = \frac{\partial^2 A^a}{\partial x^c \partial x^b} . \quad (1.49)$$

No entanto, quando consideramos a derivada covariante em espaços curvos, em geral

$$\nabla_b \nabla_c A^a \neq \nabla_c \nabla_b A^a \quad (1.50)$$

isto é, elas não comutam. Além disso, pode ser demonstrado (ver [40]) que a aplicação do comutador $[\nabla_b, \nabla_c] A^a$ depende apenas do valor de A^a , o que nos permite escrever

$$[\nabla_b, \nabla_c] A^a = R^a{}_{bcd} A^d \quad (1.51)$$

onde introduzimos o *tensor de Riemann* $R^c{}_{abd}$.

Voltando para a discussão de transporte paralelo em curvas fechadas, se considerássemos curvas infinitesimalmente pequenas, encontraríamos uma expressão equivalente ao comutador das derivadas covariantes. Portanto, a comutação da derivada covariante está indiretamente ligada ao transporte paralelo de um vetor em um caminho fechado, de forma que o tensor de Riemann está relacionado com a curvatura do espaço. No caso do espaço euclidiano todas os componentes do tensor de Riemann são nulos.

Usando a expressão da derivada covariante como função do símbolo de Christoffel, eq. (1.21), podemos escrever o tensor de Riemann como

$$R^c{}_{abd} = \partial_b \Gamma^c{}_{da} - \partial_d \Gamma^c{}_{ba} + \Gamma^c{}_{be} \Gamma^e{}_{da} - \Gamma^c{}_{de} \Gamma^e{}_{ba} . \quad (1.52)$$

O tensor de Riemann satisfaz as seguintes propriedades:

1. $R_{abcd} = -R_{bacd} = -R_{abdc}$;
2. $R_{abcd} = R_{cdab}$;
3. $R_{abcd} + R_{acdb} + R_{adbc} = 0$.

A princípio, o número de componentes do tensor de Riemann, para um espaço de dimensão d , é d^4 . Porém, com essas propriedades levadas em consideração, o número de componentes independentes reduz-se para $d^2(d^2 - 1)/12$ [8]. Isto é, um espaço unidimensional ($d = 1$) não pode ter curvatura e em um espaço bidimensional ($d = 2$) o tensor de Riemann tem apenas um componente. Vamos encontrar esse componente para o espaço bidimensional. Consideremos o seguinte tensor:

$$\zeta_{abcd} = \frac{1}{2} (g_{ac}g_{bd} - g_{ad}g_{cb}) . \quad (1.53)$$

Este tensor ζ_{abcd} possui as mesmas propriedades do tensor de Riemann, portanto também possui apenas um componente independente. Então, a relação entre esse tensor e o de Riemann deve ser linear

$$R_{abcd} = A \zeta_{abcd} . \quad (1.54)$$

Para descobrir qual é esse componente, vamos contrair o tensor de Riemann duas vezes para obter a curvatura escalar², denotada por S . Lembrando que

²É comum encontrar na literatura referências à curvatura gaussiana K . Essa grandeza tem sua definição natural na geometria diferencial e se relaciona com a curvatura escalar por $2K = S$

operação de contração em tensores pode ser compreendida como a soma em dois índices, da seguinte maneira:

$$g^{bd}R_{abcd} = R_{ac} . \quad (1.55)$$

Na contração acima obtemos o chamado tensor de Ricci. Contraindo mais uma vez obtemos um escalar, denominado curvatura escalar S , dada por:

$$S = g^{bd}g^{ac}R_{abcd} = g^{bd}g^{ac}A\zeta_{abcd} \quad (1.56)$$

$$S = \frac{A}{2}g^{bd}g^{ac}(g_{ac}g_{bd} - g_{ad}g_{cb}) = \frac{A}{2}\left((g^{ab}g_{ab})^2 - g^{ab}g_{ab}\right) . \quad (1.57)$$

Portanto, o tensor de Riemann em duas dimensões é dado por

$$R_{1212} = \frac{S(g_{11}g_{22} - (g_{12})^2)}{(g^{ab}g_{ab})^2 - g^{ab}g_{ab}} , \quad a, b = 1, 2 \quad (1.58)$$

Concluindo essa seção, temos os fundamentos para trabalhar com espaços curvos e, mais especificamente, superfícies. O tensor de Riemann para superfícies possui apenas um componente, o que torna os cálculos da próxima seção muito mais simples em comparação com o espaço-tempo ($d = 4$) na relatividade geral, aonde o tensor de Riemann possui $d^2(d^2 - 1)/12 = 20$ componentes independentes. Na próxima seção vamos utilizar essas ferramentas para estudar modelos de geometria hiperbólica, que nada mais são que superfícies de curvatura escalar/gaussiana constante e negativa.

1.5 Geometria hiperbólica

1.5.1 Introdução histórica e postulados

Euclides, um matemático grego que viveu por volta de 300 aC, forneceu uma base axiomática à geometria [31]. A geometria já era conhecida e extensivamente utilizada muito antes da obra de Euclides ser publicada, mas a nova abordagem forneceu um nível de rigor inédito, aonde propriedades intuitivas de pontos, linhas e formas se tornaram dedutíveis sob a forma de teoremas. Estes são os axiomas, escritos numa forma não rigorosa:

1. Cada par de pontos pode ser unido por um e apenas um segmento de reta.

2. Qualquer segmento de reta pode ser estendido infinitamente em ambas as direções.
3. Dado um raio e um centro existe um e apenas um círculo.
4. Todos os ângulos retos (90°) são iguais.
5. Se uma reta interseccionar duas retas e os ângulos internos de um mesmo lado somarem menos que dois ângulos retos, as duas retas, se estendidas indefinidamente, se encontrarão naquele lado onde os ângulos somarem menos que dois ângulos retos.

Dada a natureza mais complicada do quinto postulado, a idéia de que talvez essa não seja a formulação axiomática mais fundamental persistiu por mais de dois mil anos, onde matemáticos do mundo inteiro tentaram deduzir esse quinto axioma a partir dos quatro primeiros. O objetivo de obter a familiar geometria só com quatro axiomas nunca deu certo, todas as "provas" do quinto postulado necessitavam da introdução de um novo postulado que, de fato, era equivalente ao quinto postulado de Euclides [31].

É interessante notar que outras geometrias já eram conhecidas mas não eram interpretadas como *outras geometrias*. A própria geometria elíptica, já muito utilizada na geografia e astrologia, não parece ter acelerado o processo de rejeição do quinto postulado. Talvez, pela esfera ser uma superfície imersa no espaço tridimensional, se pensasse na geometria elíptica como um caso particular da geometria euclidiana.

Apesar da demora, foram justamente esses modelos de geometrias não euclidianas construídos dentro de um espaço euclidiano de dimensão maior que provaram a independência do quinto postulado dos outros quatro. Isso não era óbvio, pois os axiomas careciam do rigor que se exige na matemática atual, permitindo espaço para interpretação. No início do século XIX, então, surgiu o interesse em analisar a estrutura resultante apenas dos quatro axiomas e o resultado foi uma teoria consistente [15]. Ao adicionar o postulado

*Dada uma linha e um ponto fora dessa existe mais de uma linha,
passando pelo ponto, paralela à linha dada.*

temos a emergência da geometria hiperbólica, cujo termo provém de um dos modelos dessa geometria, com várias propriedades ausentes na geometria

euclidiana. Nas próximas seções veremos alguns modelos de geometria hiperbólica, onde poderemos observar o comportamento de geodésicas paralelas, dada pelo postulado acima.

A geometria hiperbólica é também chamada de geometria de Bolyai-Lobachevsky, nome proveniente dos primeiros autores, embora Gauss tenha mencionado ter desenvolvido a geometria hiperbólica na sua juventude mas não se interessou em publicar [15].

1.5.2 Modelos de geometria hiperbólica

Lobachevsky havia sugerido a possibilidade de superfícies de curvatura constante e negativa serem modelos de geometria hiperbólica e essa sugestão foi comprovada pouco depois por Ferdinand Minding. Mas foi Beltrami em seus dois artigos, algumas décadas depois, quem deu o passo mais significativo fornecendo diversos modelos de espaço hiperbólico. Começaremos pelo modelo do hiperbolóide, do qual podemos construir outros modelos com simples projeções e mudanças de sistemas de coordenadas.

No espaço tridimensional com a métrica de Minkowski, $g_{ab} = \text{diag}(-1, 1, 1)$, a superfície denominada pseudoesfera é o conjunto de todos os pontos (y_0, y_1, y_2) equidistantes da origem:

$$-y_0^2 + y_1^2 + y_2^2 = -R^2, \quad (1.59)$$

onde selecionamos apenas o hiperbolóide superior. Da mesma maneira que a esfera, as geodésicas são curvas formadas pela intersecção entre o hiperbolóide e planos que passam pela origem. O termo pseudoesfera é utilizado para designar não apenas o hiperbolóide mas também os outros modelos de geometria hiperbólica.

O próximo passo é identificar o grupo de isometrias, essencial para a descrição da geometria e dinâmica nesse espaço. Isometrias são transformações que preservam a métrica, i.e., seja $d(a, b)$ a função que retorna a menor distância entre $a, b \in M$ e seja Λ é uma transformação isométrica, então

$$d(a, b) = d(\Lambda(a), \Lambda(b)) \quad (1.60)$$

ou, na notação de componentes,

$$\Lambda_a^c g_{cd} \Lambda_b^d = g_{ab} \quad (1.61)$$

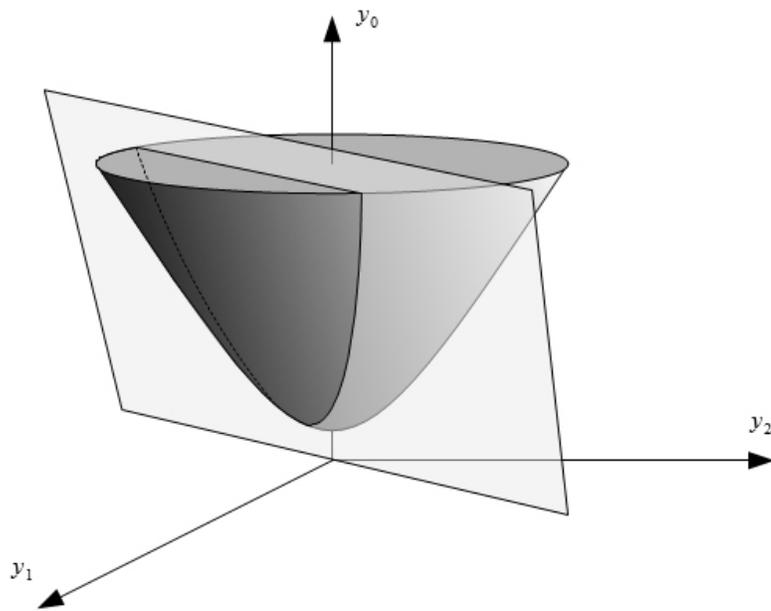


Figura 1.2: Hiperbolóide no espaço de Minkowski. Assim como na esfera, as geodésicas são curvas dadas pela intersecção do hiperbolóide com planos que passam pela origem.

Na esfera, o grupo de isometrias são as transformações de rotação. No hiperbolóide, aquelas transformações de Lorentz que não mudarem o sinal de y_0 (preservando o hiperbolóide superior) são as isometrias no hiperbolóide. No contexto da relatividade, essas transformações são denominadas ortocronais pelo fato de y_0 estar relacionado ao tempo [8]. As isometrias podem ser geradas pelo produto das seguintes transformações

$$R_{\varphi_0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_0 & -\sin \varphi_0 \\ 0 & \sin \varphi_0 & \cos \varphi_0 \end{pmatrix} \text{ (Rotação usual no plano } (y_1 y_2)) \quad (1.62)$$

$$T_{\tau_0} = \begin{pmatrix} \cosh \tau_0 & \sinh \tau_0 & 0 \\ \sinh \tau_0 & \cosh \tau_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ (Boost em } y_1) \quad (1.63)$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ (Reflexão no plano } (y_0, y_1)) \quad (1.64)$$

O fato de usarmos 3 coordenadas para descrever a superfície torna esse um modelo inconveniente. O modelo a seguir, que vamos construir partindo do hiperbolóide, é mais fácil de trabalhar e visualizar a geometria da pseudoesfera.

Disco de Poincaré

Em coordenadas pseudoesféricas o hiperbolóide é dado por:

$$y_0 = R \cosh \tau \quad (1.65)$$

$$y_1 = R \sinh \tau \cos \varphi \quad (1.66)$$

$$y_2 = R \sinh \tau \sin \varphi \quad (1.67)$$

Nessa parametrização (τ, φ) a métrica da superfície é representada pela matriz 2x2

$$g_{ab} = R^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sinh^2 \tau \end{pmatrix} \quad (1.68)$$

ou

$$ds^2 = R^2 (d\tau^2 + \sinh^2 \tau d\varphi^2) \quad (1.69)$$

Por simplicidade, daqui em diante vamos considerar $R = 1$. Construiremos o disco de Poincaré como o conjunto de pontos formados pela intersecção

das retas que passam pelo hiperbolóide e pelo ponto $(-1, 0, 0)$ com o plano (y_1, y_2) . No plano, podemos usar o mesmo φ e a distância da origem é dada por semelhança de triângulos, ilustrado na figura (1.3). Com isso temos que:

$$r = \frac{\sinh \tau}{1 + y_0} = \tanh \frac{\tau}{2} \quad (1.70)$$

e a métrica no disco resulta simplesmente em:

$$ds^2 = \frac{4(dr^2 + r^2 d\varphi^2)}{(1 - r^2)^2} = \frac{4(dx_1^2 + dx_2^2)}{(1 - x_1^2 - x_2^2)^2}, \quad (1.71)$$

aonde (x_1, x_2) são as coordenadas cartesianas no disco e $r^2 = x_1^2 + x_2^2$ é a distância *euclidiana* da origem. As coordenadas (r, φ) caracterizam a chamada parametrização polar do disco.

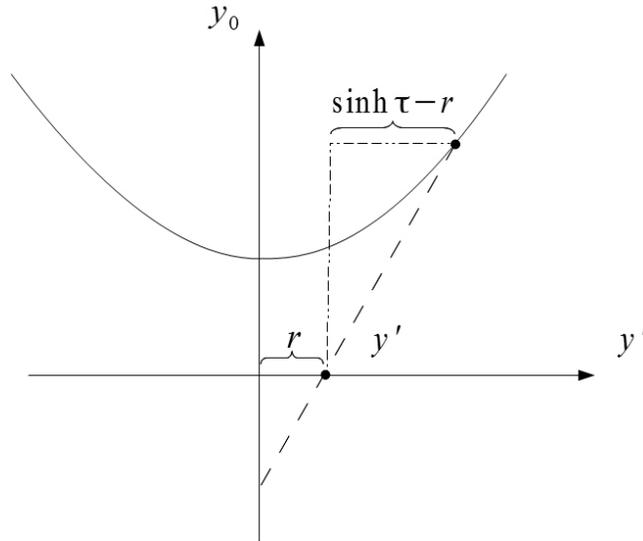


Figura 1.3: Plano (y_0, y_1) (dado por um ângulo φ qualquer). A projeção pode ser obtida por semelhança de triângulos.

A seguinte parametrização complexa é útil para descrever os deslocamentos no disco:

$$z = x_1 + ix_2 = re^{i\varphi} = \frac{y_1 + iy_2}{1 + y_0} \quad (1.72)$$

Nessa parametrização as transformações de rotação, *boost* e reflexão precisam ser re-escritas. Rotação:

$$R_{\varphi_0}(z) = \frac{\{y_1 \cos \varphi_0 - y_2 \sin \varphi_0\} + i \{y_1 \sin \varphi_0 + y_2 \cos \varphi_0\}}{1 + y_0} \quad (1.73)$$

$$R_{\varphi_0}(z) = \frac{y_1 + iy_2}{1 + y_0} e^{i\varphi_0} = z e^{i\varphi_0} \quad (1.74)$$

$$R_{\varphi_0}(z) = z e^{i\varphi_0} \quad (1.75)$$

Boost:

$$T_{\tau_0}(z) = \frac{(\cosh \tau_0/2) z + \sinh \tau_0/2}{(\sinh \tau_0/2) z + \cosh \tau_0/2} \quad (1.76)$$

Reflexão no plano (y_0, y_1)

$$S(z) = z^* \quad (1.77)$$

Com exceção da reflexão, todas as transformações podem ser expressas sob a forma de frações lineares:

$$z' = \frac{\alpha z + \beta}{\beta^* z + \alpha^*}, \quad |\alpha| - |\beta| = 1 \quad (1.78)$$

que por sua vez possuem uma conveniente representação matricial

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}. \quad (1.79)$$

O disco de Poincaré é o modelo que vamos utilizar. É conveniente por descrever toda a pseudoesfera dentro de um círculo unitário no plano euclidiano, e os ângulos são equivalentes ao do plano euclidiano (se diz que o modelo é conformal). Na seção seguinte introduziremos o modelo denominado meio-plano de Poincaré, que auxiliará nos cálculos de curvatura e geodésicas.

Meio plano de Poincaré

Infelizmente a construção desse modelo não é tão facilmente ilustrada quanto a construção do disco como uma projeção do hiperbolóide. Utilizamos uma transformação fracional linear particular.

Sejam $x \in \mathbb{R}$ e $y > 0 \in \mathbb{R}$ as coordenadas do meio plano, $\zeta = x + iy$ e $z = x' + iy'$ as coordenadas no disco de Poincaré, então

$$\zeta = \frac{-iz + i}{z + i} \quad (1.80)$$

$$z = \frac{-\zeta + i}{\zeta + i} \quad (1.81)$$

Geometricamente, a transformação (1.80) é a combinação de uma reflexão no eixo $y = x$ e a inversão de um ponto com respeito a um círculo de raio 1 centrado em $(0, -2)$ (i.e. tocando o disco de Poincaré). Dessa forma, a fronteira do disco passa a ser todo o eixo x e a área $y > 0$ o centro do disco. Na figura (1.4) ilustramos várias trajetórias no meio plano e no disco de Poincaré.

A métrica do meio plano é dada por

$$ds^2 = \frac{dx^2 + dy^2}{y^2} . \quad (1.82)$$

Como essa métrica é mais conveniente para calcular os símbolos de Christoffel, vamos utilizar este modelo para obter a curvatura e as geodésicas da pseudoesfera. Sabendo-se que a curvatura escalar $S = g^{bd}g^{ac}R_{abcd}$ e que o tensor de Riemann possui somente um componente independente, S se resume a:

$$S = (g^{22} + g^{11}) R^2_{121} \quad (1.83)$$

Expandindo esse componente em termos dos símbolos de Christoffel, eq. (1.36), temos

$$\begin{aligned} R^2_{121} = & \partial_2 \Gamma^2_{11} - \partial_1 \Gamma^2_{21} + \Gamma^2_{21} \Gamma^1_{11} - \Gamma^2_{11} \Gamma^1_{21} \\ & + \Gamma^2_{22} \Gamma^2_{11} - \Gamma^2_{12} \Gamma^2_{21} . \end{aligned} \quad (1.84)$$

Os únicos componentes não nulos podem ser facilmente calculados:

$$\Gamma^1_{21} = \Gamma^1_{12} = \Gamma^2_{22} = -\frac{1}{y} \quad (1.85)$$

e

$$\Gamma^2_{11} = \frac{1}{y} . \quad (1.86)$$

De forma que:

$$R^2_{121} = -\frac{1}{y^2} , \quad (1.87)$$

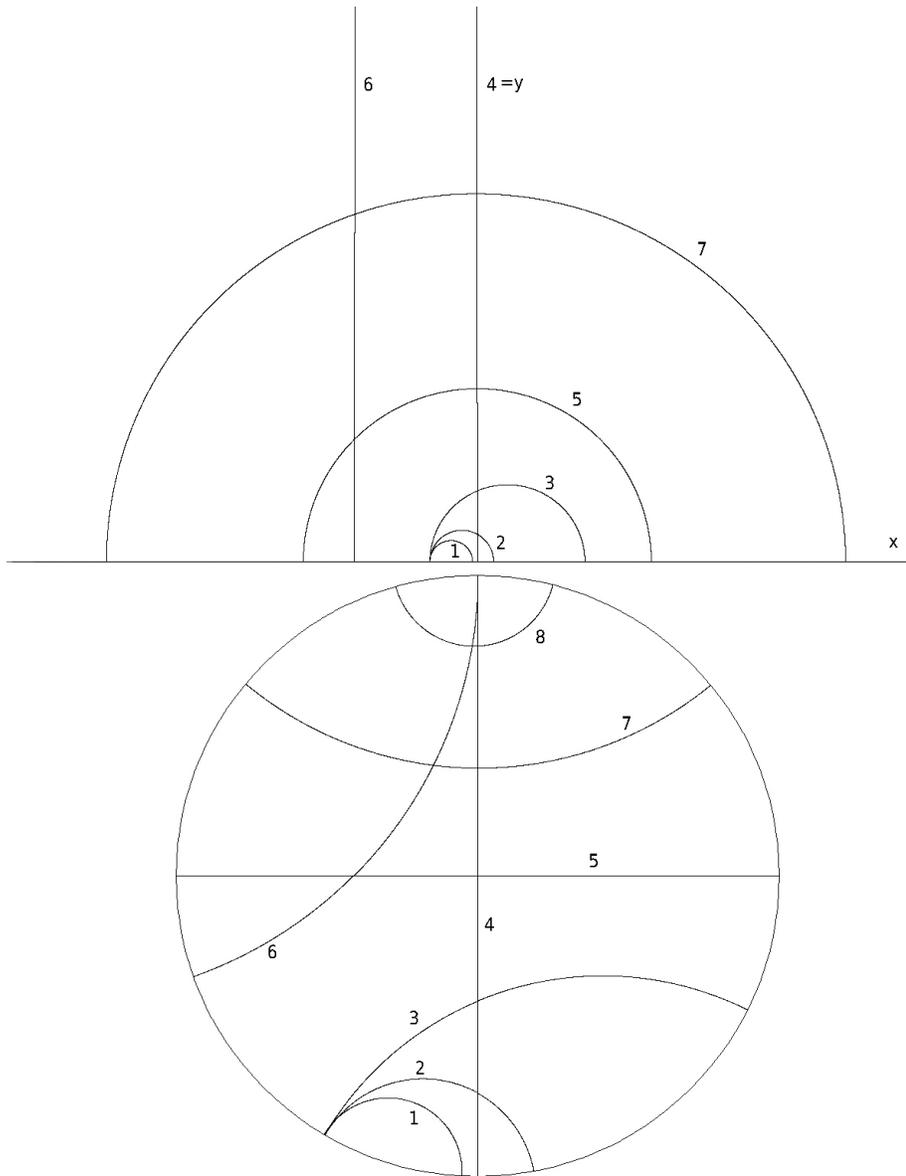


Figura 1.4: As geodésicas do plano hiperbólico no meio plano (acima) e no disco (abaixo). Esta figura foi gerada utilizando o applet [4]

que nos dá a curvatura escalar

$$S = (g^{22} + g^{11}) R^2_{121} = -2 \quad (1.88)$$

e a curvatura gaussiana

$$K = -1 \quad (1.89)$$

ou, para $R \neq 1$,

$$K = -\frac{1}{R^2}. \quad (1.90)$$

Usando a equação da geodésica (1.48) e os símbolos de Christoffel calculados anteriormente, as geodésicas no meio plano são dadas pelo sistema de equações:

$$\frac{d^2x}{ds^2} - \frac{2}{y} \frac{dx}{ds} \frac{dy}{ds} = 0 \quad (1.91)$$

$$\frac{d^2y}{ds^2} + \frac{1}{y} \left(\frac{dx}{ds} \right)^2 - \frac{1}{y} \left(\frac{dy}{ds} \right)^2 = 0. \quad (1.92)$$

No caso em que $\dot{x} \equiv \frac{dx}{ds} = 0$. A equação (1.92) se torna

$$y \frac{d^2y}{ds^2} - \left(\frac{dy}{ds} \right)^2 = \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{y}}{y} \right) = 0 \quad (1.93)$$

isto é,

$$\dot{y} = ay. \quad (1.94)$$

Notando que o vetor tangente é unitário, o produto escalar nos dá

$$\frac{1}{y^2} \dot{x}^2 + \frac{1}{y^2} \dot{y}^2 = 1 \Rightarrow a^2 = 1. \quad (1.95)$$

Usando esse valor de a^2 e resolvendo a equação $\dot{y} = ay$ da forma usual, temos que a geodésica é dada por:

$$(x_0, e^{\pm(s-s_0)}) , \quad (1.96)$$

que é uma reta paralela ao eixo y .

Vamos considerar o caso em que $\dot{x} \neq 0$. Primeiro, notamos que:

$$d \left(\frac{y\dot{y}}{\dot{x}} \right) = \frac{\dot{y}^2 \dot{x} + y\ddot{y}\dot{x} - y\dot{y}\ddot{x}}{\dot{x}^2} \quad (1.97)$$

pode ser rearranjado, adicionando-se os termos $(\dot{x}^3 - \dot{x}^3 + 2\dot{x}\dot{y}^2 - 2\dot{x}\dot{y}^2)/\dot{x}^2$, para se tornar

$$d\left(\frac{y\dot{y}}{\dot{x}}\right) = \frac{\dot{x}(y\ddot{y} + \dot{x}^2 - \dot{y}^2) - \dot{y}(y\ddot{x} - 2\dot{x}\dot{y}) - \dot{x}^3}{\dot{x}^2} \quad (1.98)$$

aonde identificamos as equações (1.91) e (1.92), nos dando

$$d\left(\frac{y\dot{y}}{\dot{x}}\right) = -\dot{x} \Rightarrow d\left(\frac{y\dot{y}}{\dot{x}} + x\right) = 0. \quad (1.99)$$

Assim, resumimos o problema a resolver a equação:

$$\frac{y\dot{y}}{\dot{x}} + x = b \quad (1.100)$$

aonde b é um número real. Multiplicando por \dot{x} e integrando em s , temos

$$y^2 + x^2 - 2bx = +c \quad (1.101)$$

ou, numa forma provavelmente mais familiar,

$$(x - b)^2 + y^2 = b^2 + c. \quad (1.102)$$

Essa é a equação do círculo de raio $\sqrt{b^2 + c}$ com o centro no eixo x , isto é, semicírculos perpendiculares ao eixo x . Lembrando que a construção do meio plano, dada pela eq. (1.80), faz com que o eixo x do meio plano seja equivalente à circunferência do disco. Dessa forma, podemos inferir que as geodésicas no disco devem ser curvas perpendiculares à circunferência do disco. Na figura 1.4 nós podemos ver as geodésicas no meio-plano e no disco de Poincaré.

Existem vários outros modelos que não vamos utilizar e nem desenvolver nessa dissertação. Mas uma pergunta natural é se existe uma superfície hiperbólica inserida num espaço euclidiano tridimensional. A resposta é sim, mas existem limitações. Hilbert propôs um teorema que diz que uma superfície completa (que não possui fronteiras), regular (todos os pontos são diferenciáveis e a superfície não possui intersecções com ela mesma) e isométrica aos modelos de pseudoesfera mostrados aqui, não existe no espaço euclidiano tridimensional com a métrica usual $g_{ab} = \delta_{ab}$. Um modelo de pseudoesfera no espaço euclidiano é a superfície de revolução da tractrix. Na figura 1.5 podemos ver uma parte dessa superfície e a área equivalente no disco de Poincaré.

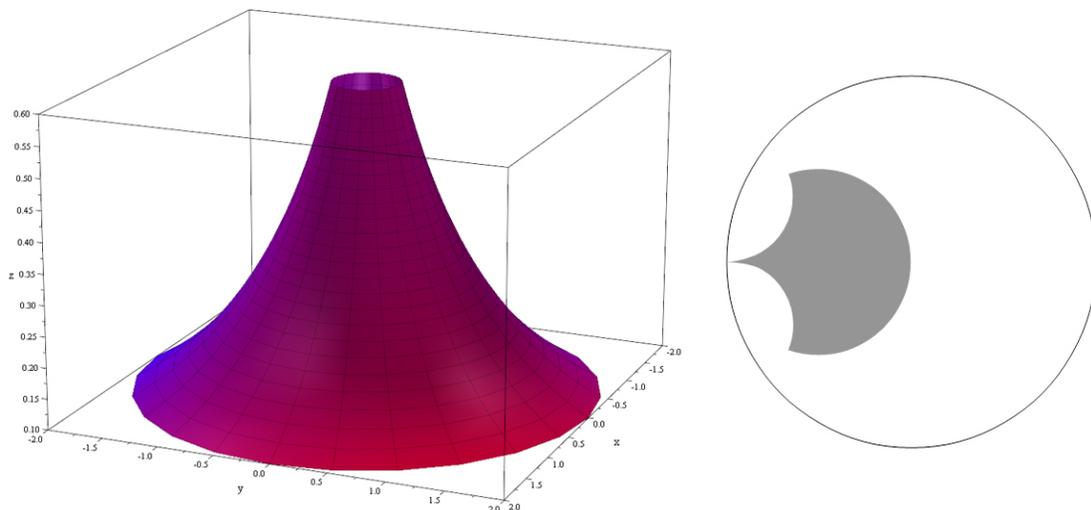


Figura 1.5: A superfície de revolução da tractrix é um modelo local de geometria hiperbólica. Ao lado, a área equivalente no disco de Poincaré.

1.6 Espaços compactos

Uma superfície compacta é uma superfície sem fronteiras e de área finita. A esfera é um exemplo de superfície compacta; possui área finita e não tem fronteiras.

Podemos construir diversas superfícies compactas com um procedimento relativamente simples (veja [41]). Começamos com um quadrado qualquer e vamos denominar os vértices deste quadrado por a , b , c e d . A partir desse quadrado podemos construir diferentes superfícies; um caso simples é quando identificamos os pontos do lado ab como equivalentes aos pontos do lado dc preservando a orientação, isto é, "colamos" os lados. Nesse caso, obtemos uma nova superfície que podemos reconhecer como um cilindro. Podemos fazer o mesmo com os lados ad e bc , construindo o que denominamos de toro plano (podemos visualizar o toro no espaço 3d euclidiano e se assemelha a uma câmara de pneu, porém distorcemos sua geometria). O toro plano, representado por T^2 , é um exemplo de uma superfície compacta e de curvatura nula. A figura (1.6) ilustra o procedimento que acabamos de descrever.

O processo de construção é semelhante a identificar os pontos de um

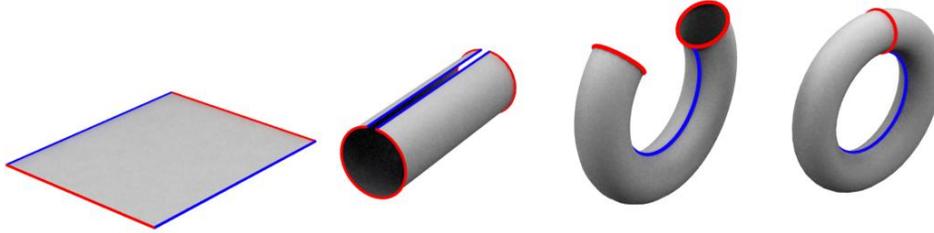


Figura 1.6: Existe um homeomorfismo, um mapeamento contínuo e invertível, entre o quadrado com os lados identificados e o toro.

plano, digamos (x_A, y_A) e (x_B, y_B) , que satisfazem a condição

$$x_A - x_B = \pm n \quad \text{e} \quad y_A - y_B = \pm m \quad (1.103)$$

aonde n, m são números inteiros. Notemos que a translação de um ponto por um vetor múltiplo de (n, m) produz pontos que respeitam a condição acima, e dizemos que pertencem a mesma classe de equivalência. Nesse caso, o quadrado é denominado domínio fundamental.

Ressaltamos que a distância infinitesimal

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 \quad (1.104)$$

não é alterada pela translação no plano euclidiano. Assim, as componentes da métrica não são afetadas pela translação, isto é, são isometrias. Por isso, o toro plano T^2 possui a mesma métrica, com curvatura nula.

Seja Γ_t o conjunto das translações no plano, o conjunto de pontos que formam o toro plano é representado pelo espaço quociente \mathbb{R}^2/Γ_t . As translações são um subgrupo de todas as isometrias do plano.

Esse procedimento pode ser generalizado, de forma que dado um espaço qualquer M , podemos construir o espaço M/Γ , aonde Γ é um subgrupo das isometrias de M . E a curvatura de M é a mesma de M/Γ . Para espaços homogêneos, M pode ser \mathbb{R}^n , H^n (espaço hiperbólico n -dimensional), S^n (hiper esfera n -dimensional), que são os espaços de curvatura constante nula, negativa e positiva, respectivamente.

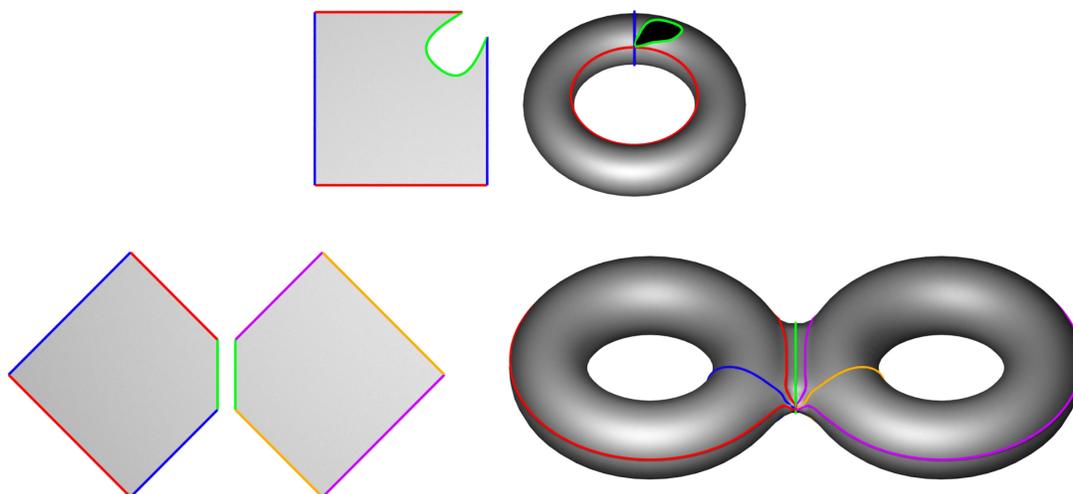


Figura 1.7: O procedimento de construir o bitoro.

No nosso caso, estamos interessados nos espaços bidimensionais com curvatura negativa, ou seja, espaços quocientes definidos na superfície hiperbólica H^2/Γ . A escolha de diferentes Γ nos fornece diferentes tipos de espaços compactos.

No caso de superfícies, o procedimento de construção pode ser facilmente visualizado. Retornemos ao nosso quadrado inicial, utilizado para construir o toro plano (mas lembrando que estamos em uma superfície hiperbólica agora). Vamos manter os lados identificados, mas façamos um pequeno corte em um dos seus vértices, criando um novo lado, que vamos representar por δ . Dupliquemos esse polígono e colamos os dois polígonos pelos seus lados δ . A figura obtida é um octógono. Considerando que os lados a serem identificados são os mesmos, a superfície obtida é agora um bitoro, e possui curvatura constante e negativa. Esse procedimento é ilustrado na figura (1.7).

Todo esse processo pode ser repetido, isto é, podemos realizar novos cortes e obter superfícies com "buracos" adicionais. Esse número de buracos é denominado genus, e pode ser relacionado com a curvatura da superfície conforme veremos mais adiante nesta seção. É interessante observar que a identificação dos lados pode ser feita de diversas maneiras, gerando topologias diferentes, como a faixa de Möbius, por exemplo.

O processo de identificação dos lados de um polígono regular (no nosso

caso, um octógono), pode ser construído calculando-se

$$V' = MV , \quad (1.105)$$

aonde V , V' são matrizes coluna, cujas entradas são as coordenadas dos vértices a serem identificados, e M é a matriz de transformação. No caso do octógono, temos um conjunto de quatro matrizes a serem determinadas. Este procedimento será ilustrado mais adiante. Toda a informação da topologia (o aspecto global do espaço) está contida nessas matrizes, que denominamos geradores. A identificação dos lados de um polígono representa também uma condição de periodicidade imposta ao sistema.

A escolha de isometrias para a construção dos espaços quocientes nos fornece polígonos que podem ser utilizados para tecer³ o espaço. Existem poucos domínios fundamentais que podem ser utilizadas para tecer o plano euclidiano, como o quadrado e o hexágono. Esse fato está relacionado com a carência de um comprimento intrínseco, e todos os domínios fundamentais que se diferenciam pela escala (quadrados de vários tamanhos, por exemplo) são equivalentes. Em espaços com curvatura constante o raio age como um comprimento intrínseco e o número de possíveis polígonos fundamentais é infinito e relacionado com a área que ocupam, já que um polígono fundamental nessa superfície não pode ser escalonado. Um triângulo na esfera de raio R e ângulos internos α , β e γ possui área $A = R^2 (\alpha + \beta + \gamma - \pi)$. A relação equivalente para um triângulo pseudoesférico (a curva formada pela união de 3 pontos pelas geodésicas na pseudoesfera) é similar

$$A = R^2 [\pi - (\alpha + \beta + \gamma)] . \quad (1.106)$$

No caso Euclidiano, em cada vértice, a soma dos ângulos internos de todos os polígonos que se encontram no vertice é 2π , caso contrário teríamos um vão ou uma sobreposição. Podemos escrever isso na forma de uma equação, aonde $(p - 2) \pi / p$ é o valor de cada ângulo interno do polígono, p é o número de lados e q o número de polígonos que podem compartilhar um mesmo vértice:

$$q \left[\frac{(p - 2) \pi}{p} \right] = 2\pi . \quad (1.107)$$

E pode ser re-escrito como

$$qp - 2q - 2p = 0$$

³Tecelagem é o processo de cobrir um espaço bidimensional utilizando polígonos.

ou

$$(p - 2)(q - 2) = 4 . \tag{1.108}$$

O par $\{p, q\}$ caracteriza totalmente a tecelagem regular. No caso euclidiano, existem três pares de p e q que respeitam a condição (1.108), isto é, três polígonos regulares podem ser utilizados para tecer o plano euclidiano, ilustrados na figura 1.8: $\{4, 4\}$, que representa tecelagem com quadrados; $\{6, 3\}$ hexágonos; e $\{3, 6\}$ triângulos. Esse último possui um número ímpar de lados, o que em princípio impossibilita o processo de identificação dos lados descrito anteriormente. Mas ainda é possível criar condições de contorno periódicas com a tecelagem $\{3, 6\}$, onde o polígono fundamental é formado por dois triângulos colados, formando um paralelogramo. A notação $\{p, q\}$ é denominada símbolo de Schläfli.

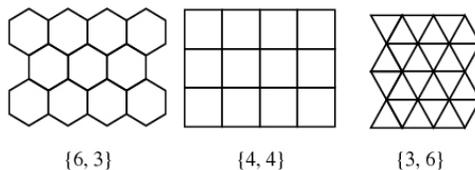


Figura 1.8: Exemplos de tecelagem regular no plano euclidiano.

No plano hiperbólico a soma interna dos ângulos pode ultrapassar 2π , e a condição equivalente a (1.108) se torna

$$(p - 2)(q - 2) > 4 , \tag{1.109}$$

permitindo infinitas possibilidades, como já foi mencionado. A figura 1.9 ilustra três exemplos.

Vamos procurar uma relação entre a curvatura gaussiana K e o genus g . Usando a relação de área de triângulo dada anteriormente, podemos deduzir uma área para polígonos de V vértices e α_i ângulos internos:

$$A = \left[(V - 2) \pi - \sum_i \alpha_i \right] R^2 \tag{1.110}$$

O teorema de Gauss-Bonnet [28] fornece uma generalização que, no caso de superfícies compactas, é dada por

$$\int_A K dA = 4\pi (1 - g) \tag{1.111}$$

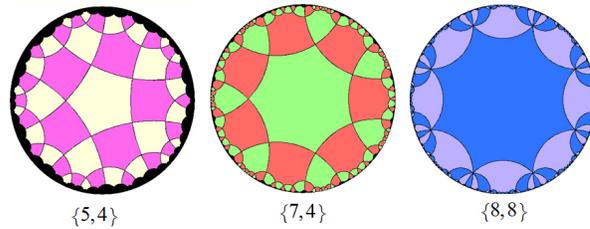


Figura 1.9: Exemplos de tecelagem regular no plano hiperbólico, representados no disco de Poincaré.

ou, como estamos lidando com superfícies de curvatura constante,

$$KA = 2\pi\chi. \quad (1.112)$$

Aonde definimos $\chi \equiv 2(1 - g)$, denominado número de Euler [15]. Com isso temos uma propriedade interessante: o menor genus possível para um espaço compacto de curvatura constante e negativa é 2 que, como vimos no início desta seção, é dado por um octógono. O octógono será construído na próxima seção.

1.6.1 O octógono regular

O octógono regular é o domínio fundamental mais simples que podemos construir na pseudoesfera e possui $g = 2$. Não é possível construir espaços com g menor na pseudoesfera utilizando polígonos regulares. Usando o modelo do hiperbolóide sabemos que as isometrias são dadas pelo subgrupo de Lorentz que preserva o hiperbolóide superior (equações (1.62), (1.63) e (1.64)). Isto é, quatro *boosts* (e seus inversos) de rapidez τ_i ($i = 0, 1, 2, 3$). O primeiro *boost*, g_0 , é na direção de x_1 :

$$g_0 = T_{\tau_0} = \begin{pmatrix} \cosh \tau_0/2 & \sinh \tau_0/2 \\ \sinh \tau_0/2 & \cosh \tau_0/2 \end{pmatrix} \quad (1.113)$$

Para encontrar o *boost* associado ao lado adjacente podemos aplicar a rotação com $\varphi = -\pi/4$ aplicar g_0 e rotacionar de volta com $\varphi = \pi/4$. De forma geral temos:

$$g_i = R_{i\pi/4} T_{\tau_0} R_{-i\pi/4} \quad (1.114)$$

É importante observar que a rotação não faz parte do grupo G que gera o espaço quociente, estamos utilizando-a para encontrar as outras transformações, explorando a simetria do octógono. Desta forma precisamos encontrar apenas τ_0 .

Podemos construir vários octógonos que obedecem a condição de tecelagem (1.109). Entretanto, fixando a curvatura gaussiana em $K = -1$, o teorema de Gauss-Bonnet (equação (1.112)) impõe que a área seja $A = 4\pi$. Dessa forma a tecelagem fica unicamente definida por $\{8, 8\}$ (veja [35] para mais detalhes) e a rapidez τ_0 é dada por

$$\cosh \tau_0 = 1 + \sqrt{2} . \quad (1.115)$$

Existe uma relação entre as transformações do grupo, dada por

$$(g_0 g_1^{-1} g_2 g_3^{-1}) (g_0^{-1} g_1 g_2^{-1} g_3) = I . \quad (1.116)$$

Esta relação pode ser visualizada na figura 1.10.

Nesta dissertação, utilizamos a superfície construída com um octógono regular para realizar nossas análises. Octógonos irregulares também podem ser considerados, para analisar efeitos de perturbação na solução de uma equação de onda (ver por exemplo [6] e [5]), mas nesta dissertação os irregulares não serão considerados.

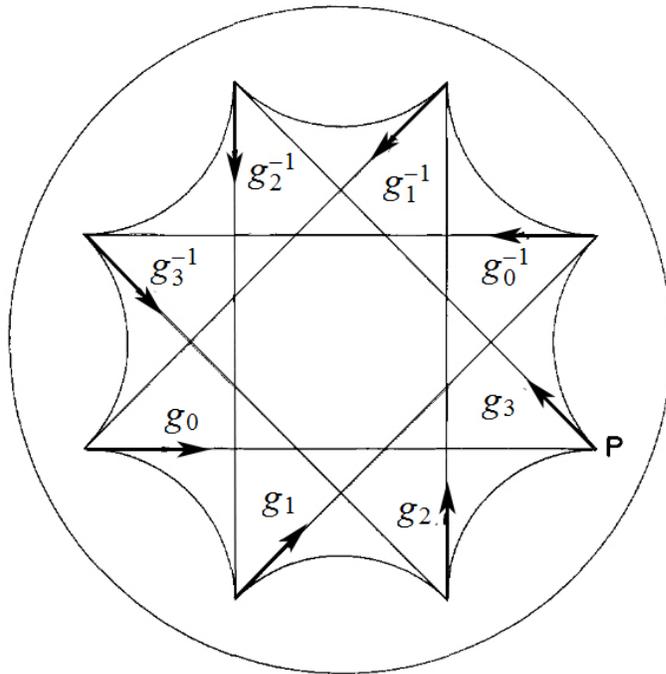


Figura 1.10: A visualização da relação entre as transformações do grupo.
 Figura retirada de [7].

Capítulo 2

Mecânica Quântica na pseudoesfera

Nesse capítulo trataremos da física nas superfícies curvas e compactas. Vamos começar ilustrando o que torna o sistema clássico, na superfície hiperbólica compacta, interessante. Em uma situação sem a presença de um potencial externo, a Lagrangeana de uma partícula sobre a superfície possui apenas a parte correspondente a energia cinética, e o movimento da mesma ocorre sobre as geodésicas da superfície.

Uma característica do plano hiperbólico, independente do modelo, é a divergência exponencial das geodésicas [10]. No espaço compacto esse fato se torna de grande importância, pois mesmo o sistema de uma partícula livre tem seu espaço de fase denso e *mixing*, características de um sistema altamente caótico [3] [23]. A figura (2.1) ilustra a ergodicidade deste sistema, com a trajetória no espaço de configuração. Considerando-se que espaços de fase densos e *mixing* são típicos de sistemas clássicos caóticos, espera-se que, no limite semiclássico, o sistema quântico manifeste impressões da dinâmica clássica em alguma extensão [17] [23].

Nas seções seguintes desenvolveremos a dinâmica quântica de uma partícula livre no disco de Poincaré. Mostraremos que o espectro do operador de Laplace reflete a ergodicidade do espaço compacto na sua distribuição discreta. Na última seção discutiremos os algoritmos estudados e nossas dificuldades de abordar o problema de autovalor numericamente.

O artigo de revisão *Chaos on the pseudosphere* [7] é a principal referência de dinâmica em espaços curvos e compactos desse capítulo. Para a parte numérica utilizamos, como referência, dois trabalhos: *Ringing the eigenmodes*

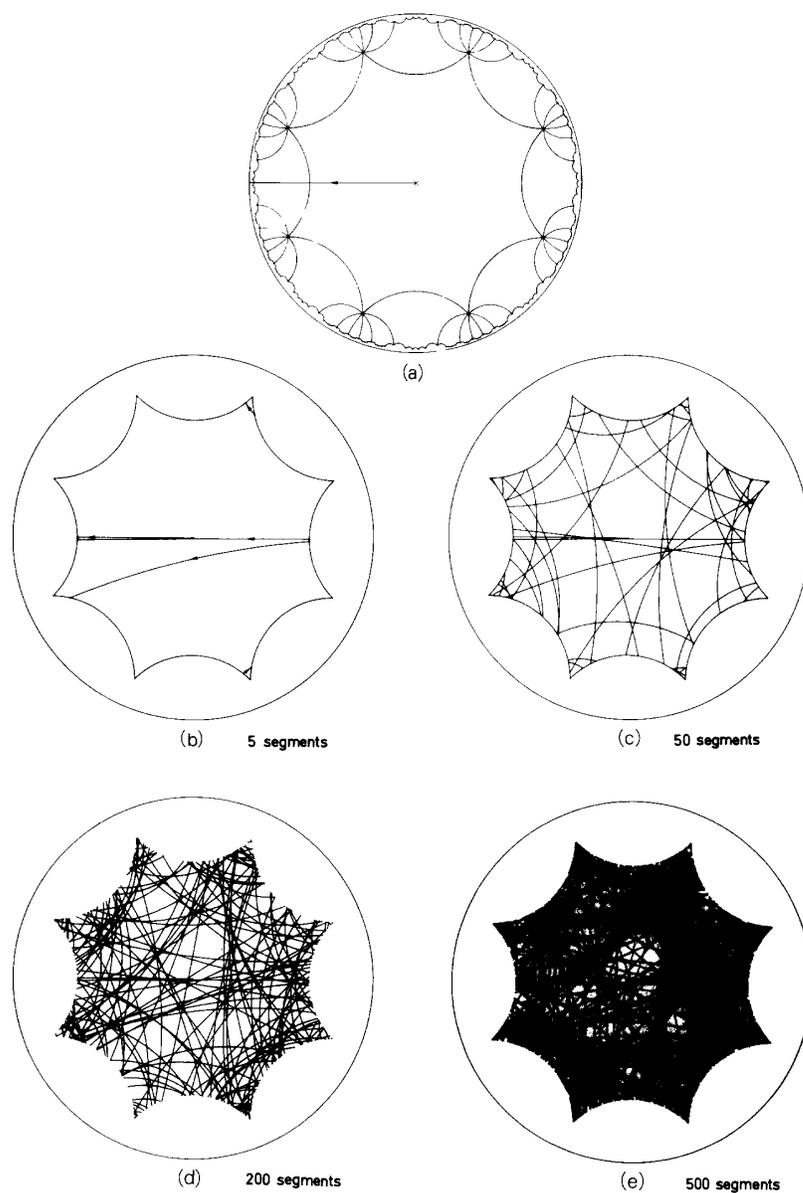


Figura 2.1: A trajetória de uma partícula livre no disco de Poincaré é mostrada em (a); em (b) mostramos a trajetória no octógono compacto após 5 travessias (*segments*), 50 travessias em (c), 200 travessias em (d) e 500 travessias em (e). Ilustração retirada de [7].

of the laplacian [14] e *On the eigenmodes of compact hyperbolic 3-manifolds* [13].

2.1 Dinâmica quântica no octógono compacto

Nesta seção descreveremos duas abordagens para obter-se a equação de Schrödinger: a primeira diretamente do operador de Laplace para espaços genéricos e uma segunda, específica para superfícies inseridas no espaço euclidiano tridimensional através de um potencial confinante.

2.1.1 Equação de Schrödinger em espaços curvos

A análise de uma partícula confinada à uma superfície, sem potencial externo, se reduz a análise de uma partícula livre na superfície. Para espaços compactos, precisamos considerar a topologia do espaço (em geral, as informações sobre a topologia, são introduzidas como condições de contorno do problema). Neste trabalho, estamos interessados em analisar a dinâmica de uma partícula quântica confinada em uma superfície compacta, em particular de um espaço com geometria hiperbólica, cujo domínio fundamental é um octógono (ver capítulo 2).

Neste caso, a dinâmica é descrita pela equação de Schroedinger independente do tempo

$$H\psi = E\psi, \quad (2.1)$$

aonde

$$H = \frac{1}{2m} \nabla_i \nabla^i \quad (2.2)$$

é o operador Hamiltoniano para a partícula livre, dado pelo operador de Laplace (eq. (1.46)).

Antes de continuarmos com a nossa análise, é importante ressaltar que ao utilizarmos um sistema de coordenadas que não é cartesiano ou ao considerarmos espaços curvos, precisamos tomar alguns cuidados com o processo canônico de quantização. Para ilustrar um problema que surge, vamos esquematisar a quantização de uma partícula livre em um espaço curvo. Para isso, consideremos a lagrangeana de uma partícula livre dada por:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} g_{ij} \frac{dx^i}{dt} \frac{dx^j}{dt} \quad (2.3)$$

e os momentos canonicamente conjugados, definidos por

$$p_i \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^i} = \frac{m}{2} g_{ij} \frac{dx^j}{dt}. \quad (2.4)$$

Para quantizarmos o nosso sistema, precisamos então determinar os operadores de posição e momento \hat{p}_i e \hat{x}^i e precisamos que seus comutadores sejam relacionados com os parênteses de Poisson da seguinte maneira:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}^j] = i\hbar \{p_i, x^j\} = i\hbar \delta_i^j \quad (2.5)$$

$$[\hat{x}^i, \hat{x}^j] = i\hbar \{x^i, x^j\} = 0 \quad (2.6)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \{p_i, p_j\} = 0. \quad (2.7)$$

Dadas essas condições, pode ser demonstrado [26] que a única solução que resulta em operadores hermitianos é dada por

$$\hat{p}_i = i\hbar g^{-1/4} \partial_i g^{-1/4} \quad (2.8)$$

$$\hat{x}^i = x^i. \quad (2.9)$$

Como o hamiltoniano e o lagrangeano estão relacionados pela transformação de Legendre [39]

$$H = \sum \dot{x}_i p_i - \mathcal{L}, \quad (2.10)$$

o operador Hamiltoniano resulta em:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} g_{ij} \hat{p}^i \hat{p}^j. \quad (2.11)$$

Ressaltamos que a métrica g_{ij} , em geral, pode depender da posição, de forma que o operador correspondente também poderá ser função do operador posição. Neste caso, podemos ter combinações de \hat{x}^i e \hat{p}^i como $\hat{x}_i \hat{x}_j \hat{p}^i \hat{p}^j$, $\hat{x}_i \hat{p}^i \hat{x}_j \hat{p}^j$ etc., que classicamente são equivalentes a $(x_i p^i)^2$, mas não são necessariamente equivalentes quando são tratados como operadores (dizemos que existe um problema de ordenamento de operadores [26]). Portanto, a quantização canônica não torna óbvia qual é a ordem correta dos operadores.

Para simplificar a notação, omitiremos, a partir de agora, o circunflexo sobre a grandeza para representar um operador. Caso seja necessário distinguir uma grandeza clássica de um operador, será feita a devida ressalva.

Na próxima subseção vamos apresentar uma abordagem desenvolvida por Costa [16], na qual o movimento em uma superfície é analisada, considerando-se que temos uma superfície em um espaço ambiente plano de três dimensões,

o movimento da partícula sendo confinado na superfície através de um potencial externo (potencial confinante). Com uma escolha adequada de coordenadas, obtemos que o potencial externo confinante, não influencia a dinâmica da partícula, de forma que obtemos uma equação que depende apenas das coordenadas na superfície. A curvatura da superfície passa a ser representada por um potencial efetivo, que contém as informações sobre a sua geometria.

2.1.2 Equação de Schrödinger em uma superfície definida por um potencial confinante

Vamos considerar a Equação de Schrödinger para uma partícula:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_\lambda \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (2.12)$$

aonde o potencial V_λ tem o propósito de confinar o movimento da partícula a uma dada superfície. Vamos definir essa superfície como os pontos representados pelo vetor posição:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2) \quad (2.13)$$

aonde q_1 e q_2 são coordenadas definidas na superfície. Utilizando (2.13), um ponto próximo da superfície pode ser representado pelo vetor posição

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}(q_1, q_2) + q_3 \mathbf{N}(q_1, q_2), \quad (2.14)$$

aonde \mathbf{N} é o vetor unitário normal à superfície no ponto (q_1, q_2) e q_3 é a distância da superfície ao ponto, medida ao longo do vetor normal (conforme ilustrado na figura 2.2). Com essa escolha de coordenadas, o potencial confinante é definido de forma a satisfazer às condições:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_3) = \begin{cases} \infty, & q_3 \neq 0 \\ 0, & q_3 = 0 \end{cases} \quad (2.15)$$

e deve resultar na dinâmica da partícula totalmente restrita à superfície. O parâmetro λ é introduzido como forma de controlar o grau de confinamento do potencial.

Com o raio vetor \mathbf{R} , podemos construir os vetores de base

$$\mathbf{e}_i = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_i} \quad (2.16)$$

de forma que as componentes da métrica podem ser obtidas por:

$$G_{ij} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (2.17)$$

A parametrização do espaço tridimensional com q_1, q_2, q_3 não fornece uma descrição única de cada ponto do espaço mas, como estamos interessados na descrição do espaço próximo a superfície, este fato não será problemático. De maneira análoga, podemos obter as componentes da métrica na superfície, porém, usando o vetor \mathbf{r} , isto é:

$$g_{ij} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2. \quad (2.18)$$

Da equação (2.14) podemos ver que as componentes da métrica G_{ij} dependem de $\partial \mathbf{N} / \partial q_i$. Essas derivadas satisfazem as equações de Weingarten [18]:

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j} \quad (2.19)$$

com os coeficientes α_{ij} dados por

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{g} \begin{pmatrix} g_{12}h_{12} - g_{22}h_{11} & h_{11}g_{21} - h_{21}g_{11} \\ h_{22}g_{12} - h_{12}g_{22} & h_{21}g_{12} - h_{22}g_{11} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

sendo h_{ij} a segunda forma fundamental da superfície [18]. A segunda forma fundamental fornece propriedades da superfície em relação ao espaço em que está inserida, chamadas de propriedades extrínsecas.

Utilizando as equações (2.17) e (2.19), obtemos as seguintes relações:

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_i} = \begin{cases} \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + q_3 \alpha_i^j) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}, & i = 1, 2 \\ \mathbf{N}(q_1, q_2), & i = 3 \end{cases} \quad (2.21)$$

E a métrica G_{ij} pode ser desenvolvida usando as derivadas acima e lembrando da sua definição (2.17) e da definição da métrica na superfície (2.18). Temos para os índices $i, j = 1, 2$

$$G_{ij} = \sum_{l=1}^2 \sum_{k=1}^2 (\delta_i^l + q_3 \alpha_i^l) (\delta_j^k + q_3 \alpha_j^k) g_{lk} \quad (2.22)$$

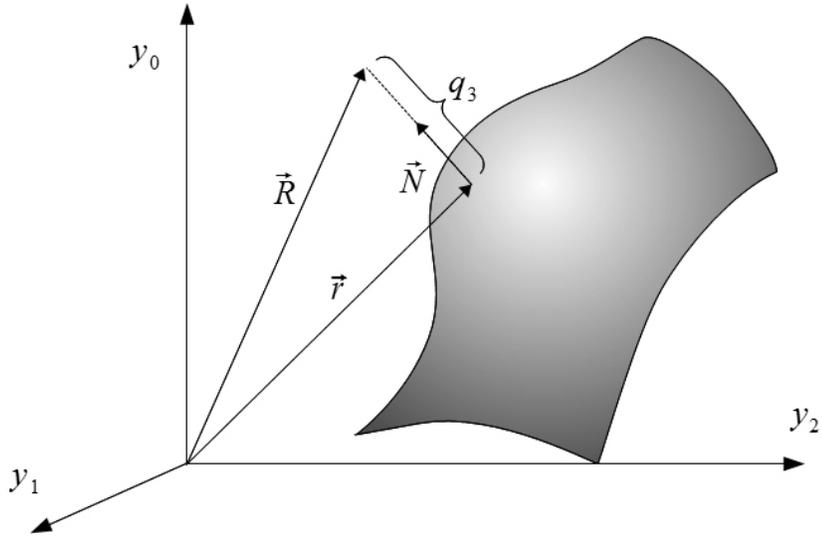


Figura 2.2: Parametrização do espaço tridimensional utilizando as coordenadas (q_1, q_2, q_3) .

Efetuando-se a multiplicação dos termos entre parenteses em (2.22) e coletando-se os termos independentes de q_3 , proporcionais à q_3 e proporcional à q_3^2 , temos (para $i, j = 1, 2$)

$$G_{ij} = g_{ij} + q_3 \left(\sum_{l=1}^2 \alpha_{il} g_{lj} + \sum_{k=1}^2 \alpha_{jk} g_{ik} \right) + q_3^2 \sum_{l,k=1}^2 \alpha_{il} \alpha_{jk} g_{lk} . \quad (2.23)$$

O cálculo dos outros componentes de G_{ij} é direto:

$$G_{13} = G_{31} = 0 \quad (2.24)$$

e

$$G_{33} = 1 . \quad (2.25)$$

Para obtermos o operador de Laplace apenas sobre a superfície é necessário que possamos separá-lo de forma a obter uma parte que contenha apenas as coordenadas (q_1, q_2) e sem o potencial confinante V_λ . Com essa separação, a função de onda pode ser escrita pelo produto de uma parte tangencial (contida na superfície e que não depende de q_3) e uma parte normal (que

depende do potencial confinante). Para efetuar essa separação, precisamos antes efetuar alguns passos.

Consideremos a normalização da função de onda, dada por

$$\int |\psi(\mathbf{R}, t)|^2 dx dy dz . \quad (2.26)$$

Ao passarmos das coordenadas cartesianas para (q_1, q_2, q_3) , o elemento de volume não será separável por possuir um fator $f(q_1, q_2, q_3)$ que depende de q_1, q_2 e q_3 . Se definirmos uma nova função de onda como

$$\chi(q_1, q_2, q_3, t) = \sqrt{f(q_1, q_2, q_3)} |\psi(\mathbf{R}, t)| \quad (2.27)$$

a equação de normalização (2.26) pode ser escrita como

$$\int |\psi(\mathbf{R}, t)|^2 dx dy dz = \int \left| \frac{\chi(q_1, q_2, q_3, t)}{\sqrt{f(q_1, q_2, q_3)}} \right|^2 f(q_1, q_2, q_3) dA dq_3 , \quad (2.28)$$

onde dA depende apenas de q_1 e q_2 .

Por outro lado, utilizando-se a métrica G_{ij} (equações (2.23), (2.24) e (2.25)) o elemento de volume dV pode ser generalizado como:

$$dV = \sqrt{G} dq_1 dq_2 dq_3 , \quad (2.29)$$

onde G é o determinante de G_{ij} . E, usando as equações (2.23), (2.24) e (2.25), G resulta em:

$$G = g \left[1 + \left(q_3 \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} \right)^2 + (q_3 \alpha)^2 + 2 \left(q_3 \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} + q_3^2 \alpha + q_3^3 \alpha \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} \right) \right]^2 \quad (2.30)$$

onde $\alpha = \det \alpha_{ij}$. E, de fato, pode ser re-escrito como:

$$G = g \left(1 + q_3 \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} + q_3^2 \alpha \right)^2 . \quad (2.31)$$

Usando (2.31) no elemento de volume dV , podemos claramente identificar a parte exclusivamente dependente da superfície e o fator que procuramos:

$$dV = f(q_1, q_2, q_3) dA dq_3 \quad (2.32)$$

onde

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + q_3 \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} + q_3^2 \alpha \quad (2.33)$$

e

$$dA = \sqrt{g} dq_1 dq_2 . \quad (2.34)$$

Para desenvolver a Equação de Schrödinger é interessante primeiramente escrever o operador de Laplace, dado pela equação (1.46), como:

$$\begin{aligned} \nabla^2 = & \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) + \\ & \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\sqrt{G} \frac{\partial}{\partial q_3} \right) . \end{aligned} \quad (2.35)$$

O somatório está explicitado para destacarmos os termos dependentes de q_3 do restante. Então, usando-se esse operador na Equação de Schrödinger (2.12) juntamente com a função de onda (2.27), temos

$$\begin{aligned} - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\sqrt{G} \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \right\} \frac{\chi}{\sqrt{f}} + V_\lambda \frac{\chi}{\sqrt{f}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \frac{\chi}{\sqrt{f}} . \end{aligned} \quad (2.36)$$

Neste ponto, já podemos considerar o efeito do potencial $V_\lambda(q_3)$. Sabemos que a função de onda só terá valores significativamente maiores que zero para $q_3 \rightarrow 0$. Então, da equação (2.33), temos que:

$$\lim_{q_3 \rightarrow 0} f(q_1, q_2, q_3) = 1 \quad (2.37)$$

e

$$\lim_{q_3 \rightarrow 0} \frac{\partial f(q_1, q_2, q_3)}{\partial q_3} = \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} \quad (2.38)$$

e, ainda:

$$\lim_{q_3 \rightarrow 0} \frac{\partial^2 f(q_1, q_2, q_3)}{\partial^2 q_3} = 2\alpha . \quad (2.39)$$

E, da métrica G_{ij} dada por (2.23), (2.24) e (2.25), temos que

$$\lim_{q_3 \rightarrow 0} G_{ij} = g_{ij} . \quad (2.40)$$

Portanto, a Equação de Schrödinger para $q_3 \rightarrow 0$ se torna:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) \chi \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} \right]^2 - \alpha \right) \chi \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Assumindo-se que podemos separar a função de onda [16]:

$$\chi(q_1, q_2, q_3, t) = \chi_t(q_1, q_2, t) \chi_n(q_3, t) \quad (2.42)$$

onde χ_t e χ_n indicam funções de onda tangente e normal, respectivamente, a equação (2.41) pode ser separada em duas equações diferenciais:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) \chi_t \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} \right]^2 - \alpha \right) \chi_t = i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.43)$$

e

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} - V_\lambda(q_3) \chi_n = -i\hbar \frac{\partial \chi_n}{\partial t} . \quad (2.44)$$

Pode-se observar que a equação (2.44) é simplesmente a equação de um poço de potencial unidimensional, e a equação (2.43) é a equação de Schrödinger de uma partícula na superfície.

Observemos um termo, denominado potencial de superfície [16], presente na equação (2.43):

$$V_S(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \alpha_{ii} \right]^2 - \alpha \right) . \quad (2.45)$$

Sabemos, da geometria diferencial (veja [18]), que podemos re-escrever (2.45) em relação às curvaturas principais, k_1 e k_2 , ou das curvaturas Gaussiana K e curvatura média M :

$$V_S(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{2m} (k_1 - k_2)^2 . \quad (2.46)$$

A presença da segunda forma fundamental em α , curvaturas principais ou curvatura média, mostra uma curiosa dependência de propriedades extrínsecas na função de onda tangente. Isso sugere que a equação (2.43) pode ser diferente em duas superfícies isométricas (superfícies com métricas iguais). Essa dependência não aparece em (2.1) pois definimos o Hamiltoniano em uma superfície usando apenas propriedades intrínsecas, dada pela métrica g_{ij} , ignorando qualquer espaço maior em que a superfície esteja inserida. Pode não ser imediatamente óbvio que a equação (2.43) é equivalente a de uma partícula livre na superfície, porém, o "potencial" V_S aparece apenas devido a definição da função de onda χ_t utilizando a função $f(q_1, q_2, q_3)$.

Apesar dos cálculos estarem matematicamente corretos, fisicamente esse potencial confinante com regiões não diferenciáveis é problemático. Cheng [12] expôs o seguinte argumento a respeito dessa abordagem: consideremos o potencial confinante como duas superfícies idênticas que esmagam a partícula. Na posição (q_1, q_2) a distância entre as duas superfícies é dada por:

$$d(q_1, q_2) = \epsilon f(q_1, q_2) . \quad (2.47)$$

Se fizermos $\epsilon \rightarrow 0$, a Equação de Schrödinger dependerá de um termo proporcional a $[\epsilon f(q_1, q_2)]^{-2}$, que não é pequeno e varia a medida que nos movemos na superfície.

2.1.3 Partícula livre e o espectro de energia no plano hiperbólico

Em analogia ao caso euclidiano, onde as soluções da partícula livre são dadas por combinações de ondas planas ou esféricas, podemos construir funções de

ondas planas e circulares (lembrando que estamos num espaço bidimensional) no plano hiperbólico. É suficiente, no entanto, desenvolver apenas as ondas circulares.

Usando a parametrização polar do disco de Poincaré (seção 1.5.2), e a Equação (2.1), a equação de Helmholtz é dada por (veja também em [19]):

$$-\left[\frac{1}{\sinh \tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sinh \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) + \frac{1}{\sinh^2 \tau} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi = \lambda \psi . \quad (2.48)$$

Usando-se o método de separação de variáveis,

$$\psi = F(\tau) G(\varphi) , \quad (2.49)$$

podemos separar a equação (2.48) em:

$$\frac{\sinh \tau}{F(\tau)} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sinh \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) F(\tau) + \sinh^2 \tau \lambda = \frac{1}{G(\varphi)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} G(\varphi) . \quad (2.50)$$

Definindo a constante de separação como $-m^2$, a parte dependente de φ é dada simplesmente por $G(\varphi) = e^{im\varphi}$, enquanto que $F(\tau)$ é solução da equação de Legendre [2]

$$\left(\frac{1}{\sinh \tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sinh \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) + \lambda + \frac{-m^2}{\sinh^2 \tau} \right) F = 0 \quad (2.51)$$

cujas soluções são dadas pela função associada de Legendre $P_l^m(\cosh \tau)$, onde l é dado por

$$-\lambda = l(l+1) . \quad (2.52)$$

Portanto, a função de onda circular pode ser escrita como

$$\psi = P_l^m(\cosh \tau) e^{im\varphi} . \quad (2.53)$$

Vamos analisar essa função de onda para tentar obter alguma informação geral sobre sistemas livres. Definindo um parâmetro auxiliar ρ podemos re-escrever a relação entre os coeficientes λ e l de (2.52):

$$\lambda = \frac{1}{4} + \rho^2 \quad (2.54)$$

$$l = -\frac{1}{2} \pm i\rho . \quad (2.55)$$

Esse parâmetro ρ desempenha um papel análogo ao número de onda do caso euclidiano. No limite $\tau \rightarrow \infty$, a equação (2.51) se torna:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \lambda \right) F = 0 , \quad (2.56)$$

e possui solução do tipo:

$$F(\tau) = e^{l\tau} C(\tau) = e^{-\frac{\tau}{2}} e^{\pm i\rho} C(\tau) . \quad (2.57)$$

Como, para $\lambda < 1/4$, ρ é imaginário, a função de onda cresce exponencialmente em todas as direções, o que é uma situação fisicamente inaceitável. Portanto, o espectro do operador de Laplace no plano hiperbólico é contínuo e possui o valor mínimo de $\frac{1}{4}$. No caso do espaço compacto, que veremos a seguir, algumas propriedades novas aparecem, incluindo o espectro do operador que, além de discreto, como já é esperado, tem seu autovalor mais baixo deslocado para zero.

2.2 A dinâmica e o espectro no octógono compacto

O octógono compacto (seção 1.6.1) é caracterizado pelas seguintes condições de contorno periódicas:

$$\psi(g_i^{-1}z) = \psi(z) \quad (2.58)$$

onde g_i são as transformações do subgrupo de Lorentz (capítulo 1). Vamos analisar o efeito das condições acima usando a expansão em ondas circulares (2.53), dada por:

$$\psi = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m P_l^m(\cosh \tau) e^{im\varphi} . \quad (2.59)$$

Porém, vamos utilizar outra normalização da base das funções de Legendre, que será mais conveniente no cálculo a seguir. Definimos a seguinte função

$$\mathcal{P}_{m0}^l(\cosh \tau) = \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+m+1)} P_l^m(\cosh \tau) , \quad (2.60)$$

que é o que se chama de uma continuação analítica de P_l^m [2]. \mathcal{P}_{mn}^l é definida no plano complexo e sua forma geral pode ser escrita como:

$$\mathcal{P}_{mn}^l(\cosh \tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\cosh \tau/2 + z \sinh \tau/2)^{l+n} (z \cosh \tau/2 + \sinh \tau/2)^{l-n} z^{m-l-1} dz, \quad (2.61)$$

onde Γ é um círculo unitário no plano complexo. É importante notar que o sinal em $l = -\frac{1}{2} \pm i\rho$ é irrelevante na expansão (2.59) mas na nova função dá origem a duas expansões diferentes,

$$\psi = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m^{\mp} \mathcal{P}_{m0}^l(\cosh \tau) e^{im\varphi}, \quad (2.62)$$

onde

$$a_m^{\mp} = \frac{\Gamma(\frac{1}{2} \pm i\rho + m)}{\Gamma(\frac{1}{2} \pm i\rho)} a_m. \quad (2.63)$$

Consideremos um novo sistema de coordenadas, dado pelo deslocamento da origem \mathcal{O} com um *boost* de rapidez τ_1 na direção de x_1 para a nova posição \mathcal{O}' . Um ponto $z = (\tau, \varphi)$ tem suas novas coordenadas (τ_2, φ_2) dadas por [2]

$$\cosh \tau = \cosh \tau_1 \cosh \tau_2 + \sinh \tau_1 \sinh \tau_2 \cos \varphi_2 \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} \sinh \tau e^{i\varphi} &= \sinh \tau_1 \cosh \tau_2 + \cosh \tau_1 \sinh \tau_2 \cos \varphi_2 \\ &\quad + i \sinh \tau_2 \sin \varphi_2 \end{aligned} \quad (2.65)$$

e a função \mathcal{P}_{m0}^l é dada pelo teorema da adição [20]:

$$e^{im\varphi} \mathcal{P}_{m0}^l(\cosh \tau) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathcal{P}_{mk}^l(\cosh \tau_1) e^{ik\varphi_2} \mathcal{P}_{k0}^l(\cosh \tau_2). \quad (2.66)$$

Estas demonstrações são relativamente complicadas e vão além do escopo desta dissertação. De qualquer modo, a expansão (2.62) pode ser re-escrita como:

$$\psi = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_m^{\mp} \mathcal{P}_{mk}^l(\cosh \tau_1) e^{ik\varphi_2} \mathcal{P}_{k0}^l(\cosh \tau_2). \quad (2.67)$$

Considerando que o *boost* de rapidez τ_1 , usado em (2.67), é uma das transformações do grupo definindo as condições de contorno periódicas (2.58),

temos que uma das condições de contorno periódicas, $\psi(\tau, \varphi) = \psi(\tau_2, \varphi_2)$, é dada por

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m^{\mp} \mathcal{P}_{mk}^l(\cosh \tau_1) \right\} e^{ik\varphi_2} \mathcal{P}_{k0}^l(\cosh \tau_2) \quad (2.68)$$

$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k^{\mp} \mathcal{P}_{k0}^l(\cosh \tau_2) e^{ik\varphi_2} . \quad (2.69)$$

Para que essa condição seja satisfeita, seus coeficientes devem coincidir, dando origem ao sistema de equações:

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} a_m^{\mp} \mathcal{P}_{mk}^l(\cosh \tau_1) = a_k^{\mp} , \quad l = -1/2 + i\rho . \quad (2.70)$$

No caso do octógono, as outras três condições de contorno podem ser obtidas com aplicações de rotação (seção 1.6.1), isto é

$$\exp\left(-i\frac{jk\pi}{4}\right) a_k^{\mp} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m^{\mp} \mathcal{P}_{mk}^l(\cosh \tau_1) \exp\left(-i\frac{jk\pi}{4}\right) , \quad j = 0, 1, 2, 3 . \quad (2.71)$$

Ao se impor essas quatro condições $j = 0, 1, 2, 3$ sobre o sistema, o espectro se torna discreto e não possui mais o valor mínimo $\lambda = 1/4$. Os autovalores no intervalo $(0, 1/4)$ são chamados de autovalores baixos (*low-lying eigenvalues* [7]). Como usamos expansões construídas a partir de autofunções da superfície hiperbólica completa, que possui espectro contínuo $(1/4, \infty)$, para obtermos as condições de contorno periódicas, o esquema pode não detectar esses autovalores baixos. Entretanto, estudos mostram que os espaços compactos que apresentam esses autovalores baixos são os que possuem genus muito alto e outros casos particulares, sendo muito improváveis no octógono compacto que possui genus 2 [7].

O sistema (2.71) não possui solução analítica e o pouco de informação que podemos obter analiticamente não é o feito de forma trivial [7]. Na próxima seção exploraremos o que pode ser feito numericamente.

2.3 Cálculos numéricos

Dada a dificuldade em tratar o problema de autovalores do operador de Laplace analiticamente, estudamos alguns algoritmos numéricos para evolução

de ondas em espaços discretos (com redes quadradas) e métodos de obtenção dos autovalores.

O método de Euler, que consiste em uma aproximação de primeira ordem da derivada, é usado para a evolução das ondas no espaço discreto, conforme ilustrado na figura (2.3). Nos espaços compactos mais triviais, como o quadrado com os lados identificados, a associação é feita de maneira trivial, já que a fronteira da rede coincide com os lados. No octógono compacto, entretanto, precisamos de métodos mais avançados.

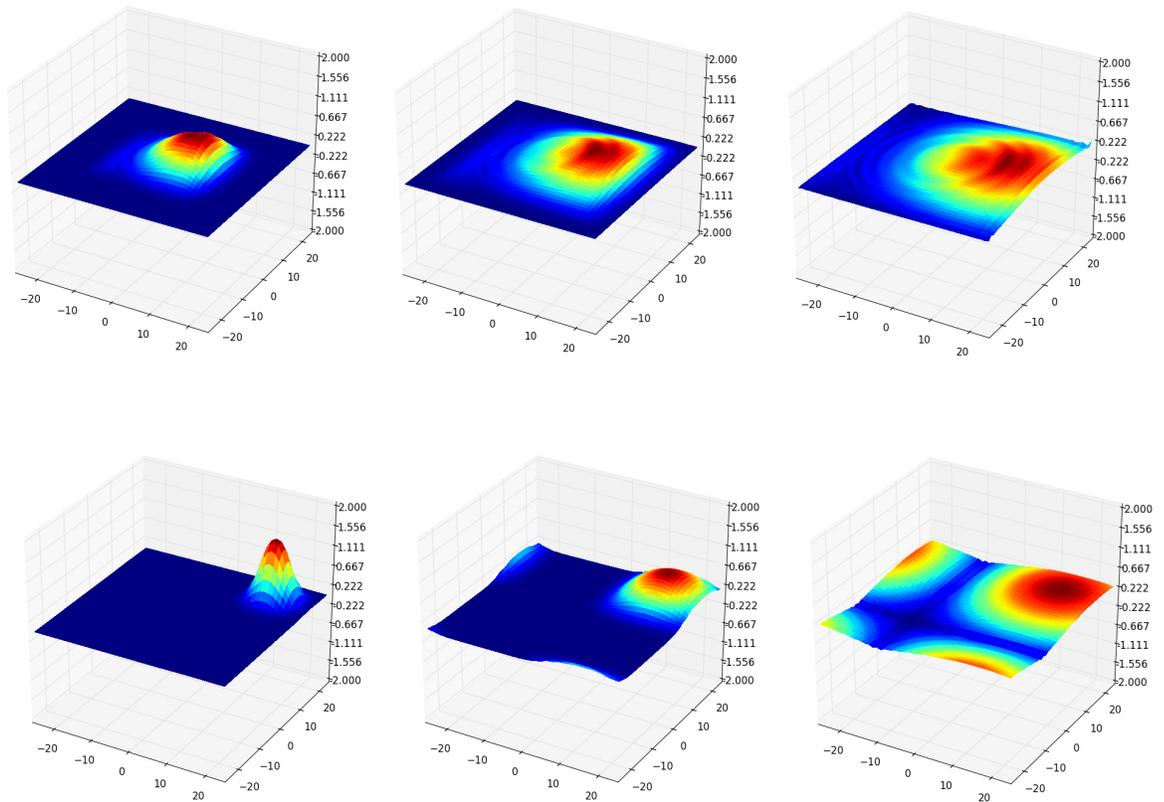


Figura 2.3: Evolução de pacotes de onda obtidas pelo método de Euler. Acima temos três instantes da simulação usando um potencial quadrado infinito e, abaixo, simulação com condições de contorno periódicas.

O algoritmo proposto em [14] consiste em evoluir a equação da onda

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \Psi_\lambda = 0 \quad (2.72)$$

onde ψ_λ também é solução da equação de autovalor que estamos interessados:

$$(\nabla^2 + \lambda^2) \Psi_q = 0 . \quad (2.73)$$

Usando o ansatz $\Psi_\lambda(\mathbf{x}, t) = \exp(-i\lambda t) \psi(\mathbf{x})$, podemos evoluir a equação da onda na superfície compacta para calcular a transformada de Fourier no tempo

$$a_\lambda(\mathbf{x}) = \int_0^\infty \Psi(\mathbf{x}, t) e^{i\lambda t} dt \quad (2.74)$$

permitindo, assim, calcular o espectro de autovalores

$$P(\lambda) = \int |a_\lambda| dV . \quad (2.75)$$

Numericamente, as integrais (2.74) e (2.75) são transformadas em somatórios. Previamente, deve-se definir um conjunto de frequências que se quer investigar. Seguindo Cornish [14], utilizamos um intervalo de frequências de 0 a 15 com uma resolução de $\Delta\lambda = 0.09$ (definido de forma coerente com o tempo total de simulação). Com o método de Euler, então, calculamos a evolução da onda, utilizando um passo dt pequeno, e incrementamos o valor de a_λ para cada ponto do domínio fundamental e para cada λ definido. Quanto maior o tempo de evolução mais preciso será o espectro, Cornish alega ter utilizado um passo $dt = dx/10$ e 2^{17} iterações, com bons resultados. A integral (2.75) é feita de maneira direta, somando-se $|a_\lambda|$ em todos os pontos do DF, para cada λ . O resultado é a curva dada por $P(\lambda)$ com máximos e mínimos locais, aonde os mínimos ocorrem nas frequências equivalentes aos autovalores do operador de Laplace.

A implementação das condições de contorno periódicas é complicada pelo fato de usarmos uma rede quadrada e os lados do octógono serem curvos. Ao processar um ponto próximo a fronteira, o método de Euler analisa os pontos adjacentes, de forma que se um destes pontos adjacentes estiver fora do domínio fundamental usamos as transformações do grupo responsável pela associação dos lados (eq. (1.114)) para encontrar o ponto equivalente. O problema é que esse ponto equivalente pode estar fora da rede computacional,

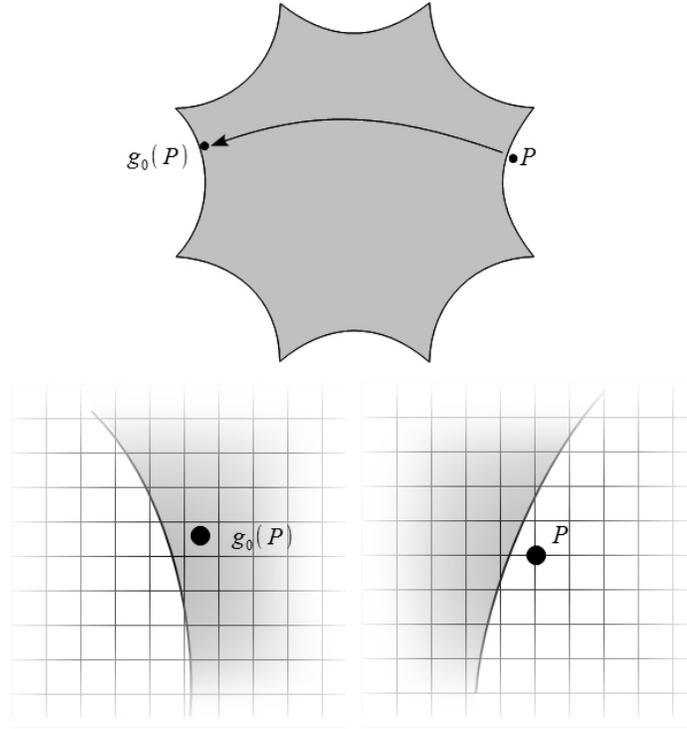


Figura 2.4: O ponto $g_i(P)$ pode estar (e geralmente está) fora da grid computacional. Esse problema é contornado com um esquema de interpolação de seis pontos.

como é mostrado na figura (2.4). Uma interpolação, então, é feita nesse ponto usando 6 pontos adjacentes escolhidos de maneira adequada (figura 2.5). A interpolação é dada por:

$$\begin{aligned}
 \phi(p\Delta x, q\Delta y) &= \frac{q(q-1)}{2}\phi_{0,-1} + \frac{p(p-1)}{2}\phi_{-1,0} \\
 + (1 + pq - p^2 - q^2)\phi_{0,0} &+ \frac{p(p-2q+1)}{2}\phi_{1,0} \\
 + \frac{q(q-2p+1)}{2}\phi_{0,1} &+ pq\phi_{1,1} + \mathcal{O}(\Delta x^3\phi_{0,0}) \ ,
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

aonde o esquema deve ser rotacionado para que os pontos $(-1, 0)$ e $(0, -1)$ fiquem sempre mais próximos da origem, aumentando as chances de estarem dentro do domínio fundamental.

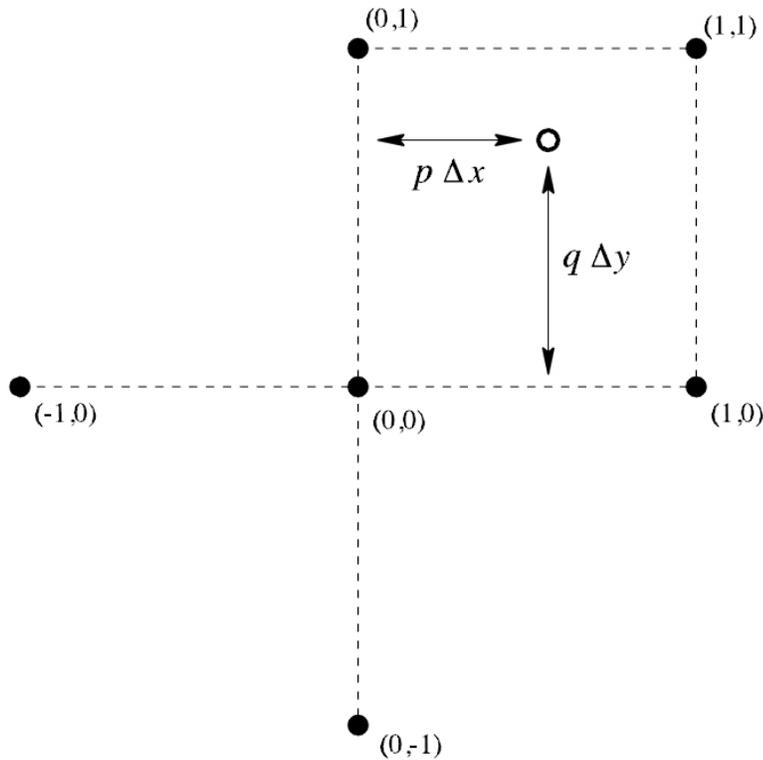


Figura 2.5: Esquema de interpolação utilizado. Esta figura foi retirada de [14]

Sintetizando-se o algoritmo que faz a associação dos lados, dois passos são críticos: o primeiro passo é a classificação dos pontos da rede computacional. Os pontos que estão dentro do domínio fundamental (DF) e possuem pontos adjacentes fora do DF são chamados de *slavedrivers* e o restante dos pontos dentro do domínio fundamental são chamados de *masters*. Todos os pontos fora do domínio fundamental que forem utilizados na interpolação acima são chamados de *slaves* e o restante é chamado de *freemen*. Notando que qualquer *freemen* que seja necessário na interpolação deve ser transformado em *slave*.

Dada a equação de interpolação acima, temos um sistema de N equações lineares acopladas, aonde N é o número de *slaves* e M o número de *slavedrivers*. Organizando os pontos em vetores ϕ_s (de *slaves*) e ϕ_{sd} (de *slavedrivers*), o

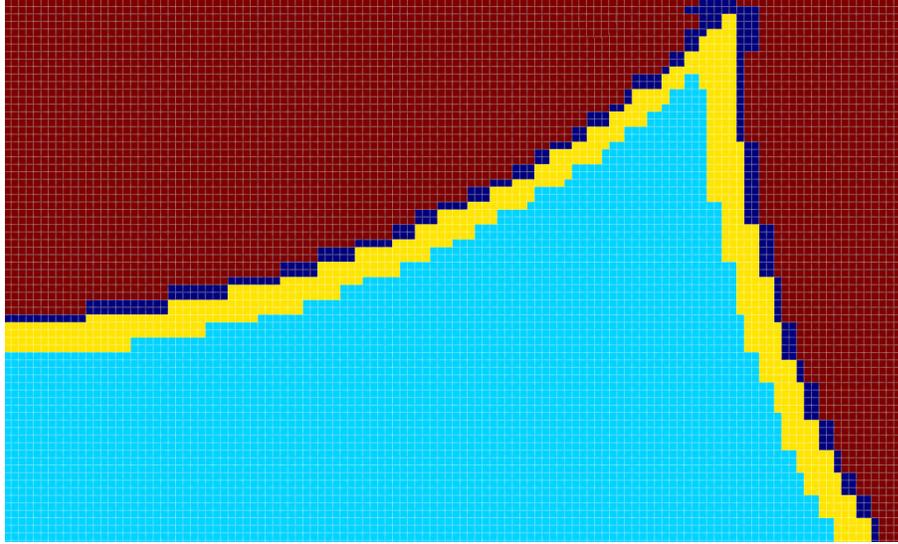


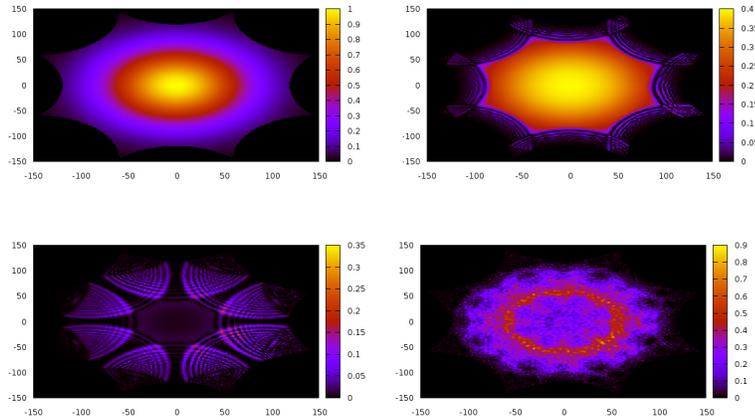
Figura 2.6: Uma parte do octógono onde destacamos a classificação dos pontos da *grid*: *Masters* (azul claro), *slavedrivers* (amarelo), *slaves* (azul escuro) e *freemen* (vermelho).

sistema de equações de interpolação (2.76) pode ser escrito na seguinte forma matricial:

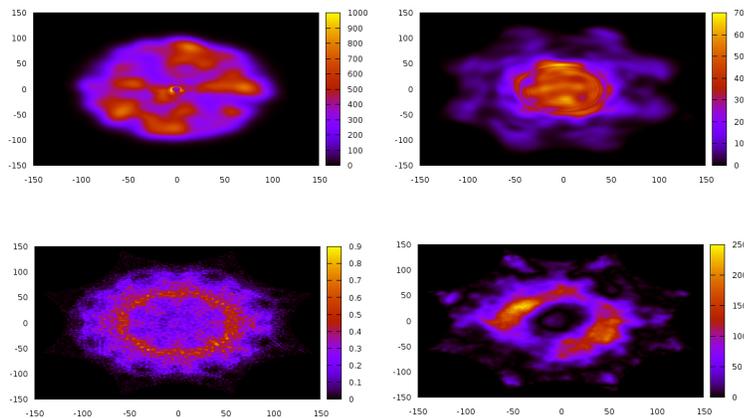
$$A\phi_s = B\phi_{sd} . \quad (2.77)$$

Portanto, o segundo passo consiste em construir a matriz $C = A^{-1}B$.

Construída essa matriz, cada iteração da evolução da onda é precedida pela aplicação da matriz C no vetor dos *slavedrivers*, retornando os *slaves*. Com os *slaves* atualizados, o método de Euler fornece a nova função de onda, e as demais quantidades de interesse. As figuras (2.3) e (2.3) ilustram simulações com diferentes condições iniciais.



Alguns Instantes de uma simulação da evolução de uma função de onda dada por uma gaussiana no centro.



Alguns Instantes de uma simulação da evolução de uma função de onda dada por uma combinação aleatória de gaussianas.

2.3.1 Algoritmo mais direto

Foi estudado, mas não implementado, outro método (ver [13]), que apresenta um algoritmo mais direto de resolver o problema de autovalor. Isto é, procurar as soluções de $\psi(g_i^{-1}z) = \psi(z)$ diretamente utilizando expansão em ondas circulares (eq. (2.59)). Usando a notação de [13], onde λ é o autovalor agora indicado nos índices, e explicitando os dois somatórios em l e m ,

temos

$$\psi = \sum_{l=-L}^L \sum_{m=-l}^l a_{\lambda lm} Q_{\lambda lm} , \quad (2.78)$$

aonde

$$Q_{qlm} \equiv P_l^m (\cosh \tau) e^{im\varphi} . \quad (2.79)$$

Evidentemente, truncamos o somatório infinito, indicado por L .

Esta abordagem direta é possível se restringirmos a análise das condições de contorno a um número finito de pontos. Então selecionamos aleatoriamente um conjunto de d pontos dentro do domínio fundamental e encontramos todas as imagens desse conjunto de pontos, que se encontram dentro de um raio ρ_{\max} . Cada ponto p_j possui n_j imagens e um sistema de $\sum_{i=0}^{n_j-1} (n_j - i) = n_j (n_j + 1) / 2$ equações, dadas pelas condições de contorno

$$\psi (g_\alpha p_j) - \psi (g_\beta p_j) = 0 , \text{ com } \alpha \neq \beta . \quad (2.80)$$

Então, considerando-se todos os pontos do conjunto, temos um sistema de $M = \sum_{j=1}^d n_j (n_j + 1) / 2$ equações. Usando a expansão (2.78), o sistema é dado por

$$\sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l (a_{\lambda lm} Q_{qlm} (g_\alpha p_j) - a_{\lambda lm} Q_{qlm} (g_\beta p_j)) = 0 . \quad (2.81)$$

Podemos expressar o sistema de forma matricial, com uma matriz A aplicada em um vetor que consiste nos coeficientes a_{lm}

$$Aa = 0 . \quad (2.82)$$

A matriz A possui M linhas e $N = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l 1 = (L + 1)^2$ colunas. Quando $M = N - 1$ o sistema possui solução para qualquer λ . No entanto, quando $M > N$ o sistema só terá solução quando λ for um autovalor da superfície compacta. O método usual de resolver esse tipo de sistema é usando a chamada decomposição de valor singular [36]. O algoritmo de decomposição de valor singular é comum em pacotes de álgebra linear e consiste em procurar o vetor a que minimiza $|Aa|^2$, o vetor resultante é composto dos autovalores que procuramos.

2.3.2 Problemas de estabilidade

Para testar a precisão do primeiro algoritmo, além da amplitude de probabilidade, calculamos a energia da onda que está sendo evoluída. Considerando a ação do sistema

$$S = \int \sqrt{-g} g^{\mu\nu} \partial_\mu \psi \partial_\nu \psi d^2 x dt , \quad (2.83)$$

podemos deduzir a forma da energia $E = T + G$, dada por

$$E = - \int \frac{4\dot{\phi}^2}{(1-x^2-y^2)^2} dx dy - \int \left\{ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right\} dx dy . \quad (2.84)$$

Discretizando, temos que

$$T = - \sum_{ijn} \frac{4(\phi_{ij}^n - \phi_{ij}^{n-1})^2}{(1-(i\Delta x)^2 - (j\Delta y)^2)^2} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t^2} \quad (2.85)$$

e

$$G = - \sum_{ij} \left\{ \frac{(\phi_{i-1,j} - \phi_{i,j})^2}{\Delta x} + \frac{(\phi_{i,j-1} - \phi_{i,j})^2}{\Delta y} \right\} . \quad (2.86)$$

Os resultados estão expostos nas figuras (2.7) e (2.8).

As nossas simulações numéricas não se mostraram estáveis. Uma tentativa de melhorar a estabilidade, considerando uma rede maior que 301×301 e uma resolução temporal melhor, fez com que o tempo de computação e o espaço de armazenamento aumentasse muito rapidamente, inviabilizando a nossa simulação.

Os nossos resultados indicam uma variação muito grande na energia do sistema após poucas iterações. Não conseguimos determinar qual o erro. Mas notamos que ao utilizarmos uma melhor resolução da rede, a instabilidade demorava mais para aparecer (testamos também com $dt/2$, sem qualquer melhoria). No entanto, um aumento na rede resulta em aumento no tempo de computação, tornando a simulação com o método inviável. A mudança do método de integração, de Euler para Runge-Kutta de quarta ordem, também aumenta drasticamente o tempo de computação, mesmo mantendo a rede constante. Isto porque passamos a necessitar determinar muito mais pontos de interpolação, e em cada passo a interpolação precisa ser refeita, ao contrário do método de Euler, que permite que os coeficientes possam ser pré calculados (dado por uma matriz). Como para a interpolação precisamos

determinar uma matriz que relaciona os pontos *slavedrivers* com os *slaves*, o tempo de computação se torna inviável, considerando que temos apenas um computador de mesa para realizar as simulações.

É importante ressaltar que a solução numérica de uma equação de onda com contornos arbitrários também apresenta muitas dificuldades. Existem diferentes métodos para diferentes tipos de contornos, e também diferentes métodos se desejamos calcular autovalores mais baixos ou os mais altos. Em alguns casos, podemos considerar uma abordagem perturbativa, mas nem sempre este tipo de abordagem é conveniente. Uma discussão sobre essas abordagens pode ser encontrada em [1]. E, no caso do espaço não ser plano, outras dificuldades aparecem.

Mas, como estamos mais interessados em um regime aonde temos um grande número de autovalores e em um intervalo de energia ΔE pequeno, isto é, em um regime de altas energias, resolvemos abordar o problema de uma outra maneira: considerar o desenvolvimento assintótico da função partição. A partir da função partição, calculamos algumas propriedades termodinâmicas para sistemas com topologia compacta e curvatura negativa. Essa abordagem e os resultados obtidos estão no próximo capítulo, e constitui o resultado principal da dissertação.

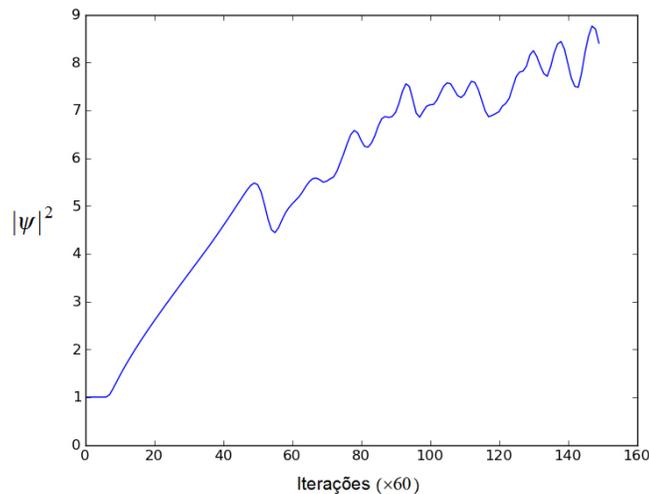


Figura 2.7: Amplitude da função de onda em função do número de iterações.

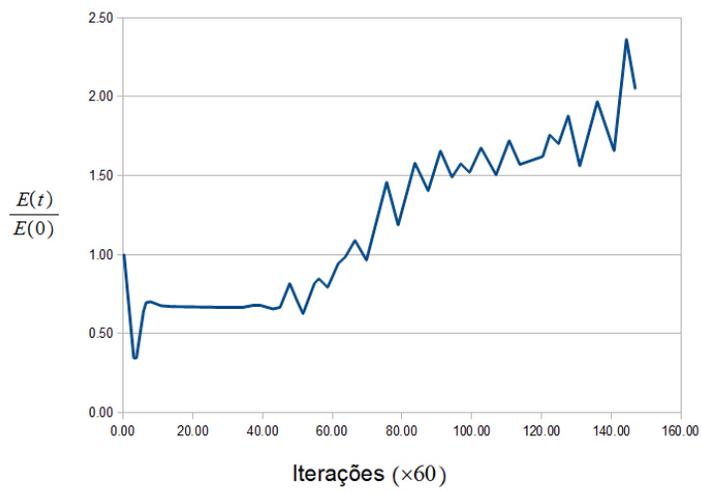


Figura 2.8: Variação da energia total em função do número de iterações.

Capítulo 3

Termodinâmica no limite assintótico

Para considerarmos o caso do limite semiclássico, uma abordagem alternativa seria a de se considerar uma aproximação em um regime de altas temperaturas e determinar a função partição, levando-se em consideração as propriedades geométricas e topológicas do sistema.

A abordagem desse problema foi desenvolvida de forma matematicamente mais rigorosa em [25] e mais física em [24]. Esses artigos (em especial [25]), introduziram um questionamento se poderíamos "ouvir a forma de um tambor". Experimentos efetuados com esta finalidade indicaram que tal possibilidade não existe [37]. Para uma abordagem mais matemática, ver [21].

No entanto, mesmo não sendo possível ouvir a forma exata do tambor, a abordagem adotada por Kac tem sido aplicada em algumas situações no limite termodinâmico como, por exemplo, no cálculo de alguns coeficientes na expansão do virial [32] [34]. E como a presença de curvatura afeta algumas propriedades termodinâmicas em líquidos [35], o estudo da influência da geometria para algumas propriedades termodinâmicas é um assunto bastante interessante.

Assim, optamos por utilizar esta aproximação em nossos cálculos. Um dos resultados novos nos fornece uma restrição para a aplicabilidade dessa aproximação, aonde não somente a temperatura deve ser alta, mas também impõe algumas restrições para a topologia e geometria do sistema. Esses resultados são compatíveis com a idéia de que não podemos ouvir a forma do tambor, tanto a sua geometria como a sua topologia.

Nosso resultado foi obtido calculando inicialmente a condição de estabili-

dade termodinâmica, sendo o nosso sistema um gás ideal, em uma superfície compacta com curvatura negativa e genus (topologia) arbitrário. Mostramos que o sistema tem que ser sempre estável para que possamos definir uma energia interna positiva.

Nas primeira e segunda seções deste capítulo, apresentaremos uma breve descrição de estabilidade termodinâmica e a função partição. A principal referência é Callen [11]. Na terceira seção, apresentamos a função partição obtida por Kac e McKean e aplicamos para o cálculo da estabilidade e discutimos os resultados obtidos.

3.1 Fundamentos de termodinâmica e estabilidade

A termodinâmica fornece um conjunto de princípios físicos que permite extrair propriedades macroscópicas de sistemas compostos de muitos entes como, por exemplo, um sistema com N partículas interagindo gravitacionalmente que, descrito pelas leis de Newton, a dinâmica é descrita por $3N$ equações diferenciais. A termodinâmica contorna esse problema computacional assumindo que existem estados descritos por poucos graus de liberdade, denominados estados de equilíbrio.

Consideremos, por exemplo, um copo com água mexido com uma colher recentemente e outro copo com água em repouso. Inicialmente a descrição do copo com água em movimento é mais complexa, por apresentar vórtices e outras estruturas. Porém, passado alguns minutos, os dois copos com água se tornam macroscopicamente indistinguíveis e são descritos por um conjunto pequeno de grandezas, como temperatura e volume. Esses são os estados de equilíbrio. E o conjunto de parâmetros são a energia interna U e, geralmente, volume, número de partículas etc, dependendo totalmente do sistema, do estado e do meio externo.

A evolução para estados de equilíbrio pode acontecer rápida ou lentamente. De fato, na realidade, nenhum sistema está em um estado perfeito de equilíbrio, mas, nos casos em que a evolução é "muito lenta" (definição relativa ao sistema em questão), a termodinâmica pode ser ainda aplicável, e as grandezas que descrevem o sistema são variáveis. A validade da termodinâmica nesse estado de equilíbrio metaestável ou quase estático pode ser verificada pela consistência interna (ou inconsistência) da descrição obtida.

As condições requeridas para estabilidade serão expostas em seguida.

A segunda lei da termodinâmica introduz a entropia S que, assim como a energia interna, é uma variável extensiva (depende do tamanho do sistema), como uma função monotonicamente crescente da energia interna e das outras grandezas extensivas que caracterizam os estados em equilíbrio [11]. Os valores das grandezas extensivas são tais que a entropia é sempre máxima. Mais especificamente, a condição de estado de equilíbrio é dada por

$$dS = 0 \quad (3.1)$$

e é estável se

$$d^2S \leq 0. \quad (3.2)$$

A condição de estabilidade (3.2) será melhor explorada com a introdução dos potenciais termodinâmicos. O estado de um sistema pode ser descrito pela equação da entropia $S(U, \mathbf{X})$, onde \mathbf{X} representa as outras grandezas extensivas do sistema, ou na representação da energia $U(S, \mathbf{X})$. Da segunda lei da termodinâmica, sabemos que a entropia é uma função monotonicamente crescente da energia interna, portanto a condição de estabilidade significa que a energia deve ser mínima. Aplicando a transformada de Legendre em U ou S em relação as outras grandezas extensivas, obtemos outras grandezas, denominadas potenciais termodinâmicos [11], que podem fornecer descrições mais convenientes dependendo da interação do sistema com o ambiente.

Vamos considerar um sistema que pode ser descrito por U , S , V e N . Dessa forma, a equação fundamental na representação da energia é dada por

$$U = TS - pV + \mu N, \quad (3.3)$$

aonde T (temperatura), p (pressão) e μ (potencial químico) são denominadas variáveis intensivas (que não dependem do tamanho do sistema), definidas pelas derivadas parciais:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} \quad (3.4)$$

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N} \quad (3.5)$$

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (3.6)$$

As transformadas de Legendre de U em relação a V e S resultam na entalpia H e na energia livre de Helmholtz F , respectivamente. Isto é

$$H \equiv U + pV \quad (3.7)$$

e

$$F \equiv U - TS . \quad (3.8)$$

Podemos definir também a energia livre de Gibbs G como a transformada de Legendre de U em relação a V e S

$$G \equiv U + pV - TS . \quad (3.9)$$

A utilidade de cada um desses potenciais depende de que parâmetros estão variando em cada processo termodinâmico.

Considerando processos que mantém N constante, as condições de estabilidade na representação da energia são

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} \geq 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \geq 0 \quad (3.11)$$

e

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} \right)^2 \geq 0. \quad (3.12)$$

As condições de estabilidade para a energia livre de Helmholtz:

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{V,N} \leq 0 \quad (3.13)$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_{T,N} \geq 0 \quad (3.14)$$

As condições de estabilidade para a entalpia:

$$\left(\frac{\partial^2 H}{\partial S^2} \right)_{p,N} \geq 0 \quad (3.15)$$

$$\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \right)_{S,N} \leq 0 \quad (3.16)$$

As condições de estabilidade para a energia livre de Gibbs:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{p,N} \leq 0 \quad (3.17)$$

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_{T,N} \leq 0 \quad (3.18)$$

Todas obedecem o mesmo padrão, são funções convexas (segunda derivada negativa) de seus parâmetros intensivos e são funções côncavas (segunda derivada positiva) de seus parâmetros extensivos.

Um processo termodinâmico que leva à instabilidade pode significar, por exemplo, transição de fase. Nosso objetivo é analisar a estabilidade quando o sistema está num espaço hiperbólico compacto. Para isso precisamos das equações de estado, que serão obtidas na próxima seção.

3.2 Equações de estado

Um microestado é definido como uma das possíveis configurações dos elementos de um sistema, e pode ser dado por uma função de onda ou, classicamente, pela posição e momento de cada partícula. Um sistema é macroscopicamente descrito por seus parâmetros extensivos, e existe um número muito grande (possivelmente infinito) de microestados consistentes com essa descrição. Esse conjunto de microestados é denominado *ensemble*. A Mecânica Estatística se baseia na seguinte hipótese fundamental [11]: *Em um sistema em equilíbrio, todos os microestados possuem probabilidade igual.*

Existem vários *ensembles* fundamentais, mas vamos introduzir apenas o *ensemble canônico*, o conjunto de todos os microestados de um sistema com V e N constantes e em contato com um reservatório térmico. Considerando-se o reservatório térmico como parte do sistema total, a probabilidade do subsistema que estamos interessados estar em qualquer microestado v (lembrando da hipótese fundamental) é proporcional ao número de estados do sistema total em que o subsistema está no microestado v . Introduzindo a notação Ω para número de estados, temos:

$$\mathcal{P}_v \propto \Omega_{res}(U_{tot} - U_v). \quad (3.19)$$

Podemos colocar (3.19) em uma forma mais compacta escrevendo

$$\Omega_{res}(U_{tot} - U_v) = \exp[\ln \Omega_{res}(U_{tot} - U_v)], \quad (3.20)$$

e fazendo uma expansão em série de Taylor de $\ln \Omega_{res}(U_{tot} - U_v)$, notando que a energia do reservatório é muito maior que a do subsistema, para obter

$$\ln \Omega_{res}(U_{tot} - U_v) \simeq \ln \Omega_{res}(U_{tot}) - U_v \frac{d\Omega_{res}(U_{tot})}{dU_{tot}}. \quad (3.21)$$

No contexto da Mecânica Estatística, a entropia é *definida* de forma consistente com a segunda lei da termodinâmica como $S = k_B \ln \Omega$ [11], onde k_B é a constante de Boltzmann. Como a temperatura é definida por $(\partial S / \partial U)_{V,N} = 1/T$ temos que

$$\frac{\partial \Omega_{res}(U_{tot})}{\partial U_{tot}} = \frac{1}{k_B T} = \beta. \quad (3.22)$$

Com isso podemos re-escrever a probabilidade (3.19) como

$$\mathcal{P}_v \propto \exp(-\beta U_v), \quad (3.23)$$

descartando a constante $\Omega_{res}(U_{tot})$, pois queremos apenas a relação com as energias U_v , qualquer constante em \mathcal{P}_v será incorporada na condição de normalização, dada por:

$$Z = \sum_v \exp(-\beta U_v) = 1, \quad (3.24)$$

também conhecida como *função partição canônica*. E temos então

$$\mathcal{P}_v = \frac{\exp(-\beta U_v)}{Z}. \quad (3.25)$$

Vamos mostrar que a energia livre de Helmholtz F é o potencial termodinâmico mais conveniente para sistemas descritos pelo *ensemble* canônico. A energia interna é dada pelo cálculo do valor esperado:

$$U \equiv \langle U \rangle = \sum_v \mathcal{P}_v U_v \quad (3.26)$$

que, usando as relações (3.25) e (3.24), pode ser re-escrita como:

$$U = \frac{\sum_v \exp(-\beta U_v) U_v}{\sum_v \exp(-\beta U_v)} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (3.27)$$

Considerando Z como função de β e V , a diferencial de $\ln Z$ é dada por:

$$d(\ln Z) = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV. \quad (3.28)$$

Porém, vimos que $U = -\partial \ln Z / \partial \beta$ e uma conta análoga nos fornece $p = \beta^{-1} (\partial \ln Z / \partial V)$, então

$$d(\ln Z) = -U d\beta + \beta p dV = -d(\beta U) + \beta dU + \beta p dV, \quad (3.29)$$

o que nos permite escrever a variação dU como:

$$dU = \frac{1}{\beta} d(\ln Z + \beta U) - p dV. \quad (3.30)$$

Sendo $dU = T dS - p dV$, temos então que a entropia é dada por

$$S = k_B \ln Z + \frac{U}{T}. \quad (3.31)$$

Tendo a entropia e a energia em termos da função partição, podemos finalmente escrever a energia livre de Helmholtz, dada simplesmente por

$$F = U - TS = -k_B T \ln Z. \quad (3.32)$$

3.3 Estabilidade termodinâmica em superfícies genéricas

Em Kac [25], o autor busca relações entre o espectro do operador de Laplace e propriedades da superfície em que o sistema se encontra. Weyl havia introduzido anteriormente uma função partição no limite semiclássico (altas energias e temperatura) dependente da área do domínio [25], Kac adicionou correções que incluíam também o perímetro do domínio. McKean e Singer [24] forneceram uma demonstração para a função de partição e uma relação adicional com genus g da superfície. Como também é possível expressar a função partição como um somatório envolvendo o espectro de energia (autovalores do operador de Laplace) [11], conhecendo o espectro podemos extrair algumas propriedades da superfície.

Weyl demonstrou, para a equação de Helmholtz com condições de contorno de Dirichlet com área A , que o número de autovalores menores que λ , denotado por $N(\lambda)$, obedece a relação:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} N(\lambda) = \frac{A}{2\pi} \lambda. \quad (3.33)$$

Para um gás ideal, a função partição pode ser dada em termos da energia E_n de cada elemento do sistema ou dos autovalores λ_n da equação de Helmholtz:

$$Z = \sum_v \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) = \sum_v \exp(-\lambda_n t) \quad (3.34)$$

onde

$$t \equiv \frac{\hbar^2}{2mk_B T} = \frac{\hbar^2 \beta}{2m} \quad (3.35)$$

A seguir, desenvolvemos, de forma muito resumida, a construção da função partição assintótica.

Classicamente, em um gás ideal (toda a discussão será feita para gases ideais), a probabilidade de encontrar partículas específicas em $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$ é dada por:

$$\frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n}{A} . \quad (3.36)$$

O análogo quântico é um pouco mais complicado:

$$\frac{\sum_n e^{-t\lambda_n} \psi_n^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)}{\sum_n e^{-t\lambda_n}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n . \quad (3.37)$$

Fazendo $\hbar \rightarrow 0$ ou $T \rightarrow \infty$ ou $t \rightarrow 0$, o caso quântico deve recair no clássico, isto é,

$$\frac{\sum_n e^{-t\lambda_n} \psi_n^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)}{\sum_n e^{-t\lambda_n}} \sim \frac{1}{A} \quad (3.38)$$

ou

$$\sum_n e^{-t\lambda_n} \psi_n^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) \sim \frac{1}{A} \sum_n e^{-t\lambda_n} , \quad t \rightarrow 0 . \quad (3.39)$$

Utilizando a lei de Weyl, a convergência do termo $\sum_n e^{-t\lambda_n}$ pode ser estimada:

$$\sum_n e^{-t\lambda_n} \sim \frac{A}{2\pi t} . \quad (3.40)$$

Portanto, conhecendo o espectro λ_n , nós podemos obter a área.

Dando mais um passo, consideremos a equação de difusão,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla^2 P , \quad (3.41)$$

sendo $\vec{\rho}$ o ponto de concentração inicial, isto é,

$$\lim_{t \rightarrow 0} P(\vec{r}, t) = \delta(\vec{r} - \vec{\rho}) . \quad (3.42)$$

As soluções da equação de difusão podem ser escritas em função dos autovalores da equação de Helmholtz:

$$P(\vec{r}, t) = \sum_n^{\infty} e^{-t\lambda_n} \psi_n(\vec{\rho}) \psi_n(\vec{r}) \quad (3.43)$$

e, integrando sobre o espaço D , temos a função partição novamente:

$$Z = \int_D P(\vec{r}, t) dA = \sum_n^{\infty} e^{-t\lambda_n} . \quad (3.44)$$

O problema pode ser investigado com mais profundidade analisando as funções P , além da relação com a área já obtida. A expansão de P deduzida em [24], para $\vec{\rho} = \vec{r}$ e t pequeno, integrada em D , possui a forma

$$Z = \frac{A}{4\pi t} + \frac{\chi}{6} + \frac{\pi t}{60} \int_A K^2 dA + \mathcal{O}(t^2) \quad (3.45)$$

onde K é a curvatura gaussiana e χ é o número de Euler (introduzido na seção 1.6), relacionado ao genus g por:

$$\chi = 2(1 - g) . \quad (3.46)$$

Nesta seção vamos utilizar a função partição (3.45) para investigar se há influência da topologia na estabilidade termodinâmica. Vamos usar a equação (3.14) como condição de estabilidade:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial A^2} \geq 0. \quad (3.47)$$

Usando a equação (3.32) e desenvolvendo a derivada, a condição acima se torna:

$$\left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial A} \right)^2 - \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial A^2} \geq 0. \quad (3.48)$$

Utilizando a relação (1.112) entre a curvatura gaussiana, a área e o genus, vamos re-escrever a função partição resolvendo a integral

$$\int_A K^2 dA = \int_A \left(\frac{2\pi\chi}{A} \right)^2 dA = -\frac{(2\pi\chi)^2}{A} , \quad (3.49)$$

de forma que

$$Z = \frac{A}{4\pi t} + \frac{\chi}{6} - \frac{\pi^3 t \chi^2}{15A}. \quad (3.50)$$

Agora podemos calcular as derivadas primeira e segunda de Z em relação à área para obter:

$$\frac{\partial Z}{\partial A} = \frac{1}{4\pi t} + \frac{\pi^3 t \chi^2}{15A^2} \quad (3.51)$$

e

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial A^2} = -\frac{2\pi^3 t \chi^2}{15A^3}. \quad (3.52)$$

Uma álgebra relativamente simples permite explicitar o genus e a temperatura na análise de estabilidade. Das equações (3.46) e (3.35) e definindo-se $a \equiv mk_B/\hbar^2$ a condição de estabilidade (3.48) se torna:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{aT}{2\pi} + \frac{2\pi^3(1-g)^2}{15aTA^2} \right)^2 \\ & + \left(\frac{aTA}{2\pi} + \frac{(1-g)}{3} - \frac{2\pi^3(1-g)^2}{15aTA} \right) \left(\frac{4\pi^3(1-g)^2}{15aTA^3} \right) \geq 0, \end{aligned} \quad (3.53)$$

que pode ser re-escrito como:

$$(aT)^2 \left[1 + \frac{(4\pi^2)^2}{15} y^2 - \frac{16\pi^5}{45} y^3 - \frac{(4\pi^4)^2}{(15)^2} y^4 \right] \geq 0, \quad (3.54)$$

com

$$y \equiv \frac{(g-1)}{aAT}. \quad (3.55)$$

No gráfico (3.1) podemos ver que existe uma região de instabilidade, onde $\partial^2 F/\partial A^2$ é negativo. Numericamente, o intervalo de estabilidade é dado por

$$0 < y < 0.33604 \quad (3.56)$$

ou, usando (3.55),

$$\frac{AT}{g-1} > 2.6313 \times 10^{-15} m^2 K. \quad (3.57)$$

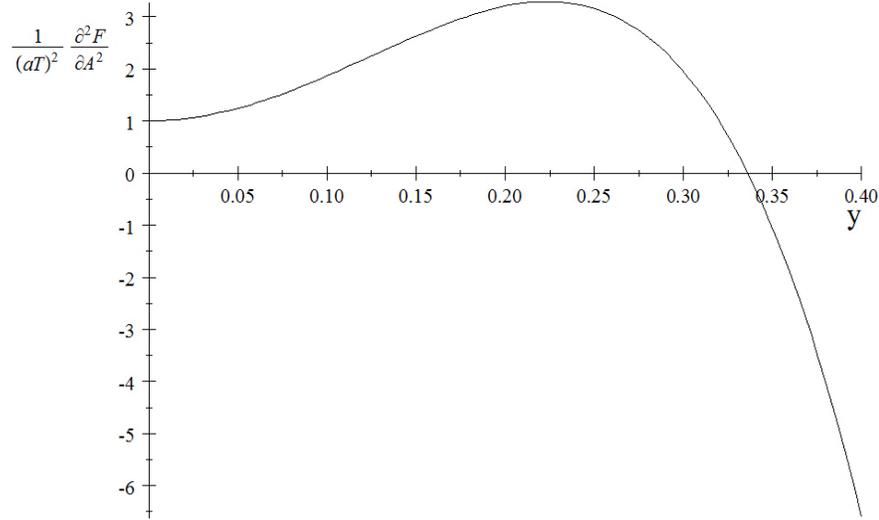


Figura 3.1: O sistema é estável para $\partial^2 F/\partial A^2$ positivo.

Vamos verificar se a energia interna permite que o sistema saia da região de estabilidade encontrada. A equação da energia interna (3.27), com as variáveis definidas previamente, tem a forma

$$U = k_B T \left(1 + \frac{4\pi^4}{15} y^2 \right) \left(1 - \frac{2\pi}{3} y - \frac{4\pi^4}{15} y^2 \right)^{-1}. \quad (3.58)$$

A energia interna impõe a condição adicional

$$f(y) = 1 - \frac{2\pi}{3} y - \frac{4\pi^4}{15} y^2 > 0, \quad (3.59)$$

cujos comportamento pode ser visto no gráfico (3.2). Numericamente obtemos

$$\frac{AT}{g-1} > 5.53 \times 10^{-15} m^2 K, \quad (3.60)$$

que é mais forte que a condição de estabilidade, isto é, $\frac{AT}{g-1}$ é sempre maior que o valor mínimo para instabilidade.

Desta forma, apenas a condição da equação (3.60) precisa ser considerada. Mas, usando a equação (1.112), podemos escrever a equação (3.60) em termos

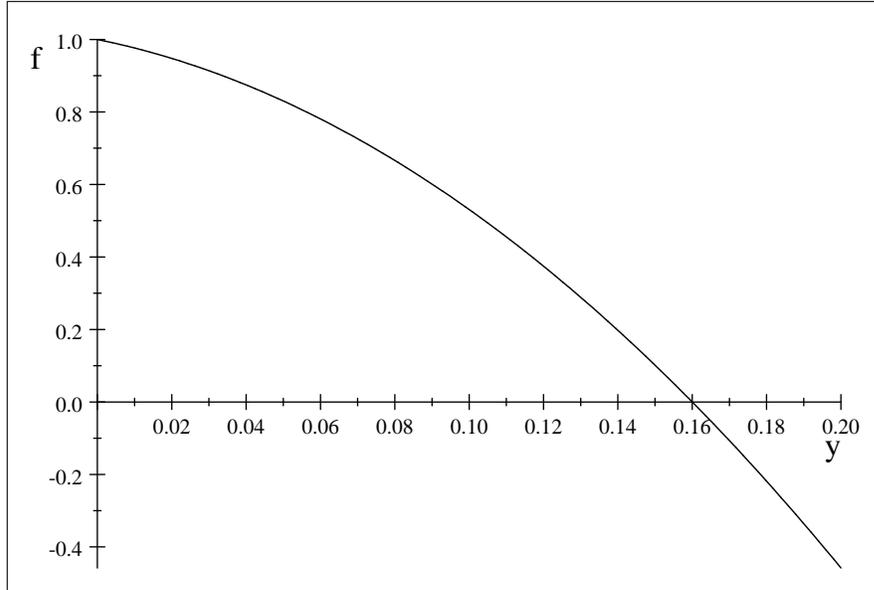


Figura 3.2: $f(y) > 0$ é a condição de que a energia interna deve ser positiva.

da curvatura K , de forma que

$$\frac{T}{|K|} > 4.40 \times 10^{-14} m^2 K, \quad (3.61)$$

indicando que em condições de curvatura muito alta, a aproximação utilizada para obter a função partição deixa de ser válida.

Assim, além da condição de ser em altas temperaturas, para a validade da aproximação utilizada para a obtenção da função partição (3.45), devemos incluir que a curvatura gaussiana K deve ser pequena ou o genus g deve ser pequeno (mantendo a área com dimensões onde efeitos quânticos são desprezíveis).

Como (em temperatura ambiente) a aproximação é válida para valores de K menores que $10^{13} \sim 10^{14} m^2$ ou para g muito maior que a mesma ordem de grandeza, podemos afirmar que o efeito da curvatura (geometria) e da topologia não são importantes nesta aproximação. De forma que eventuais mudanças na geometria ou na topologia não afetam a estabilidade termodinâmica de um sistema.

Capítulo 4

Comentários finais

Apesar do nosso resultado indicar que efeitos da topologia e da geometria não são importantes quando consideramos um gás ideal em temperaturas foras do que se considera baixas, uma análise qualitativa nos leva a pensar que em algum momento os efeitos da geometria e/ou da topologia podem se tornar importantes.

Altas temperaturas correspondem ao regime clássico, o comprimento de onda deve ser pequeno. Nesse caso, as regiões com pequena curvatura não seriam "sentidas" pelo sistema, o que justificaria o fato da geometria não ser importante nessa aproximação. Mas no regime quântico os comprimentos de onda são maiores, de forma que mesmo pequenas curvaturas podem exercer alguma influência.

O estudo do espectro do operador de Laplace envolve, além das questões da geometria, as informações sobre a topologia do sistema (de uma maneira genérica, as condições de contorno do sistema) [9]. Nossos resultados indicam que no regime de altas temperaturas, tanto a topologia como a geometria, não tem nenhuma influência mensurável. Mais do que altas temperaturas, estamos tratando de uma situação no regime clássico. Poderíamos então levantar a seguinte questão: existe algum regime (baixas temperaturas ou regime quântico) aonde os efeitos da temperatura ou da topologia são relevantes? Em caso afirmativo, a transição desta região para a região onde deixa de ser importante, seria a mesma da transição do regime quântico para o clássico? Teríamos, então, uma aproximação semi-clássica aonde os efeitos da topologia e da geometria seriam relevantes?

Uma outra questão que pode ser interessante investigar, futuramente, é o caso do genus muito alto. No caso particular de termos um genus muito

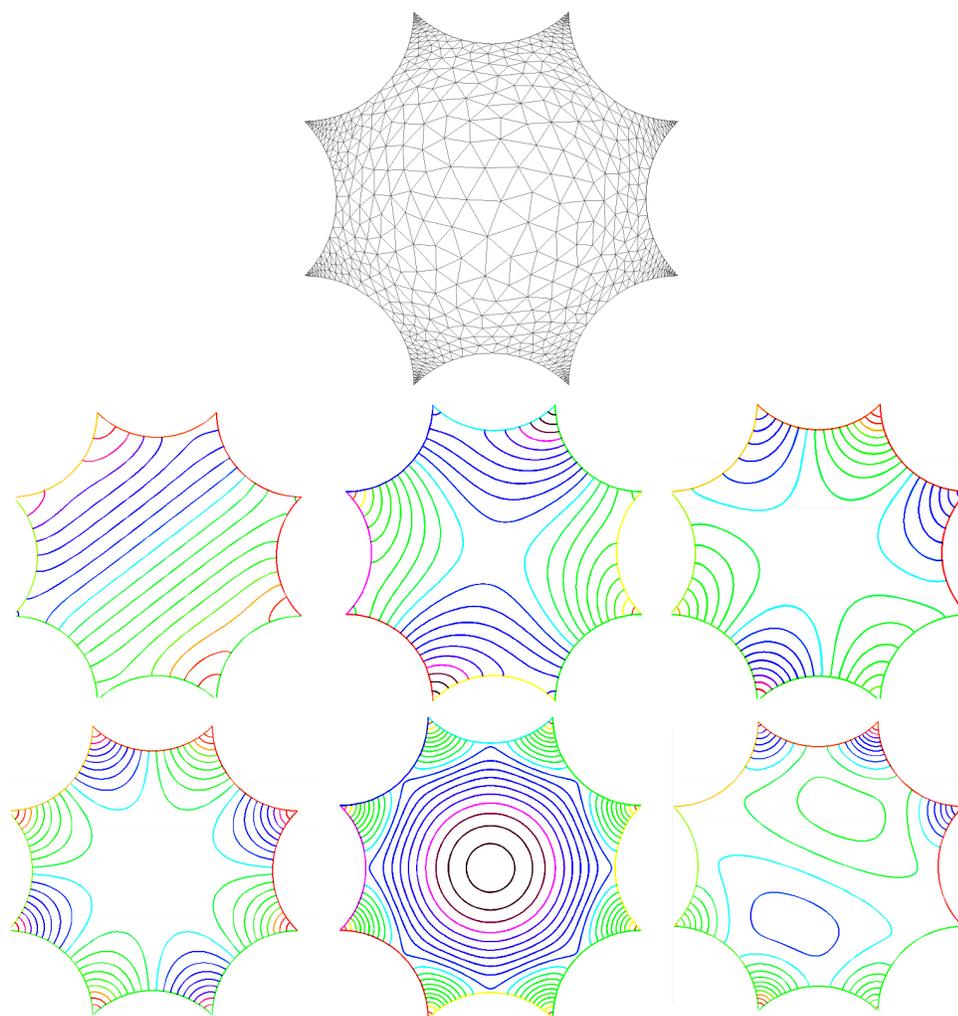


Figura 4.1: Rede gerada de forma a se adaptar aos lados do octógono e à métrica do disco de Poincaré e algumas das autofunções obtidas.

alto, para manter a curvatura pequena, devemos ter uma área muito grande. Isso nos leva a seguinte questão: uma superfície plana (curvatura pequena) cheia de buracos é equivalente a um sistema com alto grau de porosidade? Em caso afirmativo, teríamos a possibilidade de analisar certas propriedades termodinâmicas de sistemas porosos, utilizando a função partição (3.45).

Existem vários métodos numéricos para a obtenção do espectro da equação de Helmholtz no octógono compacto que não tivemos a oportunidade de implementar. O algoritmo proposto em [14] para implementar condições de contorno periódicas, usando interpolações, pode ser uma das fontes de imprecisão na simulação. Outra possível fonte é a relação entre a métrica e a rede, que faz com que a resolução seja maior no centro. Podemos contornar ambos problemas mencionados utilizando uma rede adaptável. Entretanto, a geração da rede (geralmente feita com o algoritmo de Voronoi) e o método de diferenças finitas para a solução de equações diferenciais na rede não são triviais. Fizemos alguns testes utilizando a linguagem *FreeFem++*, um idioma de C++, que fornece ferramentas para resolver problemas utilizando métodos de diferenças finitas. Os resultados preliminares, ilustrados na figura (4.1), são promissores, obtivemos algumas autofunções e seus respectivos autovalores. Apesar do espectro de autovalores parecer incompleto quando comparado com os existentes na literatura, as autofunções são coerentes e possuem a esperada simetria do octógono.

Para finalizar, gostaríamos de ressaltar que a utilização de topologias não triviais ainda não é um exercício comum nos problemas de física. No entanto, a utilização de topologia pode nos fornecer informações que de outra maneira seria bem difícil de obter, como nos estudos relacionados com cronologia em espaço-tempo [40]. Contudo, os avanços recentes nas técnicas de manipulação de nanoestruturas, com a fabricação de sistemas com topologias não triviais, como a faixa de Moebius [27], pode fazer com que o estudo de técnicas de topologia passe a ser mais rotineiro para os trabalhos de pesquisa em nanotecnologia.

Referências Bibliográficas

- [1] P. Amore. Spectroscopy of drums and quantum billiards: Perturbative and nonperturbative results. *J. Math. Phys.*, 51, 2010.
- [2] G. B. Arfken. *Mathematical Methods for Physicists, Sixth Edition: A Comprehensive Guide*. Academic Press, 2005.
- [3] V. I. Arnold, A. Weinstein, and K. Vogtmann. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer, 1989.
- [4] NonEuclid Hyperbolic Geometry Article and Applet. <http://www.cs.unm.edu/~joel/noneuclid/noneuclid.html>, Abril 2012.
- [5] R. Aurich and F. Steiner. Exact theory for the quantum eigenstates of strongly chaotic system. *Physica D*, 48(2-3):445–470, 1991.
- [6] R. Aurich and M. Taglieber. On the rate of quantum ergodicity on hyperbolic surfaces and for billiards. *Physica D*, 118(1-2):84–102, 1998.
- [7] N. L. Balazs and Voros. Chaos on the pseudosphere. *Physics Reports*, 143(3):109–240, 1986.
- [8] A. O. Barut. *Electrodynamics and Classical Theory of Fields and Particles*. Dover Publications, 2010.
- [9] M. Berger. *A Panoramic View of Riemannian Geometry*. Springer, 2007.
- [10] M. R. Bridson and A. Haefliger. *Metric Spaces of Non-Positive Curvature*. Springer, 1999.
- [11] H. B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, 1985.

- [12] K.S. Cheng. Quantization of a general dynamical system by feynman's path integration formulation. *J. Math. Phys.*, 13(1723), 1972.
- [13] N. J. Cornish and D. N. Spergel. On the eigenmodes of compact hyperbolic 3-manifolds. *arXiv:math/9906017v1*, 1999.
- [14] N. J. Cornish and N. G. Turok. Ringing the eigenmodes from compact manifolds. *Class. Quantum Grav.*, 15:2699–2710, 1998.
- [15] H. S. M. Coxeter. *Non-euclidean geometry*. The Mathematical Association of America, 1998.
- [16] R. C. T. da Costa. Quantum mechanics of a constrained particle. *Physical Review A*, 23:1982–1987, 1981.
- [17] A. M. Ozorio de Almeida. *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*. Cambridge University Press, 1990.
- [18] Manfredo P. do Carmo. *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. Prentice Hall, 1976.
- [19] S. S. e Costa. A description of several coordiante systems for hyperbolic spaces. *arXiv:math-ph/0112039v1*.
- [20] A. Erdelyi. *Asymptotic Expansions*. Dover Publications, 2010.
- [21] C. Gordon, D.L. Webb, and S. Wolpert. One cannot hear the shape of a drum. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 27:134–138, 1992.
- [22] G. Gutiérrez and J. M. Yá nez. Can an ideal gas feel the shape of its container? *Am. J. Phys.*, 65(8):739, 1997.
- [23] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer, 1990.
- [24] Jr. H. P. McKean and I. M. Singer. Curvature and the eigenvalues of the laplacian. *J. Differential Geom*, 1(1-2):43–69, 1967.
- [25] Mark Kac. Can one hear the shape of a drum? *The American Mathematical Monthly*, 73(4):1–23, 1966.

- [26] H. Kleinert. *Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets*. World Scientific Publishing Company, 2004.
- [27] A. P. Korte and G. H. M. van der Heijden. Curvature-induced electron localization in developable moebius-like structure. *J. Phys. Condens. Math*, 21(49), 2009.
- [28] W. Kuhnel. *Differential Geometry: Curves - Surfaces - Manifolds*. American Mathematical Soc., 2006.
- [29] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *The classical theory of fields*. Butterworth-Heinemann, 1980.
- [30] J. R. Magnus and H. Neudecker. *Matrix Differential Calculus With Applications in Statistics and Econometrics*. John Wiley, 1999.
- [31] J. W. Milnor. Hyperbolic geometry: The first 150 years. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 6:9–24, 1982.
- [32] C.D. Modes and R.D. Kamienn. Hard disks on the hyperbolic plane. *Phys. Rev. Lett.*, 99(235701):1–4, 2007.
- [33] G. Ouyang, C. X. Wang, and G. W. Yang. Surface energy of nanostructural materials with negative curvature and related size effects. *Chem. Rev.*, 109(12):4221–4247, 2009.
- [34] A. Santos, M. L. de Haro, and S. B. Yuste. An accurate and simple equation of state for hard disks. *J. Chem. Phys.*, 103(4622):1–4, 1995.
- [35] F. Sausset and G. Tarjus. Periodic boundary conditions on the pseudosphere. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 40:12873–12899, 2007.
- [36] T. S. Shores. *Applied Linear Algebra and Matrix Analysis*. Springer, 2007.
- [37] S. Sridhar and A. Kudrolli. Experiments on not hearing the shape of drums. *Phys. Rev. Lett.*, 72(14):2175–2178, 1994.
- [38] G. Tarjus, F. Sausset, and P. Viot. Statistical mechanics of liquids and fluids in curved space, 2010.

- [39] S. T. Thornton and J. B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Holt Rinehart Winston, 1995.
- [40] R. M. Wald. *General Relativity*. University Of Chicago Press; First Edition edition, 1984.
- [41] J. R. Weeks. *The Shape of Space*. CRC Press, 2001.