

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**I) Hipótese Topológica sobre Transições de Fase
II) Sobre a Fase de Vidro em Sistemas bidimensionais com
Interações Competitivas***

Ana Carolina Ribeiro Teixeira

Tese elaborada sob orientação do Prof. Dr. Daniel Adrián Stariolo e apresentado ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências, área de concentração Física.

Porto Alegre
Dezembro - 2010

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

Conteúdo

Resumo	iii
Abstract	v
I Hipótese Topológica sobre Transições de Fase: Modelo Esférico	3
Introdução	5
1 Transições de Fase Termodinâmicas	9
1.1 Condições de estabilidade/instabilidade termodinâmicas e TFs	10
1.2 Transições de primeira ordem	12
1.3 Transições contínuas	16
1.4 Origem de transições de fase como Singularidades de Potenciais Termodinâmicos	22
1.4.1 Teoremas de Yang e Lee	22
2 A Hipótese Topológica	26
2.1 Geometrização da Dinâmica Hamiltoniana	27
2.2 Geometria e Dinâmica Caótica nas Transições de Fase	31
2.2.1 Expoente de Lyapunov	31
2.2.2 Observáveis Geométricos e Transições de Fase: Curvatura	33
2.2.3 Um resultado analítico: modelo XY campo médio	35
2.3 Transições de Fase e Topologia	35
2.3.1 Origem Topológica das Flutuações de Curvatura Singulares	36
2.3.2 Transições Topológicas e Transições de Fase Termodinâmicas	40
2.4 A Hipótese Topológica	40
2.4.1 Confirmação da Hipótese Topológica em modelos físicos	43
2.4.2 Teorema sobre uma relação de necessidade	47
2.5 Contra-exemplos da Hipótese Topológica	50
2.5.1 Modelos Unidimensionais: Burkhardt e Peyrard-Bishop	50
2.5.2 Modelo ϕ^4 campo médio	52
2.5.3 Modelo Esférico campo médio	61
2.6 Resultados recentes: Origem de não-analiticidades em entropias microcanônicas	67

2.6.1	Singularidade na densidade Jacobiana	68
2.6.2	Singularidade por maximização em relação a um parâmetro	74
2.7	Recapitulação e Síntese	75
3	Hipótese Topológica e o Modelo Esférico na Rede	77
3.1	Termodinâmica	78
3.1.1	Ensemble Canônico	79
3.1.2	Ensemble Microcanônico	83
3.2	Topologia	85
3.2.1	Topologia em campo nulo: $H = 0$	88
3.2.2	Topologia em campo não-nulo: $H \neq 0$	95
3.2.3	Interações de longo alcance	98
II	Sobre a Fase de Vidro em Sistemas bidimensionais com Interações Competitivas	105
	Introdução	107
4	Vidros Estruturais	111
4.1	Analogia com vidros de spin descontínuos	113
4.1.1	Fenomenologia	114
4.1.2	Predições Quantitativas	115
4.2	Fenomenologia da Transição de Fase em Vidros Reais - Teoria RFOT	117
5	Fase de Vidro em Modelo Bidimensional com Interações Competitivas	121
5.1	Hamiltoniano	121
5.1.1	Modelo discreto	121
5.1.2	Limite contínuo: funcional de Ginzburg-Landau	122
5.2	Estática	124
5.2.1	Campo médio	124
5.2.2	Uma aproximação auto-consistente para o campo: aproximação de Hartree	126
5.3	Fase de Vidro	129
5.3.1	Entropia Configuracional	129
5.3.2	Réplicas em Modelos sem Desordem Congelada	130
5.3.3	Expansão da Função de Correlação: Aproximação SCSA	134
5.3.4	Matriz da função de correlação no espaço de réplicas	145
5.3.5	Funções não-diagonais no espaço de réplicas: emergência da fase de vidro	147
5.3.6	Expansão SCSA para a energia livre de Helmholtz	148
5.3.7	Obtenção da temperatura "espinodal" T_D : condição para a ocorrência do líquido superresfriado	150
5.3.8	Entropia Configuracional	154
5.4	Da Fase de Vidro no Modelo Proposto	156
5.4.1	Cálculo da Auto-Energia fora da diagonal $\Sigma_{\mathcal{F}}(k_m)$	159

Apêndices	173
A Parte I	175
A.1 Resumo de Teoria de Morse	175
A.2 Alguns Conceitos de Homotopia	179
A.3 Topologia das subvariedades M_ν do Modelo Esférico na Rede	183
A.3.1 Topologia em campo nulo: $H = 0$	187
B Parte II	198
B.1 Teorema LCT	198
B.2 Elementos não-diagonais da função de correlação no espaço de réplicas	199
B.3 Obtenção da matriz de polarização do modelo estudado [eq. (5.4)]	201
B.3.1 Forma exata da função $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$	201
B.3.2 Forma exata da função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$	203
Referências Bibliográficas	211

Aos meus pais, meus avós, o meu começo...

Agradecimentos

Ao Daniel, orientador e amigo, por me ensinar que pesquisar é criar, colaborando e interagindo. Pela amizade, pelo apoio, pela franqueza e por tanto que com ele aprendi de física e mais.

Ao Jeferson Arenzon, que me ajudou e me apoiou sempre que precisei, algumas vezes antes mesmo que eu o soubesse. Muito do que consegui se deve à sua ajuda e ao seu apoio moral.

Aos membros de minha banca de qualificação, professores Harry Westfahl Jr., Luiz Fernando Ziebell e Miguel Ângelo Gusmão, pelo interesse e pelas críticas e sugestões. Aos membros de minha banca de defesa de tese, professores Alba Graciela de Theumann, Daniel Barci, Harry Westfahl Jr. e Miguel Ângelo Gusmão. Em especial, agradeço a Harry Westfahl e a Miguel Ângelo Gusmão pelas discussões frutíferas em outras oportunidades.

A todos meus professores. Em especial aos professores Victoria Herscovitz, Ruth de Souza Schneider (in memoriam), Claudio Schneider, Luiz Fernando Ziebell, Ricardo Rego Bordalo Correia, Marco Aurélio Idiart e Horacio Girotti.

Aos meus colegas da sala M205. Em especial, aos queridos amigos Tibério Borges Vale, ao Rogério Riffel, ao Rodrigo Nemmen, à Marla Heckler, ao Eduardo Basso e à Salete Pianegonda. Aos meus colegas da sala N224. Em especial, Eduardo Altmann, Fabio Poderoso e Alexandre Derivi.

Aos meus grandes amigos na física Antonio Endler, Carolina Brito e João Thiago Amaral. Ao Heitor Carpes Marques Fernandes, ao Fabio Sperotto Bemfica e ao Marcelo Disconzi.

Ao Fabiano, pelo carinho, pela inspiração, pelas risadas que damos juntos.

Às minhas avós, Ilga e Cássia, e aos meus avôs, que muita falta me fazem, Nilo e Piquito. A candura, o alento e a sabedoria.

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

Aos meus pais, desdobramento do incondicional. Por nunca medirem esforços para me ajudar.

À minha mãe, porque ela sempre esteve comigo, por me ensinar que os bons caminhos nem sempre são fáceis. Por antever os obstáculos e sempre me ajudar a contorná-los. Pela coragem, pela compaixão.

Ao meu pai, por sempre confiar em meu potencial, pela força incondicional. Por me ensinar que não existe nada perfeito; existe o que foi feito e o que não foi.

Resumo

Esta tese é dividida em duas partes. Na Parte I, apresenta-se uma verificação da Hipótese Topológica (HT) sobre o Modelo Esférico ferromagnético. Esta hipótese sugere uma nova abordagem a transições de fase termodinâmicas (TFs), baseada na idéia recentemente proposta de que o mecanismo na origem das TFs seja uma transição topológica (TT) adequada do espaço de configurações de um sistema ocorrendo no ponto da transição de fase. Através de uma análise topológica do espaço de configurações do Modelo Esférico, sugere-se que as TTs relevantes ao comportamento crítico sejam caracterizadas por não-analiticidades em certos invariantes topológicos. Da comparação entre termodinâmica e topologia, conclui-se que tais TTs *não* coincidem com as TFs que ocorrem no modelo. Ademais, nenhuma descontinuidade topológica "abrupta" pôde ser associada aos pontos onde ocorrem TFs no mesmo, isto é, as TTs que coincidem com os pontos críticos (termodinâmicos) não possuem características distintas que as diferenciem das demais TTs. O principal resultado deste trabalho indica que o mecanismo topológico não é responsável pela emergência das transições de fase no modelo. Este trabalho resultou em duas publicações (Risau-Gusman, Ribeiro-Teixeira, Stariolo, Phys. Rev. Lett. 2005; idem, J. Stat. Phys. 2006).

Na Parte II desta tese, investigou-se a ocorrência de uma fase de vidro a baixas temperaturas, em um modelo bidimensional, sem desordem congelada, mas frustrado por interações competitivas em escalas de distância distintas, denominada fase de *stripe-glass*. O cálculo da entropia configuracional do modelo é baseado em um método aplicado a sistemas frustrados sem desordem congelada devido a Westfahl, Schmalian e Wolynes. A entropia configuracional como função da temperatura e parâmetros do modelo pode ser obtida a partir da expansão para a energia livre dentro da aproximação auto-consistente de campo blindado (*self-consistent screening approximation*, SCSA), proposta por Bray. A fase de *stripe-glass*, quando ocorre, está ligada à mobilidade dos defeitos no sistema, e é caracterizada pela ocorrência de uma correlação a dois tempos finita no limite assintótico $t - t' \rightarrow \infty$, abaixo da transição para o regime de dinâmica lenta. O método aplicado ao modelo bidimensional estudado resulta em uma entropia configuracional nula para qualquer temperatura porque a correlação entre réplicas distintas (que corresponde à correlação dinâmica), neste modelo, é sempre nula. Conclui-se assim que não ocorre fase de vidro em qualquer temperatura no modelo estudado.

Abstract

This thesis is divided into two parts. In Part I a verification of the Topological Hypothesis (TH) on the ferromagnetic Spherical Model is presented. This hypothesis suggests a new approach to phase transitions (PTs), based on the recently proposed idea that the mechanism at the origin of these phenomena might be a suitable topology change in a system's configuration space at its phase transition point. Within a topological analysis of the Spherical Model's configuration space, one suggests that the TTs which are relevant to the thermodynamic system's critical behavior are characterized by non-analyticities of some given topological invariants. From the comparison between thermodynamics and topology, one concludes that such TTs do *not* coincide with the PTs occurring in the model. Furthermore, no "abrupt" topological discontinuity could be associated to the model's PTs, i. e., the TTs occurring at the thermodynamic critical points do not display any salient feature which identify those amongst the other TTs. The main result of this work indicates that the topological mechanism is not responsible for the emergence of the phase transitions in the model. This work has resulted in two publications (Risau-Gusman, Ribeiro-Teixeira, Stariolo, Phys. Rev. Lett. 2005; idem, J. Stat. Phys. 2006).

In Part II of the thesis, one has investigated the occurrence of a glassy phase in a two-dimensional system, without quenched disorder, but frustrated by the competition of interactions on different length scales. The configurational entropy is computed through a method applied to frustrated systems with no quenched disorder, due to Westfahl, Schmalian and Wolynes. Introducing replicas through averaging over a pinning field, and within Bray's self-consistent screening approximation, one is able to compute the system's configurational entropy as a function of temperature and the model parameters. The stripe-glass phase, when it occurs, is connected to the appearance of a finite long-time correlation function in the system, in the asymptotic limit $t - t' \rightarrow \infty$, and below the temperature of a crossover to the slow dynamics regime. The asymptotic limit of the two-times dynamic correlation function is related to the mobility of defects on the sample and is identified with finite off-diagonal correlations in replica space. Within this approach one finds no finite contribution for the correlation between distinct replicas. Therefore, one concludes that glassiness does *not* emerge at any temperature in the aforementioned model.

Preâmbulo

Na Parte I desta tese, apresenta-se uma verificação da Hipótese Topológica (HT) sobre o Modelo Esférico ferromagnético. Esta hipótese sugere uma nova abordagem a transições de fase termodinâmicas (TFs), baseada na idéia recentemente proposta de que o mecanismo na origem das TFs seja uma transição topológica (TT) adequada do espaço de configurações de um sistema ocorrendo na energia termodinâmica crítica [1–3]. Caracteriza-se a topologia do espaço de fases do Modelo Esférico de Berlin-Kac [4] no contexto da HT, para spins distribuídos em uma rede hipercúbica de dimensão inteira d . Para campo externo nulo, pôde-se caracterizar a topologia exatamente, no nível da homotopia. Encontrou-se que, embora ocorra um contínuo de TTs nas variedades correspondentes, para $d \geq 3$ ocorrem descontinuidades abruptas em certas funções topológicas que poderiam ser associadas às transições de fase que ocorrem no nível termodinâmico. Mostrou-se que estas transições topológicas, entretanto, não coincidem com as transições de fase, e que ademais nenhuma descontinuidade topológica "abrupta" pôde ser associada aos pontos onde ocorrem transições de fase no modelo. Em contraste com o que ocorre com a versão de campo médio do Modelo Esférico, mostrou-se que estas descontinuidades topológicas são acessíveis ao sistema termodinâmico. Conclui-se assim que, mesmo neste sistema com interações de curto alcance, o mecanismo topológico não parece ser responsável pela emergência da transição de fase. Analisou-se igualmente o caso de uma rede de spins conectados a um número macroscópico de vizinhos (mas não à totalidade dos spins na rede), onde se encontrou que, de maneira análoga aos resultados encontrados para o modelo em campo médio [5], neste caso a Hipótese Topológica parece valer: a transição de fase coincide com o ponto de acumulação das transições topológicas presentes no espaço de fases. Considerou-se também a questão da equivalência de ensembles no modelo esférico com interações a vizinhos próximos, de relevância na presente análise. Este trabalho resultou em duas publicações [6, 7].

Apesar da validade limitada da HT com respeito a TFs de equilíbrio, é outrossim um fato notável que a topologia da superfície de energia livre tem um papel central no comportamento dinâmico de sistemas desordenados, tanto com desordem congelada como com desordem auto-induzida, como mostrado na literatura [8–16]. Em particular para sistemas que sofrem transições ou mudanças de regime (*crossovers*) dinâmicos, como vidros de spin descontínuos (por exemplo o modelo p -spin esférico ou discreto) e vidros estruturais, a topologia da superfície de energia potencial é determinante. Para o p -spin esférico, resultados numéricos apontam que a transição dinâmica seja caracterizada pela ordem dos pontos de sela que vai a zero (marcada pela ocorrência de autovalores nulos do Hessiano da energia potencial) na vizinhança desta transição (definida pela temperatura de *Mode Coupling*)¹. A semelhança entre vidros de spin descontínuos (campo médio) e sistemas em dimensão finita e com desordem auto-induzida, como vidros estruturais, permite estabelecer tal relação entre topologia e a transição vítrea nestes últimos. Diversas propriedades de sistemas desordenados ou com dinâmica lenta estão estreitamente relacionadas a propriedades topológicas da superfície de energia no espaço de configurações, como a fragilidade de um sistema formador de vidro, processos de difusão em líquidos superresfriados, a temperatura efetiva em relações de flutuação dinâmicas. Em particular, esta relação estreita entre a topologia da superfície de energia livre e os comportamentos dinâmico e termodinâmico de sistemas desordenados é evidenciada, por exemplo, na semelhança entre a entropia configuracional em sistemas desordenados de um lado, e o logaritmo da característica de

¹Vale notar que esta hipótese é construída sobre evidências numéricas (ver uma análise crítica desta hipótese em [17]).

Euler associada aos pontos estacionários da energia no espaço de parâmetros de ordem microscópicos - ou graus de liberdade sob um processo de *coarse-graining* parcial -, de outro.

Com esta motivação, estuda-se, na Parte II desta tese, a ocorrência de uma fase de vidro a baixas temperaturas, em um modelo bidimensional, sem desordem congelada, mas frustrado por interações competitivas em escalas de distância distintas. A competição de interações em diferentes escalas de distância pode estabilizar fases moduladas, caracterizadas por uma grande variedade de padrões mesoscópicos. A frustração induzida por este tipo de competição pode também estabilizar uma fase de vidro nestes sistemas, uma fase *stripe-glass*. É sabido que a fase *stripe-glass* ocorre em diversos sistemas tridimensionais [18–24]. Evidências experimentais sugerem a ocorrência de uma fase de vidro também em duas dimensões, por exemplo, em filmes ferromagnéticos dipolares [25, 26]. Esta é uma questão relevante, já que o mecanismo de estabilização de um vidro em duas dimensões é fundamentalmente distinto do mecanismo em três dimensões. O cálculo da entropia configuracional é baseado em um método aplicado a sistemas frustrados sem desordem congelada devido a Westfahl, Schmalian e Wolynes [18, 19, 21]. As réplicas foram introduzidas integrando-se sobre um campo que quebra explicitamente a simetria, selecionando os estados metaestáveis desordenados. A entropia configuracional como função da temperatura e parâmetros do modelo pode ser obtida a partir da expansão para a energia livre dentro da aproximação auto-consistente de campo blindado (*self-consistent screening approximation*, SCSA), proposta por Bray [27]. A fase de *stripe-glass*, quando ocorre, está ligada à mobilidade dos defeitos no sistema, e é caracterizada pela ocorrência de uma correlação a dois tempos finita no limite assintótico $t - t' \rightarrow \infty$, abaixo da transição para o regime de dinâmica lenta. O esquema de réplicas aplicado a modelos sem desordem congelada permite obter, no contexto de um formalismo estático, informações sobre a dinâmica (assintótica) do sistema, dado que a correlação dinâmica no limite assintótico é dada pelos elementos fora da diagonal da matriz de correlação no espaço de réplicas, isto é, pela correlação entre réplicas distintas. Resulta para o modelo bidimensional frustrado estudado uma entropia configuracional nula para qualquer temperatura, pois a correlação entre réplicas distintas, neste modelo, é sempre nula. Conclui-se assim que não há fase de vidro a qualquer temperatura no modelo estudado.

Parte I

Hipótese Topológica sobre Transições de Fase: Modelo Esférico

Introdução

Transições de fase, do ponto de vista fenomenológico, são definidas como mudanças nas propriedades físicas de sistemas.

O primeiro tipo de transições estudado foram as transições de fase termodinâmicas (TFs), isto é, aquelas envolvendo mudanças nas propriedades de equilíbrio (térmico e mecânico) de sistemas macroscópicos. Tais fenômenos podem ser caracterizados, do ponto de vista matemático, pela perda de analiticidade de funções termodinâmicas - energia livre de Gibbs, por exemplo - com respeito à temperatura, ou outro parâmetro intensivo. Esta perda de analiticidade ocorre quando a equação de estado do sistema viola os critérios de estabilidade termodinâmica, no ponto da transição, que é definido pelos parâmetros intensivos. Um resultado de grande importância foi a prova do teorema que determina a necessidade de uma TT coincidindo com o ponto de transição de fase em sistemas com potenciais estáveis, confinantes e de curto alcance [28]. Em sistemas com potenciais de curto alcance, entretanto, o conjunto de valores de v correspondentes a TTs se torna denso na vizinhança da TF, e as implicações do teorema se tornam de certa forma inócuas. Ainda assim, o resultado parece sugerir que transições topológicas são, no mínimo, um dentre os eventuais mecanismos fundamentais na origem de uma transição de fase nesta classe de potenciais. A determinação, se possível, de um critério de suficiência relacionando TTs e TFs estabeleceria a topologia como *único* mecanismo na origem de transições de fase. Verificando-se esta possibilidade, esperar-se-ia poder relacionar *diretamente* quantidades topológicas das subvariedades de energia potencial M_v - invariantes topológicos - a quantidades termodinâmicas do sistema correspondente. Esta talvez seja a principal motivação teórica e prática da Hipótese Topológica.

A primeira questão a ser investigada consistia em explicar como comportamentos termodinâmicos distintos para regiões adjacentes do diagrama de fases poderiam emergir a partir de uma interação microscópica *única*. A primeira teoria bem sucedida foi formulada por C. N. Yang e T. D. Lee [29,30], mostrando que a não-analiticidade das referidas funções na transição é acarretada pela ocorrência de raízes da função de partição grã-canônica no espaço de fugacidade, dado que no limite de volume² infinito estas podem tornar-se reais positivas.

Desde então, outras abordagens à origem de TFs foram elaboradas, como, por exemplo, por Dobrushin, Lanford e Ruelle, a partir do conceito de medida de Gibbs, em função da ocorrência ou não de uma medida única no sistema³.

²ou, equivalentemente, número máximo de graus de liberdade

³D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, Encyclopaedia of Mathematics and its Applications, (Addison-Wesley, New York, 1978).

Estas teorias se aplicam somente a sistemas infinitos (macroscópicos) e em equilíbrio termodinâmico. No entanto, transições mais gerais são definidas em sistemas que não obedecem a um ou outro destes requisitos. Transições dinâmicas (como, por exemplo, as vitrosas), em sistemas *fora do equilíbrio* e com tempos de relaxação muito grandes, caracterizadas por divergências em quantidades dinâmicas, começaram, a partir da década de 60, a ser amplamente estudadas, e assim, melhor compreendidas e caracterizadas. De outra parte, nos últimos anos, a pesquisa experimental em sistemas finitos, ou não macroscópicos, - mesoscópicos, nanoscópicos ou ainda em *clusters* nucleares, atômicos e moleculares - forneceu evidências de transições de fase também nestes sistemas (embora a caracterização dos fenômenos observados como transições de fase não seja unânime). Teoricamente estas evidências foram corroboradas pela possibilidade de ocorrência de não-analiticidades de entropias fora do limite termodinâmico, isto é, em sistemas finitos [31]. Neste contexto, caso seja possível unificar os formalismos de transições de fase de equilíbrio, dinâmicas e em sistemas finitos, a abordagem unificada deve ser desenvolvida na escala dos mínimos componentes relevantes à descrição, na busca por assinaturas das transições no âmbito “microscópico”. Primeiramente, porque o processo de mediação na mecânica estatística, sob a suposição fundamental de ergodicidade da dinâmica microscópica dos sistemas, suprime informações sobre a co-dependência entre a dinâmica⁴ e o comportamento termodinâmico observado. Assim, o estabelecimento de uma relação entre dinâmica e comportamento termodinâmico se pode dar somente em um nível “anterior” a médias e à definição de ensembles⁵. Depois, porque, para sistemas finitos, muito distantes em escala do limite termodinâmico, pouco ou nenhum sentido têm as médias estatísticas de ensembles.

Outrossim, uma pergunta que motiva o estudo de possíveis assinaturas de TFs no âmbito de espaços de graus de liberdade microscópicos é acerca da possibilidade de determinar-se a ocorrência de transições de primeira ordem, contínuas, ou nenhuma transição já no nível do Hamiltoniano microscópico do sistema.

Motivado pelo panorama acima exposto, o presente trabalho tem como tema central a chamada Hipótese Topológica (HT). Esta hipótese sugere uma nova abordagem a transições de fase termodinâmicas, apoiada na idéia recentemente proposta de que o mecanismo na origem destas seja uma quebra de difeomorficidade *adequada* de subvariedades do espaço de configurações dos sistemas no ponto da transição. Embora se saiba que nem toda transformação descontínua ou não analítica (*não-difeomórfica*) na topologia está ligada a uma TF, foi provado recentemente para uma classe de modelos que transições topológicas (TTs) são necessárias na presença de TFs - de primeira e segunda ordem, pelo menos [28]. A HT se aplica a sistemas macroscópicos, descritos por Hamiltonianos clássicos, em um espaço de coordenadas e momenta contínuos, e já foi confirmada em outros modelos, em especial o modelo XY e o modelo *k*-trigonométrico, ambos em aproximação de campo médio.

A primeira parte desta tese apresenta a verificação da HT sobre o Modelo Esférico ferromagnético de curto alcance, e é uma continuação do trabalho realizado durante o estágio de Mestrado, em que a mesma verificação foi realizada sobre o Modelo Esférico ferromagnético em campo médio [5, 32]. A termodinâmica do Modelo

⁴No regime de dinâmica lenta, esta é dominada pela topologia e geometria da superfície de energia livre em um espaço de configurações adequado.

⁵Ou, alternativamente, com a proposição de uma medida estatística capaz de levar em conta a quebra de ergodicidade - completa ou parcial - em fases sem simetria definida - ver Parte II desta tese.

Esférico com interação de curto alcance na rede hipercúbica foi originalmente desenvolvida em [4]. O modelo apresenta transição de fase contínua (de terceira ordem, na classificação de Ehrenfest) na ausência de campo magnético externo, para redes hipercúbicas em dimensão inteira superior ou igual a 3. Na aplicação da HT ao modelo, resolveu-se exatamente, [ao nível da homotopia], a topologia do espaço de configurações, para as redes de dimensões $d \doteq 1, 2, 3$ e 4, na ausência de campo magnético externo. Neste caso, é possível mostrar que as subvariedades da família $\{M_u\}$ são continuamente retraídas a hiperesferas S^{D_u} , cuja dimensão, função do parâmetro livre u (a energia potencial média) é dada pela integral da densidade de autovalores do potencial microscópico entre o mínimo de energia potencial e u . A dimensão das hiperesferas caracteriza completamente a topologia das subvariedades M_u . O comportamento de D_u indica um *contínuo* de TTs em todo o suporte de energias potenciais u . Esta função é pelo menos $C^{\lceil (d-1)/2 \rceil}$. Uma característica distintiva para uma TT ocorrendo neste sistema supor-se-ia ser a correspondência com uma não-analiticidade da função D_u . Estas TTs, mais abruptas, são boas candidatas para representarem uma assinatura das TFs do sistema, quando as há. As descontinuidades, entretanto, em suas derivadas de ordem $\lceil (d-1)/2 \rceil$ *não* coincidem com as transições de fase observadas em $d \doteq 3, 4$. Em contrapartida, as TTs que coincidem com os pontos críticos para $d \geq 3$ não são abruptas. Os resultados, de outra parte, corroboram trivialmente o teorema acerca da necessidade de uma transição topológica na energia potencial crítica.

Ao abordar-se a topologia do sistema sob campo magnético externo, embora não se tenha caracterizado completamente a topologia das respectivas subvariedades $\{M_u\}$ para todo o intervalo relevante do parâmetro u , pôde-se mostrar que a primeira TT (no menor valor de u a apresentar TT neste caso) corresponde à transição entre dois pontos desconexos, S^0 , e uma hiperesfera de dimensão finita, ou “extensiva”, o que produz uma descontinuidade na primeira derivada da função D_u . Esta TT, presumidamente mais abrupta, *não* possui entretanto correspondência com uma TF a qualquer d , já que nenhuma transição de fase ocorre no sistema sob campo magnético finito.

Em conclusão, não se encontrou nenhum mecanismo topológico *suficiente* que origine uma TF no Modelo Esférico com interação a curto alcance. Desta maneira, parece impossível definir-se uma classe de transições topológicas que estejam em correspondência *biunívoca* com as transições de fase observadas no modelo, e, em conseqüência, a topologia das subvariedades $\{M_u\}$ não está na origem destas TFs.

A Parte I desta tese está estruturada da seguinte forma: dedica-se o Capítulo 1 a um resumo de transições de fase termodinâmicas, que constituem a motivação física deste trabalho; no Capítulo 2, faz-se uma síntese dos resultados que motivaram a elaboração da Hipótese Topológica, incluindo modelos e resultados que corroboram a proposta, e que antecederam o presente trabalho; o Capítulo 3 é dedicado à introdução do modelo esférico com interações de curto alcance, sua termodinâmica, o desenvolvimento da análise topológica e os resultados obtidos; no último capítulo apresentam-se as conclusões do trabalho, resultados mais recentes na literatura e perspectivas no âmbito da importância da topologia no comportamento dinâmico e termodinâmico de sistemas estatísticos, que motiva a seqüência do trabalho descrito na Parte II desta tese. Ao final da tese, inclui-se um Apêndice com um resumo de conceitos e definições da topologia utilizados ao longo do texto, em particular, no capítulo 3 de

resultados sobre o Modelo Esférico na rede hipercúbica.

Capítulo 1

Transições de Fase Termodinâmicas

Este capítulo apresenta um resumo sucinto sobre transições de fase, contendo aspectos destes fenômenos relevantes no contexto da Hipótese Topológica e resultados apresentados na seqüência da tese. O resumo é baseado em textos clássicos em Mecânica Estatística e Termodinâmica, como os livros de K. Huang e H. B. Callen [33, 34].

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

Um dos objetivos centrais da física estatística é caracterizar e prever as condições para a ocorrência de TFs em modelos teóricos distintos. Ao nível termodinâmico, transições de fase são matematicamente caracterizadas pela não-analiticidade² de funções termodinâmicas do sistema como função de algum parâmetro. Do

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

²Divergência da função ou de alguma de suas derivadas.

ponto de vista da física estatística, demonstrar a emergência de uma função termodinâmica singular a partir de um Hamiltoniano microscópico "bem comportado" torna-se necessário à coerência e auto-consistência da teoria. A emergência destas singularidades no limite termodinâmico já foi explicada no contexto dos ensembles grã-canônico e canônico [29,30,35]. Algumas questões, no entanto, ainda motivam a proposta da Hipótese Topológica (HT) como uma teoria alternativa para a origem fundamental de transições de fase. A primeira delas questiona a possibilidade de uma caracterização microscópica de TFs, que preceda a definição de qualquer medida estatística, isto é, independente de ensembles. Existindo esta caracterização, poder-se-ia eventualmente distinguir interações microscópicas por originarem transições de fase contínuas, descontínuas, ou nenhuma transição.

Este capítulo contém um resumo de aspectos e conceitos teóricos básicos no tema de transições de fase termodinâmicas ou de equilíbrio.

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

1.1 Condições de estabilidade/instabilidade termodinâmicas e TFs

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

A relação fundamental deve obedecer a certas condições decorrentes do princípio de máxima entropia para que expresse os estados termodinâmicos do sistema³. Este princípio exige, para os estados termodinâmicos, (além de $dS = 0$) que a entropia seja uma função côncava de seus parâmetros. Tais condições de concavidade (convexidade) são chamadas critérios de estabilidade local. Estes critérios também se aplicam na representação de energia: $U(S, V, N)$ deve ser uma função convexa de seus parâmetros para todo e qualquer estado de equilíbrio, o que equivale a um princípio de mínima energia. Para as transformadas de Legendre de U , dentre elas, $F(T, V, N)$ (energia livre de Helmholtz), tem-se⁴

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

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

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

³Este princípio, na mecânica estatística, é obtido como um resultado e é conhecido como Teorema H. Na termodinâmica corresponde à segunda lei da termodinâmica.

⁴Via de regra, os potenciais termodinâmicos obtidos a partir de transformadas de Legendre de U obedecerão a princípios de minimização em relação a seus parâmetros extensivos, e maximização em relação a seus parâmetros intensivos.

Não raro, a partir de cálculos da mecânica estatística, ou interpolação de dados experimentais, obtém-se uma função para um potencial termodinâmico, definindo uma superfície em um espaço de parâmetros adequado, em que certos pontos não são *globalmente* estáveis⁵, isto é, ou estados em que simplesmente os critérios de concavidade (respectivamente, convexidade) em relação a dado parâmetro são violados (estados termodinamicamente instáveis), ou estados em que a maximização (respectivamente, minimização) *global* em relação ao parâmetro é violada (estados metaestáveis, dado que existe outro estado mais estável termodinamicamente acessível). A região definida por tais pontos é uma região de coexistência de fases do sistema dado. Uma região de instabilidade (global) da relação fundamental, ou, equivalentemente, da função de um potencial termodinâmico acarreta, portanto, uma transição de fase.

Equação de Estado

Uma equação de estado pode ser obtida a partir de uma relação fundamental. Esta é uma relação funcional entre variáveis de estado do sistema, P , V e T , por exemplo, no caso de sistemas fluidos, que reduz o número de graus de liberdade independentes na sua descrição. As soluções da equação de estado serão o conjunto de pontos $\{(P, v, T)\}$ (sendo $v = V/n$, o volume molar do sistema) dos estados de equilíbrio do sistema. Os respectivos diagramas de fases serão as projeções nos planos $P-v$, $T-P$, ou $v-T$ dos pontos em que o sistema sofre transição de fase e/ou onde há coexistência de diferentes fases. A fase que é realizada na natureza é aquela que minimiza a energia livre para P e T fixos.

Regra de Gibbs

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

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

que define uma curva $P = P(T)$ no diagrama de fases, a curva de coexistência. Para o sistema puro, três fases só podem coexistir em um único ponto (P, T) do plano $P-T$, chamado ponto triplo. O sistema não pode existir em mais de três fases a mesma temperatura e pressão⁶. Em geral, para um sistema composto de r diferentes tipos de partículas, teremos no máximo $r + 2$ fases coexistindo, diagramas de fases de dimensão maior, *superfícies* de coexistência, etc.

A igualdade dos potenciais químicos de duas fases diferentes para cada componente do sistema corresponde

⁵O critério mais geral, que deve vigorar na relação fundamental, é o de estabilidade *global*, donde o conceito de estados globalmente estáveis. A construção de Maxwell garante que também o critério de estabilidade global seja obedecido.

⁶O problema de coexistência para mais de três fases se torna então superespecificado.

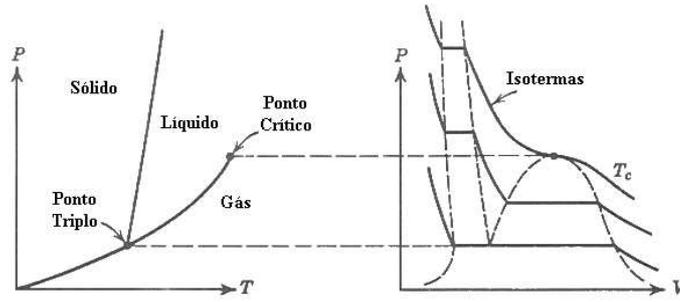


Figura 1.1: Diagramas P-T e P-V de um fluido típico. No diagrama P-V, as isotermas expressam os estados estáveis do sistema. [33]

à condição de continuidade nas derivadas da energia livre conveniente em relação a n_j :

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

onde n_j é o número molar do respectivo componente, e T_t é a temperatura da transição entre as fases de alta temperatura ($T \rightarrow T_t^+$) e a de baixa temperatura ($T \rightarrow T_t^-$). A energia livre acima referida é aquela cujas variáveis naturais, exceto $\{n_j\}$, são todas intensivas. Para um sistema PVT, é a energia livre de Gibbs, $G(T, P, \{n_j\})$.

A despeito da derivada em relação aos números molares $\{n_j\}$, nada garante que as derivadas da energia livre em relação à temperatura ou outro parâmetro intensivo devam ser contínuas. De fato, este é um aspecto importante de uma transição, tanto assim que é um dos critérios de classificação de TFs. As transições nas quais as derivadas da energia livre em relação à temperatura ou outra variável intensiva são descontínuas são denominadas transições de primeira ordem, as demais, denominadas transições contínuas.

Como $(\partial G / \partial T)_P = -S$ e $(\partial G / \partial P)_T = V$ podem não ser contínuas na transição, as funções S e V poderão sofrer uma descontinuidade neste ponto, havendo dois ou mais valores destas funções associados ao ponto da transição. Assim, o ponto da transição é definido pelo valor assumido pelas variáveis intensivas, neste caso T e P .

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

1.2 Transições de primeira ordem

Os sistemas mais conhecidos a sofrerem transições de primeira ordem são os fluidos clássicos, dos quais um exemplo familiar (embora apresente alguns aspectos atípicos, associados a suas anomalias) é a água, que pode existir na fase gasosa, líquida, e em muitas formas sólidas, que distinguem-se pela estrutura cristalina. Este tipo de transição também ocorre em sistemas em que entram em jogo interações quânticas, como supercondutores na presença de um campo magnético finito (transição fase condutora normal - fase supercondutora), fluidos binários, como a mistura de ^3He e ^4He . As transições em fluidos clássicos (sistemas PVT) serão enfatizadas aqui por serem

mais simples e familiares.

Como visto acima, transições de primeira ordem representam uma mudança descontínua no estado do sistema: o volume molar v e a entropia molar s variam descontinuamente através da curva de coexistência. Estas transições são marcadas por regiões finitas de instabilidade nas equações de estado ou potenciais termodinâmicos correspondentes.

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

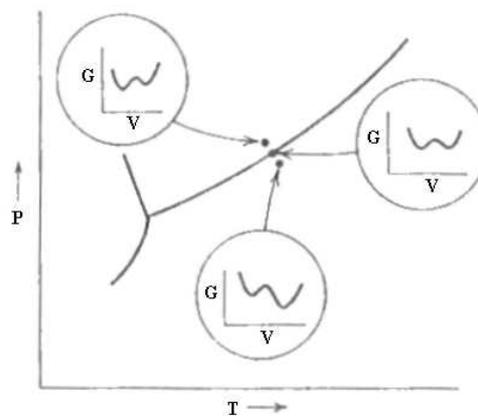


Figura 1.2: Comportamento de G em uma transição de primeira ordem. Abaixo da transição, $T < T_i$, o estado termodinâmico é v_0 , v_1 é um estado metaestável. Em $T = T_i$, os mínimos v_0 e v_1 correspondem a energias iguais, e as duas fases coexistem. Para $T > T_i$, o mínimo estável muda bruscamente de v_0 para v_1 , através de T_i [34].

As flutuações de um observável do sistema em torno de seu equilíbrio (na transição) são profundamente influenciadas pelos detalhes (metaestabilidades e/ou instabilidades) da relação fundamental, o seu valor médio, no entanto, reflete apenas o estado de equilíbrio (mais) estável. Na região de coexistência as flutuações se tornam maiores devido à diminuição da barreira, mas não se tornam particularmente grandes devido ao *calor latente*, que representa uma barreira ainda finita entre as duas fases em equilíbrio, e atua como um mecanismo “amortecedor” das flutuações.

Nesta região, de instabilidade, a equação de estado fornece alguns pontos que não correspondem a estados de equilíbrio estável do sistema - alguns correspondem a estados metaestáveis, por terem energia livre maior, violando o critério de estabilidade global, mas não o local, outros correspondem a estados espúrios, não físicos, porque violam o critério de estabilidade local. Da isoterma (figura 1.3, gráfico à direita), em cada valor de P em que a função $g = G/V$ é “multivaluada”, o princípio de mínimo para o potencial de Gibbs seleciona o menor valor de g correspondente.

Sobre a mesma isoterma, identificam-se estados de um lado da curva de coexistência (estados R, Q, O , local e globalmente estáveis, pertencentes à fase I) e de outro (estados D, C, B , local e globalmente estáveis,

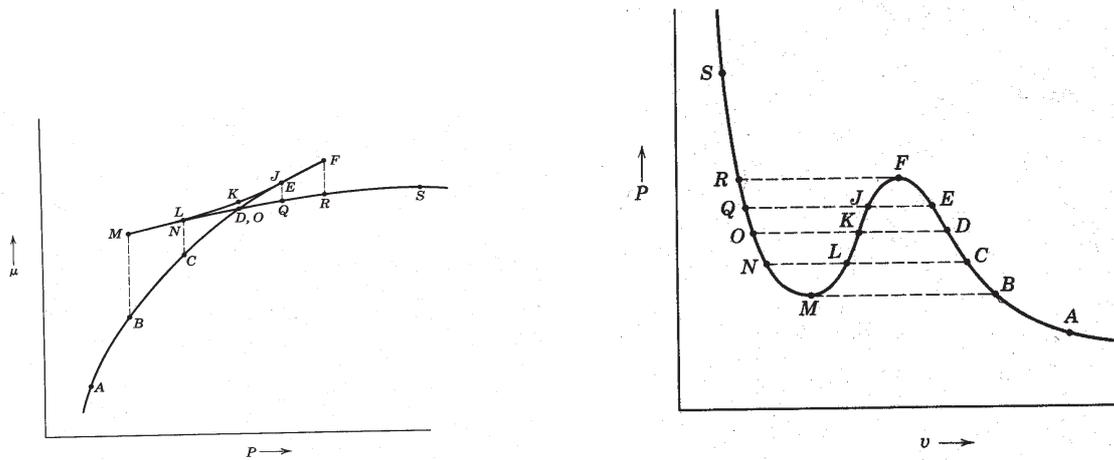


Figura 1.3: À esquerda: Isoterma $\mu \times P$. Os estados de equilíbrio são aqueles que minimizam $\mu = g = G/V$ para dado P . À direita: Isotermas $P \times v$ resultantes de uma equação de estado instável de um fluido clássico. Os estados O a M e F a D são localmente estáveis, mas globalmente instáveis. Os estados M a F são localmente instáveis [34].

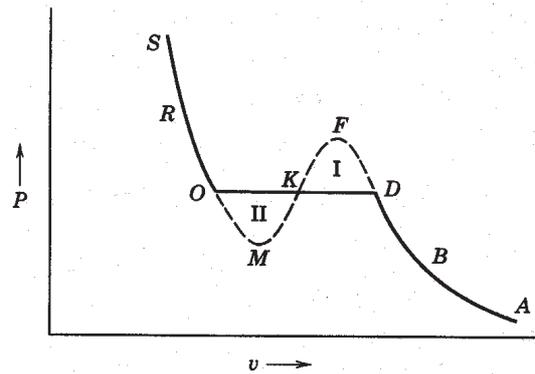


Figura 1.4: Isoterma estável (curva cheia) obtida a partir da isoterma instável (curva pontilhada) através da construção de Maxwell no diagrama $P-v$ [34].

pertencentes à fase II), estados localmente instáveis (estados L, K, J , pertencentes ao ramo não-côncavo da energia livre), e estados metaestáveis, ou apenas localmente estáveis (estados N, M, F, E). Aqueles estados estáveis que ademais correspondem a valores idênticos de energia livre, onde os dois ramos côncavos da energia livre se interceptam, encontram-se sobre a curva de coexistência (estados O e D). Quando a isoterma cruza a curva de coexistência no diagrama $P-T$ (linha vertical), a curva dos estados termodinâmicos, no diagrama $P-v$, apresenta um segmento de reta horizontal entre os estados D (volume específico da fase I) e O (volume específico da fase II). Em D (O) a isoterma $g(P)$ cruza sobre si mesma e a derivada da curva estável é descontínua. Para determinar, no diagrama $P-v$, a que pressão e volume específico correspondem estes estados, entre os quais ocorre a transição, se faz uso da continuidade do potencial de Gibbs. Sendo $dg = -s dT + v dP$ para um sistema fechado, e sobre a isoterma, $dT = 0$, temos $g_O - g_D = \int_D^O v(P) dP = 0$ e, separando a integral sobre a isoterma em integrais entre

os estados intermediários, e rearrajando convenientemente os termos, obtém-se a condição:

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

que representam as áreas orientadas sob as curvas DF , FK , MK e MO em um diagrama $v-P$, e a equação acima corresponde a igualar as áreas I e II indicadas na figura. Esta é a construção de Maxwell. Os estados E , F , M e N , localmente estáveis ou metaestáveis, são estados físicos possíveis, e eventualmente uma amostra sofrerá flutuações que o levem, por muito pouco tempo em geral (mas por vezes, por tempos bastante longos), a estes estados.

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

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

onde s^I e s^{II} estão para as entropias molares da fase I e II, respectivamente, no ponto da transição, T_t . O calor latente está ligado à diferença nas entropias das duas fases, e portanto ligado ao grau de ordenamento das moléculas em uma e outra (fase). Pode-se dizer que a emissão de calor durante a transição de primeira ordem reflete a reorganização microscópica do sistema: a importância da energia de ligação entre as moléculas frente à sua energia térmica se torna maior na fase de baixa temperatura em relação à fase de alta temperatura, e isto se dá bruscamente ao atravessar-se a curva de coexistência. É possível mostrar também que o calor latente é sempre positivo (absorvido) na transição da fase de baixa para a de alta temperatura.

Da isoterma estável da figura (1.4), vê-se que o volume específico médio do sistema assume todos os valores entre O e D , mas a parcela do sistema na fase gasosa estará em O , e a parte líquida, em D ⁷, isto é, o sistema será inhomogêneo devido à separação de fases. Observa-se também que a compressibilidade do sistema a temperatura constante, $\kappa_T = -1/V(\partial V/\partial P)_T$, diverge como uma delta de Dirac na transição (além de sofrer uma descontinuidade: $\lim_{P \rightarrow P_t^+} \kappa_T \neq \lim_{P \rightarrow P_t^-} \kappa_T$), já que o volume específico de uma fração do sistema pode sofrer uma variação finita sem variação da pressão do sistema. Isto, porém, não gera flutuações indefinidamente grandes no sistema (enquanto houver quantidades das duas fases coexistindo), porque, havendo uma variação infinitesimal de pressão no sistema, o vapor que em decorrência se condensa emite calor específico, o que aquece o sistema, tendendo a voltar para o estado de equilíbrio inicial. É neste sentido que o calor latente se torna um mecanismo de “amortecimento” para flutuações no sistema.

⁷Se uma fração x do número total de mols da substância encontra-se na fase I, o volume específico médio do sistema será dado por: $v = x v_O + (1 - x) v_D$.

1.3 Transições contínuas

Indo sobre a curva de vaporização no diagrama $P-T$ (figuras (1.1) e (1.5)), no sentido de temperatura (e/ou pressão) crescente, as fases líquida e vapor se distinguem cada vez menos⁸. O calor latente ℓ , assim, vai diminuindo, e, se o sistema possui o volume específico adequado, v_c , ℓ vai continuamente a zero, no ponto terminal da curva, que é um ponto crítico, definido por (T_c, P_c, v_c) . A partir deste ponto, líquido e vapor não são mais fases distintas. Pontos críticos são aqueles em que ocorrem transições contínuas. Contrariamente ao que poderia sugerir o exemplo apresentado - do diagrama qualitativo de um fluido típico -, transições contínuas não ocorrerão sempre associadas a transições de primeira ordem.

Além dos fluidos clássicos, também sofrem transições contínuas alguns materiais paramagnéticos (transições para fase ferromagnética ou anti-ferromagnética), fluidos quânticos, na transição da fase líquida normal para a superfluida, como ^3He e ^4He , misturas de fluidos imiscíveis em certa região de temperatura e pressão (fluidos binários), como por exemplo as misturas de ^3He e ^4He ou metano e hexano, e supercondutores na ausência de campo magnético externo (transição da fase condutora normal para a supercondutora), a transição entre a fase de vórtices livres e de pares de vórtices ligados no modelo XY bidimensional.

Considerações gerais

O comportamento do potencial de Gibbs em função de v ao longo da curva de vaporização até seu ponto crítico e além deste, ilustrando a natureza contínua da transição do fluido no ponto crítico, é dado na figura (1.5).

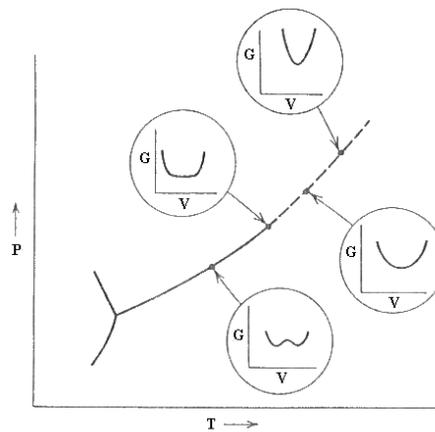


Figura 1.5: Comportamento de G em uma transição contínua. Em $T < T_c$, a energia possui dois mínimos diferentes e equivalentes, $v_g \neq 0$ (vapor) e $v_l \neq 0$ (líquido). Em T_c , os mínimos coincidem em $v_g = v_l = v_c$, formando um mínimo “achatado” (flutuações divergentes). Para $T > T_c$, o mínimo v_c é único e “normal”. [34]

Transições contínuas não envolvem calor latente, o que é logo percebido através de (1.6), já que a derivada em T do potencial de Gibbs é contínua nestas transições. Como conseqüência, o estado do sistema muda de forma contínua através do ponto da transição - não há barreira de energia entre as “fases“. O mecanismo de

⁸A distinção entre as duas fases se dá na diferença entre as respectivas entropias molares, volumes específicos, etc.

“amortecimento” das flutuações no estado do sistema (flutuações no volume específico v , para os fluidos clássicos) conduzido pelo calor latente é ausente, sendo este fato responsável pela ocorrência de flutuações divergentes. Esta divergência das flutuações no ponto crítico, juntamente com outros fenômenos distintivos de transições contínuas, estão agregados sob a denominação de *fenômenos críticos*.

No entorno de um ponto crítico as funções termodinâmicas do sistema poderão em geral ser descritas em termos de uma variável macroscópica apenas (função definida dos parâmetros independentes), denominada *parâmetro de ordem*, que deve ser identicamente nula em uma das fases (em geral na fase de maior temperatura). O parâmetro de ordem estará relacionado com a quebra de simetria envolvida na transição, o que em certos sistemas, como é o caso nos vidros, pode não ser evidente. A identificação desta variável é particular a cada sistema, e sua escolha pode não ser única.

A transição paramagneto/ferromagneto

O paradigma de transição contínua é a transição paramagneto/ferromagneto.

O Modelo Esférico estudado no capítulo 3 fornece um exemplo teórico da transição paramagneto/ferromagneto. Outro exemplo é o modelo de Ising. Exemplos desta transição em sistemas reais são encontrados em materiais como ferro, níquel e cobalto. Acima de T_c , o ferro é um paramagneto, isto é, possui magnetização (média) $\langle \mathbf{M} \rangle = \sum_{i=1}^N s_i = 0$ na ausência de campo magnético externo \mathbf{B} , e, na presença de um campo \mathbf{B} fraco, sua magnetização média por spin obedece a $\langle \mathbf{m} \rangle = \mu \mathbf{B}$ ($\mu > 0$ é a constante de permeabilidade magnética), respondendo linearmente ao campo. Abaixo de T_c , o sistema é um ferromagneto, possui magnetização finita mesmo em campo externo nulo, e a magnetização sob ação de $\mathbf{B} \neq 0$ varia a fim de alinhar-se com o campo, sendo dada por: $\langle \mathbf{m} \rangle = \langle \mathbf{m}_0 \rangle + \mu \mathbf{B}$, onde $\langle \mathbf{m}_0 \rangle$ é a *magnetização espontânea*. Para este sistema, o parâmetro de ordem é o vetor magnetização média, $\langle \mathbf{M} \rangle$, ou, equivalentemente, $\langle \mathbf{m} \rangle$. Muitos modelos descrevem transições paramagneto/ferromagneto, por exemplo: o modelo de Heisenberg, o modelo de Ising, o modelo XY (Heisenberg clássico), o modelo esférico, o modelo gaussiano.

O ponto crítico que separa as fases ferromagnética e paramagnética também ocorre associado a uma linha de transições de primeira ordem no plano HT (onde H representa o campo magnético externo), definida por $H = 0, T \leq T_c$.

Considera-se uma rede d -dimensional de átomos com valor esperado do momento de spin não-nulo. O Hamiltoniano - excluída a eventual contribuição cinética - típico de um ferromagneto será dado por

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

onde s_i , a variável de spin no sítio i , pode ser um vetor ou escalar, uma variável contínua ou discreta, ou representar um estado quântico, obedecendo a uma álgebra de Lie dada. Os somatórios $\sum'_{i,j}$ podem ser tomados entre sítios primeiros vizinhos, vizinhos em segunda ordem, ou eventualmente de cada spin com todos os demais. Os

elementos J_{ij} da matriz de interação são positivos ou nulos, H_i representa um campo magnético externo que pode ser uniforme ou não, e se acopla linearmente com o spin s_i .

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

Em campo nulo, quando aquecemos o sistema desde $T < T_c$, o módulo da magnetização média vai diminuindo continuamente até chegar a zero em T_c , tornando-se nulo para $T > T_c$. Sua derivada, porém, é infinita em $T = T_c^-$ e cai para zero em $T = T_c^+$, possui portanto uma descontinuidade infinita (figura (1.6)). Este é o comportamento típico do parâmetro de ordem na vizinhança da transição contínua. A presença de um campo finito destrói a transição ferromagneto/paramagneto, pois neste caso a magnetização é uma função analítica da temperatura.

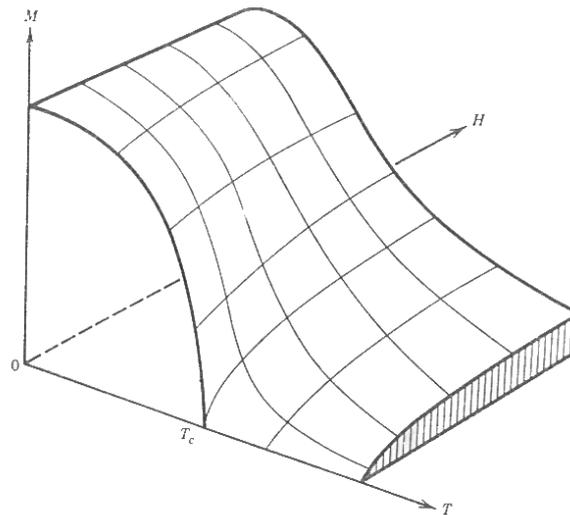


Figura 1.6: Diagrama $M-H-T$ de um paramagneto. O sistema sofre transição em $H = 0$. A superfície se estende simetricamente para $M, H < 0$. Em $H = 0$ região abaixo da curva $M(T)$ é inacessível [33].

Simetria

Uma transição contínua sempre separa duas fases com simetrias espaciais diferentes. No caso acima descrito, o estado do sistema na fase paramagnética é rotacionalmente invariante, enquanto que no estado de ferromagneto, há uma direção preferencial⁹ definida pelo vetor da magnetização espontânea e a invariância rotacional é assim destruída. A redução de simetria na fase de baixa temperatura, processo denominado *quebra espontânea*

⁹Tal direção é determinada pelas flutuações aleatórias dos spins enquanto o magneto vai sendo resfriado em direção a T_c .

de simetria, exige para a descrição de tal fase um parâmetro adicional, o parâmetro de ordem. A fase de maior simetria possui em geral a simetria do Hamiltoniano; a fase de menor simetria, portanto, não é invariante frente a todas as transformações do grupo de simetria de \mathcal{H} . Por outro lado, a simetria do Hamiltoniano microscópico subjacente deve estar expressa de alguma forma em todo estado macroscópico daquele derivado. A maneira pela qual a simetria se manifesta nesta fase é distinta: o sistema possuirá infinitos estados estáveis equivalentes (cada um com a mesma magnetização $|\mathbf{M}|$, distinguindo-se somente pela direção espacial) transformados uns nos outros pela operação da simetria quebrada. Como classicamente o sistema pode existir somente em um dos estados, esta simetria fica “escondida” na fase de baixa temperatura. Um sistema *macroscópico* quântico também não poderá existir em uma combinação linear destes estados fundamentais porque a transição de um estado fundamental para outro é realizada por um operador que muda simultaneamente os estados de todas as partículas do sistema, e este operador não existe no limite termodinâmico. Assim, a probabilidade do sistema realizar a transição (quântica) de um estado fundamental para outro é nula.

Funções de correlação

O *teorema de flutuação-dissipação* estabelece que flutuações de certos observáveis estão relacionadas a uma “susceptibilidade” apropriada, que lhes corresponde. Para as flutuações de energia, por exemplo, tem-se

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

onde k_B é a constante de Boltzmann. Sendo $U = \langle \mathcal{H} \rangle$ extensiva, $\delta U/U \propto 1/\sqrt{N}$, e as flutuações na energia vão a zero no limite termodinâmico.

Porém, quando o calor específico c_v diverge, como acontece no ponto crítico de uma transição de segunda ordem, as flutuações $(\delta U)^2$ se tornam importantes. A ordem de uma transição remete à classificação original de Ehrenfest para transições de fase, e é identificada como a mais baixa ordem da derivada do potencial a divergir no ponto da transição. O calor específico, como se sabe, é dado por: $c_v = -\frac{T}{N} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{V,N}$, donde sua divergência para $T = T_c$.

Assim, além dos valores esperados dos observáveis termodinâmicos, próximo a uma transição contínua, outras funções, relacionadas a flutuações do sistema, tornam-se imprescindíveis a sua descrição. Supõe-se que o parâmetro de ordem seja definido como a média termodinâmica de um campo, vetorial ou escalar, que fornece a densidade de momento magnético (magnetização), $m(\mathbf{x})$:

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

A função de correlação (a dois pontos) é definida pelo segundo momento desta densidade de momento magnético:

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

De maneira a isolar a parte da correlação devida às interações entre os spins, subtrai-se a contribuição devida ao valor esperado (não-nulo) de $m(\mathbf{x})$, e define-se a função de correlação (a dois pontos) *conectada*:

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

$G_c^{(2)}$ mede a correlação espacial entre as flutuações do parâmetro de ordem em torno de seus valores esperados em diferentes pontos do sistema. Tomando-se a invariância translacional do sistema:

$$\begin{aligned} G_c^{(2)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) &= G_c^{(2)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}), \\ \langle m(\mathbf{x}) \rangle &= \langle m(0) \rangle, \quad \forall \mathbf{x}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

a sua isotropia

$$G_c^{(2)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = G_c^{(2)}(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|), \quad (1.13)$$

e através de suposições simples, pode-se mostrar que esta função apresenta as seguintes propriedades assintóticas na vizinhança do ponto crítico - para $x = |\mathbf{x}|$ grande e $|t| \equiv |T - T_c|/T_c \ll 1$ ($|t| \neq 0$):

$$G_c^{(2)}(x) \sim \frac{e^{-x/\xi}}{x^{d-2+\eta}}, \quad (1.14)$$

onde ξ é um comprimento característico, o *comprimento de correlação*. A equação acima indica que próximo, mas *não sobre* T_c , o parâmetro de ordem flutua em blocos (de igual orientação de spin, aproximadamente) de dimensões lineares menores ou iguais a ξ . A ocorrência de blocos maiores é extremamente rara, já que para x suficientemente grande, a equação (1.14) é dominada pela exponencial que decai rapidamente a valores próximos de zero para $x \gtrsim \xi$. A dependência de ξ com a temperatura (que pode ser empiricamente obtida a partir do comportamento experimental de quantidades correlatas), na região em torno de T_c ($|t| \ll 1$), é:

$$\xi \sim t^{-\nu}, \quad (1.15)$$

onde $\nu > 0$ é um *expoente crítico*. Assim, em $t = 0$, ξ diverge e o comportamento assintótico da função de

correlação (1.14), exatamente sobre o ponto crítico, passa a ser dominado pela lei de potência em x :

$$G_c^{(2)}(x) \sim \frac{1}{x^{(d-2+\eta)}}, \quad t = 0, \quad x \text{ grande}, \quad (1.16)$$

onde d é a dimensão do sistema, e η é outro expoente crítico. É uma suposição implícita da teoria a de que a presença da transição de fase domina a fenomenologia do sistema na vizinhança do ponto crítico. Isto significa que t é o único parâmetro relevante e, através de (1.15), que ξ é o único comprimento característico do sistema nesta região dos parâmetros termodinâmicos. A divergência de ξ na transição, portanto, sugere que todas as funções termodinâmicas neste ponto tenderão assintoticamente a funções homogêneas de x , como ocorre com a função de correlação (1.16). Isto equivale a definir a região crítica (vizinhança de $t = 0$) como aquela em que ξ seja suficientemente grande, de modo que o comportamento assintótico das funções começa a ser dominado pela lei de potência, deixando de ser dominado pela exponencial. A divergência de ξ em T_c , ademais, indica que flutuações do parâmetro de ordem em blocos de spin de qualquer tamanho ocorrem com probabilidade comparável. No ponto crítico, portanto, o comportamento do sistema é dominado por estruturas dinâmicas macroscópicas. A equação acima, (1.16), por ser uma lei de potência, expressa a *invariância de escala do sistema*¹⁰.

Além dos expoentes críticos ν e η acima definidos, que determinam a dependência de ξ e de $G_c^{(2)}$ na temperatura reduzida t , também se introduzem os expoentes α , β , γ , δ , das leis de potência caracterizando o comportamento crítico de outras grandezas termodinâmicas:

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{calores específicos} & c \sim |t|^{-\alpha}, & H = 0, \\ \text{parâmetro de ordem} & M \sim |t|^\beta, & t < 0, H = 0, \\ \text{isoterma crítica} & M \sim H^{-1/\delta}, & t = 0, \\ \text{"susceptibilidades"} & \left\{ \begin{array}{l} \chi \sim |t|^{-\gamma}, \\ \kappa_T \sim |t|^{-\gamma}, \end{array} \right. & \begin{array}{l} H = 0, t > 0 \text{ (magnetos)} \\ t > 0 \text{ (fluidos)} \end{array} \end{array} \right.$$

onde χ é a susceptibilidade magnética, função resposta da magnetização, e κ_T é a compressibilidade, função resposta do volume específico. Ambas divergem no ponto crítico nos respectivos sistemas.

Como descrito, expoentes críticos descrevem o comportamento de quantidades termodinâmicas no entorno ou sobre a temperatura crítica, e é uma característica distintiva de transições contínuas que este comportamento seja regido por leis de potência.

Um exemplo da emergência da universalidade no contexto de fenômenos críticos é através de leis, denominadas de *scaling*, que relacionam os expoentes críticos de um sistema uns aos outros:

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

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

¹⁰O resultado de uma redefinição de escala espacial $x' = x/b$ é simplesmente uma redefinição correspondente (que dependerá do expoente de escala específico) da escala da respectiva função termodinâmica $f(q' \sim x'^{D_q}) = b^{D_f} f(q \sim x^{D_q})$.

lei de Widom: $\gamma = \beta(\delta - 1)$

lei de Josephson: $vd = 2 - \alpha$.

Os expoentes críticos para um sistema específico podem ser obtidos através do grupo de renormalização ou do funcional de energia livre no formalismo fenomenológico de Ginzburg-Landau. Estes expoentes caracterizam a transição de fase do sistema e, por extensão, o próprio sistema em função do tipo de transição que sofre. De fato, no contexto do grupo de renormalização, o conceito de classes de universalidade surge naturalmente, cada sistema pertencendo a uma dada classe de universalidade dependendo de seu comportamento crítico. Esta teoria, bem como a de Ginzburg-Landau, são de extrema importância no âmbito da teoria de fenômenos críticos. Entretanto, elas não serão abordadas aqui porque fogem do escopo do trabalho.

Universalidade

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

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

1.4 Origem de transições de fase como Singularidades de Potenciais Termodinâmicos

1.4.1 Teoremas de Yang e Lee

A Hipótese Topológica (HT) propõe que, no âmbito do ensemble microcanônico, transições de fase sejam originadas por um mecanismo topológico engendrado por transições topológicas adequadas no espaço de configurações do sistema. Esta se propõe a ser uma explicação alternativa à de Yang e Lee, no ensemble grã-canônico, e à de Dobrushin, Lanford, Ruelle, no ensemble canônico, cujo estudo, espera-se, adicionará elementos à compreensão destes fenômenos. Assim, nesta seção, de maneira a situar a proposta da HT em seu contexto formal,

apresenta-se a abordagem a transições de fase por C. N. Yang e T. D. Lee [29, 30], que explica a origem de TFs através da função de grã-partição e suas propriedades.

Uma teoria sobre a origem de TFs deve conseguir explicar como um sistema regido por uma única interação microscópica pode se apresentar em fases macroscópicas marcadamente distintas. Considera-se um gás monatômico cujas partículas interagem sob o potencial:

$$U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \begin{cases} \infty, & \text{se } |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < a \\ \epsilon_{ij} & \text{se } a \leq |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \leq b \\ 0 & \text{se } |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > b \end{cases} \quad (1.17)$$

onde \mathbf{r}_i é o vetor posição da partícula de rótulo i . Este potencial genérico possui uma parte repulsiva (infinita) que expressa o volume finito das partículas e sua impenetrabilidade, $\epsilon_{ij} > -\infty$. Apesar do potencial acima ser de curto alcance, é possível generalizar esta abordagem para potenciais que decaem lentamente com a distância.

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

$$\mathcal{Q}_V = \sum_{N=0}^M \frac{Z_N}{N!} y^N, \quad (1.18)$$

onde Z_N é a parte configuracional da função de partição para N partículas (considerando um Hamiltoniano clássico, quadrático nos momenta $\{p_i\}$, a parte dos momenta é trivialmente integrada e incorporada à variável y) e y é uma função da fugacidade $z = e^{\mu/k_B T}$:

$$Z_N = \int \cdots \int_V d^3r_1 \cdots d^3r_N \exp(-U/k_B T),$$

$$y = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{\mu/k_B T}. \quad (1.19)$$

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

$$\mathcal{Q}_V = Z_0 \frac{Z_M}{M!} \prod_{i=1}^M \left(1 - \frac{y}{y_i} \right), \quad (1.20)$$

onde y_1, \dots, y_M são as raízes do polinômio \mathcal{Q} . Os coeficientes $Z_N/N!$ são todos positivos. Para V finito, portanto, as raízes não poderão ser reais positivas. Ao tomar-se o limite $V \rightarrow \infty$, o número de raízes, M , aumenta, e estas se movem no plano complexo y . Neste limite eventualmente algumas raízes tocarão o eixo real positivo, por exemplo, nos pontos $y = t_1, t_2$ na figura (1.8). Os comportamentos do sistema nas regiões $y < t_i$ e $y > t_i$ diferirão, e $y = t_i$

corresponde a uma transição de fase no sistema. A pressão e a densidade do sistema são dadas por:

$$\begin{aligned}\frac{P}{k_B T} &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \log Q_V, \\ \rho &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \log y} \frac{1}{V} \log Q_V.\end{aligned}\quad (1.21)$$

Os resultados da teoria são sintetizados pelos seguintes teoremas:

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

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

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

possuem limites analíticos em y . E neste caso, as operações $(\frac{\partial}{\partial \log y})$ e $\lim_{V \rightarrow \infty}$ comutam em R , de maneira que valerá a identidade termodinâmica:

$$\rho = \left(\frac{\partial}{\partial \log y} \right) \left(\frac{P}{k_B T} \right).\quad (1.22)$$

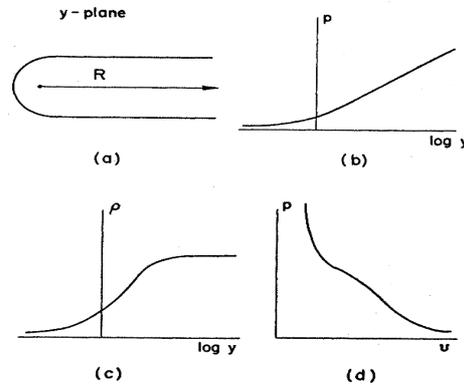


Figura 1.7: Comportamento da pressão P (gráficos (b) e (d)) e da densidade ρ (gráfico (c)), em uma região R que não contém raízes, a uma dada temperatura. P e ρ são funções analíticas de y , e a curva $P \times v = 1/\rho$ (gerada usando-se a relação $\rho(\log y)$ para eliminar o parâmetro $\log y$ da relação $P(\log y)$) é suave (gráfico (d)). [29]

A pressão P então será sempre uma função contínua e monotônica crescente de y , no entanto suas derivadas poderão ser descontínuas nos pontos em que as raízes tocarem o eixo y real positivo. Nestes pontos, a densidade ρ (equação (1.21)) claramente não será dada pela derivada da pressão em relação a y (equação (equação 1.22)). A densidade $\rho = 1/v$ será uma função monotônica crescente (e analítica) de y em uma região R livre de raízes.

Em alguns casos, entretanto, os limites pela esquerda e pela direita da derivada de P não coincidirão sobre uma dada raiz real e positiva, a derivada de P será descontínua e o sistema sofre uma transição de primeira ordem. Pode-se mostrar que ρ cresce na descontinuidade no sentido de y crescente.

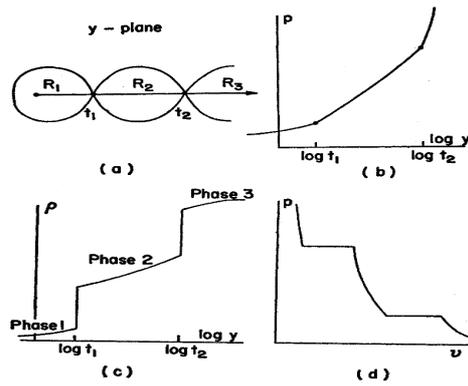


Figura 1.8: Comportamento da pressão P (gráficos (b) e (d)) e da densidade ρ (gráfico (c)), para um sistema que sofre transições de primeira ordem em $P(y = t_1, t_2)$ para uma dada temperatura. No domínio das regiões R_1 , R_2 e R_3 , as funções são analíticas. P é contínua nas transições, ρ sofre uma descontinuidade finita. Os trechos horizontais da curva em (d) são regiões de coexistência das fases “adjacentes”. [29]

À medida em que a temperatura do sistema é variada, as raízes reais e positivas se movem sobre o eixo real. Eventualmente, a uma determinada temperatura, alguma raiz pode deixar de tocar o eixo y . Nesta temperatura, T_c , o sistema sofrerá uma transição contínua, e a densidade ρ será contínua sobre a raiz. Se a densidade for contínua sobre uma dada raiz em um intervalo finito de temperaturas, tem-se uma linha de transições contínuas. Se, alternativamente, duas raízes se encontram sobre o eixo real positivo em T_0 , tem-se um ponto triplo nesta temperatura.

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

Outra abordagem à origem das transições de fase existe, no contexto do ensemble canônico, e é devida a Dobrushin, Lanford e Ruelle¹¹.

¹¹D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, Encyclopaedia of Mathematics and its Applications (idem).

Capítulo 2

A Hipótese Topológica

Este capítulo apresenta uma revisão das motivações da Hipótese Topológica, do contexto teórico em que esta se insere, de suas conseqüências, e de resultados da aplicação da Hipótese sobre modelos estatísticos que a corroboram e que não a confirmam. Ao final do capítulo se descrevem resultados mais recentes, que estabelecem rigorosamente um critério topológico-geométrico para a origem de transições de fase em certa classe de modelos, e que definem um mecanismo independente ligado à origem de transições de fase em uma classe complementar de potenciais.

As definições matemáticas usuais de transições de fase termodinâmicas são baseadas na perda de analiticidade - que rigorosamente acontece apenas no limite $N \rightarrow \infty$ - de observáveis termodinâmicos, vistas como conseqüência de singularidades nas medidas estatísticas que ocorrem na transição. Tais definições se aplicam às funções de partição canônica e grã-canônica e aos potenciais e funções termodinâmicos delas derivados. Uma definição para transições de fase de equilíbrio em sistemas Hamiltonianos, que foi introduzida há alguns anos, propõe que estas possam ser detectadas, explicadas e quantitativamente descritas pela análise da topologia e de mudanças apropriadas na topologia de subvariedades no espaço de configurações. Sob esta perspectiva, as singularidades nas medidas estatísticas seriam originadas por estas transições topológicas (TTs) nas subvariedades, que serão definidas a seguir.

Este capítulo contém uma síntese de resultados e evidências que conduzem a esta nova definição, e a justificam. O conteúdo da conjectura está contido na chamada Hipótese Topológica (HT), que será aqui apresentada, juntamente com resultados sobre modelos específicos que a corroboram [2]. Ao final do capítulo, descrevem-se resultados mais recentes que contradizem ou limitam a aplicabilidade da HT.

A conjectura se aplica a sistemas autônomos (isto é, cujos Hamiltonianos são independentes do tempo),

clássicos, confinados, com Hamiltonianos da forma

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

onde $\{q_i\}$ são as coordenadas, os N graus de liberdade do sistema, e $\{p_i\}$, os momenta conjugados ($i = 1, \dots, N$). A definição (2.1) para o Hamiltoniano restringe os sistemas estudados aos sistemas denominados *naturais*, isto é, impõe-se que a energia cinética seja quadrática nas velocidades, e que a função energia potencial $V(q)$ seja independente dos momenta. Tal definição não representa uma restrição importante. As variáveis q_i e p_i são contínuas; assim, define-se um espaço de fases contínuo para o sistema, para o qual $\{q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N\}$ constituem uma base.

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

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

que é naturalmente “folheado” pelas equipotenciais Σ_v :

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

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

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

A HT propõe, em contraste, a análise da topologia do *espaço de configurações* acessível do sistema, a subvariedade M_E (ou, de forma complementar, a topologia das subvariedades Σ_E), e investiga, assim, a existência de uma definição *microscópica* para transições de fase.

2.1 Geometrização da Dinâmica Hamiltoniana

A aplicação do formalismo da Geometria Diferencial à dinâmica de sistemas Hamiltonianos clássicos com muitos graus de liberdade ($N \gg 1$) surgiu do intuito de investigar os regimes caótico e regular no espaço de fases através da teoria ergódica.

As soluções das equações de movimento de sistemas Hamiltonianos naturais, em que estão incluídos sistemas da forma (2.1), são regidas pelo princípio de Hamilton, que impõe que tais soluções, as trajetórias naturais

dos sistemas, sejam os caminhos de integração $q = q(t)$ que extremizem o seguinte funcional:

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

onde $\mathcal{L}(q, \dot{q}) = T - V$ é o Lagrangiano do sistema (T é a energia cinética).

As geodésicas $\gamma(s)$ de uma variedade Riemanniana¹, por sua vez, são os extremos do funcional:

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

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

Uma métrica adequada para a geometrização da dinâmica Hamiltoniana é uma em que se impõe uma equivalência entre a ação de Hamilton \mathcal{S}_H (ou, alternativamente, a de Maupertuis \mathcal{S}_M) e o comprimento de arco ℓ , que mapeie as trajetórias naturais dos sistemas físicos em geodésicas de variedades Riemannianas (ou suas projeções nos subespaços adequados). Partindo-se de $\mathcal{S}_M = 2 \int T dt$, a “variedade mecânica”, identificada por M_E , é “equipada” com o tensor métrico $(g_J)_{ij} = [E - V(q)]\delta_{ij}$, (caso especial da) chamada métrica de Jacobi. Na métrica de Eisenhart [36], as trajetórias naturais, definidas como extremos de \mathcal{S}_H , são projeções das geodésicas de um espaço de configurações ampliado ($\{q^0 \equiv t, \mathbf{q} = (q^1, \dots, q^N)\}$ mais uma coordenada real q^{N+1}), que satisfazem $ds^2 = C dt^2$, $C > 0$ (escolhe-se $C = 1$), onde $ds^2 = -2V(\mathbf{q})(dq^0)^2 + a_{ij}dq^i dq^j + 2dq^0 dq^{N+1}$ ($i, j = 1, \dots, N$, e aqui $a_{ij} = \delta_{ij}$). A partir da definição das métricas, se estabelece uma relação entre os parâmetros dt da dinâmica e ds das geodésicas da variedade, e entre as equações de movimento e as equações das geodésicas.

Para se estudar a estabilidade/instabilidade das trajetórias dinâmicas investiga-se a evolução do vetor separação $\zeta^i = \tilde{q}^i - q^i$ entre duas trajetórias inicialmente próximas, isto é, especificadas por condições iniciais infinitesimalmente próximas (ver figuras 2.1). Sendo ambas trajetórias válidas do sistema, ambos $\tilde{q}^i(t)$ e $q^i(t)$ obedecerão às equações de movimento de Newton, donde a equação obedecida por ζ^i (em primeira ordem em ζ^i), é a equação da dinâmica tangente:

$$\ddot{\zeta}^i = - \left(\frac{\partial^2 V(q)}{\partial q_i \partial q_j} \right)_{q=q(t)} \zeta^j.$$

Se as soluções $|\zeta|$ crescem exponencialmente com o tempo t , a trajetória é instável, e a dinâmica, caótica.

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

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

¹Em que o elemento de comprimento de arco (quadrático) ds^2 é definido e positivo. Quando ds^2 não é sempre positivo, a métrica é pseudo-Riemanniana (por exemplo, as métricas de Eisenhart e Minkowski).

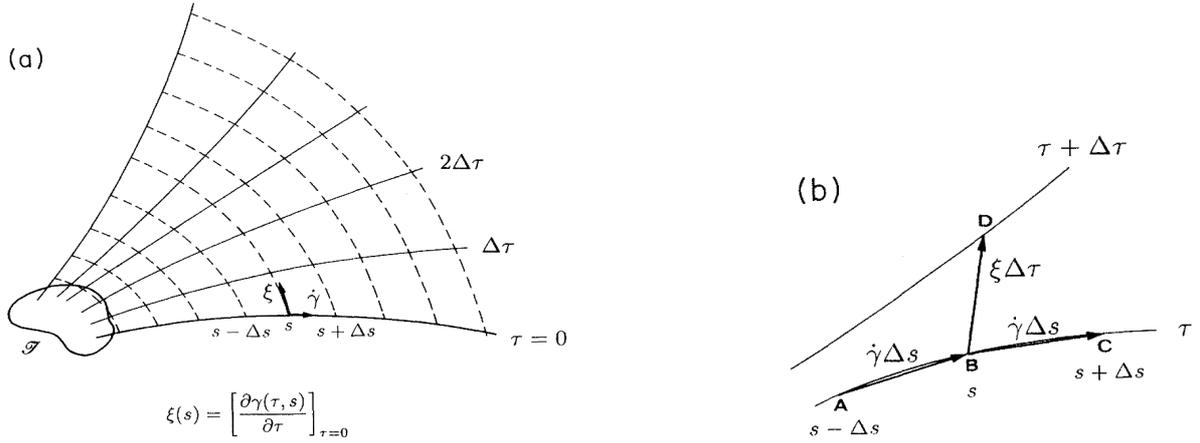


Figura 2.1: Quadro (a) à esquerda: Ilustração qualitativa de um feixe de geodésicas, parametrizado por τ inicialmente distribuídas em uma vizinhança \mathcal{J} . Quadro (b) à direita: Representação do vetor separação ξ entre duas geodésicas, soluções das equações de movimento de um dado sistema. $\xi \Delta\tau$ é a distância entre os pontos B e D, ambos correspondendo a um mesmo valor do parâmetro de comprimento de arco s [37].

onde D/ds é a derivada covariante sobre a geodésica $q(s)$ e R^i_{jkl} são as componentes do tensor de curvatura de Riemann. Da mesma forma que $|\zeta|$, a taxa de crescimento exponencial de $|J(s)|$ determinará a estabilidade ou instabilidade da geodésica. A equação de Jacobi depende apenas da curvatura da variedade, que por sua vez, dependerá da métrica $[g_{ij}]$. Usando a métrica de Eisenhart, cada componente ξ^i pode ser identificada com cada componente J^i , e a equação (2.6) se reduz exatamente à equação da dinâmica tangente:

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

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

A dinâmica caótica pode ser gerada por diversos mecanismos diferentes. Um dos mecanismos, que resulta “trivialmente” na instabilidade das geodésicas, são valores negativos da *curvatura seccional*², $K(P; \pi)$. Para a grande maioria dos modelos físicos de sistemas com muitos graus de liberdade, observa-se, no entanto, que as curvaturas seccionais $K(P; \pi)$ das variedades correspondentes são quase sempre positivas, sendo as eventuais regiões com curvatura negativa reduzidas. Ainda assim, as geodésicas são na maioria instáveis. O mecanismo responsável pelo surgimento de caos nestes casos é denominado *instabilidade paramétrica*, que ocorrerá em variedades não isotrópicas, devido à sua curvatura *variável* ao longo das geodésicas. Este é um comportamento conhecido em soluções de equações diferenciais com coeficientes variáveis no tempo. Assim, o mecanismo gerador de caos ocorrendo com maior predominância em sistemas físicos com $N \gg 1$ estará relacionado a flutuações da curvatura $K(P; \pi)$, que não sejam desprezíveis, e até mesmo da ordem de $K(P; \pi)$.

Devido à grande dificuldade que representa o sistema de equações (2.6), algumas simplificações devem ser feitas, que permitam uma análise da instabilidade das soluções J independentemente do conhecimento das trajetórias dinâmicas específicas [38]. As suposições essenciais são: (i) a variedade M_E é quase isotrópica, as

²A curvatura seccional $K(P; \pi)$ no ponto P está relacionada à “projeção” do tensor de Riemann sobre um plano π gerado por dois vetores de $T_P M$, o espaço tangente a M_E no ponto P .

componentes do tensor de Riemann ao longo de uma geodésica instável genérica podem ser aproximadas por $R_{ijkl} \sim \kappa(t)(g_{ik}g_{jm} - g_{im}g_{jk})$, onde $\kappa(t)$ é uma curvatura seccional efetiva (no caso isotrópico, a equação é exata e a curvatura seccional κ é uma constante (Teorema de Schur); (ii) no limite de N grande a curvatura efetiva pode ser modelada por um processo estocástico Markoviano, Gaussiano, onde $\langle \kappa(t) \rangle_s$ e $\langle \delta^2 \kappa(t) \rangle_s^{1/2} = \sigma_K$ são dadas pela média e flutuações médias da curvatura de Ricci³ K_R . Admitida a ergodicidade das trajetórias, faz-se $\langle \cdot \rangle_s = \langle \cdot \rangle_\mu$, onde μ é a medida ergódica natural (a **microcanônica**). Substituindo a forma aproximada para R_{ijkl} na equação (2.7), obtém-se uma equação do tipo oscilador estocástico: $\frac{d^2 \psi}{dt^2} + \kappa(t)\psi = 0$, onde ψ representa qualquer componente de J . Daí se obtém uma estimativa para o (maior) expoente de Lyapunov λ , ou a taxa de crescimento exponencial das soluções $|J|$ (no limite assintótico $t \rightarrow \infty$):

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

onde $\Lambda = \left(\sigma_k^2 \tau + \sqrt{\left(\frac{4}{3} \right)^3 k_0^3 + \sigma_k^4 \tau^2} \right)^{1/3}$ e $\tau = \tau(k_0, \sigma_K)$ é o tempo de correlação do processo estocástico.

A dinâmica de sistemas Hamiltonianos não-lineares com $N \geq 3$, via de regra, não possuirá outra integral do movimento, que não a energia. O fato do número de integrais de movimento ser muito menor que N está relacionado à exploração e acessibilidade do espaço de fases pelas trajetórias (integrais de movimento estabelecem vínculos entre coordenadas e momenta, que confinam as trajetórias a subespaços de menor dimensão). Equações de movimento não integráveis, por sua vez, estão relacionadas ao comportamento caótico. Vê-se, assim, uma estreita relação entre dinâmica caótica (para quase todas as condições iniciais no espaço de fases) e a propriedade de “phase mixing” da dinâmica (que garante a equivalência entre médias temporais em *tempos finitos* e médias de ensemble). Tal relação dá suporte a toda a fundamentação da Mecânica Estatística. De fato, o grau de instabilidade dinâmica está ligado à eficiência da propriedade de “phase mixing”.

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

Transições de fase, inclusive as que não envolvem uma quebra de simetria evidente, estão associadas com quebras da ergodicidade da variedade sobre a qual as trajetórias existem⁴. A ergodicidade é uma propriedade intrinsecamente dinâmica, e assim, supõe-se que a abordagem dinâmica possa acusar a presença de TFs no sistema termodinâmico.

³A curvatura de Ricci $K_R(P, v)$ é dada pela soma das curvaturas seccionais $K(P, \pi_i)$ nos $(N - 1)$ planos π_i gerados pelo vetor v e todos os demais vetores da base ortonormal de $T_P M$.

⁴A quebra de ergodicidade ocorre quando a ergodicidade deixa de ser aplicada a toda a variedade, e passa a valer, independentemente, apenas sobre subvariedades desconexas desta.

2.2 Geometria e Dinâmica Caótica nas Transições de Fase

2.2.1 Expoente de Lyapunov

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

Na investigação do modelo de Heisenberg clássico, modelo XY, cujo Hamiltoniano possui a forma (2.1), estudou-se o caso bidimensional, em que o sistema sofre uma transição do tipo Berezinsky-Kosterlitz-Thouless (BKT), que não envolve quebra espontânea de simetria, e separa uma fase desordenada de uma fase quase-ordenada, caracterizada por pares ligados de vórtices de cargas opostas⁵. Também se estudou a versão tridimensional, que apresenta uma transição contínua, caracterizada pela quebra espontânea da simetria contínua $O(2)$ do Hamiltoniano [39] (o primeiro estudo do modelo $d = 2$ foi realizado por Butera e Caravati⁶ ainda na década de 80).

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

$$V(\phi) = - \sum_{\langle i,j \rangle} [\cos(\phi_i - \phi_j) - 1], \quad (2.9)$$

onde $\phi_i \in [0, 2\pi)$ são variáveis angulares, definidas nos sítios de uma rede hipercúbica d -dimensional, e $\langle i, j \rangle$ denota sítios primeiros vizinhos nas redes $d = 2, 3$. Na simulação numérica da dinâmica, calcula-se a temperatura como a média temporal da energia cinética do sistema para cada valor de energia $\epsilon = E/N$. O expoente de Lyapunov foi calculado numericamente para condições iniciais de equilíbrio, para cada valor de T . Os gráficos dos resultados numéricos de $\lambda \times T$ (figuras 2.2) mostram que o expoente de Lyapunov, embora não apresente comportamento singular em nenhum dos casos $d = 2, 3$, apresenta um máximo em torno da transição de fase. Em $d = 3$ a variação no comportamento de λ no ponto da TF é um tanto mais brusca. Pode-se dizer entretanto que os comportamentos em $d = 2, 3$, embora envolvendo diferentes tipos de transições, são bastante similares.

Outro modelo estudado, com Hamiltoniano da forma (2.1), foi o ϕ^4 em rede discreta, em dimensões $d = 2, 3$, tanto para variáveis ϕ escalares ($d = 2$ [40]) quanto para variáveis vetoriais [41]. O modelo com graus de liberdade ϕ escalares, cujo Hamiltoniano possui simetria discreta \mathbb{Z}_2 , pertence à mesma classe de universalidade do modelo de Ising em mesma dimensão. O sistema sofre uma transição de fase contínua para $d > 1$. As equações de movimento, juntamente com as equações da dinâmica tangente, foram resolvidas numericamente. Cada observável termodinâmico relevante (temperatura, calor específico, parâmetro de ordem) foi expresso pela média temporal da função de ϕ correspondente. O comportamento crítico obtido pela abordagem *dinâmica* reproduziu a transição de fase termodinâmica, reproduzindo expoentes críticos do modelo de Ising $d = 2$ e os valores de T_c e ϵ_c estimados

⁵A transição BKT também é caracterizada como uma transição de ordem infinita, já que nenhuma derivada de ordem finita da energia livre é singular na transição.

⁶Butera, P.; Caravati, G. *Phys. Rev. A* **36** (1987) 962.

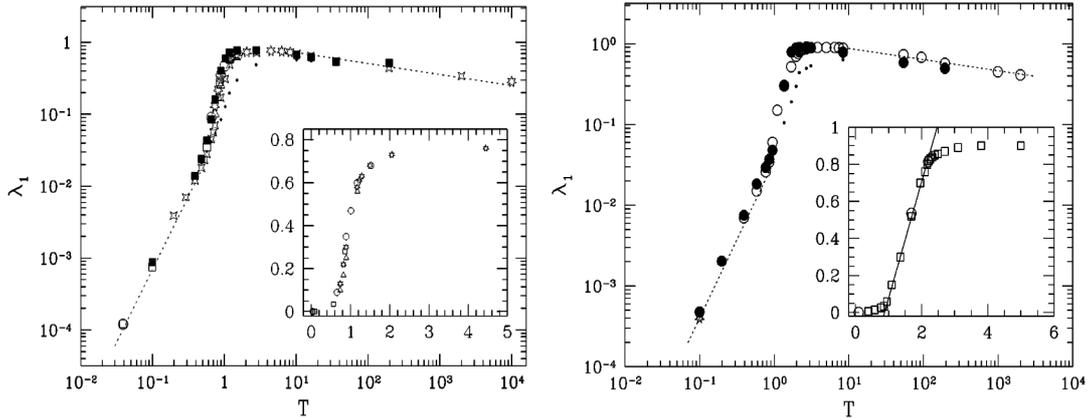


Figura 2.2: Expoente de Lyapunov λ contra T para os modelos XY $d = 2$ (à esquerda) e $d = 3$ (à direita), calculado numericamente para diferentes tamanhos N de rede, e calculado por métodos analíticos para diferentes aproximações (quadrados cheios e curva pontilhada para o modelo bidimensional à esquerda; círculos cheios e curva pontilhada para o modelo tridimensional). A transição SK ($d = 2$) ocorre em $T_c \simeq 0.95$, e a transição de segunda ordem ($d = 3$) ocorre em $T_c \simeq 2.15$ [39].

pela termodinâmica. O (maior) expoente de Lyapunov foi calculado numericamente para cada valor de ϵ . Para N grande, $\lambda(\epsilon)$ exibe um *crossover*, marcado por uma aparente descontinuidade na derivada da função. O *crossover* se aproxima de ϵ_c para valores crescentes de N . Para $\epsilon \rightarrow \infty$, $\lambda \rightarrow 0$ necessariamente, já que o modelo é integrável neste limite. O comportamento de λ como função de T , em torno de T_c , não é robusto pois é fortemente dependente dos valores escolhidos para os parâmetros do Hamiltoniano.

Na referência [41] realiza-se um estudo análogo para o modelo ϕ^4 na rede com $d = 3$, e com variáveis ϕ escalares ($n = 1$) e vetoriais $n = 2, 4$. Estes sistemas sofrem transições de fase contínuas a temperaturas finitas correspondendo à quebra espontânea da simetria \mathbb{Z}_2 discreta do Hamiltoniano para $n = 1$, e das simetrias contínuas $O(2)$ e $O(4)$ para os Hamiltonianos com $n = 2, 4$, respectivamente.

Da integração numérica das equações de movimento para condições iniciais de equilíbrio correspondentes a diferentes valores de ϵ , computou-se o (maior) expoente de Lyapunov $\lambda(\epsilon)$. Novamente, os resultados numéricos apontam para um *crossover* no comportamento de λ em $T = T_c$, exatamente sobre a transição de fase contínua, que possivelmente se torne uma singularidade em $T = T_c$, no limite $N \rightarrow \infty$. O comportamento da função $\lambda(\epsilon)$ é fortemente dependente do grupo de simetria a que pertencem os Hamiltonianos estudados.

Com o intuito de se obterem contra-provas, em [38] estudaram-se dois modelos em rede unidimensional com interações de curto alcance, os modelos FPU- β e XY, que *não* sofrem transição de fase de equilíbrio. Em ambos casos, obteve-se um comportamento suave para o máximo expoente de Lyapunov como função da temperatura, $\lambda(T)$, em contraste com os modelos XY e ϕ^4 descritos acima, cujos expoentes de Lyapunov apresentam comportamentos marcadamente distintos abaixo e acima das respectivas transições de fase.

No que se refere a outros tipos de transição, foram estudados igualmente modelos com transições de fase do tipo líquido-sólido (de primeira ordem): em [42, 43], foram considerados um sistema de discos rígidos, um gás de Lorentz e um fluido com interações por potencial de Lennard-Jones em duas dimensões, nos quais o comportamento do maior expoente de Lyapunov em função da densidade do sistema se mostrou sensível à transição de fase.

O comportamento qualitativo de λ , no entanto, é muito variável de modelo a modelo.

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

2.2.2 Observáveis Geométricos e Transições de Fase: Curvatura

No formalismo geométrico da dinâmica Hamiltoniana (seção 2.1), viu-se que o surgimento de caos está predominantemente ligado ao mecanismo de instabilidade paramétrica, ativado pelas flutuações da curvatura de Ricci, e, em particular, argumentou-se que estas possuem uma estreita relação com o expoente de Lyapunov da dinâmica (eq. (2.8)). Nesta seção, apresentam-se resultados de um comportamento mais “distintivo” das flutuações de curvatura na presença de transições de fase, que o indicado pelo expoente de Lyapunov nos mesmos casos. Tais resultados permitem, ademais, inferir uma interpretação topológica da própria origem das transições de fase. Os resultados nesta seção enfocam as evidências da quebra espontânea de simetria característica de transições contínuas, em contraste com a transição BKT particularmente, que, apesar de contínua, não apresenta quebra de simetria.

No âmbito da métrica de Eisenhart, o observável dinâmico que corresponde à curvatura de Ricci ao longo de uma geodésica é o Laplaciano da energia potencial, $\nabla^2 V$. No caso do modelo XY, com a energia potencial dada por (2.9), obtém-se, para a curvatura de Ricci: $K_R = 2N - 2V = 2\sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j)$. A flutuação quadrática média de K_R , por grau de liberdade, é dada por: $\sigma_K = \frac{1}{N}(\langle K_R^2 \rangle - \langle K_R \rangle^2)^{1/2}$. As quantidades $\langle K_R \rangle$ e σ_K foram computadas numericamente, para cada valor de T , como médias temporais - independentemente portanto de escolha de peso estatístico de ensemble - para os modelos XY $d = 2, 3$ em [39]. $\langle K_R \rangle$ apresentou comportamentos similares nos casos $d = 2$ e $d = 3$, apesar das transições em cada caso serem diferentes. Em particular, $\langle K_R \rangle$ possui um ponto de inflexão em torno das transições de fase, e, portanto, é influenciada pela presença das mesmas. O resultado mais interessante esteve nas diferenças nos comportamentos de σ_K para $d = 2, 3$.

No modelo ϕ^4 com simetria $O(n)$, a curvatura de Ricci também foi obtida equipando-se a variedade com a métrica de Eisenhart. A simulação numérica de $\langle K_R \rangle$ e σ_K , ao longo de trajetórias dinâmicas, como médias temporais, foi realizada em [40, 41]. O comportamento de $\langle K_R \rangle$ como função da densidade de energia ϵ para o modelo ϕ^4 bidimensional, $n = 1$ [40] é qualitativamente análogo ao dos casos do modelo XY $d = 2, 3$ acima

mencionado: $\langle K_R \rangle$ inverte sua convexidade próximo de ϵ_c . No entanto, este comportamento não se reproduz qualitativamente em outros modelos (que apresentam igualmente transições de fase com quebra espontânea de simetria) como os modelos ϕ^4 em $d = 3$ com simetria $O(n)$, $n = 1, 2, 4$ [41], em que as curvaturas de Ricci médias $\langle K_R \rangle$ de fato sofrem uma inversão de convexidade próximo ou sobre as transições, porém, diferentemente do caso acima descrito, também apresentam um mínimo em ou próximo de T_c . O comportamento de $\langle K_R \rangle$ é bastante dependente dos modelos estudados.

Os resultados mais significantes destas análises [39–41] se apóiam nos comportamentos singulares das flutuações de curvatura σ_K , computadas numericamente para valores finitos de N , na presença de transições com quebra espontânea de simetria (modelo XY $d = 3$, fig. 2.3 (quadro à direita), modelo ϕ^4 escalar na rede bidimensional [40] e modelos ϕ^4 $O(1)$, $O(2)$ e $O(4)$ na rede tridimensional [41]). Estas apresentam um máximo acentuado, possivelmente tendendo a uma singularidade real em $N \rightarrow \infty$, que ocorre sobre T_c ou ϵ_c , dentro da margem de erro numérico das simulações.

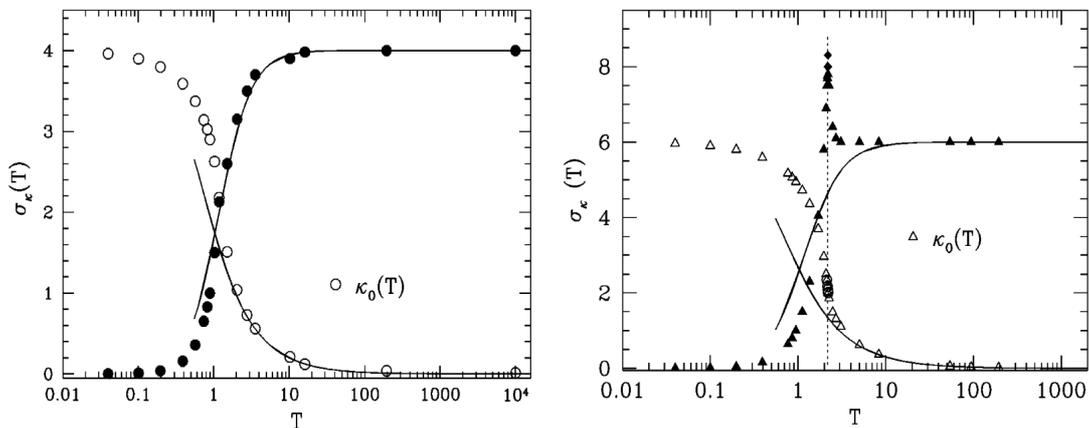


Figura 2.3: Resultados numéricos para as flutuações da curvatura de Ricci (métrica de Eisenhart), $\sigma_K(T)$, contra T para os modelos XY bidimensional (à esquerda, círculos cheios) e tridimensional (à direita, triângulos cheios) em redes finitas. Para as mesmas redes em cada modelo, computou-se a curvatura de Ricci $\kappa_0(T)$ (círculos vazados para $d = 2$; triângulos vazados para $d = 3$). Linhas sólidas nos gráficos representam a estimativa microcanônica obtida por expansão de altas temperaturas [39].

Na ausência de quebra espontânea de simetria, nos modelos XY $d = 2$ [39] (fig. 2.3, quadro à esquerda) e ϕ^4 $d = 2$ com simetria $O(2)$ [41], não ocorre comportamento singular, embora σ_K ainda se mostre sensível à presença da transição. Este comportamento pode ser qualificado como “intermediário” entre a ausência de transições e a ocorrência de transição com quebra espontânea de simetria. Não há evidências contrárias aos padrões observados.

Diferentemente do expoente de Lyapunov, as *flutuações de curvatura* se mostram observáveis adequados, por exemplo, para a investigação da existência de TFs com quebra de simetria, pois seu comportamento se mostrou, nos exemplos acima descritos, qualitativamente mais uniforme para diferentes modelos sofrendo os mesmos tipos de transições de fase, e qualitativamente distinto na comparação entre transições com e sem quebra espontânea de simetria. A sensibilidade do expoente de Lyapunov a transições de fase, assim, baseado na relação (2.8), pode ser entendida como conseqüência dos resultados expostos nesta seção.

Em [40], a mesma análise para as médias temporais dos observáveis geométricos foi realizada com a métrica de Jacobi, em que foram calculadas a curvatura escalar \mathcal{R} através de sua expressão em função de observáveis dinâmicos, e a flutuação quadrática média $\sigma_{\mathcal{R}}$ de \mathcal{R} . Vale notar que com a métrica de Jacobi a curvatura média ainda exibe um comportamento suave próximo a ϵ_c , ainda que seja afetado pela transição, enquanto a flutuação da curvatura mostra novamente um pico acentuado no ponto da transição com quebra de simetria. A persistência e robustez do comportamento das flutuações de curvatura na região crítica com a escolha de métricas diferentes reforça a idéia, que será mais adiante explorada, de que a origem deste comportamento e, conseqüentemente, a origem mais fundamental de transições de fase esteja na *topologia* das variedades do espaço de configurações.

2.2.3 Um resultado analítico: modelo XY campo médio

O modelo XY campo médio é de particular importância neste estudo, porque, além das assinaturas dinâmicas e geométricas da transição serem bastante características, este modelo também permite, como será descrito mais adiante, uma descrição analítica das propriedades topológicas das variedades do espaço de configurações. O modelo consiste de um sistema totalmente conectado de rotores planares clássicos, descrito por um Hamiltoniano da forma (2.1) com energia potencial dada por:

$$V(\phi) = \frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\phi_i - \phi_j)] - h \sum_{i=1}^N \cos \phi_i, \quad (2.10)$$

onde $\phi \in [0, 2\pi)$ representa o ângulo do rotor i com relação a uma direção fixada pelo vetor \mathbf{h} , o campo externo. A termodinâmica dos modelos ferromagnético e antiferromagnético foi resolvida em [44]. Considerando-se o caso ferromagnético $J = 1$, no limite $h \rightarrow 0$, o sistema sofre uma transição contínua, com expoentes críticos clássicos, em $T_c = 1/2$ ou $\epsilon_c = 3/4$.

O expoente de Lyapunov λ , calculado numericamente como função de ϵ [45, 46], para valores finitos de N , é positivo para $0 < \epsilon < \epsilon_c$, apresenta um máximo acentuado imediatamente abaixo de ϵ_c , e, no limite termodinâmico, vai abruptamente a zero exatamente sobre a transição, permanecendo nulo em todo o intervalo de energias acima de ϵ_c , já que nesta fase, o sistema é integrável, sendo equivalente a um conjunto de rotores desacoplados.

Em [47], confirmaram-se os resultados numéricos acima pela estimativa de $\lambda(\epsilon)$ através da relação (2.8). Da geometrização da dinâmica, obtiveram-se analiticamente os comportamentos de $\langle K_R \rangle$ e $\sigma_K = \langle \delta^2 k_R \rangle$ em função de ϵ , no limite termodinâmico. Estas quantidades apresentaram comportamentos singulares em ϵ_c , como mostra o gráfico à direita na figura 2.4, em especial para σ_K .

2.3 Transições de Fase e Topologia

As evidências descritas na seção anterior sugerem que o expoente de Lyapunov, calculado numericamente

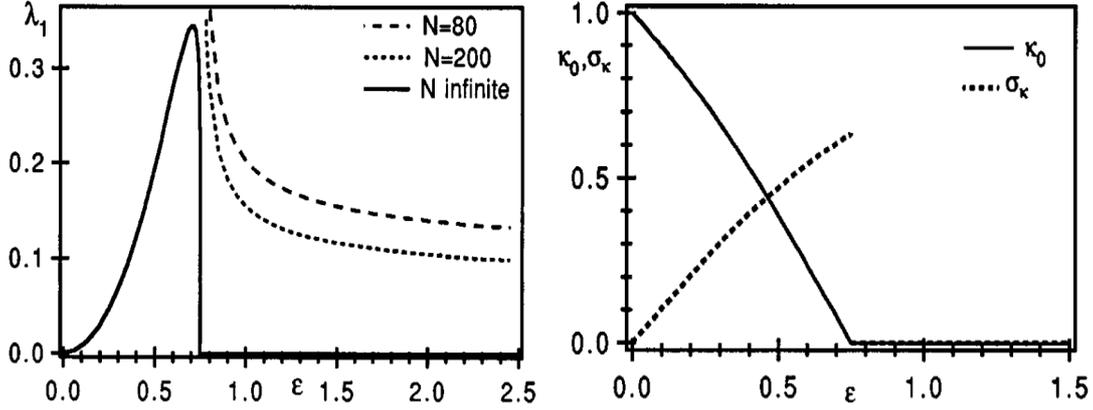


Figura 2.4: Modelo XY campo médio. À esquerda: Expoente de Lyapunov λ contra ϵ (curva sólida), eq.(2.8). As curvas tracejadas são correções analíticas de rede finita ao limite de campo médio, que tendem à curva sólida como $\lambda \propto N^{-1/3}$. À direita: Curvatura de Ricci $K_R(\epsilon)$, analiticamente computada no ensemble microcanônico (curva sólida), e suas flutuações σ_K (curva tracejada). A energia crítica da transição é $\epsilon_c = 0.75$ [47].

sobre trajetórias dinâmicas de equilíbrio, seja sensível à presença de transições de fase em geral, como consequência das propriedades de observáveis geométricos definidos a partir da métrica induzida sobre o espaço de configurações acessível. As flutuações de curvatura de M_E , σ_K ou $\sigma_{\mathcal{R}}$, como médias temporais sobre as referidas trajetórias, apontam a presença das transições de fase: apresentam um comportamento muito distinto para diferentes tipos de transições, em particular, em relação à presença ou ausência de quebra de simetria, sendo tal comportamento qualitativamente uniforme em modelos distintos com transições similares.

Partindo-se deste comportamento notável das flutuações de curvatura, buscou-se a origem mais fundamental deste e de transições de fase.

2.3.1 Origem Topológica das Flutuações de Curvatura Singulares

É possível encontrar uma correspondência entre o comportamento singular de flutuações de curvatura de uma variedade topológica e uma mudança na topologia da mesma em modelos geométricos abstratos e simples [2, 39, 41].

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

Em [2, 39, 41] estudaram-se as propriedades geométricas e topológicas de duas famílias de superfícies de revolução em dimensão 2 (dois). A imersão de uma superfície de revolução em \mathbb{R}^3 pode ser obtida pela rotação de uma curva C (gráfico de $y = f(x)$) em torno de um dos eixos do plano Cartesiano. Os gráficos das duas famílias

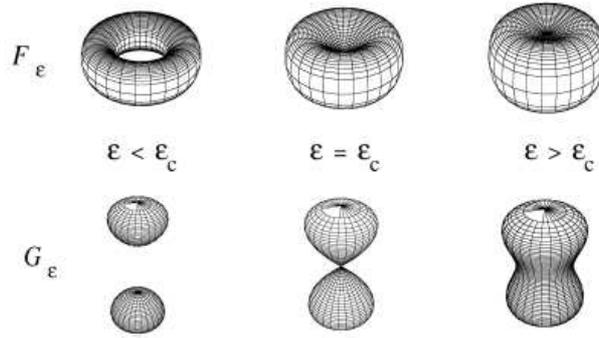


Figura 2.5: Representações das famílias \mathcal{F}_ϵ e \mathcal{G}_ϵ . Cada família é dividida em duas subfamílias pela superfície crítica correspondendo a $\epsilon_c = 0$. Os membros dentro de cada subfamília são difeomórficos entre si, enquanto que as duas subfamílias não são difeomórficas uma à outra [2].

de superfícies estudadas são dados, em coordenadas Cartesianas, por:

$$\mathcal{F}_\epsilon = (f_\epsilon(t) \cos v, f_\epsilon(t) \sin v, t) \quad (2.11)$$

$$\mathcal{G}_\epsilon = (t \cos v, t \sin v, f_\epsilon(t)), \quad (2.12)$$

onde $v \in [0, 2\pi)$ e as coordenadas são parametrizadas por ϵ através de $f_\epsilon(t) = \pm\sqrt{\epsilon + t^2 - t}$. As superfícies \mathcal{F}_ϵ e \mathcal{G}_ϵ são formadas a partir da revolução dos dois ramos (\pm) de f_ϵ e o parâmetro $\epsilon \in [-1/4, +\infty)$. As duas famílias de superfícies sofrem transições topológicas (TTs) em $\epsilon_c = 0$. As variedades \mathcal{F}_ϵ são topologicamente equivalentes a um toro bidimensional, \mathbb{T}^2 (característica de Euler $\chi = 0$), para $\epsilon < \epsilon_c$, e tornam-se difeomórficas a uma esfera \mathbb{S}^2 ($\chi = 2$) para $\epsilon > \epsilon_c$. As variedades \mathcal{G}_ϵ , por sua vez, são difeomórficas a duas esferas desconexas ($\chi = 4$) para $\epsilon < \epsilon_c$, e a uma esfera \mathbb{S}^2 ($\chi = 2$) para $\epsilon > \epsilon_c$ - Figura 2.5.

Definida a métrica induzida de \mathbb{R}^3 sobre as superfícies⁷, o comportamento das flutuações de curvatura nas transições topológicas é analisado através da curvatura Gaussiana K das variedades⁸, que, para dimensão 2, coincide com a curvatura de Ricci. As figuras 2.6 mostram que σ_K se torna singular em $\epsilon \rightarrow \epsilon_c$ para ambas famílias de superfícies, embora as duas famílias sejam geométrica e topologicamente distintas.

Os resultados descritos motivaram o estudo da topologia e das propriedades geométricas de curvatura do espaço de configurações de um sistema físico. O contexto natural para esta generalização é a Teoria de Morse, uma síntese da qual se encontra no Apêndice A. Neste caso, deve-se tomar para a variedade M estudada o espaço de configurações do sistema, que é tal que $\dim(M) \rightarrow \infty$, o que aumenta consideravelmente a dificuldade do problema. Sua função energia potencial V , suave e limitada inferiormente, é definida sobre a variedade M , e é conveniente supor-se que esta função seja uma função de Morse.

Quando $v(q) = V(q)/N$ é uma função de Morse (ver Apêndice A), as transições topológicas das variedades $M_u = \{q \in M \mid V(q) \leq u\}$ estão em correspondência biunívoca com os pontos críticos da função.

⁷Para uma superfície de dimensão k imersa no \mathbb{R}^n , parametricamente definida pelas equações $x^i = x^i(z^1, \dots, z^k)$, $i = 1, \dots, n$, onde (z^1, \dots, z^k) são coordenadas locais na superfície, a métrica induzida do \mathbb{R}^n sobre a superfície é dada por $g_{ij}(z^1, \dots, z^k) = \sum_{m=1}^n \frac{\partial x^m}{\partial z^i} \frac{\partial x^m}{\partial z^j}$.

⁸A curvatura Gaussiana é o produto da recíproca de dois raios de curvatura da variedade.

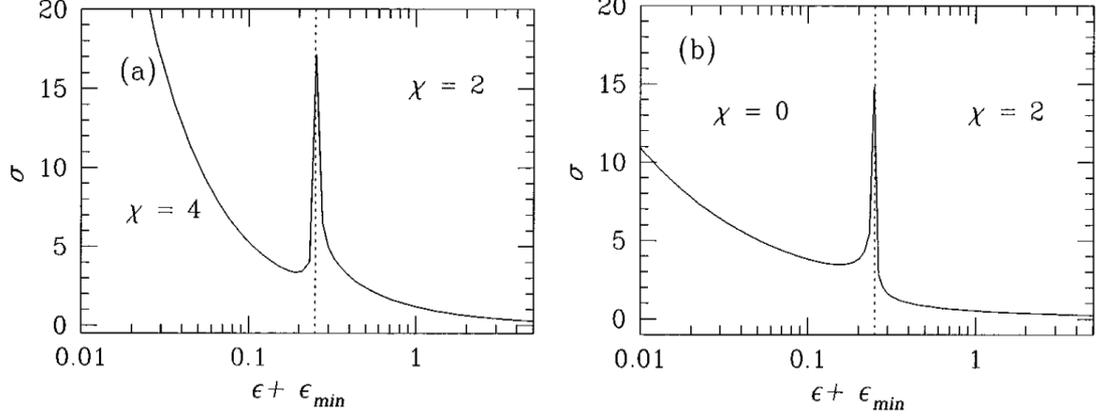


Figura 2.6: Flutuações da curvatura Gaussiana, σ_K , para as superfícies (a) \mathcal{G}_ϵ ; e (b) \mathcal{F}_ϵ . A transição topológica em $\epsilon_c = 0$ ($\epsilon_c + \epsilon_{min} = 0.25$) é marcada por uma singularidade em σ_K [41].

Assim, se u_c é um valor crítico de V , as variedades $M_{u < u_c}$ não serão difeomórficas às variedades $M_{u > u_c}$, e uma transição topológica ocorre na família de subvariedades $\{(M_u, g)\}$ precisamente em M_{u_c} . Deste modo, a determinação da estrutura topológica das variedades para todo u exige a determinação de todos os pontos críticos da função V , juntamente com os respectivos índices de Morse.

A fim de estabelecer a conexão entre as flutuações da curvatura de M e suas transições topológicas, faz-se necessário definir uma métrica $[g_{ij}]$ sobre a mesma. Em lugar de explorar tal conexão a partir de um modelo estatístico específico, recorre-se à abordagem do problema geométrico-topológico genérico no entorno de uma transição topológica em uma variedade M de dimensão alta [1]. A teoria de Morse permite acessar as propriedades topológicas de M a partir das propriedades de diferenciabilidade da função V , e permite, ademais, abordar o problema no entorno da TT sem o conhecimento específico da forma de V , dadas as propriedades de uma função de Morse na vizinhança de um ponto crítico $x_c \in M$. A carta de Morse é uma transformação linear local sobre as coordenadas de M que permite representar a função de Morse $V(x)$ na vizinhança de x_c como: $V(x) = V(x_c) - \sum_{i=1}^k x_i^2 + \sum_{i=k+1}^N x_i^2$ (sendo k o índice de Morse do ponto crítico x_c , isto é, o número de autovalores negativos do Hessiano de V calculado em x_c). Na vizinhança de um ponto crítico, portanto, as $\Sigma_u \subset M_u$ são, geometricamente, quádricas não-degeneradas (hiperbolóides, elipsóides), que se tornam degeneradas em x_c .

De outra parte, a análise das propriedades geométricas de M na vizinhança da TT foram analisadas através das flutuações da curvatura Gaussiana⁹, σ_K , destas superfícies, $\sigma_K = \langle K^2 \rangle_{\Sigma_u} - \langle K \rangle_{\Sigma_u}^2$ como função de $u \in (u_c - \delta, u_c + \delta)$, onde $\langle \cdot \rangle$ está para a integração sobre a (hiper)superfície equipotencial $\Sigma_u \equiv \{x \in M | V(x) = u\}$. A curvatura Gaussiana K_G e suas flutuações σ_K puderam ser computadas numericamente, considerando-se a imersão de M em \mathbb{R}^N [1].

A figura 2.7 mostra que σ_K desenvolve um pico singular no valor crítico $u = 0$, correspondendo à superfície crítica. As propriedades (geométricas) das variedades (M_u, g) estão de fato estreitamente ligadas às propriedades

⁹Mais especificamente, computaram-se as flutuações da curvatura de Gauss-Kronecker do modelo, que é uma generalização da curvatura Gaussiana para $\dim(M) > 2$.

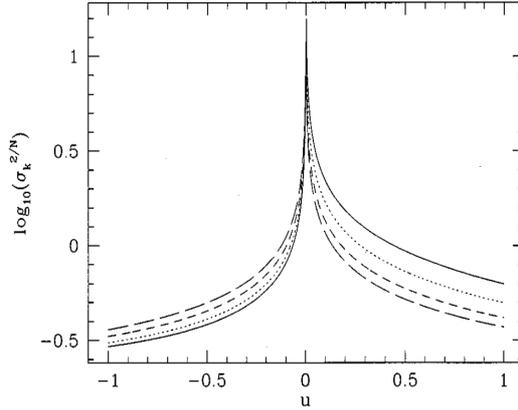


Figura 2.7: Flutuações σ_K da curvatura de Gauss-Kronecker de hipersuperfícies $V^{-1}(u)$ contra u na vizinhança de um valor crítico u_c . $\dim(V^{-1}(u)) = 100$, e os índices de Morse para cada curva são: $k = 1$ (sólida), $k = 15$ (pontilhada), $k = 33$ (tracejada), $k = 48$ (tracejado longo). [1]

das superfícies $\{\Sigma_u\}_{u \leq u_c}$ ($u_c > 0$), o que é expresso na equação (redefinindo $u_{min} = 0, u_c > 0$):

$$\int_{M_u} f d\eta = \int_0^u dV \int_{\Sigma_V} f \Big|_{\Sigma_V} \frac{d\omega}{\|\nabla V\|}, \quad (2.13)$$

onde $d\omega$ é a medida induzida sobre Σ_V (pela folheação de M_u) e f é uma função genérica definida sobre M , $f|_{\Sigma_V}$ é a sua restrição a Σ_V , e finalmente ∇V é o gradiente do potencial V com relação às coordenadas do mapa local de Σ_V .

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

Ademais, os exemplos aqui tratados não relacionam diretamente transições topológicas a transições de fase, apenas apresentam um fato comum a ambos fenômenos: assim como as transições de fase (pelo menos as com quebra espontânea de simetria) em sistemas Hamiltonianos clássicos são acompanhadas por singularidades nas flutuações de curvatura (de Ricci) das variedades M_E , também transições topológicas de variedades Riemannianas M_u podem engendrar singularidades nas flutuações de curvatura (Gauss-Kronecker) das mesmas. Esta coincidência leva à conjectura heurística: que transições de fase estejam associadas a transições topológicas das variedades do espaço de configurações do sistema.

Entretanto, pode-se argumentar que o comportamento singular das flutuações de curvatura esteja ligado à tendência da medida estatística de equilíbrio de se tornar singular na presença de transições de fase. Este comportamento, em contrapartida, não é imediatamente conectado ao comportamento topológico do espaço de configurações acessível. A seção que segue tenta elucidar deste ponto.

2.3.2 Transições Topológicas e Transições de Fase Termodinâmicas

Comprovação Indireta da Hipótese Topológica

Para tentar resolver as ambigüidades com respeito ao efeito das transições topológicas do espaço de configurações sobre o comportamento termodinâmico de um sistema físico - na ocorrência de transições de fase em particular -, buscou-se verificar se o comportamento singular das flutuações de curvatura persiste frente a diferentes escolhas da métrica $[g_{ij}]$ sobre a variedade M .

Considera-se o modelo físico ϕ^4 escalar (simetria \mathbb{Z}_2 discreta) em rede d -dimensional \mathbb{Z}^d para $d = 1$ (que não sofre transição de fase), e em $d = 2$ (que sofre uma transição com quebra espontânea de simetria a uma temperatura T_c finita), cuja energia potencial por partícula é denotada por $v_d(\phi) = V_d(\phi)/N$. Consideram-se as hipersuperfícies equipotenciais $\Sigma_u = \partial M_u$ e M_u , as partes do espaço de configurações M abaixo do nível $v(\phi) = u$, cujas definições a partir de $v(\phi)$ determinam suas topologias. A detecção de singularidades das flutuações da curvatura de Gauss-Kronecker de Σ_u é uma forma indireta de comprovar a ocorrência de transições topológicas na família $\{(M_u, g)\}$ em u_c . Trabalhando com a curvatura escalar \mathcal{R} , e admitindo a estreita relação entre Σ_u e M_u , as simulações foram realizadas sobre $\mathcal{R} = g^{kj}R_{kij}^l$ das variedades (M_u, g) , para as flutuações $\sigma_{\mathcal{R}}$ [1]. Três métricas $g^{(k)}$ (numericamente tratáveis) foram escolhidas para o cálculo de $\sigma_{\mathcal{R}}(u)$: $g^{(1)}$ dada pela transformação conforme da métrica plana Euclidiana, envolvendo $V(\phi)$; $g^{(2)}$ e $g^{(3)}$ sendo métricas não conformes, e não envolvendo o potencial físico.

O observável a que corresponde \mathcal{R} é diferente em cada métrica, da mesma forma para $\sigma_{\mathcal{R}}$. Apesar disto, os resultados para as três diferentes métricas mostram que $\sigma_{\mathcal{R}}$ apresenta máximos acentuados (que eventualmente se tornam singulares em $N \rightarrow \infty$) em um mesmo valor de $u = u_c$, para o modelo em duas dimensões, e apresenta um comportamento suave para o caso unidimensional (figuras 2.8). A energia potencial crítica obtida foi $v_c \simeq 3.75$. Das figuras 2.8 v_c , dentro da margem de erro numérico, coincide com o valor do parâmetro u_c onde ocorrem as singularidades de $\sigma_{\mathcal{R}}$. Ademais, estes máximos de $\sigma_{\mathcal{R}}$ podem ser considerados comprovações *indiretas* da presença de uma mudança topológica importante da família $\{(M_u, g)\}$ no caso $d = 2$.

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

2.4 A Hipótese Topológica

Todo o formalismo e resultados expostos neste capítulo dizem respeito a sistemas Hamiltonianos naturais da forma (2.1), com variáveis $\{p_i\}$ e $\{q_i\}$ contínuas e cujo potencial $V(q)$ é suave e limitado inferiormente. No âmbito da Mecânica Estatística, em particular do ensemble canônico, o comportamento de equilíbrio destes

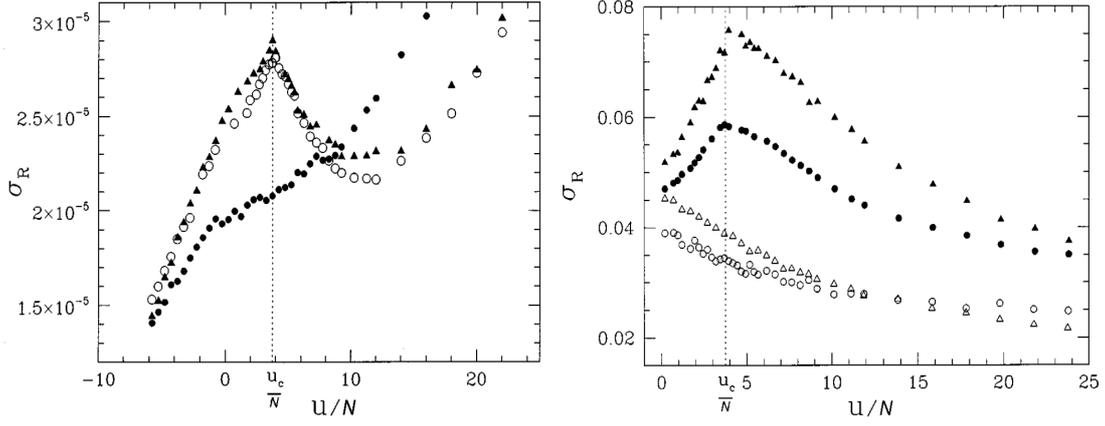


Figura 2.8: Variância da curvatura escalar de M_u , $\sigma_{\mathcal{R}}(u)$, com as métricas $g^{(1)}$ (à esquerda); $g^{(2)}$ e $g^{(3)}$ (à direita), como função de u/N , para o modelo ϕ^4 em $d=1,2$ para redes finitas. Círculos cheios (à esq., métrica $g^{(1)}$), triângulos vazios (à dir., métrica $g^{(2)}$) e círculos vazios (à dir., métrica $g^{(3)}$) correspondem ao caso 1-d; círculos vazios e triângulos cheios (à esq., métrica $g^{(1)}$), triângulos cheios (à dir., métrica $g^{(2)}$) e círculos cheios (à dir., métrica $g^{(3)}$) correspondem a redes finitas em 2-d (valores reescalados) [1].

sistemas pode ser completamente descrito através da função de partição canônica [2, 3, 39]:

$$\begin{aligned}
Q_N(\beta) &= \int d^N p d^N q e^{-\beta \mathcal{H}(p,q)} = \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{N/2} \int d^N q e^{-\beta V(q)} \\
&= \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{N/2} \int_0^\infty du e^{-\beta u} \int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|},
\end{aligned} \tag{2.14}$$

onde $\beta = 1/T$, $\Sigma_u = \{(q_1, \dots, q_N) \in \mathbb{R}^N \mid V(q_1, \dots, q_N) = u\}$ são as equipotenciais no espaço de configurações, e $d\sigma$ é o elemento invariante de volume definido pela métrica induzida por \mathbb{R}^N sobre Σ_u . Da mesma forma no ensemble microcanônico para o volume no espaço de fases [48]:

$$\begin{aligned}
\Omega_N(E) &= \int_0^E d\eta \int d^N q \Theta[V(q) - (E - \eta)] \int d^N p \delta\left(\sum_i \frac{1}{2} p_i^2 - \eta\right) \\
&= \int_0^E d\eta \int_0^{E-\eta} du \int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|} \int d^N p \delta\left(\sum_i \frac{1}{2} p_i^2 - \eta\right) \\
&= \frac{(2\pi)^{N/2}}{\Gamma(N/2)} \int_0^E d\eta \eta^{(N-2)/2} \int_0^{E-\eta} du \int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|}.
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Das equações (2.14) e (2.15) observa-se que para sistemas Hamiltonianos da forma considerada, os objetos não triviais estão contidos nas integrais $\int_{\Sigma_u} \frac{d\sigma}{\|\nabla V\|}$. O elemento de volume $d\sigma$ é determinado pela folheação natural do espaço de configurações nas equipotenciais Σ_u , assim que se define a função energia potencial $V(q)$. O fato da informação não-trivial de $Q_N(\beta)$ e $\Omega_N(E)$ ser determinada apenas pela parte interagente do Hamiltoniano é o ponto de partida da Hipótese Topológica. Sabe-se ainda que quanto maior N , menores são as flutuações de observáveis estatísticos do sistema em torno de suas médias. Assim, a projeção do suporte da medida microcanônica sobre o espaço de configurações tende assintoticamente a uma hipersuperfície $\Sigma_u = \Sigma_{\langle u(E) \rangle}$ no limite $N \rightarrow \infty$. Supondo a equivalência dos ensembles estatísticos¹⁰, também o suporte efetivo da medida canônica no espaço

¹⁰Tal equivalência é garantida quando as interações são de (suficientemente) curto alcance.

de configurações é $\Sigma_u = \Sigma_{\langle u(\beta) \rangle}$ (ver discussão no final do capítulo). Em síntese aos resultados e evidências descritos, enuncia-se [2, 3]:

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

Mudanças topológicas "abruptas" nestas variedades - suporte efetivo das medidas estatísticas - podem originar derivadas singulares no volume microcanônico¹¹, $\Omega(E)$ [49, 50]. Se este fato persiste a N crescente, esta mudança topológica resultará na perda de analiticidade de observáveis termodinâmicos em $N \rightarrow \infty$. Do ponto de vista desta hipótese, a singularidade da medida estatística na transição de fase, em u_c , é consequência das TTs ocorrendo neste ponto.

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

Investigação da topologia das variedades Σ_u

As *mudanças topológicas* das hipersuperfícies equipotenciais¹², Σ_u , representam uma *quebra de difeomorficidade* da família $\{\Sigma_u\}$ para o(s) respectivo(s) valor(es) da energia potencial por partícula u (Apêndice A).

Para descrever completamente e de forma unívoca a topologia destas variedades é necessário um conjunto completo de objetos ou estruturas matemáticas, invariantes sob difeomorfismos, denominados *invariantes topológicos*, definidos sobre as variedades Σ_u (ver Apêndice A). Em princípio a descrição completa da topologia exige mais de um invariante topológico porque, embora se saiba que uma mudança em um dado invariante topológico implique na ocorrência de uma transição topológica na variedade subjacente, a constância de um dado invariante topológico *não* implica na ausência de TT. Pela limitação prática óbvia da aplicação desta idéia à investigação de sistemas físicos específicos, a análise da topologia baseou-se em geral em um único invariante, a característica de Euler-Poincaré, χ , um invariante topológico cuja determinação se torna possível através da Teoria de Morse. Outra motivação para a escolha da característica de Euler como um invariante topológico importante é a sua estreita relação com quantidades físicas relevantes, como a entropia configuracional associada aos mínimos locais de um Hamiltoniano ou de um funcional de energia livre.

Os números de Betti da família de variedades $\{M_u\}$ para todo u constituem um conjunto completo de in-

¹¹O mesmo vale para o ensemble canônico (e grã-canônico), já que a função de partição canônica *configuracional* (considerando apenas a integral sobre as coordenadas $\{q_i\}$) é a transformada de Laplace do volume microcanônico desprezada a parte cinética (isto é, impondo-se o vínculo restrito apenas sobre a energia potencial $V(q)$: $\delta(E - V(q))$) [28].

¹²Não necessariamente associadas a uma transição de fase.

variantes topológicos, e portanto, caracteriza completamente sua topologia. A determinação do tipo de homotopia da família $\{M_u\}$ para todo u , e portanto, de todos os números de Betti das variedades, foi realizada para o modelo esférico na rede hipercúbica, que é o resultado original da primeira parte desta tese [6, 7] (ver Capítulo 3).

2.4.1 Confirmação da Hipótese Topológica em modelos físicos

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

Modelo ϕ^4

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

Para o modelo ϕ^4 escalar, em $d = 1, 2$, escolheu-se a característica de Euler como invariante topológico, devido à disponibilidade de um teorema, o teorema de Gauss-Bonnet-Hopf, que permite a determinação de $\chi(\Sigma_u)$ através da curvatura de Gauss-Kronecker total das superfícies Σ_u [3]:

$$\chi(\Sigma_u) = \gamma \int_{\Sigma_u} K d\sigma, \quad (2.16)$$

que é válido para hipersuperfícies de dimensão *par* ($\dim(\Sigma_u) = N-1$) imersas no \mathbb{R}^N , onde $\gamma = 2/\text{Vol}[\mathbb{S}_1^N]$ e $d\sigma$ é o elemento invariante de volume definido pela métrica induzida em Σ_u por \mathbb{R}^N .

Os resultados, expressos nas figuras 2.9, mostram, para o caso da rede unidimensional (sem transição), exceto por algum ruído numérico, um comportamento monótono decrescente de $\chi(v/N)$ (v/N energia potencial por grau de liberdade). No caso bidimensional, em que ocorre a transição com quebra de simetria, $\chi(v/N)$ apresenta uma mudança abrupta caracterizada por uma derivada descontínua desta função em um valor v_c/N , como ilustrado pela linha contínua que interpola os dados numéricos. As simulações foram realizadas com os valores dos parâmetros da seção 2.3.2, e o ponto no qual ocorre a singularidade de $\chi(v/N)$, $v_c/N \simeq 3.75$, coincide com a energia potencial crítica calculada naquela seção para o mesmo modelo.

O comportamento não-constante de $\chi(v/N)$ em $d = 1$ e em $d = 2$ para $v \neq v_c$ demonstra que transições na topologia estão presentes ainda que não haja transição de fase. Ademais, o comportamento observado para o caso $d = 2$ sugere que uma mudança abrupta *na taxa de variação* da topologia esteja na origem de transições de fase.

Modelo XY campo médio e unidimensional

O primeiro modelo a fornecer uma comprovação direta da Hipótese Topológica foi o modelo XY campo

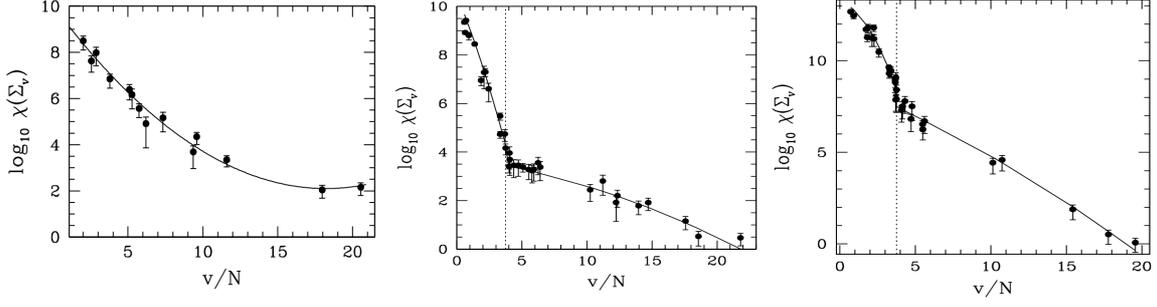


Figura 2.9: Característica de Euler $\chi(\Sigma_v)$ em função de v/N para o modelo ϕ^4 em redes finitas: à esquerda para $d = 1$, ao centro e à direita para $d = 2$ para dois tamanhos de rede distintos. Parâmetros como na seção 2.3.2 [3].

médio com interações ferromagnéticas [50–52]. Neste caso é possível mostrar analiticamente que uma mudança topológica abrupta no espaço de configurações ocorre e pode ser relacionada com a transição de fase termodinâmica (descrita na seção 2.2.3).

A energia potencial por partícula do modelo é dada por:

$$v(\phi) = \frac{V(\phi)}{N} = \frac{J}{2N^2} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\phi_i - \phi_j)] - \frac{h}{N} \sum_{i=1}^N \cos(\phi_i). \quad (2.17)$$

Fixa-se $J = 1$. A energia potencial possui limites inferior e superior: $-h \leq v(\phi) \leq 1/2 + h^2/2$. Este sistema sofre uma transição de fase contínua com quebra espontânea de simetria no limite $h \rightarrow 0$, em $\epsilon_c = E_c/N = 3/4$ ou $T_c = 1/2$.

Em [52] investigou-se a topologia das variedades M_v , cuja relação com a topologia das equipotenciais Σ_v é tanto mais próxima quanto maior N (ver eq. (2.13)). O espaço de configurações M do modelo é um N -toro \mathbb{T}^N , e a função definida sobre este é $v(\phi)$, que para campo $h \neq 0$, em que a simetria $O(2)$ de (2.17) é quebrada, é uma função de Morse própria. As variedades M_v , $v < -h$ são vazias, e M_v para $v > 1/2 + h^2/2$ devem ser difeomórficas a $M = \mathbb{T}^N$.

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

As transições topológicas para $v < 1/2 + h^2/2$ foram investigadas através da característica de Euler, que é dada por: $\chi(M_v) = \sum_{k=0}^N (-1)^k b_k(M_v) = \sum_{k=0}^N (-1)^k \mu_k(M_v)$, onde a segunda equação vale para funções de Morse, sendo μ_k o número de pontos críticos de índice k que ocorrem em M_v . Do cálculo dos índices dos pontos críticos para campo h suficientemente pequeno, resulta que em cada nível crítico no intervalo $v < 1/2 + h^2/2$, ocorrem apenas pontos críticos com um mesmo único índice e que neste intervalo este índice nunca é maior que $N/2$. Assim, $\mu_k(v) = 0, \forall k > \frac{N}{2}$. Sabe-se, no entanto, que o toro se completa em $v = 1/2 + h^2/2$ e que os números de Betti b_k do N -toro completo são $b_k = \binom{N}{k} > 0$ para todo $k = 0, \dots, N$. Das desigualdades de Morse $b_k \leq \mu_k, k = 0, \dots, N$ conclui-se que, em $v = 1/2 + h^2/2$, $\binom{N}{k}$ k -células para cada $k \in [N/2 + 1, N]$

devem ser agregadas à variedade M_v em $v = 1/2 + h^2/2$, assim que não só ocorre uma transição topológica em $v = 1/2 + h^2/2$, como esta transição topológica corresponde a uma mudança em números de Betti de $\mathcal{O}(N)$ diferentes ordens, o que é uma transição topológica bastante abrupta, especialmente em comparação às demais transições ocorrendo em $v < 1/2 + h^2/2$.

A transição de fase ocorre no limite $h \rightarrow 0$, e assim a TT acima referida ocorrerá em $v = v_c = 1/2$. Como os graus de liberdade configuracional $\{\phi_i\}$ e de momentum $\{\pi_i\}$ são escalares, no limite termodinâmico, a temperatura T , a densidade de energia ϵ e a energia potencial média por partícula $u = \langle v \rangle$ obedecem à equipartição de energia ($k_B = 1$): $\epsilon = T/2 + u(T)$, donde a energia potencial crítica média, correspondente à transição de fase é $u_c = 1/2$, isto é, $u_c = v_c$. A TT abrupta acima descrita coincide portanto com a transição de fase do modelo.

A figura 2.10 (à esquerda) mostra o gráfico de $\log(|\chi(M_v)|)/N$ contra v para diferentes valores de N , fazendo uso explícito do fato de que a variedade M , o N -toro, se completa em $v = 1/2 + h^2/2$, e, sendo $\chi(\mathbb{T}^N) = 0$ o gráfico sofre uma descontinuidade finita em $v = 1/2 + h^2/2$, de um valor finito, para 0 (zero).

Em [51, 52] também se trata comparativamente o comportamento de $\chi(v)$ do modelo XY unidimensional com interações a vizinhos próximos, que não possui transição de fase. O Hamiltoniano é da forma (2.1) e a energia potencial por partícula é dada por ($J = 1$):

$$v(\phi) = \frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N [1 - \cos(\phi_{i+1} - \phi_i)] - \frac{h}{N} \sum_{i=1}^N \cos \phi_i. \quad (2.18)$$

O espaço de configurações M ainda é um N -toro, a função $v(\phi)$, definida sobre M , é que se modifica. Da análise das soluções de pontos críticos e suas respectivas multiplicidades, resulta neste caso um contínuo de TTs, porém nenhuma transição topológica abrupta, de modo que o comportamento resultante para $\log(|\chi(M_v)|)/N$ é suave.

Comparando as figuras 2.10, vê-se que o que difere o comportamento de $\log(|\chi(M_v)|)/N$ no caso unidimensional do comportamento no caso em campo médio é que no primeiro a característica de Euler não sofre nenhuma descontinuidade.

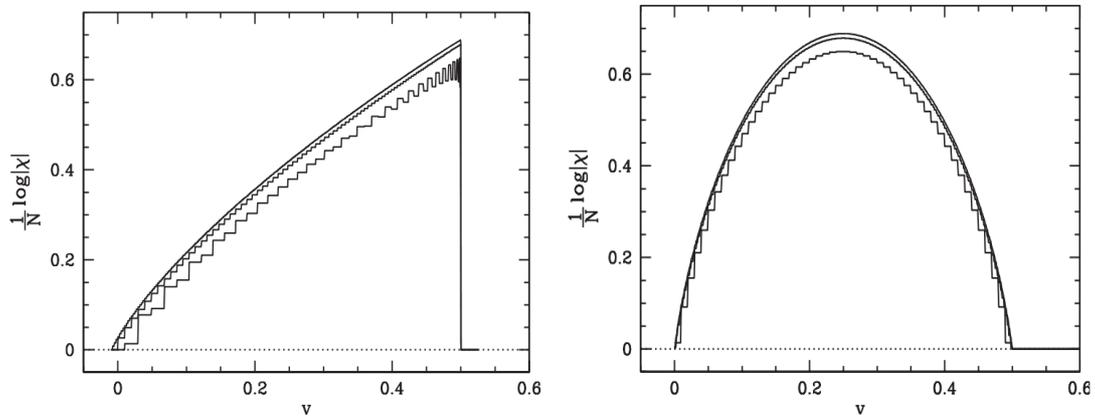


Figura 2.10: Gráficos de $\log(|\chi(M_v)|)/N$ contra v para diferentes tamanhos de sistema (tamanhos crescem com as curvas de baixo para cima) para o modelo XY campo médio, $h = 0.01$ e $v_c = 0.5 + \mathcal{O}(h^2)$ (à esquerda) e para o modelo XY unidimensional, $h = 0$ e sem transição de fase (à direita) [52].

Os resultados representados pelos gráficos 2.10 parecem corroborar a Hipótese Topológica. Entretanto, uma questão permanece em aberto: a transição de fase termodinâmica só acontece após $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty}$, quando o campo é estritamente nulo. No entanto, como se vê da figura 2.10 (à esquerda), o comportamento singular em $\log(|\chi|)/N$ e a TT abrupta ocorrem tanto para N e h finitos - em que *não* há transição de fase do ponto de vista da Mecânica Estatística -, quanto no limite $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty}$ - em que o sistema termodinâmico sofre uma transição de fase.

Modelo k -trigonométrico

Uma outra confirmação analítica direta da HT foi obtida para o modelo k -trigonométrico em campo médio, com Hamiltoniano da forma (2.1) [53–55]. Este modelo permite testar a HT tanto para uma transição contínua quanto para uma de primeira ordem, e fornece um exemplo como base de comparação com o caso sem transição. A energia potencial é dada por:

$$V_k(q) = \frac{\Delta}{N^{k-1}} \sum_{i_1, \dots, i_k} [1 - \cos \frac{2\pi}{L} (q_{i_1} + \dots + q_{i_k})], \quad (2.19)$$

que define interações de k -corpos, onde Δ e L são escalas de energia e comprimento, respectivamente, as somas nos i_k vão de 1 a N , isto é, cada partícula de índice i interage com todas as demais $N - 1$ partículas do sistema (em grupos de k partículas cada vez), e os termos com coordenadas q_i repetidas são subextensivos.

A termodinâmica do modelo foi resolvida dentro do ensemble microcanônico, e as curvas calóricas T/Δ contra e/Δ ($k_B = 1$) mostram a ausência de transição no caso $k = 1$ (o que é esperado pois neste caso não há interação entre os graus de liberdade), e $T(e)$ é uma função contínua e suave; no caso $k = 2$, a função $T(e)$ desenvolve uma derivada descontínua em uma energia e_c , indicando uma transição de segunda ordem (contínua), e no caso $k = 3$, a curva $T(e)$ é descontínua em um valor diferente da energia, indicando uma transição de primeira ordem (gráfico à esquerda na figura 2.11). O valor da energia potencial crítica nas transições $\forall k \geq 2$ é $v_c = \Delta$. No ponto da transição v_c , a simetria C_{kv} é quebrada, sendo o parâmetro de ordem a “magnetização” $m = \langle \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\cos(q_j) + i \sin(q_j)) \right| \rangle$; abaixo da energia crítica e_c há k estados transformados uns nos outros pela ação do grupo de simetria. Neste caso a quebra de simetria também ocorre para a transição de primeira ordem.

Na investigação topológica o ferramental teórico usado foi a Teoria de Morse. Foram analisadas as mudanças de topologia nas subvariedades M_v do espaço de configurações em função de v , através do cálculo analítico da característica de Euler $\chi(M_v)$. No quadro à direita da figura 2.11 grafica-se, como no modelo XY acima, $\sigma(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log |\chi(v)|$.

Do quadro no detalhe no gráfico à esquerda na fig. 2.11, para v/Δ contra e/Δ , observa-se que a região $v > \Delta$ não é acessível ao sistema, e do gráfico à direita na fig. 2.11, que tal região corresponde a $\sigma'(v) < 0$. Vê-se que na ausência de transição ($k = 1$) σ é uma função analítica de v ; para $k = 2$, onde ocorre uma transição contínua, a derivada primeira de $\sigma(v)$ é descontínua em $v_c = v(e_c) = \Delta$, e a derivada segunda é negativa em torno do ponto

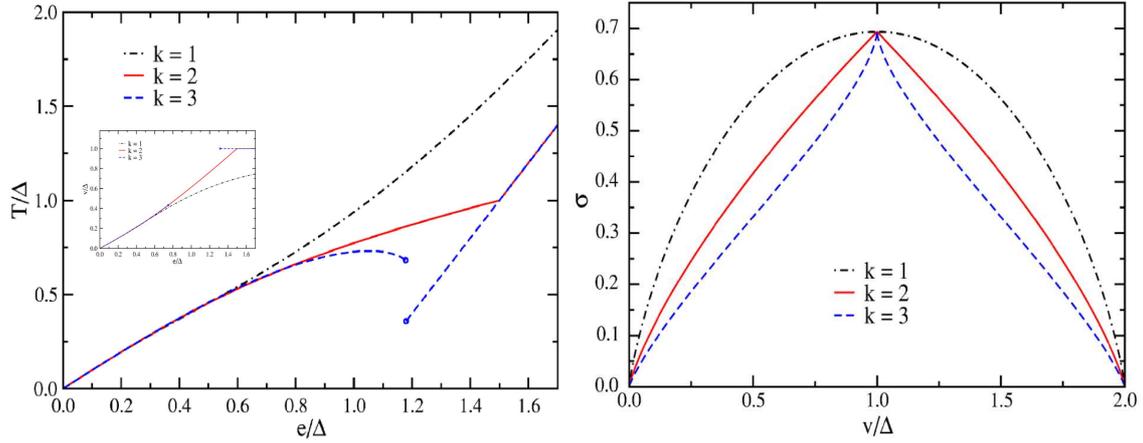


Figura 2.11: Gráfico à esquerda: Temperatura microcanônica como função da energia para $k = 1, 2, 3$. No detalhe, a energia potencial v contra a energia total e , ambos normalizados por Δ ; o ponto da transição é $v_c = \Delta$, $\forall k$. A região $v > 1$ nunca é acessada pelo sistema. Gráfico à direita: Logaritmo da característica de Euler $\sigma(v)$ (definido no texto) contra v/Δ . A transição de fase é assinalada por uma singularidade de $\sigma'(v_c)$, em $v_c = \Delta$. O sinal da segunda derivada em torno do ponto crítico diferencia as ordens das transições [53,54].

crítico; finalmente, para $k=3$, em que ocorre a transição de primeira ordem, a derivada primeira de $\sigma(v)$ também apresenta uma descontinuidade em v_c , porém sua derivada segunda é positiva em torno de v_c . Percebe-se neste caso que transições de diferentes ordens apresentam assinaturas topológicas próprias. Investigar se esta assinatura é universal ou específica a este modelo é uma questão importante¹³. Este trabalho, sendo o primeiro a verificar a Hipótese Topológica para uma transição de primeira ordem¹⁴, é de relevância central na validação desta hipótese como uma possível teoria para transições de fase.

2.4.2 Teorema sobre uma relação de necessidade

Comenta-se aqui uma importante contribuição teórica ao formalismo da HT. Trata-se de dois teoremas, provados em [28,57,58], que estabelecem a *necessidade* de uma transição topológica na família de hipersuperfícies equipotenciais $\{\Sigma_v\}_{v \in \mathbb{R}}$, em um valor crítico de energia potencial, v_c , para a ocorrência de uma transição de fase de primeira ou segunda ordem em v_c . Ambos teoremas se aplicam a potenciais aditivos, confinantes, não singulares, de alcance finito, limitados inferiormente, que sejam funções de coordenadas contínuas. Denota-se esta função por $V_N(q_1, q_2, \dots, q_N)$, onde $\{q_i\}_{i=1, \dots, N}$ representam as coordenadas relevantes do sistema. Assume-se ademais que $V_N(q)$ seja uma função de Morse própria (ver Apêndice A).

Teorema I

O primeiro teorema [28] estabelece que o difeomorfismo \mathcal{C}^∞ entre equipotenciais Σ_v em um certo intervalo de energia potencial $[v_0, v_1]$ garante que a seqüência de energias livres de Helmholtz $\{F_N^{(c)}(\beta)\}_{N \in \mathbb{N}}$ seja uniformemente convergente, com limite $F_\infty^{(c)}(\beta)$ bem definido e sendo pelo menos de classe $\mathcal{C}^2(I_\beta)$, duas vezes difer-

¹³É importante ressaltar que uma análise da relação entre o sinal da segunda derivada de quantidades topológicas e a ordem de transições de fase termodinâmicas foi inconclusiva no caso de modelos XY com interações entre $2+k$ rotores ($k=4, 6$) [56].

¹⁴É válido notar que a transição de primeira ordem neste modelo apresenta quebra espontânea de simetria.

enciável no interior aberto do intervalo de temperaturas (inversas) correspondente, $I_\beta = [\beta_0, \beta_1] = \beta([v_0, v_1])$, de modo que transições de primeira ou segunda ordem *não* podem ocorrer no intervalo (v_0, v_1) .

A prova procede fatorando-se as contribuições à função $F_N^{(c)}(\beta)$, que é definida como a densidade de energia livre de Helmholtz completa, incluindo-se as contribuições configuracional e cinética: $F_N^{(c)}(\beta) = -\frac{\log(\pi/\beta)}{2\beta} + f_N^{(c)}(\beta)$, onde a densidade de energia livre configuracional $f_N^{(c)}(\beta)$ é determinada pela função de partição configuracional, $Z_c(\beta, N)$, através de

$$f_N^{(c)}(\beta) = -\frac{\log Z_c(\beta, N)}{N\beta} = -\frac{1}{N\beta} \log \int_M d^N q e^{[-\beta V_N(q_1, \dots, q_N)]} = -\frac{1}{N\beta} \log \int_0^\infty dv e^{-\beta v} \int_{\Sigma_v} \frac{d\sigma}{\|\nabla V_N\|}. \quad (2.20)$$

A parte não-analítica de $F_N^{(c)}(\beta)$, se ocorre, necessariamente está contida em $f_N^{(c)}(\beta)$.

A densidade de energia livre $f_N^{(c)}(\beta)$ também é obtida pela extremização de uma função adequada da densidade de entropia configuracional $S_N^{(-)}(v) = \frac{1}{N} \log M(v, N)$, onde $M(v, N)$ é o volume representado pelos estados configuracionais com energia potencial menor ou igual a v (subvariedade M_v)¹⁵:

$$M(v, N) = \int_M d^N q \Theta[v - V_N(q_1, \dots, q_N)] = \int_0^v d\eta \int_{\Sigma_\eta} \frac{d\sigma}{\|\nabla V_N\|}. \quad (2.21)$$

Esta definição é remanescente de um vínculo microcanônico imposto sobre a energia *total* do sistema. A relação entre $f_N^{(c)}(\beta)$ e $S_N^{(-)}(v)$ é dada por [59]:

$$f_N^{(c)}(\beta) = \inf_v \left\{ v - \frac{S_N^{(-)}(v)}{\beta} \right\}. \quad (2.22)$$

Esta equação, por sua vez, impõe a relação a seguir entre a temperatura inversa e a densidade de entropia $S_N^{(-)}(v)$:

$$\beta_N(v) = \frac{\partial S_N^{(-)}(v)}{\partial v}. \quad (2.23)$$

A relação das quantidades termodinâmicas acima definidas com a topologia das subvariedades M_v e Σ_v fica mais transparente definindo-se um vínculo microcanônico estritamente sobre a energia potencial, com a seguinte densidade de estados:

$$\Omega(v, N) = \int_M d^N q \delta[v - V_N(q_1, \dots, q_N)] = \int_{\Sigma_v} \frac{d\sigma}{\|\nabla V_N\|} = \frac{\partial M(v, N)}{\partial v}, \quad (2.24)$$

e a respectiva entropia configuracional por partícula: $S_N(v) = \frac{1}{N} \log \Omega(v, N)$. As relações acima resultam na

¹⁵A última igualdade resulta de reexpressar-se a distribuição de Heaviside em termos de deltas de Dirac: $\Theta[v - V_N(q_1, \dots, q_N)] = \int_0^v d\eta \delta[\eta - V_N(q_1, \dots, q_N)]$ (tomando o mínimo do potencial como zero), e usarem-se propriedades da delta de Dirac, que então transformam a integral no volume em uma integral sobre a superfície das raízes do argumento: $\int_D dx \delta[g(x)] = \int_{\Sigma_g} \frac{d\sigma}{|g'(x)|}$, onde o domínio de integração da última integral é o conjunto solução de $g(x) = 0$: $\Sigma_g = \{x \in D \mid g(x) = 0\}$.

seguinte identidade:

$$S_N(v) = S_N^{(-)}(v) + \frac{1}{N} \log \beta_N(v), \quad (2.25)$$

que expressa a relação entre os respectivos suportes das duas entropias: $\Sigma_v = \partial M_v$. Como $\beta_N(v)$ é uma variável de estado intensiva, no limite termodinâmico, as entropias acima definidas são *idênticas*.

A equação (2.24) deixa claro que as não-analiticidades na densidade de estados, e portanto em $S_N(v)$, ocorrem somente se $\nabla V_N = 0$. Da teoria de Morse, sabe-se que $\Sigma_v \approx \Sigma_{v'}$ para quaisquer $v, v' \in [v_0, v_1]$ se e somente se não existirem pontos críticos q_c de V_N em $V_N^{-1}((v_0, v_1))$. Assim, as transições topológicas na variedade M_v ocorrem precisamente nas energias potenciais $v_{TT} \in V_N^{-1}(M_v)$, imagem do conjunto solução de $\nabla V_N = 0$ sob a função de Morse $V_N(q)$.

Reconsiderando a premissa do Teorema I de difeomorfismo entre as equipotenciais Σ_v em $v \in [v_0, v_1]$, é evidente que $\Omega(v, N)$ também é $C^\infty(I_v)$, e conseqüentemente, também $S_N(v)$ é $C^\infty(I_v)$, para qualquer N finito. Prova-se que no limite termodinâmico, $S_\infty(v)$ será pelo menos $C^3(I_v)$, e da identidade entre as entropias definidas neste limite, valerá também $S_\infty^{(-)}(I_v) = C^3(I_v)$. Ora, de (2.23) fica evidente que $\beta(I_v) = C^2(I_v)$, e de (2.22), fica portanto provado que $f_\infty(\beta)$ e $F_\infty(\beta)$ são $C^2(I_\beta)$, pelo menos.

Teorema II

O resultado apresentado pelo segundo teorema [58] complementa a conexão entre topologia e termodinâmica estabelecida pelo Teorema I. Enquanto o resultado do primeiro teorema se aplica somente a intervalos de energia potencial $I_v = [v_0, v_1]$ que *não* contenham valores críticos v_c de $V_N(q)$, o Teorema II analisa a possibilidade de existência de pontos críticos de $V_N(q)$ nos subconjuntos $V_N^{-1}(I_v)$ da variedade M .

Fatoriza-se o volume do espaço de configurações acessível, $M(v, N)$, em duas contribuições, quais sejam: a união de vizinhanças (pseudo-cilíndricas) dos pontos críticos e a subvariedade complementar a esta união em M_v , para uma $V_N(q)$ que seja função de Morse. Do teorema I, sabe-se que esta última subvariedade, livre de pontos críticos de $V_N(q)$, não fornece contribuição singular à entropia configuracional ou às suas primeiras três derivadas, pelo menos.

Mostra-se então que a parte não-analítica da entropia só pode se originar na contribuição a $M(v, N)$ dos pontos críticos de $V_N(q)$, isto é, na presença de transições topológicas, corroborando a hipótese do papel fundamental do mecanismo topológico. Os pontos críticos de $V_N(q)$ são, por hipótese, isolados, isto é, o Hessiano de V_N é não-degenerado, não possuindo autovalores nulos. Para $N < \infty$, isto significa que há um número finito de pontos críticos e de valores críticos.

É possível reescrever a entropia $S_N^{(-)}(v)$ como:

$$S_N^{(-)}(v) = \frac{1}{N} \log \left[\int_{M_v \setminus \cup_{i=1}^{\mathcal{N}_{cp}^{(v)}} \Gamma(q_c^{(i)}, \epsilon_0)} d^N q + \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^{\mu_i(M_v)} A(N, i, \epsilon_0) J_{j(i,k)m(i,k)} + \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{cp}^{v(v)+1}} B(N, i(n), v - v_c^{v(v)}, \epsilon_0) J_{v(v),n} \right], \quad (2.26)$$

onde $\Gamma_j(q_c^{(n_j)}, \epsilon_0)$ são vizinhanças pseudo-clíndricas em torno do ponto crítico $q_c^{(n_j)}$, de dimensão ϵ_0 [58], $\mathcal{N}_{cp}^{v(v)+1}$ é o número de pontos críticos que pertencem à equipontencial $\Sigma_{v_c^{v(v)+1}}$, $\mu_i(M_v)$ são os números de Morse da variedade M_v , isto é, o número de pontos críticos de V_N de índice i que pertencem a M_v , $v(v) = \max\{j \mid v_c^j \leq v\}$, $J_{j(i,k)m(i,k)}$ é o módulo do determinante do Jacobiano da transformação entre a carta inicial $\{q_l\}_{l=1, \dots, N}$ e a carta de Morse $\{x_l\}_{l=1, \dots, N}$, em torno do ponto crítico $q_c^{(m)} = V_N^{-1}(v_c^j)$. $A(N, i, \epsilon_0)$ são números, e $B(N, i, v, \epsilon_0)$ são funções analíticas. Ver-se-á mais adiante que $J_{j(i,k)m(i,k)}$ exerce um papel central na ocorrência de não-analiticidades em $S_N^{(-)}(v)$.

É possível mostrar que o único termo de (2.26) que pode originar transições de fase de primeira ou segunda ordem é o segundo termo no argumento do logaritmo. Este termo está em correspondência com a ocorrência de transições topológicas em M_v . Complementa-se assim a conclusão obtida no Teorema I, sobre a *necessidade* de transições topológicas em presença de transições de fase. As condições de *suficiência*, que poderiam definir uma classe de transições topológicas em correspondência um-a-um com transições de fase, não são entretanto determinadas por nenhum dos teoremas.

Em sistemas com potenciais de curto alcance, entretanto, o conjunto de valores de v correspondentes a TTs se torna denso na vizinhança da TF, e as implicações do teorema deixam de ser significativas, tornam-se triviais. Ainda assim, a necessidade de uma TT na energia crítica de uma TF parece sugerir que transições topológicas são, no mínimo, um dentre os eventuais mecanismos fundamentais na origem de uma transição de fase nesta classe de potenciais. A determinação, se possível, de um critério de suficiência relacionando TTs e TFs estabeleceria a topologia como *único* mecanismo na origem de transições de fase. Verificando-se esta possibilidade, esperar-se-ia poder relacionar *diretamente* quantidades topológicas das subvariedades de energia potencial M_v - invariantes topológicos - a quantidades termodinâmicas do sistema correspondente. Esta talvez seja a principal motivação teórica e prática da Hipótese Topológica.

2.5 Contra-exemplos da Hipótese Topológica

2.5.1 Modelos Unidimensionais: Burkhardt e Peyrard-Bishop

Em [60–62] estudam-se os modelos de Burkhardt [63] e de Peyrard-Bishop [64], sob o prisma da HT, relacionando termodinâmica dos modelos e topologia das variedades de energia potencial. O modelo de Burkhardt

é um modelo unidimensional para a interface entre duas fases sólidas, cujo Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}(q) = \sum_{i=1}^N [K|q_{i+1} - q_i| + U(q_i)], \quad (2.27)$$

onde $U(x)$ é um potencial "externo", limitado superior e inferiormente, com um único ínfimo em algum valor de x . Variantes distintas deste modelo podem apresentar ou não transições de fase. Em [62] define-se o potencial $U(x)$ como um poço quadrado centrado em $x = 0$:

$$U(x) = \begin{cases} -1, & \text{para } |x| \leq 1, \\ 0, & \text{para } |x| > 1. \end{cases}$$

Neste caso, encontra-se que o modelo possuirá uma transição de segunda ordem caso o suporte da função $U(q)$ seja a reta real, isto é, $q_i \in \mathbb{R}, \forall i \in \mathbb{N}$, mas *não* possuirá transição de fase se o suporte de $U(q)$ forem os reais não-negativos, isto é, $q_i \in \mathbb{R}_0^+, \forall i \in \mathbb{N}$. Em [61], definem-se variantes análogas deste modelo: $U(x)$ novamente é um poço quadrado finito, com domínio $x \in \mathbb{R}$, porém usam-se a profundidade do poço, $U_0 < 0$, a largura do poço, R , e a posição do poço quadrado, L , como parâmetros livres. Encontra-se, em particular, que, ao se variar L de 0 a ∞ , a temperatura da transição de fase cresce contínua e monotonicamente até $T_c = \infty$, isto é, ao deslocar-se o poço de potencial para o infinito, a TF nunca é alcançada.

Os trabalhos seguem a seguinte estratégia: dado que uma variante do modelo de Burkhardt possui TF e outra, não, analisa-se a topologia das subvariedades de energia potencial nos dois casos, no intuito de distinguir, pela topologia, os dois comportamentos termodinâmicos (ausência ou presença da transição de fase).

M. Kastner [62] para o espaço de configurações $\Gamma = \mathbb{R}^N$ (isto é, $q_i \in \mathbb{R}, \forall i$), no modelo *sem* transição de fase, encontra a seguinte transição topológica nas subvariedades M_v :

$$M_v \approx \mathbb{I}^N, \text{ para } v < v_\theta = 0 \quad \implies \quad M_v \approx \mathbb{I}^{N-1} \times \mathbb{R}, \text{ para } v > v_\theta, \quad (2.28)$$

onde $\mathbb{I} \equiv [0, 1]$ é um intervalo finito fechado. A topologia de M_v muda de uma bola N -dimensional para o produto de uma bola $(N - 1)$ -dimensional e um intervalo aberto, isto é, M_v muda de uma variedade compacta para uma variedade não-compacta. Para o espaço de configurações $\Gamma = (\mathbb{R}_0^+)^N$ (incluindo q_i não-negativos), no modelo que possui transição de fase, uma transição topológica muito semelhante é encontrada¹⁶:

$$M_v \approx \mathbb{I}^N, \text{ para } v < v_\theta = 0 \quad \implies \quad M_v \approx \mathbb{I}^{N-1} \times \mathbb{R}_0^+, \text{ para } v > v_\theta. \quad (2.29)$$

Neste caso, a topologia de M_v muda de uma bola N -dimensional para o produto de uma bola $(N - 1)$ -dimensional e um intervalo semi-aberto.

Conclui-se, deste resultado, que as transições topológicas das M_v 's encontradas, por serem muito semel-

¹⁶Intuitivamente, poderia inclusive ser considerada *menos* abrupta que a TT encontrada no primeiro caso.

hantes, não distinguem a ausência e a presença de transição de fase na termodinâmica dos modelos, e portanto, não existiria um critério puramente topológico para a existência de transição de fase nesta classe de modelos. Observe-se, ademais, que o valor de energia em que ocorre a TT, v_θ , não coincide com o valor de energia potencial da transição de fase, v_c , quando esta ocorre. Vale notar que o potencial no modelo de Burkhardt é não-confinante e portanto não obedece aos requisitos dos teoremas provados em [28, 57, 58].

Em [60], estudou-se o modelo de Peyrard-Bishop para a denaturação térmica do DNA. Encontrou-se uma TT que leva as respectivas equipotenciais Σ_v de subvariedades compactas a subvariedades não-compactas. Esta TT em [60] é interpretada como o mecanismo responsável pela transição de fase no modelo. Entretanto, como observado em [61], a TT e a TF não ocorrem no mesmo valor de energia potencial, o que viola os teoremas em [28, 57, 58]. Como no caso do potencial de Burkhardt, o potencial de Peyrard-Bishop é não-confinante (como se pode inferir pela subvariedade Σ_v não-compacta acima da transição), o que viola os requisitos dos teoremas.

2.5.2 Modelo ϕ^4 campo médio

A não coincidência da energia crítica v_c e da energia da transição topológica relevante, v_θ , também é observada no modelo ϕ^4 campo médio [65, 66].

O modelo é dado pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(\phi) = \sum_{i=1}^N \left[-H\phi_i - \frac{\phi_i^2}{2} + \frac{\phi_i^4}{4} \right] - \frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \phi_i \right)^2. \quad (2.30)$$

Os termos dentro dos colchetes, somandos do primeiro somatório, expressam o acoplamento dos graus de liberdade ao campo externo e o potencial local sobre cada sítio, que é uma função quártica dos graus de liberdade locais. Cada "partícula" encontra-se sujeita a um potencial de poço duplo ($H = 0$). O termo proporcional a J é o termo de interação entre os graus de liberdade, em que cada grau de liberdade interage com todos os demais.

A campo externo nulo $H = 0$, o sistema possui uma transição de fase de segunda ordem, a temperatura crítica T_c , para $0 < J \leq 1$, está dada pela expansão $T_c = J + \mathcal{O}(J^2)$, que corresponde à energia crítica [67]:

$$v_c = \langle v(T_c) \rangle = -\frac{1}{4}(1 - 2J) + \mathcal{O}(J^2). \quad (2.31)$$

A transição separa uma fase tipo ferromagnética de uma fase tipo paramagnética.

No contexto de uma possível origem microscópica para a transição de fase neste modelo, em que TT e TF não coincidem em energia, duas explicações alternativas foram propostas [65–68].

Pontos de sela visitados pela dinâmica a temperatura fixa

A determinação dos pontos estacionários do Hamiltoniano permite uma análise indireta da topologia das

subvariedades M_v . A caracterização dos pontos críticos consiste em determinar em que valores críticos do Hamiltoniano (e da magnetização) estes ocorrem, sua ordem e a respectiva multiplicidade. Tal caracterização permite calcular a entropia configuracional do sistema e a característica de Euler das subvariedades M_v [65, 66].

O número de estados estacionários de \mathcal{H} de ordem n_s cujos valores críticos não excedam v é dado por $\mathcal{N}_{n_s}(v)$. A soma de $\mathcal{N}_{n_s}(v)$ sobre todas as possíveis ordens n_s dos pontos críticos fornece o número de pontos críticos (de todas as ordens) a energia igual ou menor que v , $\Omega(v)$, que está relacionado à característica de Euler:

$$\begin{aligned}\Omega(v) &= \sum_{n_s=1}^N \mathcal{N}_{n_s}(v), \\ \chi(v) &= \sum_{n_s=1}^N (-1)^{n_s} \mathcal{N}_{n_s}(v).\end{aligned}\quad (2.32)$$

Em princípio, o somatório (série, para $N \rightarrow \infty$) de termos positivos e o somatório (série) alternado dos mesmos termos (invariante topológico) resultam, está claro, em funções distintas de v .

A densidade de pontos críticos à energia v sendo dada por $d\Omega(v)/dv$, a entropia configuracional por partícula (ver Capítulo 1, da Parte II desta tese) fica:

$$\sigma(v) = \frac{1}{N} \log \left[\frac{d\Omega(v)}{dv} \delta v \right] \approx \frac{1}{N} \log \Omega(v). \quad (2.33)$$

A última relação é válida desde que o número de pontos críticos cresça exponencialmente com o número de graus de liberdade N , para energia v crescente. Tal aproximação significa que o número de pontos críticos em ∂M_v dominam (exponencialmente) sobre os demais pontos críticos em M_v . Se, além desta propriedade, para qualquer valor crítico de \mathcal{H} apenas uma ordem de pontos críticos, $\bar{n}_s(v)$, dominar (exponencialmente) sobre as demais, ter-se-á, no limite termodinâmico, a identidade: $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log |\chi(v)| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \Omega(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sigma(v)$ [66].

Os pontos estacionários (isolados) relevantes são determinados por três parâmetros independentes: n_+ , n_0 e n_- , tais que $\sum_{\zeta} \frac{n_{\zeta}}{N} = 1$. A ordem n_s destes pontos estacionários coincide com um destes parâmetros, denotado n_0 pelos autores de [65]: $n_s = n_0$. Cada valor de energia crítica v define um intervalo $[n_0^{\min}(v), n_0^{\max}(v)]$, que limita inferior e superiormente a ordem dos pontos críticos ocorrendo à energia v . Ademais, cada solução de ponto crítico $\{n_+(v, \alpha), n_0(v, \alpha), n_-(v, \alpha)\}$ possui multiplicidade dada por:

$$\mathcal{N}(v, \alpha) = \frac{N!}{n_+! n_0! n_-!} \approx \exp(N\sigma(v, \alpha)), \quad (2.34)$$

que define uma entropia configuracional $\sigma(v, \alpha)$ associada aos pontos críticos em cada energia v e magnetização α , tal que $\sigma(v) = \max_{\alpha \in [\alpha_{\min}(v), \alpha_{\max}(v)]} \sigma(v, \alpha)$.

Em [66], calculou-se uma entropia configuracional $s(v, n_s)$ relativa à multiplicidade de pontos críticos de ordem n_s ocorrendo à energia v . Em $H = 0$, as curvas equipotenciais de $s(v, n_s)$ expressam uma mudança qualitativa na ordem $\bar{n}_s(v)$ que maximiza $s(v, n_s)$ com respeito a n_s , para v fixo. Abaixo da energia $v = v_{\theta}(J)$,

\bar{n}_s é simplesmente dada por $n_0^{\min}(v)$, enquanto acima de $v = v_\theta$, $\bar{n}_s \neq n_0^{\min}(v)$. As soluções coincidem somente para $v = v_\theta$. A importância de \bar{n}_s vem do fato de que o número de pontos críticos de ordem n_s ocorrendo a uma dada energia v é dado por $\mathcal{N}(v, n_s) \sim \exp(Ns(v, n_s))$. Portanto, os pontos críticos de ordem $\bar{n}_s(v)$ dominam exponencialmente sobre todos os demais à energia v , e no limite termodinâmico, $\sigma(v) = s(v, \bar{n}_s(v))$. O comportamento de $\bar{n}_s(v)$ portanto se reflete no comportamento de $\sigma(v)$. Encontra-se que $\bar{n}_s(v)$ possui uma derivada primeira descontínua em $v = v_\theta$, que acarreta uma descontinuidade na segunda derivada de $\sigma(v)$ também em $v = v_\theta$.

O comportamento encontrado para as entropias configuracionais $s(v, n_s)$ e $\sigma(v)$ garante, como explicado acima, que no limite termodinâmico $\frac{1}{N} \log |\chi(v)| = \sigma(v)$. A entropia configuracional, portanto, revela a evolução da topologia das variedades M_v , através do invariante topológico $\chi(v)$.

Na referência [66], Garanin e coautores mostram que a característica de Euler $|\chi(v)|$ muda continuamente para qualquer energia $v < 0$, isto é, há um contínuo de transições topológicas no intervalo de energias $v \in [v_{\min}, 0]$ ($v_{\min} < 0$ é a energia do estado fundamental). $|\chi(v)|$ é uma função analítica para qualquer energia no intervalo, *exceto* $v = v_\theta$, em que sua derivada segunda é descontínua. Esta característica distingue esta transição topológica das demais.

Em [65], analisa-se o comportamento da magnetização $\bar{\alpha}(v)$ que maximiza a entropia configuracional $\sigma(v, \alpha)$ para v fixo. Os pontos críticos correspondentes a esta magnetização são dominantes sobre os demais. Observa-se que $\bar{\alpha}(v)$ vai a zero na energia $v = v_\theta$ (gráficos do painel esquerdo da figura 2.12). Abaixo de v_θ dominam pontos críticos de magnetização finita, pontos de sela *ferromagnéticos*, enquanto acima de v_θ dominam pontos críticos *paramagnéticos*. Desta maneira, argumenta-se que a não-analiticidade em $v = v_\theta$ é a que deve estar relacionada à transição de fase.

A topologia das M_v é *afetada de maneira relevante* pela presença do campo externo H : com $H \neq 0$, a não-analiticidade em $|\chi(v_\theta)|$ desaparece, um resultado positivo na determinação de uma relação entre esta não-analiticidade e a transição de fase no modelo, já que a mesma também é destruída pela presença do campo externo.

Entretanto, a maior discrepância entre topologia das M_v e a termodinâmica neste modelo, como mencionado, é a constatação de que v_θ e v_c , a energia potencial crítica, não coincidem neste modelo de campo médio. Em particular para J suficientemente grande, v_c torna-se positivo e não pode coincidir com nenhuma transição topológica em M_v , já que nenhum ponto crítico ocorre acima de $v = 0$.

Para explicar esta discrepância, A. Andronico e coautores propuseram um mapa $\mathcal{M} : v_\theta \mapsto v_c$ menos restritivo que aquele originalmente proposto pela HT [65]. A energia média crítica v_c de um modelo deve assim estar relacionada com uma transição topológica ocorrendo em v_θ , onde v_θ é a energia do ponto de sela *inerente* a uma configuração referência para tal estado termodinâmico (determinado por T_c e v_c). Nos modelos em que se cumpre $v_\theta = v_c$, o mapa \mathcal{M} é a função identidade.

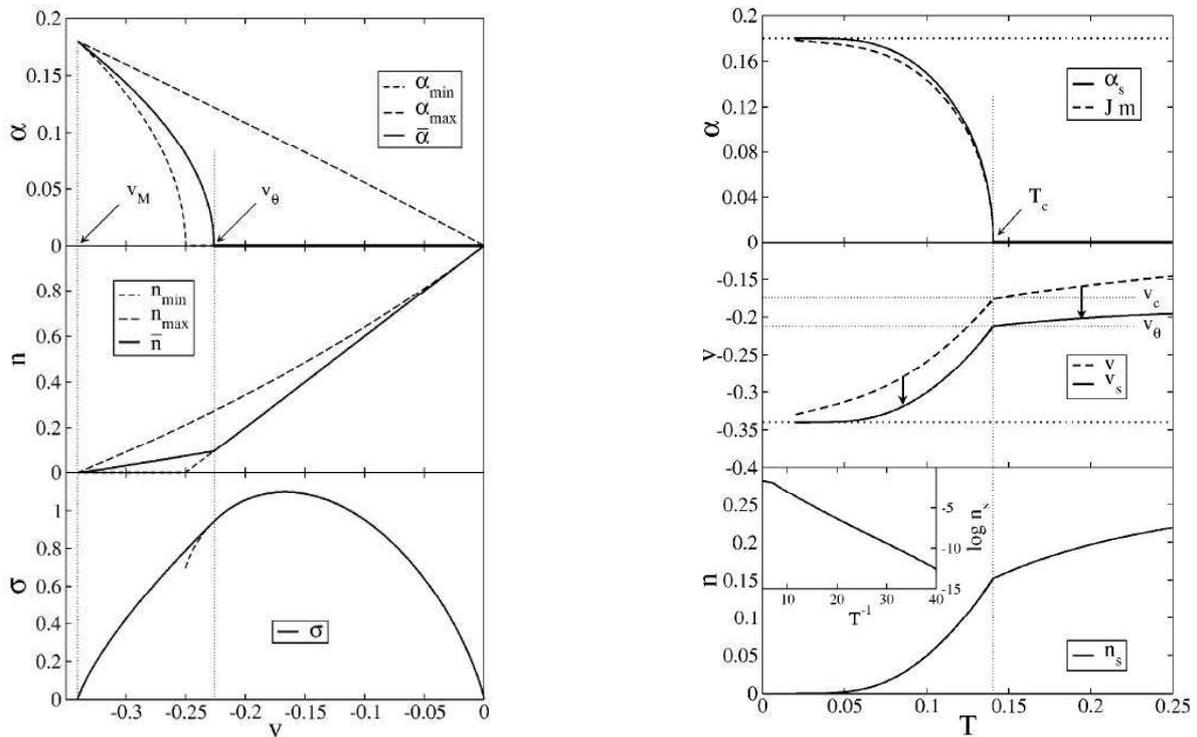


Figura 2.12: Modelo ϕ^4 campo médio com constante de acoplamento $J = 1/6$. **Gráficos à esquerda.** Painel superior: magnetizações máxima e mínima dos pontos de sela ocorrendo a energias v , magnetização $\bar{\alpha}(v)$ (linha contínua) que maximiza a entropia configuracional $\sigma(\alpha, v)$. Painel central: ordens máxima e mínima dos pontos de sela como função de v , ordem $\bar{n}(v)$ (linha contínua) dos pontos de sela dominantes (que maximizam a entropia). Painel inferior: entropia configuracional como função de v , $\sigma(v) = \sigma(\bar{\alpha}(v), v)$. **Gráficos à direita.** Painel superior: magnetização dos pontos de sela inerentes à dinâmica, $\alpha_s(T)$ (linha contínua), e magnetização $Jm(T)$ das configurações de equilíbrio. Painel central: energia potencial média, $v(T)$, e energia dos pontos de sela inerentes à dinâmica, $v_s(T)$; as setas ilustram o mapa $\mathcal{M} : v \mapsto v_s$. Painel inferior: Ordem dos pontos de sela inerentes, $n_s(T)$; o detalhe enfatiza a dependência tipo Arrhenius a temperaturas baixas, $\log(n_s) = -\Delta/T$ [65].

Equilibrando-se o sistema à temperatura T buscam-se os pontos de sela visitados com maior probabilidade pela sua dinâmica. Trata-se de estabelecer uma relação $\mathcal{M}_x : x \mapsto x_s$ entre uma configuração instantânea $x = (x_1, \dots, x_N)$ e o ponto de sela *inerente* à mesma, $x_s = ((x_1)_s, \dots, (x_N)_s)$ (tal que $\nabla_x \mathcal{H}|_{x=x_s} = 0$), e posteriormente, a relação $\mathcal{M} : v \mapsto v_s$, através de uma estatística adequada (à temperatura T fixa).

Para o ϕ^4 campo médio, constata-se que $\alpha_s(T)$ (magnetização dos pontos de sela visitados) e $m(T)$ (magnetização média) vão a zero à mesma temperatura, T_c , e uma não-analiticidade em $v(T_c) = v_c$ e $v_s(T_c)$. Usando-se a temperatura T como parâmetro (painel central à direita da figura 2.12), pode-se construir um mapa $\mathcal{M} : v \mapsto v_s$. O resultado mais interessante desta análise é que, embora v_c não coincida com v_θ , a energia média dos pontos de sela visitados à temperatura crítica coincide com v_θ , para os diferentes J analisados: $v_s(T_c) = \mathcal{M}(v_c) \approx v_\theta$ (Figura 2.13).

Apesar da identidade entre v_θ e $\mathcal{M}(v_c)$ não vigorar estritamente, pode-se comparar o resultado representado pela figura 2.13 com resultados obtidos através de outra definição para $\mathcal{M}(v)$. A diferença encontrada entre v_θ e $\mathcal{M}(v_c)$ se mostra dentro da margem de erro intrínseca à ambigüidade na determinação das “bacias de atração” dos pontos de sela.

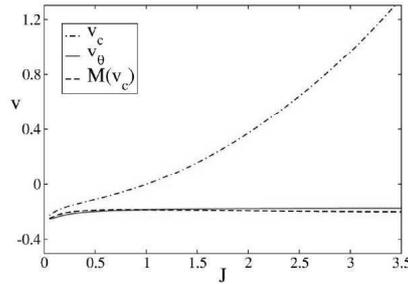


Figura 2.13: Modelo ϕ^4 campo médio. Energia potencial crítica $v_c = v(T_c)$; energia v_θ em que a entropia $\sigma(v)$ possui a singularidade; energia potencial dos pontos de sela inerentes à temperatura crítica T_c , $\mathcal{M}(v_c)$. Observe-se que $v_\theta \approx \mathcal{M}(v_c)$ [65]. (Todas quantidades como funções de J .)

Hipótese Topológica Fraca

Em [61], L. Angelani e coautores, generalizando a relação $\mathcal{M}(v_c) \sim v_c$ proposta pela HT, propõem uma versão menos restritiva da hipótese, a Hipótese Topológica Fraca (HTF), coerente com os resultados de [60, 61, 65–69], discutidos nas Seções 2.5.1 e 2.5.2, onde $\mathcal{M}(v_c) \neq v_c$. Sua análise propõe um cenário coerente para a não-coincidência de v_c e v_θ , e para a ocorrência da transição topológica nas variedades M_θ nos modelos que não apresentam transição de fase.

Tal cenário envolve o conceito de pontos de sela da função $\mathcal{H}(x)$, identificados por x_s ¹⁷ que são visitados pelo sistema durante sua dinâmica a temperatura fixa, chamados *pontos de sela inerentes*. Sabe-se que os pontos de sela da função $\mathcal{H}(x)$ estão diretamente relacionados à topologia das subvariedades M_v (e esta relação é bi-unívoca no caso de $\mathcal{H}(x)$ ser uma função de Morse), como estabelecido pela teoria de Morse. Por outro lado, a

¹⁷Pontos $x_s = ((x_s)_1, \dots, (x_s)_N)$, tais que $\nabla \mathcal{H}(x_s) = 0$.

importância, para a dinâmica e a termodinâmica, dos pontos de sela visitados pela dinâmica de Langevin é uma idéia comprovada numérica e analiticamente no caso de vidros de spin em campo médio [8–15, 70]. Em vidros de spin descontínuos, como o p -spin em campo médio, a ordem dos pontos de sela predominantemente visitados pelo sistema decresce monotonicamente ao se aproximar da transição dinâmica desde temperaturas (energias) mais altas, chegando a zero no ponto da transição dinâmica, T_D ¹⁸. Abaixo da transição dinâmica, pontos críticos de ordem zero, isto é, mínimos, são exponencialmente mais numerosos que pontos de sela de ordem $k > 0$. Acredita-se que a uma temperatura inferior, T_K (denominada temperatura de Kauzmann), o modelo possua uma transição de fase termodinâmica, que por sua vez é caracterizada pelo ponto em que o número de mínimos visitados pelo sistema deixa de ser exponencial em N ¹⁹ (ver Capítulo 4).

Para quantificar os pontos de sela visitados, foram definidos na literatura dois mapas diferentes que levam configurações instantâneas de um sistema a pontos de sela inerentes, $\mathcal{M}_x : x \mapsto x_s$. A primeira faz uso de uma função não-negativa, o pseudo-potencial $W(x) = |\nabla_x \mathcal{H}(x)|^2$, cujos mínimos (absolutos) $W(x_s) = 0$ coincidem com os pontos de sela de \mathcal{H} . Minimizando-se numericamente W a partir de configurações instantâneas de equilíbrio x até o mínimo mais próximo x_s , particiona-se o espaço de configurações em "bacias de atração" do conjunto $\{x_s\}$ [8, 69]. A média sobre a trajetória fornece o mapa $\mathcal{M} : v \rightarrow v_s$, relacionando energia potencial média à energia potencial do ponto de sela "mais próximo". A segunda definição do mapa $\mathcal{M}_x : x \mapsto x_s$ (aplicada em cálculos analíticos), envolve a determinação dos pontos de sela x_s que minimizam a *distância* $d(x, x_s)$ até uma configuração x "típica" do sistema à temperatura T , tomada da distribuição de Gibbs associada²⁰. É preciso salientar que a definição do pseudo-potencial W não é única, e que diferentes potenciais fornecem resultados qualitativamente coerentes, porém não quantitativamente idênticos.

Apesar desta ambigüidade, resultados relevantes foram encontrados ao se analisarem as transições termodinâmicas nos modelos de Burkhardt, Peyrard-Bishop e, como descrito na seção anterior, ϕ^4 campo médio. Usando-se o pseudo-potencial W definido acima, aplicou-se aos modelos o procedimento descrito, para se obterem os respectivos mapas $\mathcal{M} : v \rightarrow v_s$.

- Nos modelos em que ocorre transição de fase, mas nos quais a energia crítica v_c não coincidia com a energia da transição topológica v_θ , mostrou-se que $\mathcal{M}(v_c) \approx v_\theta$, isto é, a energia dos pontos de sela visitados pelo sistema com energia potencial média v_c é (dentro da margem de erro da aproximação) idêntica a v_θ .
- Nos modelos em que *não* ocorre transição de fase, mostrou-se que a energia dos pontos de sela visitados

¹⁸Tal resultado não é exato e existem na literatura interpretações alternativas da origem do comportamento do sistema na transição dinâmica [17].

¹⁹Ponto em que a entropia configuracional *extrapolada* se anula: crise de entropia.

²⁰Neste caso, a quantidade que determina o mapa $\mathcal{M}(v)$ é a média de Gibbs a temperatura T da entropia configuracional relativa aos pontos de sela com energia v_s , a uma distância d de uma configuração dada:

$$\Sigma(T; v_s, d) = \frac{1}{N} \int dx_i \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(x)}}{\mathcal{Z}(T)} \log \left[\int dx'_i \delta(\mathcal{H}(x') - Nv_s) \delta(\partial_i \mathcal{H}(x')) |\det H_{ij}(x')| \delta(d^2 - d^2(x, x')) \right], \quad (2.35)$$

onde $\mathcal{Z}(T)$ é a função de partição, $H_{ij}(x) \equiv \partial_i \partial_j \mathcal{H}(x)$ é o Hessiano do Hamiltoniano calculado no ponto x . Pode-se argumentar então que a minimização da distância d entre configurações instantâneas e pontos de sela de energia v_s , para dada temperatura T , equivale a impor o vínculo $\Sigma(T; v_s(T), d(T)) = 0$.

pelo sistema é sempre *inferior* a v_θ . Desta maneira, a mudança na topologia das subvariedades M_v para $v > v_\theta$ não afeta o comportamento dinâmico/termodinâmico do sistema.

O enunciado original da HT impõe que a energia potencial da transição de fase e a energia potencial onde ocorre a mudança na topologia das subvariedades M_v (Σ_v) devem coincidir: $v_c = v_\theta$. A HTF, em contrapartida, propõe que quando uma transição de fase termodinâmica (dinâmica) ocorre em uma energia crítica v_c , tal transição é acompanhada por uma descontinuidade na topologia das subvariedades M_v , em uma energia v_θ dada por $\mathcal{M}(v_c) = v_\theta$.

Os modelos em que vale a igualdade $v_c = v_\theta$ (que corroboram a HT) *não* são contra-exemplos da HTF. Nestes casos, v_c é um ponto fixo do mapa \mathcal{M} : $\mathcal{M}(v_c) = v_c$.

Diferentemente da Hipótese Topológica original, a HTF depende da medida estatística, já que o mapa $\mathcal{M} : v \rightarrow v_s$ é gerado através da média sobre a trajetória dinâmica (tempo), ou equivalentemente, através de uma média estatística. O enunciado original da HT não faz nenhuma menção a medidas estatísticas, o mapa entre v_c e v_θ sendo simplesmente a função identidade. Entretanto, mesmo para a HT original, uma vez que se determine v_c através da descontinuidade topológica em v_θ , o ponto crítico só estará completamente descrito uma vez que se determine $T_c = T(v_c)$, recorrendo à termodinâmica. Este ponto é particularmente relevante no caso da inequivalência de ensembles.

Maximização da entropia

Para Hahn e Kastner [67, 71, 72], a não coincidência entre a energia v_θ da transição topológica relevante e a energia crítica v_c no modelo ϕ^4 campo médio mostra que neste modelo topologia e termodinâmica são descorrelacionadas. Em uma análise distinta do modelo, os autores propõem uma origem para a transição de fase independente daquela proposta pela HT.

Sendo um modelo de campo médio, os teoremas da Seção 2.4.2 não se aplicam ao mesmo. De fato, v_c , equação (2.31), é uma função crescente de J e para J suficientemente grande v_c se torna positivo, e *nenhuma* transição topológica pode ocorrer na energia crítica do modelo, já que o supremo das energias em que podem ocorrer transições topológicas no espaço de configurações do modelo é $v_{max} = 0$.

Hahn et al mostram que a entropia *microcanônica* $s(v, m)$ é analítica em todo o suporte de energias e magnetizações, e descrevem o mecanismo de maximização de $s(v, m)$ com respeito a m , que acarreta uma não-analiticidade na entropia $\hat{s}(v)$ resultante, em um valor $v = v_c$ da energia.

No âmbito do ensemble canônico, caracteriza-se a ocorrência de uma transição de fase a temperatura T_c , no limite termodinâmico, por uma não-analiticidade na energia livre de Helmholtz em T_c . No âmbito do ensemble microcanônico, entretanto, a definição de uma transição de fase não é tão bem estabelecida²¹. Propõe-se [73–76]

²¹Um exemplo da dificuldade envolvida na definição de transições de fase microcanônicas é que a entropia microcanônica de um sistema finito pode apresentar (muitas) não-analiticidades que desaparecem no limite termodinâmico, e portanto não estão relacionadas com transições de fase em sua definição usualmente aceita.

então caracterizarem-se transições de fase *microcanônicas* buscando-se condições na entropia que correspondam à definição de uma transição de fase no ensemble canônico, isto é, a uma não-analiticidade da energia livre canônica. A existência de um subconjunto do domínio de s em que a entropia microcanônica não seja estritamente côncava e uma não-analiticidade no limite termodinâmico de s são duas condições capazes de acarretar não-analiticidades na energia livre resultante.

O modelo estudado é dado pelo Hamiltoniano (2.30), donde a parte não-interagente é denotada por $z_N(\phi) = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\phi_i^2}{2} + \frac{\phi_i^4}{4} \right]$ (campo nulo). Usando um princípio de grandes desvios (*large deviations principle*), os autores obtêm a entropia do modelo não-interagente, como uma função de taxa (*rate function*), $\tilde{s}(z, m)$, função da parte livre de (2.30) e da magnetização m [67, 68], assumindo-se uma distribuição uniforme para os graus de liberdade ϕ_i (variáveis aleatórias microscópicas)²². A entropia do sistema livre, $\tilde{s}(z, m)$, assim obtida é uma função analítica e côncava sobre todo o seu domínio (painel à esquerda da figura 2.14).

Como $v_N \equiv z_N - \frac{J}{2} m_N^2$ (sendo $m_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i$, ver equação (2.30)) depende apenas de z_N e m_N , a entropia do sistema interagente com energia total v_N e magnetização m_N como parâmetros de controle, $s(v, m)$, é obtida a partir de $\tilde{s}(z, m)$ simplesmente por uma transformação de variáveis não-singular:

$$s(v, m) = \tilde{s}\left(v + \frac{J}{2} m^2, m\right). \quad (2.36)$$

As propriedades de analiticidade de $\tilde{s}(z, m)$ são assim herdadas pela nova entropia $s(v, m)$. Para $J > 0$, entretanto, o domínio de definição de $s(v, m)$ *não* é convexo a baixas energias (painel cenral da figura 2.14). A restrição $s(v, m) \Big|_{(v_c, \infty)}$ é uma função côncava com um único máximo em $\hat{m} = 0$, que corresponde à fase paramagnética.

A restrição complementar, $s(v, m) \Big|_{(-\infty, v_c)}$ *não* possui concavidade definida para qualquer m , em energias menores que algum v_c . Neste intervalo de baixas energias, a entropia possui dois máximos ferromagnéticos $\pm \hat{m} \neq 0$, simétricos em relação ao estado paramagnético $\hat{m} = 0$.

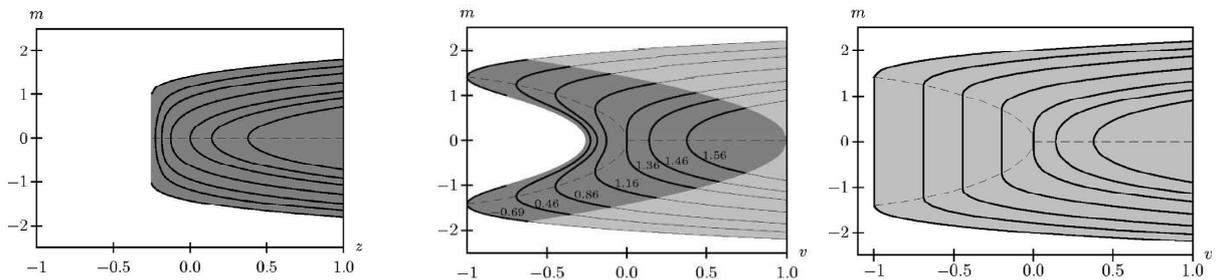


Figura 2.14: Modelo ϕ^4 campo médio: Curvas de nível da entropia do sistema não-interagente, $\tilde{s}(z, m)$ (gráfico à esquerda), da entropia do sistema interagente, $s(v, m)$, para $J = 1$ (gráfico central) e da entropia $s(v, m)$ típica de um sistema com interações de curto alcance com TF contínua em $v_c = 0$ (gráfico à direita). Nas curvas de nível à esquerda, a entropia é côncava e para z fixo é minimizada para m máxima no intervalo acessível; no gráfico ao centro, a linha tracejada marca o máximo de s com respeito a m para v fixo; no gráfico à direita, a linha tracejada marca $\hat{m}(v)$, que maximiza $s(v, m)$ para v fixo [67].

Determina-se v_c localizando o ínfimo de energia em que $\hat{m} = 0$ seja um máximo de $s(v, m)$. Como

²²Reminiscente da hipótese de igual probabilidade de microestados *a priori*, que define o ensemble microcanônico.

$\lim_{v \rightarrow v_c^-} \hat{m} = 0$, v_c marca uma transição de fase contínua²³. A entropia $s(v, m)$ sendo analítica em todo o seu domínio de definição, é lícito expandi-la em série de Taylor, p. ex. em torno de $m = 0$: $s(v, m) = s(v, 0) - \frac{1}{2}f(J; v)m^2 + \mathcal{O}(m^4)$, onde as potências ímpares de m não ocorrem, dada a simetria do modelo em relação à inversão de sinal de m . O estado paramagnético $\hat{m} = 0$ passa de um máximo para um mínimo de $s(v, m)$ quando a contribuição a $s(v, 0)$ do termo quadrático troca de sinal e passa a ser positiva. A energia crítica é dada pela equação $f(J; v_c(J)) = 0$, cuja expansão para J pequeno é dada pela equação (2.31).

Quando se libera o parâmetro de controle m , no limite termodinâmico o sistema maximizará sua entropia, que será dada por $\hat{s}(v) = \sup_m s(v, m) \equiv s(v, \hat{m}(v))$.

A solução $\hat{m} = 0$ sempre é um extremo da entropia. Para $v > v_c$, $\hat{m} = 0$ é o (único) máximo, o sistema se encontra na fase paramagnética. Para $v < v_c$, $\hat{m} = 0$ se torna um mínimo de $s(v, m)$ e duas outras soluções simétricas $\pm \hat{m}(v)$, que são os máximos absolutos na fase ferromagnética. A entropia como função da energia apenas é dada por:

$$\hat{s}(v) = \begin{cases} s(v, 0), & \text{para } v > v_c \\ s(v, \hat{m}(v)), & \text{para } v < v_c, \end{cases}$$

A maximização com respeito a m da entropia analítica $s(v, m)$ gera, na função resultante $\hat{s}(v)$, uma descontinuidade em sua primeira derivada, $\frac{d\hat{s}}{dv}$ em $v = v_c$.

Este mecanismo é restrito a sistemas com interações de longo alcance. Para um sistema com interações de curto alcance, a entropia microcanônica como função de quaisquer variáveis termodinâmicas do sistema é sempre uma função côncava. A forma típica de uma entropia $s(v, x)$ (sendo x uma variável macroscópica do sistema) - como no painel à direita na figura 2.14 - neste caso é o envelope côncavo da entropia $s(v, x)$ de um sistema com interações de longo alcance - como no painel central da figura 2.14. Na presença de uma transição de fase com quebra de simetria em um modelo com interações de curto alcance, a própria função $s(v, x)$ é não-analítica. Isto não ocorre necessariamente no caso de interações de longo alcance, vide o presente modelo de campo médio.

Para sistemas com interações de longo e de curto alcance, as entropias $\hat{s}(v)$ e $s(v, x)$ podem ser expressas pelas integrais:

$$\begin{aligned} \hat{s}(v) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \int_{\partial M_v} \frac{d\phi}{\|\nabla v_N\|} \\ s(v, x) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \int_{\partial M_v} \frac{d\phi}{\|\nabla v_N\|} \delta[x - x_N(\phi)]. \end{aligned} \quad (2.37)$$

No caso de sistemas de curto alcance na presença de uma transição de fase, $s(v, x)$ é não-analítica (assim como $\hat{s}(v)$, evidentemente). Como a não-analiticidade não depende da forma específica da função $x_N(\phi)$, esta não deve estar relacionada ao integrando, mas sim à forma do domínio de integração - em particular à sua topologia, através

²³O limite é garantido pela analiticidade de $s(v, m)$.

dos pontos críticos da energia potencial, tais que $\nabla v_N = 0$ -, como proposto pela Hipótese Topológica.

Em modelos de campo médio (e outros modelos com interações de longo alcance obedecendo a certos critérios), o Hamiltoniano pode ser expresso como função de um número finito de quantidades macroscópicas, funções do tipo $\sum_{i=1}^N g_k(\phi_i)$. Assim, a entropia do sistema interagente pode ser obtida a partir da entropia do sistema livre $\tilde{s}(z, g_1, \dots, g_n)$ (função da parte livre do Hamiltoniano z e das demais n variáveis macroscópicas das quais depende o Hamiltoniano) através de uma transformação de variáveis não-singular. Como a entropia do sistema não-interagente é sempre analítica (pois o sistema livre não possui transição de fase), e a transformação de variáveis é não-singular, conclui-se que a entropia $s(v, g_1, \dots, g_n)$ do sistema interagente também será analítica neste caso. Se uma transição de fase ocorre nestes modelos $\hat{s}(v)$ não será analítica em $v = v_c$, apesar de $s(v, g_1, \dots, g_n)$ ser analítica em todo o seu domínio. Como o domínio de integração é o mesmo em ambas funções, a ocorrência ou não da não-analiticidade no limite termodinâmico, que só ocorre em $\hat{s}(v)$, deve estar relacionada com a forma do respectivo integrando - não está relacionada, portanto, à topologia de ∂M_v . Tomando como exemplo um sistema com transição ferromagnética, a entropia $s(v, m)$, analítica, pode ser expandida em série de Taylor²⁴ em torno de $m = 0$. É possível então mostrar que tal expansão resultará em expoentes críticos clássicos (campo médio), que estarão portanto relacionados com o mecanismo de maximização.

2.5.3 Modelo Esférico campo médio

Outro contra-exemplo da Hipótese Topológica é o Modelo Esférico ferromagnético completamente conectado [5,32]. O modelo é definido pelo Hamiltoniano:

$$V = -\frac{J}{2N} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \epsilon_i \epsilon_j - H \sum_{i=1}^N \epsilon_i, \quad (2.38)$$

onde a constante de interação $J > 0$, H é um campo magnético externo homogêneo. Os graus de liberdade $\{\epsilon_i\}$ estão restritos pelo vínculo esférico: $\sum_{i=1}^N \epsilon_i^2 = N$, a estarem sobre a esfera \mathbb{S}^{N-1} de raio \sqrt{N} , prevenindo que a função de partição divirja.

No contexto do ensemble canônico, pode-se desenvolver a integral múltipla da função de partição reduzindo-a a uma integral sobre uma variável auxiliar, que pode ser aproximada, através do teorema do ponto de sela, pelo supremo (da parte real) do integrando, que ocorre em z_s , solução da equação:

$$z_s = \frac{1}{2J\beta} - \frac{1}{2N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{z_s} - 2J\beta = 0, \quad (2.39)$$

para $H = 0$. No limite termodinâmico, esta solução é exata. $z_s \rightarrow \infty$ quando $T \rightarrow \infty$, e z_s decresce continuamente

²⁴Obtendo-se um funcional de m , análogo ao funcional de energia livre de Ginzburg-Landau.

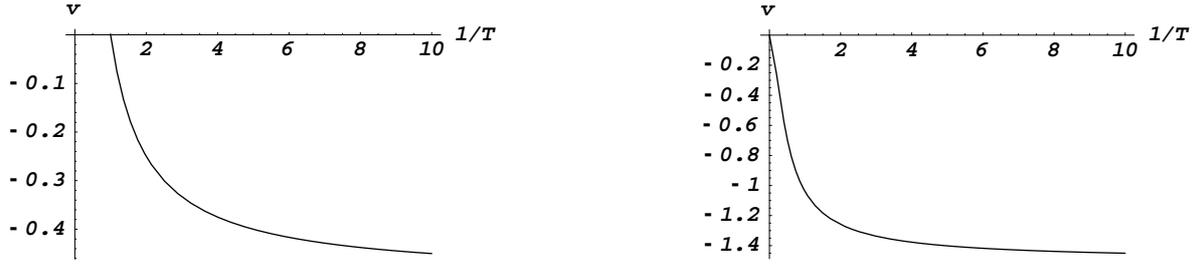


Figura 2.15: Energia interna v do modelo esférico campo médio como função da temperatura inversa $1/T$ para $J = 1$ ($k_B = 1$). À esquerda, em campo externo nulo, $H = 0$: a derivada primeira de v é descontínua à temperatura crítica $T_c^{-1} = 1$. À direita, em campo externo finito, $H = 1$: a energia interna é uma função analítica em todo o domínio de temperaturas [5].

para temperatura decrescente. A energia livre do modelo é dada por:

$$\beta f(\beta, H = 0) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln 2\beta J - 2\beta J z_s + \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \left[\ln \left(z_s - \frac{N-1}{N} \right) + (N-1) \ln \left(z_s + \frac{1}{N} \right) \right]. \quad (2.40)$$

A função entre colchetes é singular em $(z_s)_c = \frac{N-1}{2N} \rightarrow \frac{1}{2}$, que corresponde à transição de fase, cuja temperatura crítica (eq. (2.39)) é $\beta_c = J^{-1}$. Abaixo de T_c , $z_s = \frac{N-1}{2N} \rightarrow \frac{1}{2}$. A energia potencial média é dada por:

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

cujos gráficos estão representados na curva calórica do gráfico da esquerda na figura 2.15, e onde $v_c = v(\beta_c) = 0$. A energia do estado fundamental é $v_0 = -1/2$.

Ao se adicionar um campo externo H ao sistema, a curva calórica correspondente é o gráfico da função (ver gráfico da direita na figura 2.15):

$$v(\beta, H) = \frac{1}{2\beta} - J z_s(\beta) - \frac{H^2}{4J(z_s(\beta) - 1/2)}, \quad (2.41)$$

e apresenta um termo adicional dependente de H , onde z_s é solução da equação de terceiro grau:

$$(z_s - 1/2)^2 - \beta \left[2J z_s (z_s - 1/2)^2 - \frac{\beta H^2}{2J} z_s \right] = 0. \quad (2.42)$$

A energia livre possui um termo adicional: $\beta f(\beta, H) = \beta f(\beta, 0) - \frac{H^2 \beta}{J(z_s - 1/2)^2}$. Novamente, $z_s = \frac{1}{2}$ é a singularidade mais à direita (no eixo real) de $f(\beta, H)$. A equação (2.42) mostra que $z_s \rightarrow 1/2$ apenas para $\beta \rightarrow 0$, isto é, o campo magnético externo destrói a transição a temperatura finita para um estado ferromagnético. A energia interna v tende assintoticamente a $v_0 = -3/2$ quando $\beta \rightarrow \infty$, que é a energia do estado fundamental (com $H = 1$). Para $\beta \rightarrow 0$, $v \rightarrow 0$, que está abaixo do supremo da função $V(\epsilon)/N$, $\sup_{\{\epsilon_i\}} V(\{\epsilon_i\})/N = H^2/2 > 0$. Para temperaturas arbitrariamente altas, os estados de energia positiva não são relevantes para o comportamento médio,

termodinâmico do sistema, no que diz respeito ao ensemble canônico.

A matriz de interação em (2.38) é uma matriz do tipo Toeplitz (e assim simétrica), e portanto pode ser diagonalizada por uma transformação ortogonal construída a partir de seus autovetores. O Hamiltoniano na base dos autovetores da matriz de interação é dado por ($H = 0$): $V(y, H = 0) = -\frac{J(N-1)}{2N}y_1^2 + \frac{J}{2N}\sum_{i=2}^N y_i^2$. Sendo uma transformação ortogonal, o vínculo esférico não é deformado: $\sum_{i=1}^N y_i^2 = N$. Constata-se de $V(y)$ que as equipotenciais são hiperbolóides com uma direção de curvatura negativa, e outras $(N - 1)$ direções de curvatura positiva, equivalentes entre si. O vínculo esférico define o espaço de configurações como a hipersfera \mathbb{S}^{N-1} de raio \sqrt{N} .

Como é sabido, transições topológicas nas variedades M_v só podem ocorrer na presença de pontos críticos da função V . As soluções de pontos críticos, $y_c = \partial_y V|_{y=y_c} = 0$, de V sobre a esfera \mathbb{S}^{N-1} correspondem a apenas dois níveis críticos, $V(y_c)$. A primeira solução ocorre em $v_0 = -J(N - 1)/(2N)$, e corresponde a dois mínimos isolados: $\{y_1 = \pm\sqrt{N}, y_i = 0, \forall i \neq 1\}$, a segunda solução ocorre à energia $v = J/(2N)$ e é um máximo degenerado (ou uma subvariedade crítica) dada por uma esfera \mathbb{S}^{N-2} : $\{y_1 = 0, \sum_{i=2}^N y_i^2 = N\}$.

A simetria das equipotenciais e do espaço de configurações permite a investigação direta da evolução da topologia das variedades M_v em $N \rightarrow \infty$ dimensões. Como a direção y_1 é a única a quebrar a simetria esférica das equipotenciais, e as demais direções são todas equivalentes, é possível investigar o comportamento em alta dimensão através de uma representação em duas dimensões apenas: a primeira delas y_1 , a segunda, qualquer uma das outras dimensões equivalentes. A representação da esquerda na figura 2.16 mostra o comportamento topológico de M_v nesta representação bidimensional, para diferentes valores de energia, $J = 1$ e $H = 0$.

O quadrante superior esquerdo corresponde a um nível de energia v inferior à energia do estado fundamental v_0 : as equipotenciais, neste caso, não possuem nenhum ponto em comum com o espaço de configurações (que em $N = 2$, é o círculo \mathbb{S}^1 de raio $\sqrt{2}$) e a variedade $M_v = \emptyset$, é vazia. O quadrante superior direito corresponde à energia $v = v_0$ do estado fundamental da primeira transição topológica: a variedade M_v são dois pontos, os dois estados fundamentais simétricos. À medida em que se aumenta a energia a partir de v_0 , as equipotenciais varrem continuamente o espaço de configurações, e a variedade M_v corresponde à união disjunta de dois discos abertos, $\mathbb{D}^{N-1} \cup \mathbb{D}^{N-1}$ (mesma classe de homotopia de dois pontos isolados). Tal situação é representada no quadrante inferior esquerdo, em que M_v corresponde aos dois arcos, $\mathbb{D}^1 = \mathbb{I}^1$, desenhados em linhas contínuas, sobre o espaço de configurações. Não ocorrem outras transições topológicas até que a energia atinja seu valor máximo $v_{TT} = v_{max} = -1/(2N) \rightarrow 0$, quando os discos coalescem, e $M_v \sim \mathbb{S}^{N-1}$. O quadrante inferior direito representa a situação para uma energia logo abaixo de v_{max} . A energia $v_{TT} = v_{max}$ em que ocorre a última transição topológica, *coincide* com a energia média crítica v_c , prevista para a transição de fase: $v_{TT} = v_c$. Este resultado parece corroborar a Hipótese Topológica, e o teorema de [57]. A transição topológica, entretanto, *não* é distintamente *abrupta*, pelo menos com respeito ao critério sugerido pelos autores de [52], no modelo XY campo médio. No limite termodinâmico, abaixo de v_{TT} , o sistema popula apenas um dos setores disjuntos da esfera, dependendo do estado inicial escolhido, correspondendo à fase ferromagnética. Apenas para $v \geq v_{TT}$ é que os

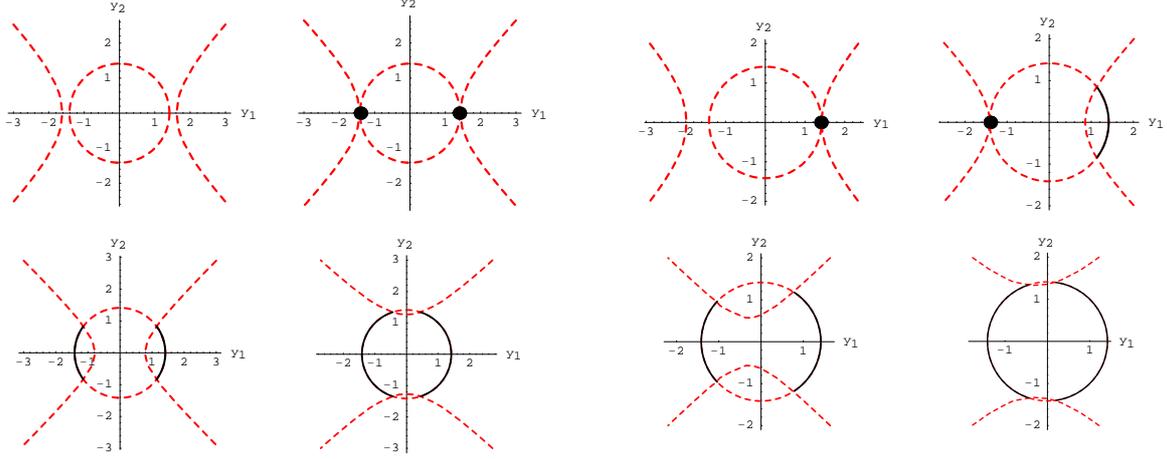


Figura 2.16: Representação das variedades M_v para o modelo esférico com $N = 2$ e $J = 1$. A curva tracejada representa o espaço de configurações M , definido pelo vínculo esférico, e as equipotenciais para um valor fixo de v . As curvas contínuas representam as variedades $M_v = \cup_{u \leq v} (\Sigma_u \cap M)$. A representação da evolução à esquerda corresponde ao caso em campo nulo, $H = 0$. A evolução à direita representa o sistema em campo externo finito, $H = 0.1$. Ver descrição dos quadrantes da figura no texto [5].

dois setores são acessíveis ao sistema.

Na base que diagonaliza a matriz de interação, com H finito, tem-se $V(y, H) = V(y, 0) - \sqrt{N}Hy_1$. Para as soluções de ponto crítico desta equação encontram-se: dois pontos isolados, um mínimo absoluto $\{y_1 = \sqrt{N}, y_i = 0, \forall i \geq 2\}$, ocorrendo em $v'_0 = -(N-1)/(2N) - H$ e um mínimo local $\{y_1 = -\sqrt{N}, y_i = 0, \forall i \geq 2\}$, ocorrendo em $v''_0 = -(N-1)/(2N) + H$, e uma subvariedade crítica, correspondendo a um máximo degenerado $\{y_1 = -H\sqrt{N}, \sum_{i=2}^N y_i^2 = N(1-H^2)\}$, ocorrendo em $v'_{max} = 1/(2N) + H^2/2$. A representação à direita na figura 2.16 é uma representação bidimensional equivalente àquela à esquerda na mesma figura (fig. 2.16) para o sistema em campo finito, $H = 0, 1$ ($J = 1$). O quadrante superior esquerdo mostra a emergência de M_v , em $v = v'_0$, com o estado fundamental (único neste caso) - homotopicamente equivalente a \mathbb{D}^{N-1} . O quadrante superior direito mostra a ocorrência do segundo mínimo, e a segunda transição topológica: $\mathbb{D}^{N-1} \rightarrow \mathbb{D}^{N-1} \cup \mathbb{D}^{N-1}$. À medida em que se aumenta a energia, duas regiões desconexas compõem M_v , apenas uma é acessível ao sistema no limite termodinâmico (situação similar ao limite termodinâmico do caso a campo nulo, abaixo de $v_{TT} = v_c$). O quadrante inferior direito mostra M_v na máxima energia termodinamicamente acessível: $v = 1/(2N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$. Observa-se que $M_v \sim \mathbb{D}^{N-1} \cup \mathbb{D}^{N-1}$, as duas subvariedades ainda são desconexas. A subvariedade crítica é anexada a M_v apenas à energia $v'_{max} \rightarrow H^2/2$, e esta transição topológica nunca ocorre no sistema (em $N \rightarrow \infty$). A ausência da transição topológica nos níveis mais altos de energia é consistente com a ausência de transição de fase no sistema em campo finito. Entretanto, tal conclusão só é possível pelo conhecimento *a priori* da termodinâmica do sistema. Caso a termodinâmica do sistema não fosse conhecida, da semelhança na evolução da topologia de M_v para os casos $H = 0$ e $H \neq 0$, concluir-se-ia erroneamente pelo mesmo comportamento termodinâmico nos dois casos.

Conclui-se, assim, que a topologia, embora aparentemente necessária, não é *suficiente* para a ocorrência de uma transição de fase no sistema [5].

Equivalência parcial de ensembles

A mecânica estatística oferece diferentes ensembles, como o microcanônico e o canônico, no contexto dos quais o comportamento termodinâmico pode ser calculado. Cada ensemble remete a uma situação física distinta; por exemplo, o microcanônico corresponde a um sistema energeticamente isolado, em que a energia é uma constante do movimento microscópico de seus componentes elementares, o canônico corresponde a um sistema em contato (por uma interação suficientemente fraca) com um banho térmico²⁵, de modo que a energia não é estritamente constante, mas sofre flutuações cujo “tamanho” depende do parâmetro da temperatura (e inversamente do número de graus de liberdade do sistema). Para sistemas com interações de curto alcance, os diferentes ensembles fornecem resultados idênticos para observáveis relevantes do sistema²⁶, no limite termodinâmico. Neste caso, qualquer uma das situações físicas representadas pelos diferentes ensembles resultam em comportamentos termodinâmicos equivalentes. Para sistemas com interações de longo alcance, entretanto, a equivalência entre os ensembles *não* é garantida. Quando os ensembles são inequivalentes, o comportamento termodinâmico de tais sistemas deverá ser determinado através do ensemble que expresse a situação física correspondente - sistema isolado, ou em contato térmico com o meio.

No contexto da Hipótese Topológica, no caso de ensembles inequivalentes, a conexão entre topologia e termodinâmica, se existir, dever-se-á dar com apenas um dos ensembles.

Em [77], constatou-se que o modelo esférico campo médio apresenta comportamentos termodinâmicos marcadamente distintos, no contexto dos ensembles canônico e microcanônico, apresentando equivalência parcial de ensembles. Tal resultado levou a uma releitura crítica das conclusões de [5]. A entropia microcanônica é dada por [77]:

$$s(v, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \Omega_N(v) = \frac{1}{2} \ln \left[1 - \left(|H| - \sqrt{H^2 - 2v} \right)^2 \right], \quad (2.43)$$

cujos domínios se constituem de todo par (v, H) que define argumentos positivos para a raiz quadrada e o logaritmo. O domínio da entropia, assim, é definido pelas inequações: $\mathcal{D}_s = \{(v, H) \in \mathbb{R}^2 \mid v < H^2/2 \wedge v > -1/2 - |H|\}$. Em especial, para $H = 0$, $s(v, 0) = \frac{1}{2} \ln[1 + 2v]$, que é uma função analítica e estritamente côncava em todo o intervalo de definição correspondente, $v \in (-1/2, 0)$.

A concavidade da função $s(v, 0)$ e seu suporte compacto permitem definir a energia livre *canônica*, $f(\beta, 0)$, a partir da entropia *microcanônica*, $s(v, 0)$, através de uma transformação de Legendre [73]. Entretanto, a derivada da entropia apresenta um ínfimo positivo, o que implica em um mínimo positivo na temperatura inversa microcanônica:

$$\beta^{mic}(v, 0) = \frac{\partial s(v, 0)}{\partial v} = \frac{1}{1 + 2v} \rightarrow \begin{cases} +\infty, & \text{para } v \rightarrow -1/2^+, \\ 1, & \text{para } v \rightarrow 0, \end{cases}$$

²⁵Um sistema muito maior que o sistema estudado, para o qual as flutuações de energia devidas às trocas com o sistema estudado são desprezíveis frente à sua energia total.

²⁶Certas correlações e segundos momentos possuem resultados distintos em diferentes ensembles.

que é uma função monotônica decrescente de v . A temperatura inversa microcanônica nunca é menor que $\beta_{min}^{mic} = 1$. Tal propriedade implica em uma relação biunívoca entre macroestados²⁷ canônicos e microcanônicos para $\beta^{can} \geq 1$ (equivalência dos ensembles), enquanto os macroestados canônicos com $\beta^{can} < 1$ correspondem a um único macroestado microcanônico, o macroestado de máxima energia $v = 0$ [77] (quebra da equivalência de ensembles no nível dos macroestados [73]). Para $H \neq 0$, os ensembles canônico e microcanônico resultam (completamente) equivalentes.

Por outro lado, da analiticidade e concavidade da entropia no limite termodinâmico infere-se - usando-se o mesmo critério para definição de TFs microcanônicas da Seção 2.5.2 [67, 77]-, a ausência de transição de fase no ensemble microcanônico, mesmo na ausência de campo externo H . Esta marcante distinção em relação ao comportamento no ensemble canônico caracteriza a equivalência parcial entre os ensembles, descrita no parágrafo anterior.

A partir deste resultado, uma releitura da análise da topologia do modelo esférico campo médio, realizada em [5] é possível. Em [5], viu-se que a evolução da topologia das subvariedades M_v ou Σ_v não é substancialmente afetada pela presença ou ausência do campo externo, principalmente no que diz respeito à transição topológica associada à transição de fase canônica ($M_v \sim \mathbb{D}^{N-1} \cup \mathbb{D}^{N-1}$, para $v = H^2/2 - \delta v$, enquanto $M_v \sim \mathbb{S}^{N-1}$, para $v = H^2/2 + \delta v$). Esta transição topológica, ademais, não é abrupta, no que diz respeito ao critério sugerido em [52]. Em comparação à termodinâmica microcanônica, a semelhança entre as transições topológicas nos dois casos simplesmente reflete a ausência de transição de fase no modelo tanto em campo externo finito quanto em campo externo nulo. O fato de esta transição topológica não ser especialmente abrupta reitera esta interpretação. Estabelecendo a comparação da topologia das variedades M_v com o ensemble microcanônico, o modelo esférico campo médio, equação (2.38), *corrobora* a HT.

Inclusão do termo cinético

A relevância dos resultados de [5] não é, entretanto, suplantada por esta reinterpretação, já que aqueles resultados se aplicam a uma variante do modelo esférico campo médio. Os graus de liberdade do modelo esférico, nas bases $\{\epsilon\}$ ou $\{y\}$, são variáveis contínuas, e tal propriedade permite a definição de uma dinâmica Hamiltoniana (ou Lagrangeana) para as mesmas variáveis. Define-se, assim, o Hamiltoniano com uma parte de interação idêntica a (2.38) e uma parte cinética:

$$\mathcal{H}(\epsilon) = \sum_{i=1}^N \frac{\dot{\epsilon}_i^2}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \epsilon_i \epsilon_j - H \sum_{i=1}^N \epsilon_i, \quad (2.44)$$

onde o momento de inércia dos graus de liberdade ϵ_i foi fixado em 1 (um). Os graus de liberdade obedecem ao

²⁷Um macroestado é um estado do sistema definido por um conjunto suficiente de variáveis termodinâmicas, em contraposição a um microestado, definido por um ponto no espaço de fases, tendo como coordenadas graus de liberdade microscópicos do sistema.

vínculo cinético: $\sum_{i=1}^N \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^N y_i^2 = N$. A entropia microcanônica do modelo é dada por:

$$s(e, H) = \frac{1}{2} + \frac{\ln \pi}{2} + \frac{\ln 2k_s}{2} + \frac{1}{2} \ln \left[1 - \left(|H| - \sqrt{H^2 - 2(e - k_s)} \right)^2 \right], \quad (2.45)$$

onde k_s é solução da equação de ponto de sela:

$$\frac{|H| - \sqrt{H^2 - 2(e - k_s)}}{\left[1 - \left(|H| - \sqrt{H^2 - 2(e - k_s)} \right)^2 \right] \sqrt{H^2 - 2(e - k_s)}} + \frac{1}{2k_s} = 0. \quad (2.46)$$

A campo externo nulo, a entropia $s(e, 0)$ é dada por [78–80]:

$$s(e, 0) = \begin{cases} \ln \left(\frac{1+2e}{2} \right), & \text{para } e \leq 1/2 \\ \frac{1}{2} \ln(2e), & \text{para } e > 1/2. \end{cases}$$

O estudo da termodinâmica microcanônica do modelo mostra que $s(e, 0)$, o limite termodinâmico da entropia microcanônica a campo externo nulo, apresenta uma não-analiticidade à energia $e = 1/2$. A entropia, ademais, é uma função estritamente côncava cuja derivada, $\beta(e, 0) = \frac{\partial s(e, 0)}{\partial e} \rightarrow \infty$ para $e \rightarrow -1/2^+$, e tende assintoticamente a zero para $e \rightarrow \infty$: $\beta(e, 0) \in [0, \infty)$. A relação entre macroestados canônicos e microcanônicos é biunívoca em todo o intervalo de temperaturas (energias), e portanto a equivalência completa entre os ensembles é recuperada pela adição do termo cinético.

A parte de interação do Hamiltoniano (2.44) coincide com o Hamiltoniano do modelo esférico campo médio (2.38), e portanto, a evolução da topologia das respectivas subvariedades M_v no espaço de configurações também coincide com os resultados para a topologia de [5]. As conclusões estabelecidas por [5] para o modelo esférico (2.38) podem ser estendidas ao modelo esférico cinético em campo médio (2.44), comparando-se a topologia das variedades M_v com a termodinâmica obtida por qualquer dos dois ensembles estatísticos. Conclui-se para este modelo que a topologia não pode ser o único mecanismo responsável pela transição de fase existente no modelo a campo externo nulo. Este modelo é portanto um contra-exemplo da HT [80].

2.6 Resultados recentes: Origem de não-analiticidades em entropias microcanônicas

O número crescente de modelos para os quais o mecanismo topológico parece ser insuficiente ou descorrelacionado das transições de fase desafia a validade ou pelo menos a generalidade da Hipótese Topológica, sob a forma originalmente elaborada. Recentemente, M. Kastner e colaboradores sistematizaram dois mecanismos fundamentais para as TFs, capazes de gerar singularidades na entropia microcanônica [67, 68, 71, 72, 81–83]. O

primeiro mecanismo - maximização da entropia microcanônica em relação a um parâmetro termodinâmico - se aplica a modelos para os quais a topologia parece estar descorrelacionada da origem das TFs, o segundo mecanismo - divergência da densidade Jacobiana para o mapa de Morse - se aplica a modelos em que a topologia parece exercer algum papel na origem das TFs. Este último mecanismo estabelece um critério de suficiência para que TTs nas subvariedades M_v do espaço de configurações destes modelos originem transições de fase, mas este critério envolve adicionalmente propriedades *geométricas* - e não apenas topológicas - das M_v 's na vizinhança dos pontos críticos relevantes, o que aponta para a inexistência de um critério puramente topológico para a emergência de transições de fase. Nas duas próximas seções descrevem-se sucintamente estes mecanismos. Um mecanismo adicional, ainda que pouco explorado, foi proposto por [62], e também observado em [60], para dois modelos distintos com potenciais não-confinantes. Nestes dois modelos as transições de fase são acompanhadas por uma mudança topológica qualitativa nas M_v , que de subvariedades compactas se tornam não-compactas. Entretanto, como salientado na seção 2.5.1, esta mudança topológica *não* coincide com a energia crítica das transições de fase.

2.6.1 Singularidade na densidade Jacobiana

Os teoremas FPS [28, 58] estabelecem a necessidade de transições topológicas coincidirem com as transições de fase ocorrendo em sistemas com potenciais de curto alcance, confinantes e estáveis. À luz destes teoremas, o mecanismo topológico parece ser o mais relevante na origem de transições de fase em alguns modelos. Entretanto, em geral no limite termodinâmico as transições topológicas nas subvariedades M_v formam um contínuo sobre o suporte de energias. A grande maioria destas TTs não tem qualquer relação com TFs e a busca por um critério puramente topológico que pudesse identificar quais transições topológicas são relevantes para o fenômeno da transição de fase foi inconclusiva. Assim, sem o conhecimento *a priori* da termodinâmica destes modelos, seria impossível identificar as TTs relevantes.

Em [72, 81–83], a abordagem topológica é complementada com um critério geométrico, que determina uma condição de *suficiência* para TTs originarem TFs, pois quantifica a contribuição de dada transição topológica à entropia microcanônica. Este critério topológico-geométrico permite mostrar que no limite termodinâmico a maioria das transições topológicas são descorrelacionadas de transições de fase.

A densidade de estados $\Omega_N(v) = \int_{\Gamma_N} d^N q \delta[V(q) - Nv]$, pode ser decomposta em dois termos, um relativo à integral sobre um subdomínio, $\gamma_N^a \subset \Gamma_N$, livre de pontos críticos de $V(q)$, e outro relativo à integral sobre o subdomínio complementar a γ_N^a em Γ_N , $\gamma_N^{na} = \mathbb{C}_{\Gamma_N} \gamma_N^a$, que compreende os pontos críticos de $V(q)$, ocorrendo a energias v_c , e as vizinhanças destes pontos. Considera-se $V(q)$ uma função de Morse própria.

Assim: $\Omega_N(v) = \Omega_N^a(v) + \Omega_N^{na}(v)$, onde o primeiro termo contém a parte analítica da densidade de estados, e o segundo, a parte não-analítica. As transições topológicas, como se sabe, são relacionadas à ocorrência dos pontos críticos de $V(q \in M_v)$. A contribuição topológica está contida na parte não-analítica Ω_N^{na} que,

evidentemente, é a única que pode produzir singularidades na entropia microcanônica - e portanto transições de fase. A contribuição de um único ponto crítico (isolado), q_c , ocorrendo à energia crítica $V(q_c)/N = v_c \in [v - \epsilon, v + \epsilon]$ (ϵ arbitrariamente pequeno) é:

$$\Omega_N^{na}(v) = \int_{\gamma_N^{na}} d^N q \delta[V(q) - Nv] = \frac{(N\pi)^{N/2}}{N \Gamma(N/2) \sqrt{|\det[\mathcal{H}_V(q_c)/2]|}} h_{N,k}^{na}(v), \quad (2.47)$$

onde $h_{N,k}^{na}(v)$ é dada por

$$h_{N,k}^{na}(v) = \begin{cases} (-1)^{k/2} (v - v_c)^{(N-2)/2} \Theta(v - v_c), & \text{para } k \text{ par,} \\ (-1)^{(k+1)/2} (v - v_c)^{(N-2)/2} \pi^{-1} \ln |v - v_c|, & \text{para } N \text{ par, } k \text{ ímpar,} \\ (-1)^{(N-k)/2} (-(v - v_c))^{(N-2)/2} \Theta(-(v - v_c)), & \text{para } N, k \text{ ímpares,} \end{cases}$$

onde k é a ordem do ponto crítico q_c , e $\mathcal{H}_V(q_c)$ é o Hessiano do potencial calculado no ponto crítico q_c . O conteúdo deste resultado é topológico, dada a relação com propriedades do ponto crítico q_c , mas também é geométrico, já que o determinante do Hessiano é uma medida da *curvatura* da superfície de energia na vizinhança de q_c .

Observe-se que $h_{N,k}^{na}(v)$ possui uma não-analiticidade em $v = v_c$, mesmo em N finito. Esta não-analiticidade corresponde à ocorrência de uma descontinuidade na derivada de ordem $\lambda = \lfloor (N-2)/2 \rfloor$ de $\Omega_N^{na}(v)$. A não-analiticidade é suavizada com N crescente, já que λ cresce linearmente com o número de graus de liberdade. No limite termodinâmico, portanto, a não-analiticidade não deve ser devida à função $h_{N,k}^{na}(v)$, mas ao seu pré-fator em $\Omega_N^{na}(v)$, em particular, $[\det \mathcal{H}_V(q_c)]^{-1/2}$.

A entropia microcanônica no limite termodinâmico será dada por:

$$s(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln[A_N^\epsilon(v) + B_N^\epsilon(v)] = \max\{a^\epsilon(v), b^\epsilon(v)\}, \quad (2.48)$$

onde $a^\epsilon(v) = \frac{1}{N} \ln[A_N^\epsilon(v)]$ e $b^\epsilon(v) = \frac{1}{N} \ln[B_N^\epsilon(v)]$ (já que $\lim_{x \rightarrow 0} \ln[1+x] = 0$), e $B_N^\epsilon(v)$ contém as contribuições não-analíticas Ω_{N,q_c}^{na} dos diferentes pontos críticos q_c ocorrendo na vizinhança de v :

$$B_N^\epsilon(v) = \sum_{\{v_c: |v_c - v| < \epsilon\}} \sum_{\{q_c: V(q_c) = Nv_c\}} \Omega_{N,q_c}^{na}(v), \quad (2.49)$$

que contém uma soma sobre valores críticos $v - \epsilon < v_c < v + \epsilon$ e uma soma sobre pontos críticos $q_c(v_c)$. Para potenciais de curto alcance, as contribuições analíticas convergem uniformemente para a função analítica $a^\epsilon(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(A_N^\epsilon(v))/N$, e portanto não podem produzir transição de fase no sistema.

Pode-se mostrar que a função $b^\epsilon(v)$ no limite termodinâmico é limitada superiormente por:

$$b^\epsilon(v) \leq \frac{1}{2} \ln(\epsilon) + \sqrt{2\pi\epsilon} + \max_{\ell, |v-v'| < \epsilon} [n_\ell + j_\ell(v')], \quad (2.50)$$

onde $\exp[N n_\ell]$ é o número total de pontos críticos de ordem $k \pmod{4} = \ell$ na vizinhança de v . A densidade

Jacobiana correspondente aos pontos críticos de ordem $k(q_c) \pmod{4} = \ell$ no limite termodinâmico é dada por:

$$\begin{aligned} j_\ell(v) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left(\frac{\sum_{q_c \in Q_\ell(v, v+\epsilon)} J(q_c)}{\sum_{q_c \in Q_\ell(v, v+\epsilon)} 1} \right), \\ J(q_c) &= |\det \mathcal{H}_V(q_c)|^{-1/2}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde $Q_\ell(v, v + \epsilon)$ é o conjunto dos pontos críticos supracitados no intervalo $(v, v + \epsilon)$, e $J(q_c)$ é o determinante do Jacobiano da transformação $\{q\} \rightarrow \{x\}$, sendo $\{x\}$ a carta de Morse na vizinhança de um dado ponto crítico q_c (ver Apêndice A). O Teorema a seguir resume as condições sobre a função $b^\epsilon(v)$ para a ocorrência de uma transição de fase no sistema termodinâmico:

Teorema: *A contribuição dos pontos de sela de $V(q)$, dada pela função $b^\epsilon(v)$, não pode induzir uma transição de fase na energia potencial por partícula $v = v_t$, se as duas condições abaixo se cumprirem:*

1. *O número de pontos críticos é limitado por $\exp(CN)$, para algum $C > 0$ (número de pontos críticos cresce menos que exponencialmente com N) e*
2. *As densidades Jacobianas em uma vizinhança de v_t possuem um limite termodinâmico da forma (2.51) com $j_\ell < \infty, \forall \ell \in \{0, 1, 2, 3\}$.*

Note-se que o Teorema acima, ao estabelecer condições necessárias para a ausência de TFs em um sistema, determina um critério de suficiência para a ocorrência de TFs. A segunda condição do Teorema é a que permite identificarem-se a maior parte dos pontos críticos da energia potencial $V(q)$, e as transições topológicas correspondentes, como irrelevantes do ponto de vista da ocorrência de transições de fase, isto é, quase todos os pontos críticos de $V(q)$ serão tais que $j_\ell < \infty, \forall \ell \in \{0, 1, 2, 3\}$. Da forma para j_ℓ (e $J(q_c)$), conclui-se que a divergência na densidade Jacobiana de um dado ponto crítico está condicionada à ocorrência de um Hessiano singular de $V(q)$, isto é, de uma curvatura tendendo a zero na vizinhança de q_c .

Este Teorema completa os teoremas FPS [28, 58], no sentido de fornecer condições de suficiência para que transições topológicas originem transições de fase em sistemas termodinâmicos. Este critério, entretanto, não é puramente topológico.

Aplicando-se tal Teorema a dois modelos que corroboram a Hipótese Topológica, quais sejam, o modelo XY campo médio e o modelo k -trigonométrico (Seção 2.4.1), calcularam-se as respectivas densidades Jacobianas $j_\ell(v)$ no limite termodinâmico. Apesar destes modelos apresentarem um contínuo de TTs, as respectivas densidades Jacobianas possuem, cada uma, apenas um ponto de divergência, coincidindo exatamente com o ponto v_c das transições de fase em cada um dos modelos (Figura 2.17). Em [81, 83], ao contrário da ambigüidade encontrada em [52] (em relação à manutenção da descontinuidade em $\log |\chi|/N$ ainda com campo externo finito $H \neq 0$ no modelo XY), observa-se que a divergência da densidade Jacobiana desaparece em campo finito. Entretanto, em [84], o cálculo da densidade Jacobiana para este mesmo modelo mostra que a divergência se mantém a campo externo finito suficientemente fraco, e desaparece apenas para campos externos suficientemente altos; a ambigüi-

dade com relação aos efeitos do campo externo distintos para topologia e termodinâmica permanece. No modelo k -trigonométrico, observa-se da Figura 2.17, que o caso $k = 1$, em que não há transição de fase, $j_\ell(v)$ é uma função constante; nos casos $k \geq 2$, $j_\ell(v)$ possui divergência exatamente nos pontos críticos do modelo [81, 83].

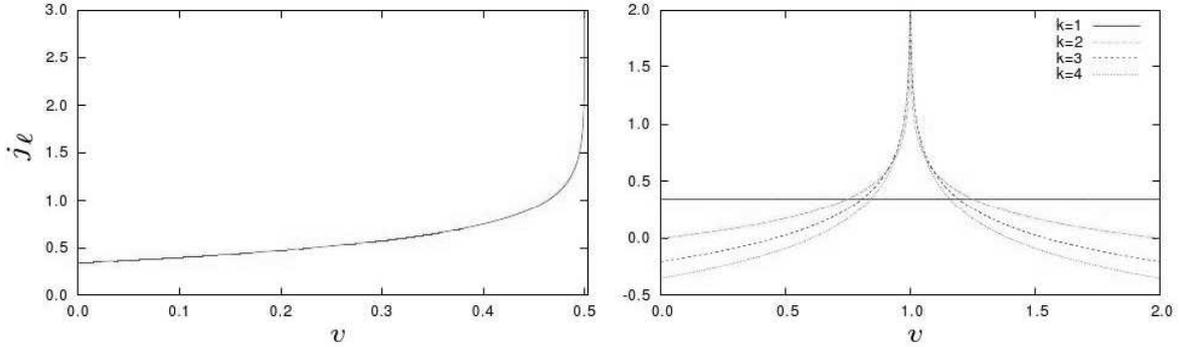


Figura 2.17: Densidade Jacobiana $j_\ell(v)$ como função da energia potencial por partícula, v , para o modelo XY (quadro à esquerda), e para o modelo k -trigonométrico, com $k = 1, 2, 3, 4$ (quadro à direita) [81, 83].

Em [84, 85], estudou-se a topologia do espaço de configurações do modelo AB_2 -XY em campo médio, com interações antiferromagnéticas entre os spins (rotores) em uma rede de célula unitária com estrutura AB_2 :

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j=1}^{N_c} \frac{1}{N_c} \left\{ z_{AB} \mathbf{S}_{A_i} \cdot (\mathbf{S}_{B_{1j}} + \mathbf{S}_{B_{2j}}) + z_B J \mathbf{S}_{B_{1i}} \cdot \mathbf{S}_{B_{2j}} \right\} - \sum_{i=1}^{N_c} \mathbf{h} \cdot (\mathbf{S}_{A_i} + \mathbf{S}_{B_{1i}} + \mathbf{S}_{B_{2i}}), \quad (2.52)$$

onde z_{AB} e z_B são os números de coordenação de spins A e B, respectivamente, e $z_B J/z_{AB}$ é a razão entre os acoplamentos $A - B$ e $B - B$. Este modelo é uma variante do modelo XY campo médio já descrito. Como é sabido, interações antiferromagnéticas são frustradas em redes triangulares. Apesar do modelo ser campo médio, a célula unitária com spins não idênticos guarda informação estrutural do sistema e é capaz de estabilizar uma variedade de fases complexas, com estruturas de spins não-colineares. O parâmetro de ordem do modelo, correspondentemente, é mais complexo que no modelo XY “usual”.

Por ser um modelo de campo médio, seu Hamiltoniano pode ser expresso exclusivamente como função dos parâmetros de ordem $\mathbf{m}_\alpha = \left(\frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \cos(\theta_{\alpha i}), \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \sin(\theta_{\alpha i}) \right)$, com $\alpha = A, B_1, B_2$; $i = 1, \dots, N_c$, e $\theta_{\alpha i}$ é o ângulo que $\mathbf{S}_{\alpha i}$ faz com o eixo Ox . Pode-se representar a evolução da topologia com a energia no espaço de menor dimensão (dimensão três) dos parâmetros de ordem²⁸: os macroestados acessíveis são dados pela intercessão das superfícies equipotenciais (quádricas hiperbólicas) com os vínculos sobre o módulo dos spins $\mathbf{S}_{\alpha i}$ e outras propriedades de invariância do Hamiltoniano (configurações no conjunto \mathcal{C}_B). Tal representação permite “desprezar” a maior parte das TTs no espaço de configurações microscópico, considerando-se apenas aquelas que implicam em uma mudança na topologia do espaço dos parâmetros de ordem, que em campo externo $\mathbf{h} = 0$ são duas. Definindo-se $E_{min}(J)$ como a energia na qual as equipotenciais começam a possuir interseção com o espaço de vínculos \mathcal{C}_B , e $E_{Tmin}(J)$ a energia na qual a característica de Euler $\chi_J(E)$ deixa de ser zero, a primeira TT observada no espaço dos parâmetros de ordem é dada pelo par (J, E) em que E_{min} e E_{Tmin} passam a diferir. Esta TT

²⁸Com magnetização transversal m_{Ay} nula, e considerando a simetria $|(m_{B1})_x| = |(m_{B2})_x| \equiv |m_{Bx}|$, $|(m_{B1})_y| = |(m_{B2})_y| \equiv |m_{By}|$.

corresponde à transição de fase de segunda ordem induzida pelo parâmetro de frustração J , em $T = 0$ e $J = 1^{29}$.

A segunda TT observada no espaço dos parâmetros de ordem ocorre à energia $E_c = 0$, $\forall J$ e corresponde à transição do espaço de macroestados acessíveis (interseção entre equipotenciais e o espaço de vínculos \mathcal{C}_B) entre um hiperbolóide de uma folha para $E_{Tmin} \leq E < E_c$ e um hiperbolóide de duas folhas para $E_c < E \leq E_{Tmax}$ (E_{Tmax} é a energia a partir da qual a topologia do espaço de macroestados acessíveis não se modifica mais e $\chi_J(E > E_{max})$ passa a ser constante). Esta TT corresponde à transição de fase contínua (induzida por flutuações térmicas), ocorrendo em $T_c(E_c = 0; J)$, acima da qual a magnetização espontânea se anula (figura 2.18).

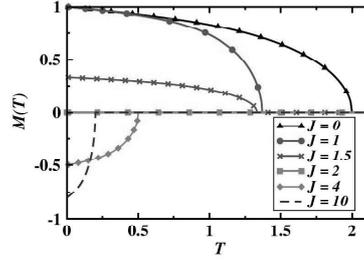


Figura 2.18: Magnetização espontânea do modelo AB_2 -XY frustrado em função da temperatura para diferentes valores do parâmetro de frustração J [84].

F. A. N. Santos e M. D. Coutinho-Filho calculam numericamente a característica de Euler (a função associada $\ln |\chi_J(E)|/2N_c$) e a densidade Jacobiana, $j_{\ell,J}(E)$, para o espaço de configurações microscópico (*microestados*) acessível em [84] (figura 2.19). Constatam-se, do comportamento de $\ln |\chi_J(E)|/2N_c$, um contínuo de TTs no suporte de energias E , e em particular, que as duas TTs acima descritas no espaço de *macroestados* marcam as singularidades observadas na função. Observa-se um padrão de cúspide em $E_c = 0$ para todos os valores de J . Para $J \geq 2$, observa-se uma descontinuidade em $\ln |\chi_J(E)|/2N_c$ em E_{Tmin} , já que para estes J 's, $\chi_J(E) = 0$ no intervalo $E_{min} \leq E < E_{Tmin}$. Na densidade Jacobiana observa-se uma divergência de $j_{\ell,J}(E)$ em $E_c = 0$, $\forall J$, que confirma que a transição de fase ferrimagneto-paramagneto é originada pelo mecanismo topológico. O comportamento da função $j_{\ell,J}(E)$ para E_{Tmin} e $J \geq 2$ ($J=2,5$) é resultado da descontinuidade supracitada em $\ln |\chi_J(E)|/2N_c$. A densidade Jacobiana, ademais, apresenta uma “anomalia” em sua curvatura na região de energias negativas, para $J = 1$, que divide os comportamentos qualitativos de $j_{\ell,J}(E < 0)$ em $J < 1$, e $J > 1$ (ver figura 2.19 (b)). O ponto de inflexão não coincide com a energia da transição a temperatura zero $E_c(T = 0) = -3$ (exatamente em $J = 1$). A esta energia $E_c(T = 0) = -3$ e $J = 1$ as energias E_{min} e E_{Tmin} passam a diferir, e o estado fundamental em E_{Tmin} corresponde a uma solução metaestável de Ising (marcado na figura 2.19 sobre a linha tracejada com um quadrado).

Ao se acrescentar um campo externo não-uniforme (*staggered*), que mantém fixos os momentos magnéticos $m_{Ax} = -1$, se destróem as transições de fase. Neste caso, como ilustrado pela figura 2.20, o padrão de cúspide

²⁹Para $0 \leq J < 1$, o estado fundamental do sistema é ferrimagnético. Aumentando-se o parâmetro de frustração em $1 \leq J < 2$, a componente x dos momentos magnéticos da espécie B começa a diminuir, e as componentes y se tornam correspondentemente finitas (em $0 \leq J < 1$, $(m_{B1})_y = (m_{B2})_y = 0$), com $(m_{B1})_y = -(m_{B2})_y$ (*canted phase*). Em $J = 2$, a configuração dos momentos magnéticos é tal que a magnetização espontânea para qualquer T desaparece (ângulo entre quaisquer dois spins em uma célula unitária é 120°). Para $J > 2$, a magnetização espontânea do estado fundamental inverte seu sentido ao longo do eixo Ox (ângulo entre os dois momentos magnéticos B_1 e B_2 se torna superior a 120°).

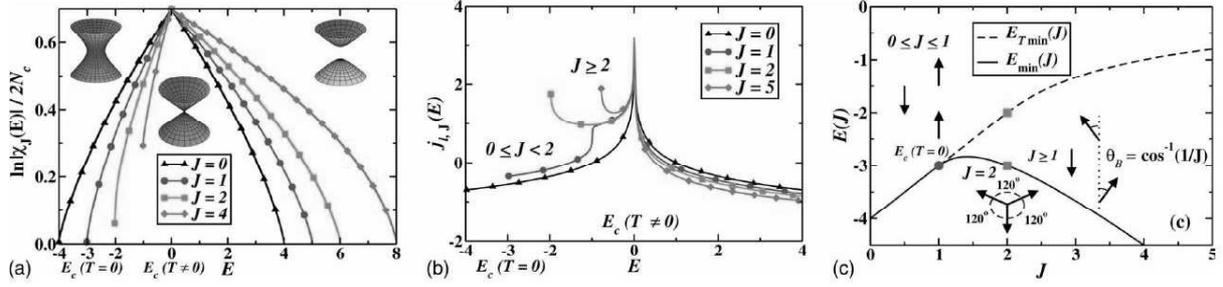


Figura 2.19: (a) $\ln|\chi_J(E)|/2N_c$ como função de E para o modelo XY-AB₂ frustrado com diferentes valores de J (observe-se o padrão de cuspide em $E_c(T \neq 0) = 0, \forall J$: a transição de fase a temperatura finita é gerada pelo mecanismo topológico). (b) Densidade Jacobiana $j_{\ell,J}(E)$ para o mesmo modelo e diferentes valores de J . (c) E_{min} e E_{Tmin} se dividem para $J = 1$ em $E_c(T = 0) = -3$. As estruturas de spin ilustradas representam os estados fundamentais em diferentes valores de J [84].

encontrado para $\ln|\chi(E)|/N_c$ em campo nulo parece se suavizar (os cálculos são numéricos, então não se pode confirmar exatamente a hipótese de diferenciabilidade para campo não-nulo). Curiosamente, entretanto, a densidade Jacobiana continua apresentando uma divergência em um valor da energia $E = 0$ para os diferentes valores de J estudados, portanto, no mesmo valor de energia crítica da transição de fase no caso sem campo externo.

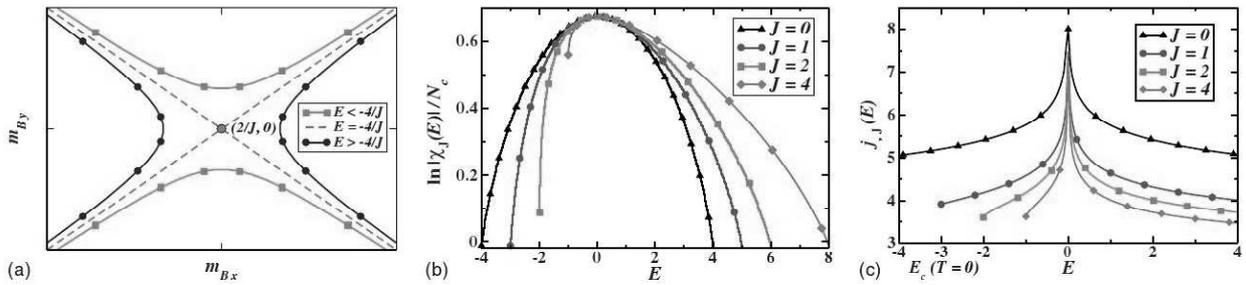


Figura 2.20: Modelo XY-AB₂ frustrado em campo externo não-uniforme (cujo efeito é manter fixos os momentos magnéticos $m_{Ax} = -1$): (a) Representação das equipotenciais no espaço dos parâmetros de ordem livres para diferentes valores de energia. (b) $\ln|\chi_J(E)|/2N_c$ como função de E : parece não ocorrer o padrão de cuspide na presença do campo que destrói a transição de fase. (c) Densidade Jacobiana $j_{\ell,J}(E)$, que apresenta uma divergência em $E = 0$ para os diferentes valores de J [84].

Ao se acrescentar um campo externo uniforme na direção x com parâmetro de frustração nulo, $J = 0$, a transição de fase é destruída. Como se vê na figura 2.21, o padrão de cuspide de $\ln|\chi_J(E)|/2N_c$ em $E_c(T \neq 0) = 0$ se mantém apenas para $h = 0$. Entretanto, a densidade Jacobiana $j_{\ell,J}(E)$ ainda apresenta divergências em $E = E_c(T \neq 0) - h^2/2$ para valores finitos, suficientemente pequenos, de h , em $0 < h \leq 4$, que não podem estar associadas a uma transição de fase. Uma transição de fase de primeira ordem em $E_{Tmin}(h)$, para $h = 4$, é observada, caracterizada por uma inversão de spin e induzida pelo campo externo, como esperado. Observa-se uma descontinuidade em $\ln|\chi_J(E)|/2N_c$ em E_{Tmin} para $h = 4$, que marca a transição de fase. A divergência na densidade Jacobiana, por sua vez, é removida para todo h acima da transição de fase, $h > 4$.

A manutenção das divergências na densidade Jacobiana mesmo na ausência de transição de fase contradiz a conclusão anterior de que a topologia seja o mecanismo tanto necessário quanto suficiente para a emergência da transição de fase a temperatura finita.

Finalmente, o cálculo da função $b^e(v)$ para o modelo esférico na rede mostrou que a contribuição topológica à entropia é nula neste modelo, $b^e(v) = 0$, explicando a não-coincidência entre não-analiticidades da densidade

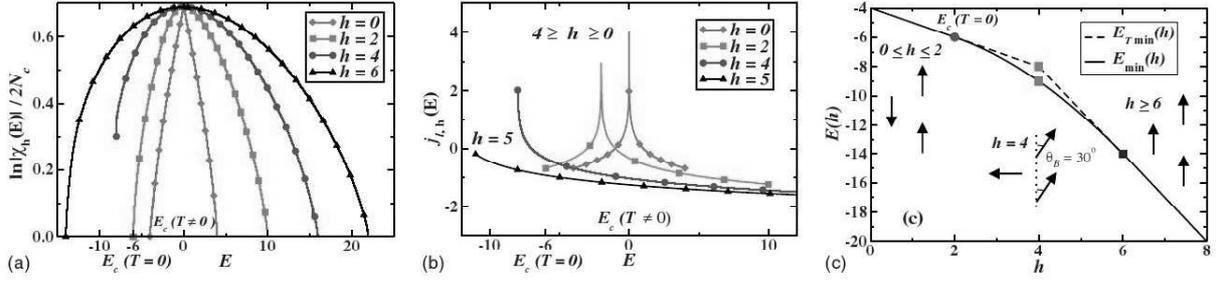


Figura 2.21: Modelo XY-AB₂ em campo externo uniforme: (a) O padrão de cúspide em $\ln|\chi_J(E)|/2N_c$ ocorre apenas para $h = 0$, e a descontinuidade, apenas para $h = 4$. (b) Divergência de $j_{L,h}(E)$ à energia $E_c(T \neq 0) - h^2/2$, para $0 \leq h \leq 4$, enquanto a transição de fase só ocorre para $h = 0$. (c) Separação de $E_{min}(h)$ e $E_{Tmin}(h)$ em $E_c(T = 0) = -6$, $h = 2$. As energias voltam a coincidir em $h = 6$, $E \approx -14$. Os diagramas representam os estados fundamentais em $E_{min}(h)$ para os diferentes valores de h [84].

de degenerescência da matriz de interação do modelo, $c(v)$ (equação (3.30)) do Capítulo 3, e a decorrelação entre topologia e transições de fase no modelo (ver Capítulo 3).

Para sistemas com potenciais de longo alcance, a contribuição $a^\epsilon(v)$ à entropia microcanônica $s(v)$ não é necessariamente analítica. A topologia então pode não ser o mecanismo relevante na origem da transição de fase nestes sistemas. A próxima seção resume o mecanismo de geração de transições de fase quando a topologia não é o mecanismo relevante; em outras palavras, quando a contribuição de $a^\epsilon(v)$ supera a de $b^\epsilon(v)$ e $a^\epsilon(v)$ é não-analítica (ver Seção 2.5.2).

2.6.2 Singularidade por maximização em relação a um parâmetro

Como descrito em detalhe na Seção 2.5.2, em alguns modelos a transição de fase não é acompanhada por uma transição topológica, ou transições topológicas resultam irrelevantes para o fenômeno da transição de fase. Tais modelos incluem potenciais de longo alcance ou não-confinantes [60, 62, 65].

Em [67, 68, 71, 72] mostrou-se que o mecanismo alternativo responsável pela transição de fase no modelo ϕ^4 campo médio é a maximização com respeito à magnetização, da entropia microcanônica do modelo, $\hat{s}(\epsilon, m)$, como função da energia e magnetização. Como explicado na Seção 2.5.2, tal mecanismo se aplica a sistemas em que a equivalência de ensembles não vigora, portanto, somente a (certos) sistemas com interações de longo alcance. Em tais sistemas, é possível encontrar uma entropia microcanônica não-côncava no limite termodinâmico, função de dois parâmetros termodinâmicos, $\hat{s}(\epsilon, m)$ ³⁰. A maximização de tal entropia analítica em relação à magnetização produz uma não-analiticidade na entropia resultante, $s(\epsilon)$, e portanto uma transição de fase no sistema. Voltando ao contexto da fatorização da densidade de estados $\Omega_N(v)$ descrita na Seção anterior, observa-se que neste caso a contribuição dominante à entropia é dada por $a^\epsilon(v)$ (equação (2.48)), e que esta será não-analítica.

Em [82], se sugere que este seja o mecanismo responsável pela transição de fase no modelo esférico na rede. Entretanto, tal sugestão parece improvável, visto que neste modelo, como mostrado nesta tese, a equivalência de

³⁰Note-se que no ensemble canônico, a entropia deve ser uma função côncava de qualquer de seus parâmetros.

ensembles vigora, e portanto tem-se uma entropia microcanônica côncava.

2.7 Recapitulação e Síntese

As duas questões centrais que motivam a Hipótese Topológica no estudo de transições de fase são: (i) É possível prever a ocorrência de uma TF em um modelo apenas através da análise da parte interativa de seu Hamiltoniano? (ii) É possível estabelecer uma relação entre propriedades topológicas das variedades M_v e quantidades termodinâmicas do respectivo modelo?

A topologia fornece uma descrição bastante reducional das propriedades das variedades acessíveis no espaço de configurações, M_v . A abordagem topológica a transições de fase é uma tentativa de relacionar a ocorrência de transições de fase a quantidades mais fundamentais que as medidas definidas no âmbito dos diferentes ensembles estatísticos.

Este capítulo resume os resultados obtidos nos modelos XY campo médio, k -trigonométrico e ϕ^4 bidimensional, que corroboram a HT. Os resultados nestes modelos mostram que, embora um contínuo de transições topológicas nas variedades M_v (Σ_v) seja encontrado, a transição topológica ocorrendo na energia crítica v_c , associada à transição de fase, apresenta aspectos distintivos, e pode ser considerada mais abrupta. Também se apresentaram resultados sobre os modelos ϕ^4 campo médio, Peyrard-Bishop, Burkhardt, esférico campo médio (incluído o termo cinético), que contradizem a HT (pelo menos em sua forma mais restritiva). Nos modelos ϕ^4 campo médio, Burkhardt e Peyrard-Bishop a transição topológica relevante *não* coincide com a transição de fase nos modelos. Nos modelos de Burkhardt e esférico campo médio, compararam-se duas variantes de cada modelo, cujas termodinâmicas diferem pela presença e pela ausência de transições de fase. Encontrou-se que a topologia das subvariedades acessíveis do espaço de configurações é indistinta quando comparadas as duas variantes correspondentes de cada modelo.

Os dois teoremas descritos na Seção 2.4.2 estabelecem a necessidade de uma transição topológica da variedade M_v (Σ_v) na energia crítica de um modelo com potencial aditivo, confinante, não-singular, de alcance finito, limitado inferiormente. Estes resultados determinam que o mecanismo topológico está ligado à origem de transições de fase, pelo menos para a classe de potenciais definida pelos requisitos dos teoremas. Vale salientar que nenhum dos modelos enumerados acima obedece a todos os requisitos dos teoremas. A ausência de transição topológica na energia crítica dos modelos de Burkhardt, Peyrard-Bishop e ϕ^4 campo médio não invalida os teoremas, já que estes não se aplicam a nenhum dos três modelos.

Na Seção 2.5.2, enunciou-se uma versão menos restritiva da HT, a Hipótese Topológica Fraca, que consegue relacionar de forma coerente a evolução da topologia das M_v 's e a termodinâmica dos modelos de Burkhardt, Peyrard-Bishop, ϕ^4 campo médio. Nesta Seção também foi descrito um mecanismo alternativo gerador de não-analiticidades na entropia microcanônica de sistemas com interações de longo alcance: a maximização de uma entropia não-côncava com respeito a um de seus parâmetros. Este mecanismo também foi aplicado ao modelo

ϕ^4 campo médio, e é uma possível explicação para a origem da transição de fase no modelo. O mecanismo de maximização proposto por Kastner é complementar aos teoremas de Franzosi-Pettini-Spinelli (FPS), já que se aplica a modelos com interações de longo alcance, não contemplados pelos teoremas.

No que se refere ao mecanismo topológico, os teoremas de Franzosi-Pettini-Spinelli determinam a necessidade de uma TT e uma TF ocorrerem à mesma energia para a classe de potenciais aos quais se aplicam, porém neste estágio ainda resta estabelecer a existência de condições de suficiência que garantam uma relação biunívoca entre transições topológicas e transições de fase. Para tal, é preciso estudar modelos aos quais se apliquem os teoremas FPS. Com esta motivação, verificou-se a validade da Hipótese Topológica sobre o Modelo Esférico com interações a primeiros vizinhos em uma rede hipercúbica, que é parte dos resultados originais apresentados nesta tese, no capítulo a seguir.

Posteriormente aos resultados sobre o modelo esférico na rede, os resultados dos teoremas FPS foram complementados por M. Kastner e colaboradores, que conseguiram estabelecer um critério de suficiência topológico-geométrico aplicado a modelos em que a topologia exerce um papel relevante na origem de não-analiticidades na entropia microcanônica. Outro mecanismo foi também proposto, aplicado a transições de fase em modelos de longo alcance, que apresentam inequivalência de ensembles.

Capítulo 3

Hipótese Topológica e o Modelo Esférico na Rede

Este capítulo apresenta a aplicação da Hipótese Topológica sobre o Modelo Esférico em uma rede hipercúbica com interações a vizinhos próximos. Apresenta-se inicialmente a termodinâmica do modelo, se estabelece a equivalência entre os ensembles canônico e microcanônico no mesmo, e finalmente, apresenta-se a análise da topologia das subvariedades M_v do espaço de configurações do modelo, buscando-se assinaturas topológicas das transições de fase que ocorrem no modelo. Estes resultados são parte dos resultados originais apresentados nesta tese.

Introduziu-se no capítulo anterior a Hipótese Topológica [2] como uma tentativa de explicar TFs em sistemas termodinâmicos ao nível do espaço de fases destes sistemas. Estudando a topologia do espaço de configurações Γ , subespaço do espaço de fases definido pelo domínio da energia potencial microscópica $V(x)$, determinam-se as transições topológicas (TTs) que ocorrem nas subvariedades de energia potencial (SEP), $M_v = \{x \in \Gamma \mid \frac{V(x)}{N} \leq v\}$ como função do parâmetro v . Uma transição topológica ocorre em v quando as subvariedades $M_{v-\epsilon}$ e $M_{v+\epsilon}$ não são homeomórficas, para ϵ arbitrariamente pequeno. A hipótese sugere que seja possível definir uma "classe" de transições topológicas que estariam relacionadas biunivocamente a transições de fase, desvelando a origem fundamental de TFs. Viu-se que a HT consiste de uma análise microscópica, que precede a termodinâmica e a definição de ensembles estatísticos. Entretanto, faz-se importante salientar que mesmo que se consiga relacionar uma transição topológica ocorrendo em v_c a uma transição de fase ocorrendo à mesma energia potencial, ainda se faz necessário recorrer à termodinâmica a fim de determinar a temperatura crítica correspondente, T_c .

Em geral, como visto nos exemplos do capítulo anterior, muitas TTs ocorrerão nas subvariedades M_v , à medida em que se varia o parâmetro v , de modo que TTs são muito mais frequentes que as transições de fase em um sistema. Assim, é provável que apenas uma classe de TTs - e não qualquer TT - seja de fato capaz de produzir

uma TF. Os resultados já obtidos mostram que a natureza das transições topológicas ou de suas assinaturas, através dos invariantes topológicos analisados, é bastante distinta de um modelo a outro. A HT foi testada em diversos modelos estatísticos clássicos [52]- [5]. Em alguns exemplos, a hipótese foi corroborada, o que permitiu que critérios de suficiência para a relação entre TTs e TFs fossem sugeridos, porém, resultados mais recentes são negativos com respeito à hipótese da maneira como foi originalmente proposta. Estes últimos em geral apontam para a inexistência de uma relação biunívoca entre TTs e TFs, e, em certos casos, evidências sugerem que não haja correlação entre TTs e TFs.

Neste capítulo, aplica-se a HT ao Modelo Esférico na rede hipercúbica, com interações a primeiros vizinhos. Busca-se, com esta análise sobre um modelo que obedece aos requisitos dos teoremas FPS (ver, entretanto, comentários ao final do capítulo), determinar uma condição de suficiência para que transições topológicas engendrem as transições de fase observadas no modelo. Para tal, resolve-se a topologia do espaço de configurações do modelo em dimensões da rede e valores dos parâmetros que apresentam e que não apresentam transições de fase, caracterizando-se as transições topológicas através de funções relevantes. Deste modo, no sistema com transição de fase, foi-se capaz de comparar TTs coincidentes e não-coincidentes com as respectivas TFs obtidas da termodinâmica, e também comparar com as TTs ocorrendo no modelo sem transição de fase.

3.1 Termodinâmica

O modelo esférico em dimensão finita foi proposto, juntamente com o modelo Gaussiano, em [4], como uma variação do modelo de Ising¹ para graus de liberdade contínuos. O modelo esférico reproduz algumas características do modelo de Ising, como $\langle \epsilon_i \rangle = 0$ (fase paramagnética), $\langle \epsilon_i^2 \rangle = 1$, possuindo ademais a vantagem de ser solúvel analiticamente em qualquer dimensão inteira. Tanto as variáveis de spin discretas (Ising) quanto as variáveis contínuas (modelo esférico) obedecem ao vínculo esférico. O modelo de Ising descreve configurações restritas aos vértices de um hipercubo N -dimensional de aresta unitária, e o modelo esférico, configurações restritas a uma hipersfera N -dimensional de raio \sqrt{N} , circunscrevendo o mesmo hipercubo.

O modelo esférico [4] é definido por N spins distribuídos em uma rede hipercúbica em d dimensões, interagindo através do potencial:

$$V = -J \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_i \epsilon_j - H \sum_i \epsilon_i, \quad (3.1)$$

onde $J > 0$ é a magnitude da interação, e $\sum_{\langle ij \rangle}$, que é a soma sobre pares de vizinhos próximos, determinam a estrutura da matriz de interação, e H é um campo magnético externo. Na rede hipercúbica com interações a vizinhos próximos, cada spin interage com seus $2d$ primeiros vizinhos. As variáveis de spin $\{\epsilon_i\}$ são reais, e

¹Ising, E. Z. *Phys.*, v. **31** (1925) 253.

acopladas pelo vínculo esférico, que define o espaço de configurações:

$$\Gamma = \mathbb{S}^{N-1} = \{\epsilon \in \mathbb{R}^N \mid \sum_i \epsilon_i^2 = N\}. \quad (3.2)$$

Embora as interações definidas em (3.1) sejam de curto alcance, o vínculo esférico (3.2) impõe uma interação efetiva global entre os spins na rede. Deste modo, a equivalência de ensembles neste modelo não é garantida. Esta possibilidade foi considerada e confirmou-se a equivalência entre os ensembles canônico e microcanônico para o modelo.

3.1.1 Ensemble Canônico

As funções termodinâmicas do sistema podem ser obtidas a partir da função de partição do modelo [4]:

$$Q_N(\beta, H) = A_N^{-1} \int_{\mathbb{S}^{N-1}} d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N \exp(-\beta V(\{\epsilon_i\})), \quad (3.3)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e A_N é uma constante de normalização igual à superfície da esfera $(N-1)$ -dimensional, \mathbb{S}^{N-1} , que é o volume do espaço de fases Γ :

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

Campo externo nulo

Para $H = 0$ a função de partição fica dada por:

$$Q_N(\beta, 0) = A_N^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N \exp[\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_i \epsilon_j] \delta\left(N - \sum_{i=1}^N \epsilon_i^2\right). \quad (3.5)$$

Tomando-se a representação de Fourier da delta de Dirac, transformando adequadamente variáveis e efetuando as integrais nos spins $\{\epsilon_i\}$, a função de partição se reduz a uma integral sobre a variável auxiliar z :

$$Q_N(\beta, 0) = \frac{A_N^{-1} \pi^{N/2}}{2\pi i} e^{-\frac{1}{2}(N-2) \ln \beta J} \int_{z_0 - i\infty}^{z_0 + i\infty} dz \exp \left[N \left(\beta J z - \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \ln \left(z - \frac{1}{2} \lambda_i \right) \right) \right], \quad (3.6)$$

onde $z_0 > \frac{1}{2} |\lambda_{max}| = \frac{1}{2} \lambda_1 = d$, que é o maior dentre os pólos de $\sum_{i=1}^N \ln \left(z - \frac{1}{2} \lambda_i \right)$. O caminho de integração é uma reta paralela ao eixo imaginário, $\Im\{z\}$, à direita de todos os pólos do integrando. Este pode, portanto, ser deformado dentro da região à direita de $\Re\{z\} = d$. O argumento da exponencial é $\mathcal{O}(N)$, e o resultado da integral para $N \rightarrow \infty$ pode ser calculado através do teorema do ponto de sela. Resulta então para a energia livre

de Helmholtz:

$$\begin{aligned} F(\beta, 0) &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Q_N(\beta, 0) \\ &= \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \ln(2\beta J) - Jz_s + \frac{1}{2\beta} f_d(z_s), \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde a função $f_d(z_s)$, definida por:

$$f_d(z) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} d\omega_1 \cdots d\omega_d \ln \left[z - \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i) \right], \quad (3.8)$$

é o limite termodinâmico de: $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln \left(z - \frac{1}{2} \lambda_i \right)$, e $2 \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i) = \lambda(\omega_1, \dots, \omega_d)$, com $\omega_i \in [0, 2\pi)$, os autovalores da matriz de interação no limite termodinâmico. A função $f_d(z)$ é a única contribuição não-analítica à energia livre. O argumento z_s é solução da equação de ponto de sela $2\beta J = \frac{\partial f_d}{\partial z}(z_s)$:

$$2\beta J = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} d\omega_1 \cdots d\omega_d \frac{1}{z_s - \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i)}, \quad (3.9)$$

que pode ser reescrita de maneira mais conveniente [86]:

$$2\beta J = \int_0^\infty dt e^{-z_s t} [I_0(t)]^d, \quad (3.10)$$

onde $I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{x \cos(\theta)}$ é a função de Bessel modificada de ordem zero.

O comportamento da função termodinâmica $F(\beta)$ está portanto condicionado à existência da solução de ponto de sela z_s para qualquer T dentro do domínio de temperaturas.

Pode-se mostrar que a função $f_d(z)$ é analítica para todo $z > d$, estritamente. Para temperaturas decrescentes, o membro esquerdo da equação (3.9) cresce monotonicamente até divergir em $T = 0$. O membro direito, por sua vez, cresce com z decrescente, dentro do domínio $z > d$: o supremo de $\frac{\partial f_d(z)}{\partial z}$ ocorre em $z = d$. Assim, a equação (3.9) terá solução em todo o suporte de temperaturas se e somente se o membro direito também divergir em $z \rightarrow d^+$.

Cadeia unidimensional: $d = 1$

A equação (3.9) neste caso se reduz a: $2\beta J = (z_s^2 - 1)^{-\frac{1}{2}}$, que diverge em $z_s = 1$. A equação de ponto de sela tem solução para qualquer temperatura. Isto significa que a não-analiticidade de $f_d(z_s)$, $z_s = 1$, só é atingida a temperatura zero, isto é, $T_c = 0$.

Para $d = 1$, resulta para (3.8) [86]:

$$f_d(z) = \ln \left[\frac{z + \sqrt{z^2 - 1}}{2} \right], \quad \Re\{z\} \geq 1 \text{ ou } \Re\{z\} > 0, \Im\{z\} \neq 0. \quad (3.11)$$

A energia livre de Helmholtz por partícula, para qualquer T , é dada por:

$$F(\beta, 0) = \frac{1}{2\beta} - \frac{1}{2\beta} \sqrt{1 + (2\beta J)^2} + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 + (2\beta J)^2} \right], \quad (3.12)$$

e é uma função analítica em todo o intervalo de temperaturas $0 < T < \infty$.

Rede quadrada: $d = 2$

A equação de ponto de sela para a rede bidimensional fica dada por: $2\beta J = \frac{2}{\pi z_s} K(2/z_s)$, onde $K(x)$ é a integral elíptica completa: $K(x) = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2} \sqrt{1-x^2 t^2}}$, que diverge em $x = 1$. Este pólo corresponde a $z_s \rightarrow \frac{1}{2} \lambda_1^+ = 2^+$ na equação de ponto de sela acima, que portanto possui solução para todo $T \in (0, \infty)$. Novamente, $T_c = 0$ e não há transição de fase a temperatura finita para este modelo.

Rede cúbica: $d = 3$

Neste caso, a equação de ponto de sela:

$$2\beta J = \int_0^\infty dt e^{-z_s t} [I_0(t)]^3 \quad (3.13)$$

não possui solução para todo $\beta \in (0, \infty)$. O membro direito cresce monotonicamente com $z_s \rightarrow \frac{1}{2} \lambda_1^+ = 3^+$, mas a integral é finita em $z_s = 3$. A equação deixa de ter solução para $\beta > \beta_c$, onde β_c é definido por:

$$\beta_c = \frac{1}{2J} \int_0^\infty dt [e^{-t} I_0(t)]^3 = \frac{0.25273}{J}. \quad (3.14)$$

Encontram-se portanto duas regiões com comportamentos distintos. Uma transição de fase de terceira ordem na classificação de Ehrenfest em $T_c = \frac{3.95679J}{k_B}$ as separa. Na região $T > T_c$, a energia livre é dada por:

$$F(\beta, 0) = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \ln(2\beta J) - Jz_s + \frac{1}{2\beta} f_3(z_s), \quad (3.15)$$

onde z_s é solução da equação de ponto de sela (3.13). Para a região $T < T_c$, escolhendo um corte de $z = -\infty$ a $z = 3$ sobre o eixo real, $Q_N(\beta, 0)$ é analítica no plano definido. Uma expansão de $f_3(z)$ em torno de $z = 3$ neste corte mostra que

$$f_3(z) = f_3(3) + 2\beta_c J(z-3) - \frac{\sqrt{2}}{3\pi} (z-3)^{3/2} + \mathcal{O}((z-3)^2),$$

isto é, a contribuição dominante a $f_3(3)$ na expansão é positiva, e $z_s = 3$ segue sendo o ponto de sela abaixo de T_c . A energia livre por partícula, abaixo de T_c fica dada por:

$$F(\beta, 0) = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \ln(2\beta J) - 3J + \frac{1}{2\beta} f_3(3). \quad (3.16)$$

d	$k_B T_c / J$	$\langle v_c \rangle / J$
3	3.9573	-1.0216
4	6.4537	-0.7728
5	8.6468	-0.6759
6	10.7411	-0.6283
7	12.7982	-0.6009
8	14.8334	-0.5833
9	16.8579	-0.5710

Tabela 3.1: Valores críticos da temperatura (T_c) e da energia potencial média por partícula correspondente ($\langle v_c \rangle$) para o modelo esférico em redes hipercúbicas de dimensão d [87].

A energia livre, em dimensão d qualquer, será dada por:

$$F(\beta, 0) = \begin{cases} \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \ln(2\beta J) - Jz_s(\beta) + \frac{1}{2\beta} f_d(z_s(\beta)), & \text{para } T > T_c, \\ \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \ln(2\beta J) - Jd + \frac{1}{2\beta} f_d(d), & \text{para } T < T_c. \end{cases}$$

Para a energia potencial média por partícula, se obtém:

$$\langle v \rangle(\beta, 0) = \frac{\partial \beta F(\beta, 0)}{\partial \beta} = \begin{cases} \frac{1}{2\beta} - Jz_s, & \text{para } T > T_c, \\ \frac{1}{2\beta} - Jd, & \text{para } T \leq T_c. \end{cases}$$

As temperaturas críticas são funções crescentes da dimensão d da rede: $\beta_c = \frac{1}{2J} \int_0^\infty dt [e^{-t} I_0(t)]^d$. As energias potenciais críticas, correspondentemente, são dadas por (3.17). A tabela 3.1 fornece os valores numéricos de T_c e $\langle v_c \rangle$ para as redes de dimensões d inteiras de 3 até 9. Os valores críticos da energia potencial média por partícula servirão de base comparativa para a análise da topologia do modelo.

Campo externo finito $H \neq 0$

Para H finito, após uma transformação ortogonal que leva a base $\{\epsilon_i\}$ na base $\{y_i\}$, a equação (3.6) para a função de partição que diagonaliza a matriz de interação, se modifica para:

$$Q_N(\beta, H) = \frac{A_N^{-1} \beta J}{2\pi i} \int_{z_0 - i\infty}^{z_0 + i\infty} dz e^{Nz} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \cdots dy_N \exp \left[-\beta J \sum_{i=1}^N (z - \lambda_i/2) y_i^2 + N^{1/2} \beta H y_1 \right]. \quad (3.17)$$

O campo magnético externo uniforme, H , que se acopla linearmente à magnetização $M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_i$ no Hamiltoniano (3.1), se acopla apenas ao autovetor y_1 ($\mathcal{O}(\sqrt{N})$) da base $\{y_i\}$. Exceto pela integral em y_1 , as integrais nos demais $\{y_{i \neq 1}\}$ na função de partição são idênticas às que aparecem em campo nulo. A integral em y_1 também é elementar e, aplicando o teorema do ponto de sela à integral na variável auxiliar z , resulta em:

$$Q_N(\beta, H) = Q_N(\beta, 0) \exp \left[N \frac{H^2 \beta}{4J(z_s - \lambda_1/2)} \right]. \quad (3.18)$$

O fator adicional na função de partição acrescenta um termo na energia livre por partícula:

$$F(\beta, H) = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \ln(2\beta J) - Jz_s + \frac{1}{2\beta} f_d(z_s) - \frac{H^2\beta}{4J(z_s - \lambda_1/2)}, \quad (3.19)$$

onde $z_s(\beta, H)$ é solução da equação de ponto de sela:

$$2\beta J = \frac{\partial f_d}{\partial z}(z_s) + \frac{H^2\beta}{4J(z_s - \lambda_1/2)^2}. \quad (3.20)$$

O termo proporcional a H diverge no limite $z_s \rightarrow \lambda_1/2 = d$. Isto significa que existirá solução de ponto de sela para qualquer temperatura $T \in (0, \infty)$. Em campo externo H finito, a transição de fase é destruída em todas dimensões de rede.

A energia potencial média, para todo T , é dada por:

$$\langle v \rangle(\beta, H) = \frac{1}{2\beta} - Jz_s + \frac{H^2}{4J(z_s - \lambda_1/2)}. \quad (3.21)$$

3.1.2 Ensemble Microcanônico

Os resultados da topologia das subvariedades M_v no Modelo Esférico deverão ser comparados com o comportamento termodinâmico, conhecido *a priori*. Ora, como descrito na seção 2.5.3 para a versão campo médio do modelo, em sistemas para os quais diferentes ensembles estatísticos resultam em comportamentos termodinâmicos distintos [31, 73–76, 88], a comparação entre topologia e termodinâmica é ambígua, já que para cada ensemble uma diferente relação é estabelecida entre TTs e TFs [89]. Verifica-se, nesta seção, a equivalência dos ensembles canônico e microcanônico para o Modelo Esférico [7, 90, 91].

A equivalência de ensembles é estabelecida em textos clássicos de mecânica estatística para sistemas com interações com decaimento rápido o suficiente com a distância. Apesar desta restrição, até recentemente a equivalência era tacitamente assumida para diversos sistemas, inclusive no caso de interações de longo alcance, em parte pela dificuldade inerente de cálculos microcanônicos. No caso do modelo esférico na rede hipercúbica, com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, a presença do vínculo esférico, que é um vínculo global do sistema, exerce a função de uma interação de alcance efetivamente infinito, o que pode, eventualmente, produzir comportamentos inequivalentes no âmbito dos diferentes ensembles.

No ensemble microcanônico, as funções termodinâmicas são obtidas a partir da densidade de estados:

$$\Omega_N(v, H) = A_N^{-1} \int_{S^{N-1}} d\epsilon_1 \cdots d\epsilon_N \delta(V(\{\epsilon_i\}) - Nv) \propto \int_{-i\infty}^{+i\infty} d\mu \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} d\eta e^{N\bar{s}_N(\mu, \eta; v, H)}, \quad (3.22)$$

onde a função $\bar{s}_N(\mu, \eta; v, H) = \mu v + \eta - \frac{\mu^2 H^2}{4(\mu d - \eta)} - f_N(\mu, \eta)$, com $f_N(\mu, \eta) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \ln(-\frac{\mu}{2} \lambda(\mathbf{p}) + \eta)$. No limite termodinâmico, $f_N(\mu, \eta) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^d} \int \cdots \int_0^{2\pi} d\omega_1 \dots d\omega_d \ln(-\mu \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i) + \eta)$. A função $\bar{s}_N =$

$\mathcal{O}(1)$, portanto pode-se aplicar o teorema do ponto de sela às integrais (3.22) sobre μ e η . A função $f_N(\mu, \eta)$ pode ser reescrita como $f_N(\mu, \eta) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \left[\ln(|\eta|) + \ln \left(-\frac{\mu}{2|\eta|} \lambda(\mathbf{p}) + \text{sgn}(\eta) \right) \right]$. Assim, escolhem-se cortes no plano complexo $\mu \in (-\infty, -|\eta|/d) \cup (|\eta|/d, \infty)$. A função $\bar{s}_N \rightarrow \infty$ quando $\mu \rightarrow \pm\eta/d$, o que indica que \bar{s}_N tem pelo menos um mínimo sobre o intervalo $\mu \in [-\eta/d, \eta/d]$. As derivadas segundas $(\bar{s}_N)_{\mu\mu}$ e $(\bar{s}_N)_{\eta\eta}$ para μ e η reais são não negativas, portanto o mínimo é único.

O resultado da aplicação do teorema do ponto de sela é a entropia:

$$s(v, H) = \frac{1}{2} \ln \left[(v + x(v, H)) - \frac{H^2}{4(d - x(v, H))} \right] - \frac{1}{2(2\pi)^d} \int d^d \omega \ln \left[x(v, H) - \sum_{i=1}^d \cos \omega_i \right], \quad (3.23)$$

onde $x(v, H) \equiv \mu_s/\eta_s \in [d, \infty)$ é solução da equação de ponto de sela:

$$\left[v + x - \frac{1}{\mathcal{A}_d(x)} \right] - H^2 \left[\frac{1}{4(d-x)} - \frac{1}{4(d-x)^2} \frac{1}{\mathcal{A}_d(x)} \right] = 0, \quad (3.24)$$

sendo $\mathcal{A}_d(x) = \int_0^\infty dt e^{-xt} (I_0(t))^d$ ($I_0(x)$ é a função de Bessel modificada de ordem zero) [86]. Do segundo termo de (3.23), vê-se que no limite $x \rightarrow d^+$ o sistema se aproxima de uma não-analiticidade da integral. A ocorrência ou não de uma transição de fase no sistema no intervalo de definição da energia $v \in [-d, 0]$ é determinada pelo comportamento da integral \mathcal{A}_d em $x = d$. Em particular, a energia crítica v_c é dada pela equação de ponto de sela (3.24) com $x = d$. As propriedades mais relevantes da integral $\mathcal{A}_d(x)$ podem ser resumidas em: para $d = 1, 2$, $\lim_{x \rightarrow d^+} \mathcal{A}_d(x) = \infty$; para $d \geq 3$, $\lim_{x \rightarrow d^+} \mathcal{A}_d(x) < \infty$ (a integral é finita).

Para $H = 0$, em dimensões $d = 1, 2$, a divergência de $\mathcal{A}_d(d)$ implica em $v_c = -d$, e a ordem ferromagnética de longo alcance só emerge no estado fundamental. Para $d \geq 3$, a energia crítica é maior que $v = -d$: $v_c = \left[\int_0^\infty dt [e^{-t} I_0(x)]^d \right]^{-1} - d$. A qualquer dimensão de rede d , as energias críticas v_c obtidas no ensemble microcanônico coincidem com as energias críticas canônicas. Com H finito, para $x \rightarrow d^+$, o coeficiente de H^2 na equação (3.24) diverge. Como a integral $\mathcal{A}_d(d)$ é não-nula para qualquer d , $x = d$ de fato nunca é uma solução de ponto de sela, e não há transição de fase para $H \neq 0$.

Para H pequeno, a equação de estado do sistema é dada por $m(x(v, H) - d) \approx H/2$. Com $H = 0$, fica claro que o sistema somente terá uma magnetização espontânea se $x(v, H) = d$ abaixo da transição.

A equivalência dos ensembles é estabelecida através da igualdade entre a entropia microcanônica, $s(v, H)$, e a transformada de Legendre-Fenchel da energia livre $f(\beta, H)$ (equação (3.19)), $s^{**}(v, H)$, que corresponde à entropia canônica:

$$s^{**}(v, H) = \inf_{\beta} \{ \beta v - \beta f(\beta, H) \} = s(v, H). \quad (3.25)$$

Da minimização acima resulta $\bar{\beta}(v, H)$, dado por:

$$\bar{\beta}(v + z_s(\bar{\beta})) = 1 - \frac{H^2 \bar{\beta}}{2(z_s(\bar{\beta}) - d)}. \quad (3.26)$$

A entropia canônica $s^{**}(v, H)$, com a substituição de $\bar{\beta}$ definido acima, e com o ponto de sela z_s solução de (3.20), é idêntica à entropia microcanônica $s(v, H)$ (equação (3.23)). Da relação entre $\bar{\beta}$ e v ($\bar{\beta} = \partial s / \partial v$), combinada com o comportamento de z_s , observa-se que para $v \rightarrow 0$, $\bar{\beta} \rightarrow 0$, e para $v \rightarrow -d$, $\bar{\beta} \rightarrow \infty$. No modelo esférico com interações a vizinhos próximos a fase paramagnética é acessível. Finalmente, para todo $v \in [-d, 0)$, obtém-se $s(v, H) = s^{**}(v, H)$ e $\partial s / \partial v \in [0, \infty)$, e portanto a equivalência completa entre os ensembles canônico e microcanônico é verificada.

3.2 Topologia

No estudo da topologia das subvariedades $M_v \subset \Gamma$, computam-se e caracterizam-se as transições topológicas ocorrendo à medida em que se varia v dentro do intervalo de energias acessível. Estabelecer-se uma relação entre a topologia das M_v e o comportamento termodinâmico equivale a definir um mapa entre o parâmetro topológico v e a energia potencial média $\langle v \rangle$, que não é uma tarefa evidente. A HT conjectura que a relação deva se dar pela identidade: $v_\theta = \langle v_c \rangle$ (equações (3.17) e (3.21)). Deste mapeamento entre topologia e termodinâmica para o modelo esférico curto alcance mostra-se, nesta seção, que o primeiro teorema FPS [28], sobre a necessidade de uma TT coincidindo com a TF no modelo, é satisfeito. Entretanto, este trabalho também mostra a *inexistência* de uma condição de suficiência que relacione transições topológicas e termodinâmicas para o modelo [6, 7].

De acordo com a teoria de Morse [92], transições topológicas nas subvariedades $M_v = \{\epsilon \in \Gamma \mid V(\{\epsilon\})/N \leq v\}$ somente ocorrem em valores de (Nv) que sejam imagens de *pontos críticos*, $\epsilon_{tt} = ((\epsilon_1)_{tt}, \dots, (\epsilon_N)_{tt})$, da função $V(\{\epsilon\})$ (isto é, pontos em que $\partial_{\epsilon_i} V(\epsilon_{tt}) = 0$)². Quando ocorre um (único) ponto crítico de $V(\{\epsilon\})/N$ em um valor $v = v_{tt}$, a subvariedade $M_{v_{tt}+\delta}$ é homeomórfica a $M_{v_{tt}-\delta} \cup e_k$, onde e_k é uma célula de ordem k - um disco aberto de dimensão k -, que é *agregada* à subvariedade M_v ao atravessar $v = v_{tt}$ no sentido de v crescente³. k é o índice ou a ordem do ponto crítico⁴.

A análise da topologia e da ocorrência de transições topológicas nas subvariedades M_v , definidas a partir da função $V(\epsilon)$, deve iniciar, portanto, pelo estudo das soluções de $\partial_{\epsilon_i} V(\{\epsilon\}) = 0$. A representação do sistema de equações na base que diagonaliza a matriz de interação simplifica o problema. Para impor o vínculo esférico, introduz-se um multiplicador de Lagrange μ , redefinindo-se o Hamiltoniano $\tilde{V} = V - \mu \sum_{i=1}^N \epsilon_i^2$. Na base $\{\epsilon\}$, a invariância translacional e as condições de contorno periódicas (que induzem uma topologia $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 \times \dots \times \mathbb{S}^1 = \mathbb{T}^d$, o toro d -dimensional, à rede de spins [4]) produzem uma matriz de interação circulante e simétrica. As

²A correspondência biunívoca entre *um ponto crítico* e uma transição topológica é garantida quando o Hessiano da função $V(\{\epsilon\})$ é não-singular, não possui autovalores nulos, isto é, os pontos críticos da função são *isolados* (ver Apêndice A).

³ $\delta > 0$ deve ser suficientemente pequeno, isto é, o intervalo $v \in [v_{tt} - \delta, v_{tt} + \delta]$ contém apenas um valor crítico de V .

⁴O índice ou a ordem de um ponto crítico é o número de autovalores negativos do Hessiano no ponto dado (ver Apêndice A).

equações de pontos estacionários, nesta base, são dadas pelo sistema de equações lineares:

$$\begin{pmatrix} (c_1 - \mu) & c_2 & c_3 & \cdots & c_{N-1} & c_N \\ c_N & (c_1 - \mu) & c_2 & \cdots & c_{N-2} & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_N & (c_1 - \mu) & \cdots & c_{N-3} & c_{N-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_2 & c_3 & c_4 & \cdots & c_N & (c_1 - \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \vdots \\ \epsilon_N \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

onde c_k são os elementos da matriz de interação no Hamiltoniano na rede hipercúbica $e^T M e = \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_i \epsilon_j$, que são tais que $c_{N+k} \equiv c_k = c_{N-k+2}$. O índice dos elementos c_k corresponde univocamente a um spin na posição (p_1, p_2, \dots, p_d) na rede de dimensão linear L , dado que $k = p_1 + L p_2 + L^2 p_3 + \cdots + L^{d-1} p_d$. A forma específica da matriz M depende da dimensão d da rede. O sistema de equações, na base que diagonaliza a matriz de interação, é dado por:

$$\begin{aligned} y_1(2\mu + \lambda_1) + \sqrt{N}H &= 0, \\ y_i(2\mu + \lambda_i) &= 0 \quad i = 2, \dots, N, \\ \sum_{j=1}^N y_j^2 &= N, \end{aligned} \quad (3.28)$$

cujas equações são evidentemente acopladas apenas pelo vínculo esférico. O espectro da matriz de interação é dado pelos autovalores [4]:

$$\lambda_i \equiv \lambda(\mathbf{p}) = 2 \sum_{i=0}^d \cos\left(\frac{2\pi p_i}{N^{1/d}}\right), \quad (3.29)$$

onde $p_i = 0, \dots, N^{1/d} - 1$. A estrutura de (3.29) mostra que a degenerescência máxima dos autovalores com N finito é $P_d 2^d$ (onde P_d é o número de permutações de d elementos). O teorema de Perron-Frobenius garante que o máximo autovalor, λ_0 , é não-degenerado.

A estrutura das soluções de (3.28) dependerá de forma crucial na degenerescência dos autovalores. Assim, é conveniente definirem-se os conjuntos C_a , com $a = 0, \dots, \hat{N}$, onde $\hat{N} + 1$ é o número de autovalores *distintos*. C_a é o conjunto contendo os índices de autovalores (vetores \mathbf{p}) correspondendo ao $(a + 1)$ -ésimo maior valor. O índice a ordena os autovalores distintos do maior ($a = 0$) ao menor ($a = \hat{N}$). A cardinalidade $|C_a|$ destes conjuntos fornece a degenerescência do $(a + 1)$ -ésimo maior autovalor. Por exemplo, como mencionado acima, $|C_0| = 1$.

A degenerescência reduz o número de equações efetivamente independentes a $\hat{N} + 1$, e portanto ao mesmo número de soluções. Cada solução corresponde a um valor crítico de v , $v_a = h(\lambda_a, H)$ (que é uma função biunívoca de λ_a), $a = 0, \dots, \hat{N} + 1$, ordenados do menor ao maior.

A degenerescência das soluções de (3.28) resulta, não em pontos críticos, mas em *subvariedades críticas*, já que qualquer ponto sobre esta se constitui em um extremo da função V , isto é, $dV = 0$ quando restrita à

subvariedade crítica. Isto implica em um Hessiano singular para a função de energia potencial quando calculado na energia crítica correspondente, já que a esta energia o Hessiano de $V(y)$ será nulo nas direções tangentes à subvariedade crítica. Um Hessiano não-inversível deriva de uma função $V(\epsilon)$ ($V(y)$) que não é uma função de Morse própria, no sentido estrito. Não obstante, a caracterização da topologia das M_v através do formalismo da teoria de Morse ainda é possível recorrendo a uma extensão da mesma por Bott [92, 93].

Quando o multiplicador μ coincide com o $(a + 1)$ -ésimo maior autovalor, especificamente $\mu = -\lambda_j/2$, com $j \in C_a$, emerge como solução de (3.28) a subvariedade crítica Σ_{v_a} , em um valor crítico $v = v_a$, que é o $(a + 1)$ -ésimo *menor* valor crítico. A subvariedade crítica Σ_{v_a} é uma hipersfera de dimensão $|C_a|$, onde $|C_a|$ é a degenerescência do autovalor correspondente a v_a . No limite termodinâmico, o espectro de autovalores se torna denso em $[-2d, 2d]$: $\lim_{N \rightarrow \infty} \lambda(\mathbf{p}) \rightarrow \lambda(\omega) = 2 \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i)$, onde $\omega_i \in [0, 2\pi)$ são parâmetros contínuos. Neste limite, a densidade espectral da matriz de interação, normalizada por N , é dada pela função:

$$c(v) = \int_0^{2\pi} \left(\prod_{i=1}^d \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \delta[v - h(\lambda(\omega), H)], \quad (3.30)$$

onde $h(\lambda(\omega), H)$ é a função que relaciona os valores críticos de v aos autovalores $\lambda(\omega)$ no limite termodinâmico. A densidade de degenerescência dos autovalores mostrar-se-á, mais adiante, crucial na caracterização da topologia das subvariedades M_v .

Na análise da topologia do modelo, não se sabem *a priori* quais as assinaturas topológicas da transição de fase pelas quais se procurar. De fato, este trabalho busca determinar uma condição de suficiência que mapeie TTs em TFs no modelo esférico, de maneira a definir uma assinatura topológica. Assim, é imprescindível dispor de dois modelos similares, variantes de um Hamiltoniano diferindo por um parâmetro, por exemplo. O objetivo é verificar se o efeito que a variação de tal parâmetro produz para a presença ou ausência de transição de fase é acompanhado por algum efeito equivalente na topologia, por exemplo, presença e ausência de dada transição topológica. No caso do modelo esférico, estes dois modelos são o modelo sem campo externo, que sofre transição de fase para dimensão inteira da rede $d \geq 3$, e o modelo com campo externo, que não possui transição de fase.

Nas subseções que seguem, desenvolve-se a análise topológica dos modelos com $H = 0$ e $H \neq 0$. No âmbito da teoria de Morse, não é possível obter explicitamente os números de Betti $\{b_i\}$ das variedades M_v , somente limites superiores para estes ou a soma alternada dos mesmos (que equivale à obtenção de um invariante topológico, a característica de Euler-Poincaré). As próximas seções se dedicam à obtenção de todos os números de Betti das variedades M_v , para qualquer v (pelo menos no caso $H = 0$). Mostrar-se-á, então, a caracterização completa dos grupos de homotopia [94, 95] das subvariedades M_v , pelo menos para o modelo sem campo externo. No caso $H = 0$, omitem-se detalhes técnicos no corpo principal da tese, cuja omissão não impede a compreensão dos resultados e conclusões do trabalho. Remete-se o leitor ao Apêndice A para tais detalhes. No caso do modelo com campo externo, conseguiu-se caracterizar completamente a topologia na vizinhança da transição topológica mais relevante [6, 7].

3.2.1 Topologia em campo nulo: $H = 0$

A cada valor crítico v_a de $v \in [-d, d]$, M_v sofre uma transição topológica. As variedades críticas que emergem neste valor de energia caracterizam a TT. Para analisar a evolução da topologia das M_v 's devem-se retomar as equações (3.28) de pontos críticos de $\tilde{V}(y)$ para $H = 0$:

$$\begin{aligned} y_i(2\mu + \lambda_i) &= 0, \quad i = 1, \dots, N, \\ \sum_{j=1}^N y_j^2 &= N, \end{aligned} \quad (3.31)$$

que neste caso são homogêneas. Desta maneira, apenas haverá solução não-trivial caso a matriz principal do sistema seja singular. Em particular, tem-se $y_i = 0$, exceto pelas variáveis pertencentes ao subespaço de autovalores nulos da matriz principal: variáveis $y_j \neq 0$, tais que $2\mu + \lambda_j = 0$ com $j \in C_a$, $v = v_a$. Estas últimas devem garantir o vínculo esférico, que equivale à condição: $\sum_{j=1}^{|C_a|} y_j^2 = N$. Resulta, para a subvariedade crítica Σ_{v_a} ocorrendo no valor crítico $v = v_a$: $\Sigma_{v_a} = \{y \in \Gamma \mid \sum_{j \in C_a} y_j^2 = N \vee y_i = 0, \text{ para } i \notin C_a\}$, que é portanto uma hipersfera $S^{|C_a|-1}$, cuja dimensão é dada pela degenerescência do autovalor correspondente, $|C_a| - 1$.

A menos que a função $V(\{y\})$ seja uma função de Morse perfeita [93], o conhecimento das subvariedades críticas não é suficiente para determinar completamente a topologia de M_v entre dois valores críticos consecutivos, já que as células $\{e_k^{(a)}\}$ agregadas a M_{v_a} em $v = v_a$ podem sê-lo de diferentes maneiras, através de diferentes mapas característicos $\Phi_a : e_k^{(a)} \rightarrow \partial M_{v_a} = \Sigma_{v_a}$ (ver Apêndice A), resultando em diferentes topologias para $M_{v > v_a}$. O conhecimento das Σ_{v_a} e suas propriedades relevantes permitem calcular exatamente os números de Morse μ_i e a série de Morse, $M_t(V)$, relativos a $V : M_v \rightarrow \mathbb{R}$ porém fornecem apenas um limite superior para os números de Betti b_i e a série de Poincaré, $P_t(M_v)$, relativos a M_v ⁵.

A substituição da solução Σ_{v_a} na função $v(y) = V(y)/N$ resulta em um valor crítico v_a a campo nulo, a função $v_a = h(\lambda_j, 0) = -\lambda_j/2$, onde $j \in C_a$ e $\mu = -\lambda_j/2$.

O cálculo do Hessiano em $v = v_a$ é trivial e resulta em uma matriz diagonal na base $\{y\}$:

$$\mathcal{H}_{ij} = \frac{\partial^2 V(y)}{\partial y_i \partial y_j} = \begin{pmatrix} -(2\mu + \lambda_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -(2\mu + \lambda_2) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -(2\mu + \lambda_3) & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -(2\mu + \lambda_N) \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

O Hessiano é singular, já que possui $|C_a|$ autovalores nulos. Para caracterizar a transição topológica em $v = v_a$ neste contexto, é preciso estabelecer um conceito para subvariedades críticas não-degeneradas que equivalha ao conceito de ordem ou índice de pontos críticos não-degenerados no caso de um Hessiano inversível. A subvar-

⁵Como mencionado anteriormente, no âmbito da teoria de Morse é possível calcular a característica de Euler, mas não se pode determinar um número suficiente de invariantes topológicos de M_v .

iedade crítica Σ_{v_a} será não-degenerada já que $\det \mathcal{H} \neq 0$, quando restrito ao subespaço das direções normais a Σ_{v_a} (considerando a imersão de $\Sigma_{v_a} = \mathbb{S}^{|C_a|-1}$ em $\mathbb{R}^{|C_a|}$, o subespaço normal a Σ_{v_a} se constitui das direções radiais). Usando uma extensão da teoria de Morse [92, 93], define-se a *ordem de uma subvariedade crítica* não-degenerada, conectada, orientável como o número de autovalores negativos do Hessiano à energia v_a , quando restrito às direções *normais* à subvariedade crítica Σ_{v_a} (ver Apêndice A). Fica evidente de (3.32) que os autovalores do Hessiano, $V_{ii} = -(2\mu + \lambda_i) = (\lambda_j - \lambda_i)$, com $j \in C_a$, serão negativos para $i \in C_b$, onde $b < a$. Assim, à energia v_a o Hessiano possuirá $\sum_{b=0}^{a-1} |C_b|$ autovalores negativos, que corresponde à ordem da subvariedade crítica Σ_{v_a} .

No que diz respeito à série de Morse, $M_t(V)$, a contribuição de uma subvariedade crítica é mais substancial que a de um ponto crítico. De fato, enquanto a contribuição de um ponto crítico isolado é proporcional a um monômio t^k , a de uma subvariedade crítica é dada por um polinômio $t^k P_t(\Sigma_{v_a})$, onde k é a ordem do ponto crítico ou da subvariedade crítica. $P_t(\Sigma_{v_a})$ é o polinômio de Poincaré de Σ_{v_a} , ao qual naturalmente podem-se aplicar as relações entre P_t e M_t descritas no Apêndice A, sendo o polinômio de Morse neste caso relativo à restrição $V|_{\Sigma_{v_a}}$. Conhecida a ordem de cada subvariedade e, é claro, o polinômio de Poincaré de uma hiperesfera, é possível construir o polinômio de Morse e, conseqüentemente, a característica de Euler $\chi(v) = M_{-1}(V)$ das subvariedades M_v para todo v .

Deformação de retração das variedades M_v

Na caracterização da topologia das M_v se seguirá um caminho mais direto, aproveitando a simetria do modelo esférico para determinar exatamente os números de Betti que definem M_v entre dois valores críticos consecutivos v_a e v_{a+1} . De fato, ao encontrar a deformação de retração que mapeia continuamente M_v na hiperesfera \mathbb{S}^{D_a-1} , onde $D_a = \sum_{b=0}^a |C_b|$, se estabelece a equivalência homotópica entre M_v , para $v \in (v_a, v_{a+1})$, e \mathbb{S}^{D_a-1} . Em cada $v = v_a$, a TT muda a topologia de M_v de $\mathbb{S}^{D_{a-1}-1}$ para \mathbb{S}^{D_a-1} . Ademais, a característica de Euler de um espaço topológico depende somente de seu tipo de homotopia, portanto os resultados revelam imediatamente o invariante topológico $\chi(v)$.

Uma deformação de retração de um espaço topológico X em um subespaço $A \subset X$ é uma família de mapas $f_t : X \rightarrow X$, $t \in I = [0, 1]$, tal que $f_0 = \mathbb{1}$ (o mapa identidade), $f_1(X) = A$, e a restrição $f_t|_A = \mathbb{1}$ para todo $t \in I$. A família de mapas f_t ademais deve ser contínua, isto é, o mapa associado $F : X \times I \rightarrow X$, $(x, t) \mapsto f_t(x)$ é contínuo em x e em t . Quando um espaço topológico X pode ser continuamente deformado a um subespaço $A \subset X$, diz-se que X e A são homotopicamente equivalentes. De fato, uma deformação de retração é um caso especial da noção mais geral de homotopia (ver Apêndice A).

Quer-se encontrar uma deformação de retração que leve M_v , com $v \in (v_a, v_{a+1})$, à hiperesfera \mathbb{S}^{D_a-1} , onde $D_a = \sup\{k \mid \lambda_k > -2v\}$, o índice k rotula uma ordenação de *todos* os autovalores (incluindo autovalores degenerados) do maior ao menor. O valor crítico $v_a = -\lambda_j/2$, onde $j \in C_a$. Por inspeção, mostra-se que uma

homotopia possível é a que leva $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N) \mapsto \mathbf{y}^{(t)} = (y_1^{(t)}, y_2^{(t)}, \dots, y_N^{(t)})$ através de:

$$y_k^{(t)} = \begin{cases} y_k \sqrt{1 + t \frac{\sum_{j=D_a+1}^N y_j^2}{\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2}}, & \text{para } 1 \leq k \leq D_a, \\ y_k \sqrt{1 - t}, & \text{para } D_a < k \leq N. \end{cases} \quad (3.33)$$

Deve-se mostrar que esta função é contínua, que obedece ao vínculo esférico para todo $t \in I$, que $\mathbf{y}^{(t)}(M_v) \subseteq M_v$, que $\mathbf{y}^{(0)}(M_v) = \mathbb{1}$, $\mathbf{y}^{(1)}(M_v) = \mathbb{S}^{D_a-1}$, e que a restrição $\mathbf{y}^{(t)}|_{\mathbb{S}^{D_a-1}} = \mathbb{1}$, $\forall t$. Tais demonstrações encontram-se na Seção A.3 do Apêndice A, em que se mostra que o mapa (3.33) de fato obedece a estes pré-requisitos.

O mapa (3.33) possui todas as propriedades que definem uma deformação de retração e, portanto, prova-se que \mathbb{S}^{D_a-1} é uma deformação de retração de M_v , com $v \in (v_a, v_{a+1})$. Tal resultado define o tipo de homotopia de M_v .

Como os números de Betti de uma variedade são invariantes frente ao tipo de homotopia, os números de Betti b_i de M_v com $v \in (v_a, v_{a+1})$ são:

$$b_i(M_v) = b_i(\mathbb{S}^{D_a-1}) = \begin{cases} 1, & \text{para } i = \sum_{b=0}^a |C_b| - 1 = D_a - 1, \text{ e } i = 0, \\ 0, & \text{para } i \neq 0, (D_a - 1). \end{cases}$$

Em $v = v_a$, a homotopia das variedades M_v muda de \mathbb{S}^{D_a-1-1} para \mathbb{S}^{D_a-1} . Em $v = v_a$, a dimensão da deformação de retração de M_v é acrescida de $|C_a|$ - a degenerescência do $(a+1)$ -ésimo maior autovalor - e, para $v \in (v_a, v_{a+1})$, se torna igual a $D_a - 1 = \sum_{b=0}^a |C_b| - 1$. Se a degenerescência dos autovalores cresce menos que linearmente com N (para quase todo $v \in [-d, d)$), D_a coincide no limite termodinâmico com a *ordem da subvariedade crítica* Σ_{v_a} que emerge em v_a : $\sum_{b=0}^{a-1} |C_b|$. Embora a dimensão da deformação de retração de M_v seja D_a , a variedade M_v sempre é dimensão N^6 . A variedade M_v emerge em $v = v_0 = -\lambda_0/2$ como dois estados fundamentais, dois pontos isolados. Como a energia potencial deve ser contínua sobre cada componente ergódica de M_v , na vizinhança imediata da energia v_0 , a variedade $M_{v_0+\delta}$ deve ser a união disjunta de dois discos N -dimensionais. Ora, para todo $v \geq v'$, vale que $M_{v'} \subseteq M_v$, e assim, para todo $v \geq v_0$, $M_{v_0} \subseteq M_v$: todas as variedades M_v com $v \geq v_0$ também serão N -dimensionais.

Em comparação à TT observada no modelo XY campo médio que corresponde à respectiva transição de fase, em que números de Betti de $\mathcal{O}(N)$ diferentes índices sofrem uma variação $\mathcal{O}\left(\frac{N!}{(N-k)!}\right)$ (onde k é o respectivo índice do número de Betti), no presente caso o que se observa é distinto. A cada TT ocorrendo no modelo esférico na rede, apenas dois índices de números de Betti sofrerão saltos, e estes saltos são $\mathcal{O}(1)$. Isto sugere que a quantidade topológica relevante, cuja variação deve estar relacionada à transição de fase no modelo, não seja o módulo do salto dos números de Betti ou o número de b_i 's a sofrerem tal salto, mas sim o índice do máximo número de Betti a sofrer um salto na TT, qual seja, $D_a - 1$, ou, possivelmente, a diferença entre os índices do número de Betti que salta de $1 \rightarrow 0$ e o índice do número de Betti que salta de $0 \rightarrow 1$, qual seja, $(D_a - 1) - (D_{a-1} - 1) =$

⁶No que se refere à homotopia, as dimensões "adicionais" de M_v são topologicamente irrelevantes.

$(D_a - D_{a-1})$.

Espectro e degenerescência da matriz de interação em $N \rightarrow \infty$

A invariância translacional da energia potencial do modelo, que depende, inclusive, da definição de condições de contorno apropriadas para a rede, resulta em uma matriz de interação *circulante*, que é um tipo de matriz de Toeplitz, com uma estrutura como a dada pela matriz $\tilde{\mathbf{M}}$ em (3.27)⁷. Para interações de suficientemente curto alcance⁸, pode-se mostrar que o espectro de autovalores de uma matriz circulante se torna contínuo quando a ordem da matriz tende ao infinito. No modelo esférico curto alcance, a interação se dá apenas entre primeiros vizinhos, depende apenas da distância entre spins e é simétrica. No limite termodinâmico, portanto, o espectro de autovalores da matriz de interação é um subconjunto denso do intervalo $[-2d, +2d]$.

Como os $\hat{N} + 1$ valores críticos da energia potencial, $v_a = h(\lambda_a, 0)$, são uma função contínua dos autovalores, conclui-se que haverá um *contínuo de transições topológicas* nas variedades M_v no intervalo de energias acessíveis, $[-d, d]$.

No limite termodinâmico, considerando que D_a seja $\mathcal{O}(N)$, é conveniente introduzir uma função finita contínua, dada pela normalização de D_a : $d(v) \equiv D_a/N$. Dada a relação entre D_a e a degenerescência dos autovalores λ : $D_a = \sum_{b=0}^a |C_b|$, é imediato expressar a densidade de degenerescência $c(v)$ no limite termodinâmico:

$$d(v) = \int_{-d}^v c(v') dv' \quad \text{ou, equivalentemente} \quad c(v) = \frac{\partial d(v)}{\partial v}. \quad (3.34)$$

Como as subvariedades M_v são sempre homotopicamente equivalentes a esferas cuja dimensão muda com v , o comportamento de D_a (equivalentemente de $d(v)$ no limite $N \rightarrow \infty$) como função de v determina completamente a topologia do modelo (ver equação (3.34)). A seguir, analisar-se-á o comportamento da ordem (normalizada) das subvariedades críticas, a função $d(v)$, e de sua derivada, a densidade de degenerescência⁹ $c(v)$, a fim de caracterizar a evolução da topologia das variedades M_v . Diante da multiplicidade das transições topológicas¹⁰, espera-se encontrar assinaturas da transição de fase em transições topológicas que possuam alguma característica distintiva das demais. É imediato esperar que tais TTs estejam associadas a singularidades da função $d(v)$, isto é, descontinuidades em alguma de suas derivadas - já que a própria função $d(v)$ é finita e contínua.

Reconsiderando o espectro (3.29) da matriz de interação, no limite termodinâmico é conveniente reexpressar o índice discreto $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d)$ através do vetor $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_d)$, onde $\omega_i = \frac{2\pi p_i}{N}$ são funções contínuas, com $0 \leq \omega_i < 2\pi$. Os autovalores são então dados por: $\lambda(\omega) = 2 \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i)$. A densidade de

⁷Uma matriz de Toeplitz tem elementos t_{ij} tais que $t_{i,j} = t_{i+1,j+1}$, e uma matriz circulante é uma matriz de Toeplitz com as condições adicionais: $t_{i,N-j} = t_{i+j+1,1}$ e $t_{N-i,j} = t_{1,j+i+1}$.

⁸Tal que cada spin não interaja com vizinhos a distâncias de ordem maior que $\mathcal{O}(\sqrt{N})$, em unidades do parâmetro de rede.

⁹A dimensão (normalizada) das subvariedades críticas.

¹⁰No limite termodinâmico, o contínuo de transições topológicas implica em $\hat{N} + 1 \rightarrow \infty$, um número infinito de TTs.

degenerescência, $c(v)$, é então dada por (ver equação (3.30)):

$$\begin{aligned} c(v) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \delta_{\lambda(\mathbf{p}), -2v} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \\ &= \int_0^{2\pi} \left(\prod_{i=1}^d \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \delta(v + \lambda(\omega)/2) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} (\cos(xv) + i \sin(xv)) [J_0(x)]^d, \end{aligned} \quad (3.35)$$

onde $\delta_{i,j}$ está para a delta de Kronecker, $\delta(x)$, para a delta de Dirac e $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero. A forma para a equação (3.35) foi obtida usando-se a representação de Fourier da delta de Dirac. Finalmente, considerando a paridade das funções seno e cosseno em relação ao centro do intervalo de integração, resulta para $c(v)$:

$$c(v) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \cos(xv) [J_0(x)]^d. \quad (3.36)$$

A função $d(v)$, conseqüentemente, é dada por:

$$d(v) = \int_{-d}^v dv' \int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \cos(xv') [J_0(x)]^d = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \frac{(\sin(vx) + \sin(dx))}{x} [J_0(x)]^d. \quad (3.37)$$

Convergência da densidade de degenerescência $c(v)$ e suas derivadas

Voltando a atenção à integral imprópria (3.36) e definindo-se o integrando $f(x, v) = \cos(xv) [J_0(x)]^d$, constata-se que $f(x, v)$ é o produto de duas funções contínuas, $\cos(xv)$ e $[J_0(x)]^d$, e portanto também é uma função contínua. Tomando uma aproximação assintótica de $J_0(x)$, para $|x|$ grande [96]

$$\begin{aligned} J_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left\{ \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \left[\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k}} \frac{\Gamma[2k+1/2]}{(2k)! \Gamma[-2k+1/2]} + R_1 \right] + \right. \\ &\quad \left. - \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \left[\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k+1}} \frac{\Gamma[2k+3/2]}{(2k+1)! \Gamma[-2k-1/2]} + R_2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde $|R_1| < \left| \frac{\Gamma[2n+1/2]}{(2x)^{2n}(2n)! \Gamma[-2n+1/2]} \right|$ e $|R_2| < \left| \frac{\Gamma[2n+3/2]}{(2x)^{2n+1}(2n+1)! \Gamma[-2n-1/2]} \right|$, isto é, o módulo dos “restos“ é inferior ao módulo dos últimos termos descartados em cada somatório (série alternada). Truncando a expansão à ordem $\mathcal{O}(1)$:

$$J_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[\cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + R(x) \right], \quad (3.39)$$

onde $|R(x)| < \frac{1}{4(2x)}$, que é uma função oscilante amortecida por $\propto x^{-1/2}$.

A densidade de degenerescência $c(v)$ é uma integral uniformemente convergente no intervalo $v \in [-d, d]$ para qualquer dimensão de rede d , exceto $d = 1$. Para $d \neq 1, 2$, podem-se obter diretamente as respectivas integrais

$c(v)$:

$$c(v) = \begin{cases} \int_0^\infty \frac{dx}{\pi} \cos(xv) J_0(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{1-v^2}}, & \text{para } d = 1, \\ \int_0^\infty \frac{dx}{\pi} \cos(xv) (J_0(x))^2 = \frac{1}{2\pi} P_{-1/2} \left(\frac{v^2}{2} - 1 \right), & \text{para } d = 2. \end{cases}$$

A primeira integral converge para $v \in (-d, d)$ (fica evidente da equação acima que $\lim_{v \rightarrow \pm d} c(v) = \infty$). Na segunda integral, $P_{-1/2}(x)$ é uma função de Legendre (de ordem $-1/2$), que converge no intervalo de energias acessíveis em $d = 2$, $v \in [-2, 0) \cup (0, 2]$, exceto pelo ponto $v = 0$ ¹¹. É importante ressaltar que, apesar do contradomínio da função Hamiltoniana (3.1) ser dado pelo intervalo $[-d, d]$, está claro que o intervalo relevante para a termodinâmica é aquele dado pela energia interna acessível ao sistema termodinâmico, isto é, $\langle v \rangle \in [-d, 0)$ (ver análise ao final da Seção 3.1.2).

Para mostrar a convergência (uniforme) de $c(v)$ para $d \geq 3$, recorre-se ao teste de Weierstrass aplicado a integrais [97]. Os detalhes da análise se encontram no Apêndice A.3. De tal análise, constata-se que $c(v)$ é contínua para $d \geq 3$. Da continuidade de $c(v)$ decorre a continuidade de $d(v)$.

Resta analisar as derivadas de $c(v)$ em relação a v , em busca de descontinuidades nestas funções. Caso exista uma relação biunívoca entre transições topológicas e transições de fase, estas são as prováveis candidatas a estabelecerem tal relação. No Apêndice A.3 investiga-se a convergência destas derivadas. Decorre desta análise que divergências da n -ésima derivada de $c(v)$, onde $n = \lceil \frac{d}{2} - 1 \rceil = \left(\frac{d}{2} - \frac{1}{2} \right)$, ocorrem, para d ímpar, em valores *inteiros ímpares* de v - inclusive $v = \pm d$, e para d par, em valores *inteiros pares* de v .

Relação entre Topologia e Termodinâmica

Em síntese, no estudo da topologia das subvariedades M_v , determinou-se que as mesmas são homotopicamente equivalentes às esferas $S^{Nd(v)-1}$. A topologia das M_v 's é determinada pela função $d(v)$. Nas subseções anteriores estudaram-se as funções $d(v)$ e $c(v) = \frac{\partial d(v)}{\partial v}$, assim como as derivadas de maior ordem. Mostrou-se que as derivadas de ordem $k < d/2 - 1$ são contínuas. A derivada de ordem $\lceil d/2 - 1 \rceil$ também foi obtida, e determinaram-se os valores de v em que esta função apresenta divergências. São estes: valores *inteiros ímpares* de v para d ímpar, valores *inteiros pares* de v para d par [6, 7]. Estas singularidades correspondem a transições topológicas mais "abruptas", que de alguma forma se destacam das demais ocorrendo em pontos em que a função $c(v)$ é suave (pontos em que $c(v)$ é pelo menos $\lfloor d/2 - 1 \rfloor$ vezes derivável).

Entretanto, *nenhum* dos pontos de singularidade coincide com as transições de fase que ocorrem para dimensões $d \geq 3$, o que é imediatamente constatado da Tabela 3.1, já que todas as energias críticas $v_c(d)$ são valores não inteiros. É evidente que exatamente no ponto da TF sempre ocorre uma TT, já que há um contínuo de TTs no intervalo $v \in [-d, d)$, porém esta TT não possui nenhum aspecto distintivo em relação às demais e, se comparada com as TTs ocorrendo nos pontos de não-analiticidades de $c(v)$ acima descritos, são menos abruptas. Ademais,

¹¹A função $P_{-1/2}(x)$ possui singularidades em $x = -1$ e $x = \infty$, apenas.

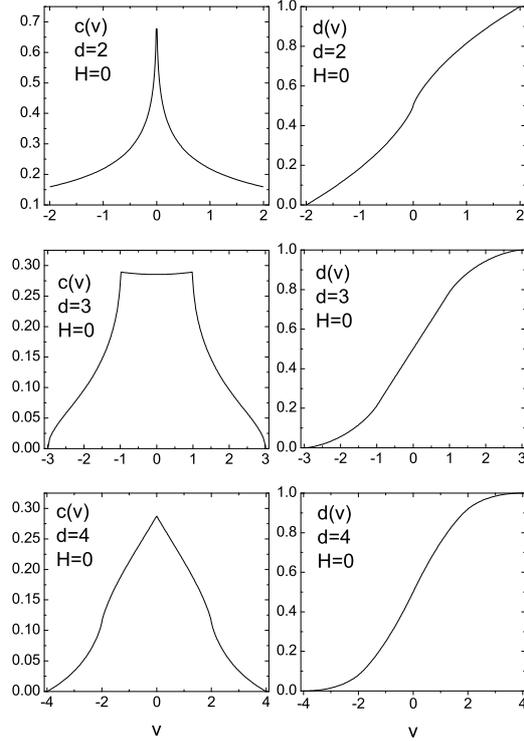


Figura 3.1: Densidade de degenerescência $c(v)$ e sua integral $d(v)$, a dimensão da deformação de retração de M_v , para campo externo nulo, e dimensões $d \doteq 2, 3, 4$ [6].

$c(v)$ e $d(v)$ (e eventualmente suas derivadas) caracterizam completamente a topologia de M_v e suas mudanças. Ademais, a ordem da primeira derivada de $c(v)$ a apresentar divergências cresce com a dimensão d da rede. Isto significa que, em dimensões $d = 1, 2$, em que não há transição de fase no sistema, as divergências ocorrem em derivadas de $d(v)$ de *menor* ordem se comparadas a sistemas de maior dimensão, $d \geq 3$, que possuem TF. Tal resultado parece se opor ao que seria esperado, no caso de singularidades em funções topológicas estarem em correspondência direta com transições de fase.

Finalmente, a única possibilidade restante para se procurar por assinaturas de TFs seria em derivadas de maior ordem de $c(v)$. Entretanto, esta possibilidade não parece muito razoável, já que implica em que a ordem da derivada a apresentar tais assinaturas topológicas depende da dimensão espacial do problema, e também em que as singularidades em derivadas de ordem *mais baixa* sejam menos relevantes, ou irrelevantes, para a termodinâmica. Infere-se portanto que descontinuidades nas *derivadas* de $d(v)$ *não* são suficientes para induzir uma transição de fase no sistema, e, de outro lado, que transições de fase não são marcadas por nenhum efeito topológico notável. Na figura (3.1), estão representadas graficamente as funções $c(v)$ e $d(v)$ para valores $d \doteq 2, 3, 4$ da dimensão da rede (os pontos nos gráficos para $d \doteq 3, 4$ foram obtidos através de integração numérica).

3.2.2 Topologia em campo não-nulo: $H \neq 0$

Ao se acrescentar o campo externo ao Hamiltoniano, a quebra de simetria resultante impede que se acesse exatamente a topologia das subvariedades M_v para todo v . No entanto, ainda é possível determinar a topologia de M_v até o segundo nível crítico da energia potencial, aqui denotado v_- , e caracterizar a transição topológica ocorrendo a esta energia, que resulta em uma TT particularmente abrupta.

A topologia das subvariedades M_v se modifica se e somente se v atravessa um valor crítico da função $V(y)$. Novamente, a análise da topologia das subvariedades M_v deve se iniciar sobre as soluções das equações de pontos críticos (3.28) com $H \neq 0$:

$$\begin{aligned} y_1(2\mu + \lambda_1) + \sqrt{N}H &= 0, \\ y_i(2\mu + \lambda_i) &= 0 \quad i = 2, \dots, N, \\ \sum_{j=1}^N y_j^2 &= N. \end{aligned} \quad (3.40)$$

A primeira equação, neste caso, é inhomogênea:

$$y_1 = -\sqrt{N}H/(2\mu + \lambda_1). \quad (3.41)$$

É fácil convencer-se de que a menor energia crítica corresponde à solução $\tilde{\mathbf{y}} = (y_1 \neq 0, y_i = 0, \forall i \neq 1)$. Considerando a solução $\tilde{\mathbf{y}}$, a substituição de (3.41) no vínculo esférico resulta em: $\mu^\pm = (\mp H - \lambda_1)/2$. Duas soluções distintas emergem: $\mathbf{y}^+ = (y_1 = -\sqrt{N}, y_i = 0, \forall i \neq 1)$ e $\mathbf{y}^- = (y_1 = +\sqrt{N}, y_i = 0, \forall i \neq 1)$, que correspondem a dois pontos isolados. As respectivas energias críticas são distintas: $v_\pm = -(\lambda_1/2 \pm H)$, donde $v_+ < v_-$, para $H > 0$. O surgimento dos dois estados ferromagnéticos, que em campo nulo se originam à mesma energia crítica, em campo finito se separa em dois eventos em energias críticas distintas.

As demais equações do sistema (3.40) são homogêneas, e soluções não-triviais, $y_j \neq 0, j \neq 1$, somente ocorrem se o coeficiente de y_j se anular, isto é, $\mu = -\lambda_j/2$. Se λ_j for tal que $j \in C_a$, a respectiva solução crítica é dada por:

$$\mathbf{y}_a \in M_v : y_1 = -\frac{\sqrt{N}H}{\lambda_1 - \lambda_j}; \sum_{j \in C_a} y_j^2 = N \left(1 - \frac{H^2}{(\lambda_1 - \lambda_j)^2} \right); y_i = 0, i \neq 1 \wedge \forall i \notin C_a. \quad (3.42)$$

Como os $\{y_i\}$ são variáveis reais, uma condição adicional deve ser imposta à solução (3.42): que $\sum_{j \in C_a} y_j^2 > 0$. Isto significa que (3.42) corresponderá a uma solução crítica se e somente se¹²:

$$\lambda_1 - \lambda_j > H, \quad \text{com } j \in C_a. \quad (3.43)$$

¹²Lembrando que λ_1 é o maior autovalor do espectro da matriz de interação.

Satisfeito o vínculo acima, constata-se ainda que, devido à degenerescência do espectro da matriz de interação, esta solução crítica é novamente uma hipersfera de dimensão $|C_a| - 1$: $\Sigma_{v_a} \approx \mathbb{S}^{|C_a|-1}$. A solução (3.42), quando substituída em $\frac{V(y)}{N} = -\frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i^2 - \frac{H}{\sqrt{N}} y_1$, fornece a energia crítica correspondente¹³:

$$v_a = -\frac{\lambda_j}{2} + \frac{H^2}{2(\lambda_1 - \lambda_j)}, \text{ com } j \in C_a, a \neq 1, \dots, \hat{N}. \quad (3.44)$$

O Hessiano de $V(y)/N$ calculado sobre a esfera \mathbb{S}^{N-1} ainda é dado pela matriz diagonal (3.32), com os multiplicadores de Lagrange μ apropriadamente modificados. Os autovalores do Hessiano no mínimo valor crítico de energia, v_+ , são dados por $V_{ii}^+ = -(2\mu^+ + \lambda_i) = (H + (\lambda_1 - \lambda_i))$. Quando calculados no valor crítico v_- , os respectivos autovalores são dados por $V_{ii}^- = -(2\mu^- + \lambda_i) = (-H + (\lambda_1 - \lambda_i))$. Sobre os pontos críticos \mathbf{y}^\pm , portanto, o Hessiano não é singular, exceto para valores específicos de H : os pontos \mathbf{y}^\pm são pontos críticos não-degenerados. Ademais, dado que $\lambda_1 = \sup_i \{\lambda_i\}$, a expressão para V_{ii}^+ resulta imediatamente em autovalores positivos, o que é esperado, já que \mathbf{y}^+ é o mínimo absoluto da função energia potencial. Do ponto de vista da topologia, significa que para energias v entre v_+ e o segundo valor crítico, M_v é homotopicamente equivalente a um disco N -dimensional, que pode ser visto como a célula de ordem 0 que à energia v_+ é agregada à variedade vazia (já que $M_{v < v_+} = \emptyset$). Neste intervalo, M_v é homotopicamente equivalente a um ponto, pois uma 0-célula é continuamente deformável a um ponto.

As propriedades do ponto crítico \mathbf{y}^- , sua ordem inclusive, claramente dependem da intensidade do campo externo. Se o campo externo H é menor que a “distância” entre o primeiro maior e o segundo maior autovalores, respectivamente, λ_1 e λ_k , com $k \in C_1$: $H < \lambda_1 - \lambda_k$, então se verifica que $V_{ii}^- > 0 \forall i$, isto é, que \mathbf{y}^- também será um mínimo, no caso, um mínimo local. Note-se que esta condição sobre H é equivalente à desigualdade (3.43), imposta sobre os autovalores para que as soluções críticas correspondentes existam sobre a hipersfera $\Gamma = \mathbb{S}^{N-1}$. Neste caso, à energia v_- mais uma célula de ordem 0 deve ser agregada à subvariedade M_v . No intervalo $v \in (v_-, v_1)$ (supondo que v_1 seja o próximo valor crítico de energia) as subvariedades M_v são homotopicamente equivalentes à união disjunta de dois discos (isto é, dois pontos isolados).

Já se sabe que à medida em que N cresce, autovalores consecutivos da matriz de interação, λ_i , se aproximam, formando um espectro contínuo no limite termodinâmico. Assim, para N suficientemente grande, haverá um certo número de autovalores, $n = \sup\{k : \lambda_k > \lambda_1 - H\}$ ¹⁴, que não obedecem à desigualdade (3.43), o que implica em que o ponto \mathbf{y}^- não seja um mínimo local. É possível mostrar que as energias dadas pela equação (3.44) nunca são menores que v_- (ver figura 3.2). Denotando-se $\lambda_1 - \lambda_j \equiv \Delta_a$, para $j \in C_a$:

$$v_a - v_- = \frac{\Delta_a}{2} + \frac{H^2}{2\Delta_a} - H = \frac{(\Delta_a - H)^2}{2\Delta_a} > 0. \quad (3.45)$$

Em particular, observa-se que as energias v_a (3.44) correspondentes a autovalores λ_j com $j < n$, isto é, tais que

¹³Note-se que o índice do máximo autovalor, λ_1 , pertence a C_0 .

¹⁴Na fórmula para n considera-se novamente que o índice do autovalor λ_i corresponde a um ordenamento do maior ao menor autovalor.

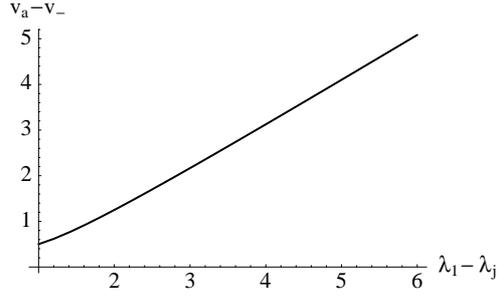


Figura 3.2: Diferença entre os valores críticos ($v_a - v_-$) como função da diferença ($\lambda_1 - \lambda_j$) (onde $j \in C_a$) para $H = 1, d = 3$. Observe-se que para $H < (\lambda_1 - \lambda_j) < 2d$, ($v_a - v_-$) é uma função crescente e não-negativa de ($\lambda_1 - \lambda_j$).

$\lambda_j > \lambda_1 - H$, constituem uma função crescente de λ_j (função decrescente de $(\lambda_1 - \lambda_j)$). Estas energias estão associadas a soluções de (3.40) que *não* pertencem à esfera S^{N-1} , não pertencem ao espaço de configurações, e portanto *não* são energias críticas. Por outro lado, as energias v_a (3.44) correspondentes a autovalores λ_j , com $j > n$, constituem uma função monotonicamente decrescente de λ_j . Estas últimas correspondem a autovalores λ_j que obedecem à desigualdade (3.43), e constituem, juntamente com v_+ e v_- , o espectro de energias críticas.

Com esta análise mostra-se a existência de um intervalo finito, $\Delta_{th} \equiv v_- - v_+$, no qual não ocorrem transições topológicas. A inspeção dos autovalores V_{ii}^- do Hessiano, calculado sobre \mathbf{y}^- , mostra que a ordem deste ponto crítico será n . Assim, a subvariedade M_v , que é equivalente a um ponto, e^0 , no intervalo $v_+ < v < v_-$, em $v = v_-$ tem uma célula de ordem n , \mathbb{D}^n , a si agregada. O único mapa característico, Φ , entre pontos em $\partial\mathbb{D}^n$ e um ponto é o mapa constante [94]. Para $v = v_-$, $M_v = e^0 \sqcup_{\Phi} \mathbb{D}^n = S^n$: o único resultado da união de um disco de ordem 0 e um disco de ordem n é a hipersfera S^n .

Para valores grandes de N , a transição topológica em v_- leva M_v de um ponto (dimensão nula) a uma hipersfera de dimensão *macroscópica* - comparável a N -, dada por $d(v_-)$. Esta TT é marcada por uma descontinuidade em $d(v)$, e uma descontinuidade, acompanhada por uma divergência, em $c(v)$. Representa, portanto, uma TT particularmente abrupta em M_v . Entretanto, nenhuma TF pode estar ligada a esta TT, já que o modelo simplesmente não possui TFs. Para $v > v_-$, não foi possível determinar a que tipo de homotopia pertence M_v . Porém, $Nc(v)$ ainda representa a dimensão das subvariedades críticas Σ_v (e a degenerescência dos autovalores correspondentes da matriz de adjacência) em todo o intervalo $[-d, d)$.

Acima de v_- , as energias críticas se modificam com $H \neq 0$ para a equação (3.44), que, para $v_a > v_+ + \Delta_{th}$, é uma função monotonicamente decrescente de λ_j ¹⁵. Assim, $c(v)$ e sua integral, $d(v)$, acima de v_- , são identificadas com suas respectivas funções no caso $H = 0$ através de uma translação: $d^{(H \neq 0)}(v) = d^{(H=0)}(v - H^2/2(\lambda_1 - \lambda_k))$, onde, se v corresponde ao $(a + 1)$ -ésimo valor crítico, λ_k é tal que $k \in C_a$. Para $v < v_-$, estas funções caracterizam completamente a topologia de M_v . Acima de v_- , a conexão destas funções com a topologia não está tão clara. A figura (3.3) apresenta o gráfico de ambas funções em todo o seu suporte, para dimensões $d \doteq 2, 3, 4$.

¹⁵Observe-se que as energias críticas a campo nulo, $v_a = -\lambda_j/2$ ($j \in C_a$), também constituem no limite termodinâmico uma função decrescente de λ_j .

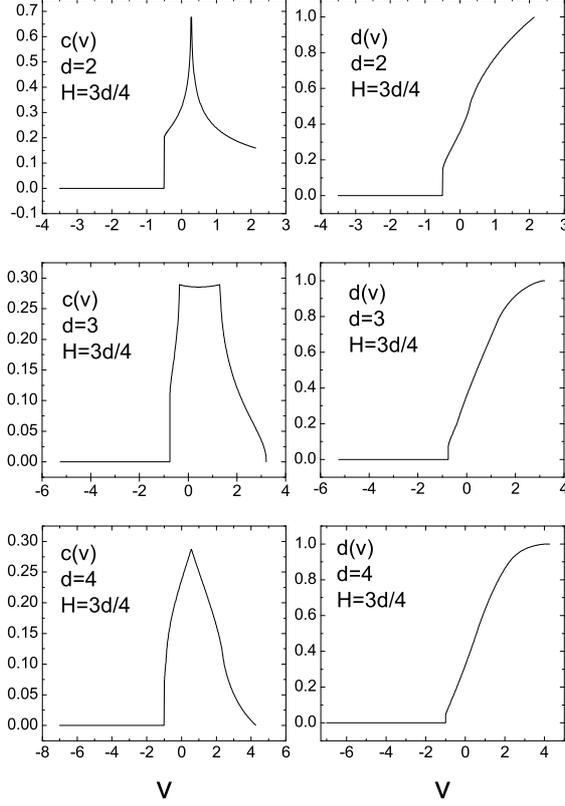


Figura 3.3: Densidade de degenerescência $c(v)$ e sua integral $d(v)$, para um campo externo finito ($H = 3d/4$) e dimensões $d = 2, 3, 4$. A descontinuidade de $d(v)$ em v_- resulta em uma função delta em sua derivada, $c(v)$, no mesmo valor de v [6].

A região em que a topologia pôde ser completamente determinada, isto é, abaixo de v_- , apresenta uma transição topológica *macroscópica*, mais abrupta que qualquer outra TT encontrada no caso $H = 0$, e que, surpreendentemente, não corresponde a nenhuma TF. Assim, descontinuidades na *própria* função $d(v)$ tampouco produzem TFs no modelo.

3.2.3 Interações de longo alcance

Em [5–7], estudaram-se o modelo esférico completamente conectado e o modelo esférico com interações apenas a vizinhos próximos, na busca de assinaturas topológicas às respectivas transições de fase. A fim de examinar a existência de uma condição de suficiência para que uma TT induza uma TF, procura-se explorar todo um espectro de variantes de modelos esféricos, no que diz respeito ao alcance das interações: foram estudados dois sistemas com interações de longo alcance, como no caso campo médio [5], porém em que cada spin interage com uma fração apenas dos demais spins da rede. O Hamiltoniano destas duas variantes do modelo esférico é aquele dado pela equação (3.1), que em função das coordenadas que diagonalizam a interação e com $H = 0$, se torna:

$$V = -\frac{1}{2} \sum_i \lambda_i x_i^2. \quad (3.46)$$

O Hamiltoniano acima, juntamente com o vínculo esférico ($\sum_i x_i^2 = N$) e os respectivos espectros de autovalores λ , definem os modelos. No primeiro caso cada spin interage com seus aN vizinhos mais próximos na rede ($a < 1$). Os autovalores correspondentes no limite termodinâmico são dados por:

$$\lambda_{p_1, \dots, p_d}(a) = \frac{1}{\pi^d} \sum_{i=1}^d \frac{p_i^{d-2} g_d(2\pi a^{1/d} p_i)}{\prod_{k \neq i}^d (p_i^2 - p_k^2)} \quad \text{para } d \geq 2 \quad (3.47)$$

$$\lambda_p(a) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(2\pi a p)}{p} \quad \text{para } d = 1 \quad (3.48)$$

onde $p_i = 1, \dots, N^{1/d}$ para todo i e $g_d(x) = (-1)^{d/2} \cos(x)$ se d é par e $g_d(x) = (-1)^{(d-1)/2} \sin(x)$ se d é ímpar. No segundo caso, cada spin interage com todos os spins dentro do hipercubo de *aresta* medindo $2aN$ sítios, centrado naquele spin. Os autovalores da matriz de interação são: $\lambda_{p_1, \dots, p_d} = \prod_{i=1}^d \lambda_{p_i}(a^{1/d})$, onde $\lambda_{p_i} = \lambda_p$ é dado pela eq. (3.48).

Ambos espectros das matrizes de interação são infinitos, porém discretos. Há uma infinidade de valores críticos de energia potencial v em que ocorrem TTs, já que haverá uma infinidade de valores de energias potenciais das soluções das equações de pontos críticos. Procura-se por um aspecto especial do espectro, que distinga um valor crítico dos demais, devido à natureza da TT a ele associada. Este aspecto seria o ponto de acumulação dos espectros, que ocorre em $\lambda = 0$ para ambos casos. É fácil argumentar que, como as equações de ponto de sela terão a mesma forma funcional das equações (3.28), as soluções serão as mesmas, e as subvariedades críticas envolvidas (hiperesferas) em cada valor crítico dependerão da estrutura do espectro e degenerescência dos autovalores correspondentes. Assim, é também fácil concluir, ao substituir a solução adequada em (3.46) que a transição topológica correspondente ao ponto de acumulação $\lambda = 0$ ocorrerá em $v = 0$.

Ora, a transição de fase em ambos modelos possui temperatura crítica $T_c = J/a$, que corresponde a uma energia potencial média crítica por partícula $v_c = 0$. Assim, a TT coincide com a TF em ambos casos, como obtido no modelo campo médio [5]. Também como foi obtido no caso campo médio, ao acrescentar-se o campo externo ao hamiltoniano dos modelos, desaparecendo a transição de fase, a mesma TT ocorre¹⁶ em um valor crítico do parâmetro v , que é inacessível à energia potencial média por partícula dos modelos. Conclui-se de tais resultados que, apesar da TT coincidir com a TF no caso $H = 0$, o mecanismo topológico, que é essencialmente o mesmo com ou sem campo externo, não é suficiente para induzir uma transição de fases no caso $H \neq 0$.

¹⁶A TT continua ocorrendo no espaço de configurações, já que o espectro da matriz de interação é insensível ao acréscimo do campo externo.

Conclusões

A Hipótese Topológica estudada nesta tese, propõe uma explicação para a origem fundamental de transições de fase em sistemas termodinâmicos no nível da topologia do espaço de configurações destes sistemas.

Transições de fase termodinâmicas nos ensembles canônico e grã-conônico são definidas como não-analiticidades nas respectivas funções de partição, que acarretam não-analiticidades em observáveis - como potenciais termodinâmicos - delas derivados. Sabe-se, no entanto, que as energias livres de Helmholtz e de Gibbs para um sistema finito são analíticas. No contexto dos ensembles canônico e grã-canônico, não-analiticidades somente podem ocorrer nos potenciais termodinâmicos no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$ [29, 30, 35].

Por outro lado, a entropia microcanônica de um sistema finito pode apresentar não-analiticidades [31, 73–76, 88]. Da mesma forma, a abordagem topológica pode ser elaborada para qualquer N , o que também permite estender a Hipótese Topológica sobre transições de fase termodinâmicas para transições de fase em sistemas finitos¹⁷. Além de estabelecer uma conexão natural com transições de fase no ensemble microcanônico, a HT apresenta vantagens no sentido da unificação conceitual dos diversos fenômenos de transição, inclusive na inserção destes fenômenos no contexto dinâmico. A abordagem topológica fornece um campo comum para a dinâmica e a termodinâmica. De fato, as trajetórias dinâmicas do sistema em equilíbrio são restritas ao suporte da medida estatística no espaço de fases, e a topologia das variedades que compõem este suporte influenciará também estas trajetórias. Como se viu no Capítulo 2, a dinâmica Hamiltoniana microscópica de um sistema está conectada, através do máximo expoente de Lyapunov, a quantidades topológicas. Estas quantidades topológicas, invariantes topológicos, por sua vez, estão relacionadas à ocorrência de transições de fase através da abordagem topológica. Transições de fase e dinâmica microscópica subjacente são assim conectadas.

Por outro lado, é um fato notável que a topologia da superfície de energia livre tem um papel crucial em sistemas desordenados, como mostrado na literatura [8–11, 13–15, 17, 70, 98]. Ademais, como sistemas frustrados e desordenados possuem comportamentos dinâmico (macroscópico, coletivo) e termodinâmico estreitamente interligados, a abordagem topológica, ao estabelecer naturalmente uma conexão entre termodinâmica e dinâmica microscópica, pode adicionar à compreensão da emergência de fases desordenadas em sistemas complexos como

¹⁷Refere-se a sistemas finitos como sistemas cujo número de graus de liberdade N é muito menor que o número de Avogadro, mas grande o suficiente para uma abordagem estatística do mesmo.

por exemplo vidros de spin - sistemas que apresentam desordem congelada - ou vidros estruturais - com desordem auto-induzida.

Outra vantagem importante da abordagem topológica é a possibilidade de relacionarem-se quantidades topológicas e observáveis termodinâmicos. É de se esperar, entretanto, que esta possibilidade esteja condicionada à determinação da topologia como *único* mecanismo na origem de transições de fase nesta classe de sistemas. Alguns trabalhos já procuraram estabelecer tal conexão entre topologia e termodinâmica no contexto da HT [49, 52, 53]. Em [52], foi possível estimar uma contribuição topológica à entropia dos modelos XY campo médio e unidimensional. Mostrou-se que esta quantidade apresenta comportamentos condizentes aos de uma entropia: é monotonicamente crescente com a energia potencial até o valor máximo de v , acima do qual permanece constante, como se espera de uma entropia configuracional. Ademais, a contribuição topológica à entropia do modelo campo médio apresenta uma derivada descontínua no ponto da transição v_c , que sugere ser esta a origem da perda de analiticidade da entropia total na transição. No modelo unidimensional a função é suave. No caso do modelo k -trigonométrico [53], conjectura-se uma relação entre a entropia e $\sigma(v) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log |\chi(v)|$ (onde $\chi(v)$ é a característica de Euler das variedades M_v no espaço de configurações do modelo) em torno da transição (seção 2.4.1): $s(e) \sim \sigma(v(e)) + \mathcal{R}(e)$. De fato, em torno da transição de primeira ordem, a derivada segunda de $\sigma(v)$ é positiva, e $\partial^2 S / \partial E^2 > 0$ corresponde a um calor específico negativo, como observado no ensemble microcanônico para regiões termodinamicamente instáveis. Neste sentido, o salto na derivada segunda de $\sigma(v)$ corresponde a uma descontinuidade do calor específico na transição.

Neste trabalho caracterizou-se completamente a homotopia das subvariedades M_v do espaço de configurações do modelo esférico com interações entre primeiros vizinhos, no caso de campo externo nulo. Determinou-se que as M_v , para $v > -d$, possuem o tipo de homotopia de hipersferas cuja dimensão, $Nd(v) - 1$, é função da energia potencial v , estabelecendo assim, de forma inequívoca, os grupos de homotopia de M_v . Embora a caracterização completa da homologia de M_v no caso de campo finito não tenha sido possível para todo v , [caracterizaram-se] as transições topológicas ocorrendo em M_v através das subvariedades críticas (e suas respectivas ordens e energias críticas), assim como a topologia das subvariedades M_v no intervalo de energias $v \in [-d - H, v_-]$. Constatou-se, no caso $H \neq 0$, que a transição topológica ocorrendo em v_- envolve um salto macroscópico na dimensão da deformação de retração de M_v : de um disco \mathbb{D}^0 a uma esfera S^n , onde n é comparável a N . Em ambos modelos, encontra-se um contínuo de TTs em quase todo o intervalo de energias potenciais acessíveis¹⁸, e uma função da topologia (que, pelo menos no modelo com $H = 0$, caracteriza completamente sua topologia) pôde ser calculada, denotada $d(v)$ e que apresenta, ela mesma ou alguma de suas derivadas, descontinuidades em valores isolados de energia potencial. Estas descontinuidades são um aspecto distintivo das TTs que a elas correspondem. Em nenhum dos casos, entretanto, estas descontinuidades coincidem com as transições de fase, nos casos em que elas ocorrem ($H = 0$ e $d \geq 3$). As TTs que de fato coincidem com as TFs são suaves, e não possuem nenhuma caracterís-

¹⁸Em campo externo H nulo, os dois primeiros níveis críticos, v_+ e v_- , como se viu, são isolados; existe um *gap* de energia devido à quebra de degenerescência nos estados fundamentais produzida pelo campo H .

tica preeminente, sendo indistinguíveis das demais. Tal resultado mostra a inexistência de um critério puramente topológico relacionando biunivocamente TTs a TFs. A topologia não pode ser o único mecanismo responsável pelas TFs neste modelo. A relevância dos resultados deste trabalho se assenta no fato de ser este a primeira caracterização analítica e completa da topologia de um modelo com interações de curto alcance e potencial confinante, no contexto da HT. Em particular, o modelo esférico curto alcance é, dentre os modelos estudados, o que mais se aproxima de preencher os requisitos do teorema [28].

A prova, pelos teoremas de Franzosi e colaboradores [28, 58], de que para potenciais de curto alcance, confinantes, estáveis, uma transição topológica é necessária no ponto de uma transição de fase, implica em que, pelo menos nesta classe ampla de potenciais, a topologia deve exercer algum papel nas transições de fase. Curiosamente, dentre os modelos já estudados, aqueles que corroboram a Hipótese Topológica não obedecem a pelo menos um dos critérios dos teoremas FPS, e portanto não pertencem à classe de potenciais supracitada. Por outro lado, dentre os modelos que violam a HT, nenhum tampouco obedece a todos os pré-requisitos dos teoremas.

A escolha do modelo esférico na rede no presente trabalho foi motivada pelo caráter de curto alcance, confinante e estável deste modelo. Entretanto, como comentado anteriormente, a imposição do vínculo esférico se constitui em uma interação de alcance efetivamente infinito entre os spins da rede, violando assim a *aditividade* do potencial [99]. A aditividade é a propriedade em que, para dois sistemas macroscópicos com N graus de liberdade, o potencial do sistema composto, $V(2N)$, é dado pela soma dos potenciais de cada um: $V(2N) = V(N) + V(N)$. Fica claro que o potencial do modelo esférico viola a aditividade quando se analisa a definição através de um sistema de "tamanho" $2N$, composto por dois conjuntos de graus de liberdade, $\{\epsilon_i\}_{i=1,\dots,2N}$ e $\{\sigma_i\}_{i=1,\dots,2N}$. Se a aditividade se cumprisse no modelo, tal sistema poderia sempre ser separado em dois subsistemas macroscópicos, por exemplo $\{\epsilon_i\}$ e $\{\sigma_i\}$, com potenciais $V(N)$ e cada um obedecendo a um vínculo esférico $\sum_{i=1}^N \epsilon_i^2 = N$ e $\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N$, derivados do original $\sum_{i=1}^{2N} (\epsilon_i^2 + \sigma_i^2) = 2N$. Ora, está claro que todas as configurações do sistema original *não* obedecerão aos dois vínculos separadamente: o vínculo esférico sobre o sistema composto é menos restritivo que os dois vínculos esféricos sobre cada subsistema. O modelo, devido ao vínculo esférico, viola a aditividade do potencial. Ainda assim, pode-se afirmar que, dentre os modelos já estudados, este modelo é o que mais se aproxima da classe de potenciais a que se aplicam os teoremas FPS.

Ainda que não esteja incluído na classe de potenciais definida pelos teoremas de Franzosi e colaboradores, o modelo esférico obedece trivialmente à existência de TTs na energia potencial das TFs, já que o espectro de energias das transições topológicas é contínuo e o "tamanho" ou a "intensidade" destas transições é descorrelacionado da ocorrência de TFs no modelo. A simples existência das TTs, portanto, não somente é insuficiente na predição das TFs do modelo, como também parece *irrelevante*. Conclui-se assim que o mecanismo topológico não é o mecanismo responsável pela transição de fase no modelo esférico com interações a primeiros vizinhos, em $H = 0$ e $d \geq 3$ (d inteiro). Ademais, a equivalência entre os ensembles canônico e microcanônico verificada para este modelo implica em uma entropia côncava, e impede que a transição de fase neste modelo seja originada pelo mecanismo de maximização da entropia microcanônica com relação a um de seus parâmetros.

No contexto da Hipótese Topológica *Fraca* (HTF) [61], L. Angelani e G. Ruocco analisaram a relação entre a termodinâmica do modelo esférico na rede hipercúbica e os pontos de sela inerentes à dinâmica [100]. Os autores encontram que o mapa escolhido \mathcal{M}_v entre (a energia potencial de) configurações instantâneas e (a energia potencial de) pontos de sela inerentes às mesmas relaciona a energia crítica termodinâmica, e_c , a uma energia topológica crítica. Especificamente, a energia dos pontos de sela inerentes atinge seu valor *mínimo* no ponto da transição de fase: $\mathcal{M}(e_c) = e_s(T_c) = -Jd$, onde J é a constante de interação ferromagnética e d a dimensão da rede. Abaixo da temperatura (termodinâmica) crítica, T_c , o sistema permanece próximo dos pontos de sela de mínima energia, enquanto acima de T_c (e_c), a energia dos pontos de sela inerentes é crescente com a energia potencial de configurações instantâneas. No contexto desta análise, os pontos de sela inerentes parecem exercer um papel central na transição de fase do modelo esférico. Vale notar que esta hipótese deve ser explorada com cuidado, visto que as conclusões obtidas através da HTF possuem uma dependência intrínseca na escolha do mapa \mathcal{M}_v .

Embora a topologia das subvariedades de energia potencial, M_v (ou das equipotenciais Σ_v), não seja suficiente na determinação da ocorrência ou não de transições de fase termodinâmicas em muitos modelos, é indiscutível a importância da topologia no comportamento dinâmico de sistemas, tanto com desordem congelada quanto sem desordem congelada [8–10]. A entropia configuracional, que é uma quantidade central na caracterização de um vidro, possui uma grande semelhança com um invariante topológico da superfície de energia livre de um vidro: a característica de Euler. Tal relação entre a topologia da superfície de energia livre e a emergência de dinâmica lenta em sistemas formadores de vidros é uma forte motivação para a investigação da ocorrência da fase de vidro em um modelo frustrado como o que se estudará na Parte II desta tese. A hipótese de existência de uma fase de vidro neste modelo, se confirmada, motiva uma abordagem topológica à entropia configuracional do mesmo (como será proposto, mais adiante, nas Conclusões e Perspectivas da Parte II).

Parte II

Sobre a Fase de Vidro em Sistemas bidimensionais com Interações Competitivas

Introdução

O mecanismo topológico, na forma e com a abrangência inicialmente propostas pela Hipótese Topológica, mostrou não se aplicar a diversos sistemas. Nos sistemas em que a topologia parece exercer algum papel na origem de transições de fase, é preciso identificar um critério de suficiência para o mecanismo topológico. Para estes sistemas, M. Kastner e colaboradores constataram que este mecanismo *não* é de fato puramente topológico: envolve transições topológicas, mas também depende de propriedades geométricas no âmbito da métrica definida sobre as variedades M_v . Como se viu na Parte I desta tese, foi também provada a existência de outro mecanismo gerador de transições de fase de equilíbrio microcanônicas, que produzem singularidades sobre o limite termodinâmico da entropia microcanônica. Viu-se então que tal mecanismo, qual seja, a maximização da entropia microcanônica com respeito a um de seus parâmetros, se aplica a sistemas com interações de longo alcance e que apresentem inequivalência de ensembles, nos quais a entropia microcanônica pode não ser uma função côncava [71, 72].

Neste cenário, está claro que a topologia não é o mecanismo fundamental único na origem de transições de fase de equilíbrio. Apesar da validade limitada da HT com respeito a TFs de equilíbrio, é outrossim um fato notável que a topografia (a topologia e a geometria) da superfície de energia livre tem um papel crucial em sistemas desordenados, como mostrado na literatura [8–14, 101–111]. Esta relação estreita é evidenciada, por exemplo, na semelhança entre a entropia configuracional em sistemas desordenados de um lado, e a característica de Euler na topologia, de outro. Em particular para sistemas que sofrem transições ou *crossovers* dinâmicos, como vidros de spin descontínuos (por exemplo o modelo p -spin esférico ou discreto) e vidros estruturais, a topologia da superfície de energia potencial é determinante. Para o p -spin esférico, resultados numéricos sugerem que a transição dinâmica é caracterizada pela ordem dos pontos de sela que vai a zero (marcada pela ocorrência de autovalores nulos do Hessiano da energia potencial) na vizinhança desta transição, localizada pela temperatura de *Mode Coupling*. A semelhança entre vidros de spin descontínuos (campo médio) e sistemas em dimensão finita e com desordem auto-induzida, como vidros estruturais, permite estabelecer tal relação entre topologia e a transição vítrea nestes últimos. Diversas propriedades dinâmicas de vidros estruturais estão estreitamente relacionadas a propriedades topológicas da superfície de energia no espaço de configurações, como a fragilidade de um sistema formador de vidro, processos de difusão em líquidos superresfriados, a temperatura efetiva em relações de flutuação dinâmicas.

Embora a Mecânica Estatística de Equilíbrio seja uma área bem compreendida, com um formalismo muito

bem estabelecido, muitas questões adjacentes ou à fronteira de seu escopo ainda permanecem em aberto ou foram resolvidas apenas recentemente.

Um exemplo de sistemas que não são descritos pela Mecânica Estatística de Equilíbrio de Boltzmann e Gibbs são sistemas desordenados cuja frustração produz uma multiplicidade de estados localmente estáveis com energia livre próxima, o que, sob condições adequadas pode levar a uma fase de vidro. A mecânica estatística não pode explicar, por exemplo, como um sistema com entropia alta não consegue explorar todo o espaço de fases.

Apesar da prolífica atividade na área de sistemas desordenados nos últimos trinta anos, diversas questões fundamentais ainda permanecem em aberto. Em especial, vidros estruturais, ou sistemas *sem* desordem congelada com interações de alcance finito, ainda apresentam diversos desafios aos pesquisadores [104, 112]. Vidros de spin em campo médio com desordem congelada, como os modelos de Sherrington-Kirkpatrick e p -spin, são mais bem compreendidos, e suas soluções pelo esquema de quebra de simetria de réplicas de Parisi, e pela energia livre TAP [98, 113, 114] estão entre os mais importantes êxitos na área. A semelhança com vidros de spin descontínuos (p. ex. o modelo p -spin [111, 115, 116]) inspirou a descrição de *Random First Order Transition* (RFOT) para vidros estruturais, sistemas com desordem auto-induzida [15, 16, 70, 101, 117–121].

A dinâmica lenta não é exclusividade de vidros, já que é observada em sistemas que apresentam *coarsening* após um resfriamento rápido abaixo da transição para uma fase mais ordenada [122–124]; ou sistemas com interações de longo alcance que apresentam inequivalência de ensembles (p. ex. o modelo HMF [99]), cuja dinâmica conservativa não evolui (rapidamente) à distribuição de Maxwell-Boltzmann. Tais sistemas podem possuir infinitas distribuições de (quase) equilíbrio, dados pelas soluções estacionárias da dinâmica de Vlasov. Por outro lado, o estado de sólido desordenado tampouco é exclusivo ao vidro, já que também pode ser observado, p. ex., na fase de *spin-ice* em compostos do tipo pirocloro [125, 126].

A RFOT, descrita no capítulo que segue, é uma teoria estática que distingue vidros dos demais fenômenos de dinâmica lenta e fases desordenadas. Esta é um dos cenários atualmente aceitos para a transição de vidro, e estabelece a predominância exponencial, abaixo desta transição, de mínimos da energia livre frente a pontos de sela de qualquer outra ordem. Tal distinção se dá pela existência de uma entropia configuracional finita abaixo de uma temperatura T_D (próxima à temperatura de *Mode Coupling*, T_{MCT}), e que vai a zero na temperatura de Kauzman, T_K , em que a fase de vidro é tão estável quanto a fase com ordem de longo alcance (p. ex. cristalina).

Abaixo da temperatura da transição de vidro, $T < T_D$, a dinâmica do sistema é dominada pela (topologia e geometria da) superfície de energia livre e se torna lenta devido à predominância exponencial de pontos de sela de ordem zero. O número de mínimos locais com energia livre $\Phi(T)$ cresce exponencialmente com o tamanho do sistema:

$$\mathcal{N} = \exp(NS_c(T)),$$

onde $S_c(T)$ é a sua entropia configuracional. O peso estatístico de cada mínimo local é desprezível frente ao peso estatístico do mínimo global da energia livre. Porém, quando o número de mínimos locais com dada energia livre

crece exponencialmente com o tamanho N do sistema, estes se tornam estatisticamente relevantes. A energia livre que deve ser então minimizada é dada por:

$$\Phi(T) = f(T) - T S_c,$$

onde $f(T) = U - T S$, sendo U a energia interna do sistema, e S a contribuição térmica à entropia. Para a energia livre $\Phi(T)$ de vidros, a energia $f(T)$ e a entropia configuracional S_c exercem o papel que U e S , respectivamente, exercem frente a $f(T)$.

Sistemas com interações competitivas são muito comuns na natureza e em aplicações tecnológicas - p.ex. microemulsões, filmes ferromagnéticos dipolares, gás de Coulomb frustrado, os padrões de digitais, a pelagem das zebras, etc [25, 26, 127–156]. A competição de interações em diferentes escalas de distância pode estabilizar fases moduladas, dentre estas, fases esmélicas, com ordem orientacional e posicional de longo alcance, e fases nemáticas, com ordem orientacional de longo alcance. As estruturas moduladas são caracterizadas por uma grande variedade de padrões mesoscópicos (fases de faixas, com simetria C_π , fases hexáticas, com simetria $C_{\pi/6}$, líquidos tetragonais, etc). A frustração induzida por este tipo de competição pode também estabilizar uma fase de vidro nestes sistemas, uma fase do tipo *stripe-glass*. Recentemente, Westfahl, Schmalian e Wolynes introduziram um método formal para o cálculo da entropia configuracional em sistemas com interações competitivas para, assim, verificar a ocorrência de vidro nestes sistemas. Este método analisa a emergência de um limite assintótico finito para a função de correlação a dois tempos, e envolve a identificação de um comprimento dinâmico característico - um comprimento de Lindemann - que diverge na transição de vidro, estreitamente ligado àquela correlação dinâmica. Os autores, juntamente com seus colaboradores S. Wu e G. Kotliar, propõem a solução da matriz de correlação no espaço de réplicas através de uma expansão perturbativa da respectiva equação de Dyson, qual seja, uma expansão auto-consistente de campo blindado (originalmente *self-consistent screening approximation*, SCSA, proposta por A. J. Bray [27]), e através de uma técnica não-perturbativa, pela aplicação da teoria de campo médio dinâmica (originalmente *dynamic mean field theory*, DMFT). Aplicando o método supracitado através da solução perturbativa SCSA ou não-perturbativa da DMFT, fases de *stripe-glass* foram encontradas em diversos sistemas tridimensionais, como o gás de Coulomb frustrado com repulsão Coulombiana simples [18, 19]¹⁹, e com repulsão Coulombiana blindada (um potencial do tipo Yukawa) [23, 24], em microemulsões de óleo e água na presença de surfactantes [20], em um modelo bosônico quântico frustrado [21], no modelo de Brazovskii²⁰ (que aproxima de maneira satisfatória diversos sistemas com interações competitivas, inclusive o próprio gás de

¹⁹A emergência de uma fase de *stripe-glass* no gás de Coulomb frustrado também foi estudada, por técnicas independentes (por análises dinâmicas de *Mode-Coupling*), por Gilles Tarjus e colaboradores [129, 157–159]. Os autores encontram dinâmica lenta e metaestabilidade no modelo, mas a interpretação física da fase de vidro é distinta daquela proposta por Westfahl e colaboradores.

²⁰Os dois últimos modelos são resolvidos através da DMFT [21, 22]. Esta solução para a auto-energia da matriz de correlação no espaço de réplicas leva em conta que a formação de um vidro, não estando ligada à divergência de nenhum comprimento de correlação estático, é predominantemente dominada por correlações *locais* de um líquido superresfriado denso (em contraste com o comportamento crítico na vizinhança de uma transição contínua, em que os modos rápidos, relativos a comprimentos de onda pequenos, se tornam irrelevantes, sendo a transição dominada *somente* pelos modos lentos, relativos a comprimentos de onda longos). A solução baseia-se em um mapeamento auto-consistente do problema (Hamiltoniano) original em um problema *local*, que possui uma auto-energia (local) *idêntica* à auto-energia daquele.

Coulomb frustrado) [22]. Apesar dos muitos resultados em $d = 3$ para sistemas similares, o estudo da fase de vidro em um sistema com interações competitivas em $d = 2$ é de grande relevância, já que a emergência de um vidro em duas dimensões é fundamentalmente distinta da sua emergência em três dimensões [160].

Investiga-se na Parte II desta tese, a emergência de uma fase de vidro em um modelo contínuo bidimensional, cujo Hamiltoniano efetivo é do tipo de Ginzburg-Landau. Este pode ser considerado um modelo efetivo para a descrição de sistemas como filmes finos ferromagnéticos dipolares.

Capítulo 4

Vidros Estruturais

Este capítulo apresenta um resumo sucinto sobre a fenomenologia e abordagem quantitativa (teoria RFOT) de vidros estruturais, incluindo sua analogia com vidros de spin em campo médio com uma quebra de simetria de réplicas. Descrevem-se aqui as hipóteses fundamentais da teoria de vidros frágeis, que aborda o estado de vidro como uma fase termodinâmica. Como premissa básica, admite-se a existência de uma transição de equilíbrio a uma temperatura finita, que resulte na fase vítrea como a fase de mais baixa temperatura. Abaixo de tal temperatura, a fase de vidro é tão estável quanto a fase com ordem de longo alcance eventualmente subjacente.

Se um sistema encontra-se inicialmente na fase fluida, diminuindo a temperatura a uma taxa suficientemente alta, o líquido pode tornar-se um *líquido superresfriado*, mesmo abaixo da temperatura de condensação, T_m , e a transição para o sólido cristalino é assim evitada. Um resfriamento subsequente do líquido superresfriado resulta em um *vidro*. A taxa de resfriamento mínima para que o sistema possa formar um vidro, sendo esquivada a cristalização, dependerá de quão bom formador de vidro este seja.

É possível definir um funcional da energia livre $F[\rho]$, que no caso de um sistema fluido é função da densidade média local de partículas, no caso de um sistema magnético, depende da magnetização média local, etc, funções estas representadas por $\rho(\mathbf{x})$ ($\rho(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \langle \delta^{(3)}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) \rangle$), onde a média é tomada com respeito à medida de Boltzmann $\exp(-\beta E)$ [101]. Este funcional é análogo ao funcional de energia livre TAP (ver, por exemplo, [161]), que é definido em um espaço N -dimensional de magnetizações locais $m_i \equiv \langle \sigma_i \rangle$, entre outros, para o modelo p -spin campo médio. Propõe-se que a temperaturas suficientemente baixas, o funcional de energia livre $f[\rho] \equiv F[\rho]/N$ possua um número exponencialmente grande de mínimos, ou estados localmente estáveis - que cresce com a exponencial do número de partículas do sistema, N -, em um intervalo de energia livre $f \in [f_{min}(T), f_{max}(T)]$. Estes mínimos, porém, não expressam uma simetria espacial óbvia, ao contrário do que acontece com as fases ordenadas, cristalina ou ferromagnética. A estrutura de mínimos da energia livre $F[\rho]$ coincidirá, a temperatura zero, com os mínimos do Hamiltoniano (energia potencial) do sistema no espaço de

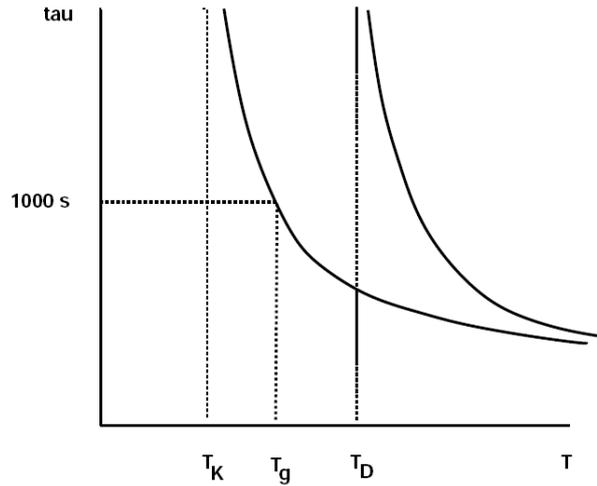


Figura 4.1: Tempos de relaxação em função da temperatura. A curva à direita representa a relaxação de um vidro de spin descontínuo em campo médio, e a curva à esquerda, a de um vidro. Em campo médio, o vidro de spin sofre uma transição dinâmica prevista pela teoria de *mode coupling* a uma temperatura $T_D > T_K$, abaixo da qual o sistema não equilibra mais. No caso de sistemas em dimensão finita, processos ativados abaixo de T_D deprimem a temperatura de divergência do tempo de relaxação, que só ocorre em T_K . A teoria de *mode coupling* fornece previsões quantitativas satisfatórias apenas muito acima de T_D . Em $T_g > T_K$, o tempo de relaxação do vidro real já é longo o suficiente para que o mesmo não equilibre mais em escalas experimentais [101].

graus de liberdade microscópicos¹.

Na região de altas temperaturas, a solução que domina o comportamento termodinâmico é a uniforme $\rho(\mathbf{x}) = \rho$, onde $\rho(x)$ é a densidade de partículas média local. À medida em que se reduz a temperatura, é possível que surjam outros mínimos do funcional $F[\rho]$, além da solução uniforme. A energia livre destes, porém, é mais alta que a da solução homogênea. O sistema, portanto, encontra-se na fase líquida, ou fluida, em que o mesmo é insensível à estrutura de mínimos da energia potencial no espaço de graus de liberdade $V(\{\mathbf{x}_i\})$. Quanto mais se reduz a temperatura, tanto mais sensível é a dinâmica do líquido à estrutura de mínimos metaestáveis de $V(\{\mathbf{x}_i\})$.

No laboratório, o líquido superresfriado sai do equilíbrio a uma temperatura T_g , que depende da taxa de resfriamento Γ . T_g é tipicamente *definida* como a temperatura na qual o tempo de relaxação do líquido atinge a ordem de 10^3 segundos [102, 108]. O padrão de relaxação do líquido gradativamente resfriado, dado pela função viscosidade, ou susceptibilidade - donde se obtêm os tempos de relaxação - em função da temperatura, fornece informações sobre a estrutura de mínimos da energia livre. Vidros fortes (*strong*) possuem um comportamento tipo Arrhenius para os respectivos tempos de relaxação, já que a escala de energia dada pela altura típica das barreira de energia livre independe da temperatura [104]. Os tempos de relaxação de vidros frágeis (*fragile*) crescem muito mais rápido que um Arrhenius à medida em que a temperatura decresce em direção a T_g : são chamados super-Arrhenius, e caracterizados por uma altura de barreira de energia livre que cresce com T decrescente (figura 4.1). Resfriando-se o líquido, este congela no estado amorfo (vidro) a uma temperatura T_g que decresce com Γ .

Quando "congela" no estado de vidro, o calor específico do sistema sofre uma descontinuidade, a partir de um valor, maior, correspondente ao líquido superresfriado, para um valor, menor, próximo do sólido cristalino. A *entropia configuracional* é dada por $S_c = S_{supliq} - S_{crystal}$, ou seja, pelo "excesso" de entropia da fase de líquido

¹O Hamiltoniano de um sistema com desordem congelada não possui uma simetria definida, já que o subconjunto de graus de liberdade aleatórios é fixo. Dentro da analogia aqui descrita de vidros estruturais com vidros de spin descontínuos, conjectura-se o mesmo cenário.

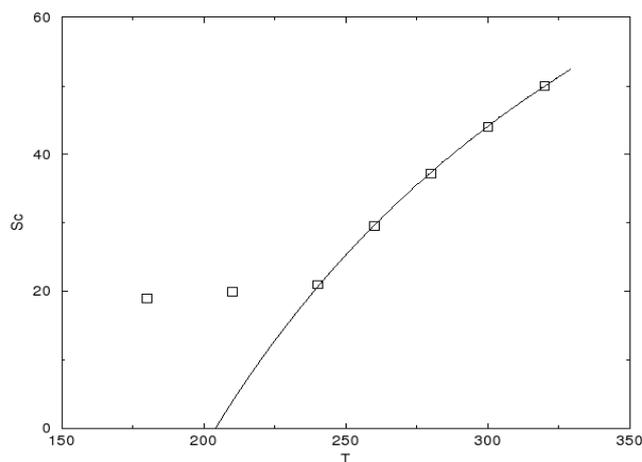


Figura 4.2: Gráfico da entropia como função da temperatura. A curva sólida corresponde ao líquido superresfriado, e os pontos correspondem a dados experimentais para OTP, *o*-tepheryl (a entropia está em $JK^{-1}mol^{-1}$, e a temperatura em K) [102]. Os dados experimentais deixam de coincidir com a curva sólida em $T_g \approx 246K$.

superresfriado em relação à fase de equilíbrio - cristalina - subjacente. Pode, assim, ser medida pela integral $S_c(T) = \int_C \frac{dQ_{supliq}}{T} - \int_C \frac{dQ_{crystal}}{T} = \int dT(C_{supliq} - C_{crystal})/T$, sendo portanto proporcional à diferença entre os respectivos calores específicos, determinados para um mesmo processo termodinâmico. A função $S_c(T)$ se comporta suavemente no estado de líquido superresfriado, até que se torne um vidro, em T_g , ponto em que a entropia deixa de seguir a curva e tende a um valor finito, variando muito pouco a temperaturas mais baixas, como mostra a figura 4.2. Se resfriado mais lentamente o sistema segue a curva suave para S_c até temperaturas pouco menores. Se extrapolada desde a região de líquido superresfriado, S_c vai a zero a uma temperatura T_K . Do cenário experimental descrito, duas situações se apresentam como possíveis comportamentos do sistema quando resfriado a uma taxa Γ infinitesimal: a curva S_c contra T tende suavemente a uma assíntota em um valor finito de entropia configuracional, ou, para alguma temperatura T_K , $S_c = 0$ - permanecendo nula na região abaixo de T_K -, e o sistema sofre uma transição de fase ideal em T_K , ficando "preso" a um estado metaestável, amorfo, isto é, sem simetria espacial definida. Dados experimentais não permitem testar as hipóteses, já que o sistema sai do equilíbrio em $T_g > T_K$. Para tal, uma analogia de vidros reais com vidros de spin descontínuos, em campo médio, torna-se elucidativa e parece conduzir à segunda das hipóteses, que é o cenário adotado na descrição de vidros estruturais que segue.

4.1 Analogia com vidros de spin descontínuos

O paradigma de vidros de spin descontínuos é o modelo p -spin, campo médio, com spins de Ising [111] ou vínculo esférico [15, 116]. O Hamiltoniano do modelo envolve interação entre grupos de p spins, cujo tensor de interação, de ordem p , tem elementos aleatórios, distribuídos segundo uma função distribuição Gaussiana ou outra. O p -spin é, portanto, um modelo com desordem congelada.

4.1.1 Fenomenologia

Apesar desta diferença aparentemente fundamental entre a natureza da frustração em vidros estruturais e no modelo de campo médio p -spin, as semelhanças entre vidros reais (estruturais) e vidros de spin descontínuos são bastante sugestivas e começam com a ambigüidade existente na definição da ordem da transição termodinâmica [115]. Se há de fato, a uma temperatura T_K , uma transição vítrea ideal ('*ideal glass transition*'), esta deve possuir características mistas: o parâmetro de ordem é descontínuo, como em transições de primeira ordem, enquanto as entropias configuracional e total, assim como a energia livre e a energia interna, são contínuas no ponto da transição, como em transições de segunda ordem, segundo a classificação de Ehrenfest. O mesmo ocorre em vidros de spin descontínuos, que são aqueles cuja solução termodinâmica, abaixo da transição, possui uma quebra de simetria de réplicas (*IRSB*). Estes sistemas possuem uma transição de fase de um estado com simetria de réplicas (RS) para um estado com uma quebra de simetria de réplicas, a uma temperatura T_K . A solução *IRSB* passa a existir abaixo da temperatura $T_D > T_K$, mas a RS ainda é a solução mais estável no intervalo $T_D > T > T_K$. A solução RS deixa de existir abaixo de T_K [15]. (A transição dinâmica em $T = T_D$ na verdade impede que o sistema equilibre abaixo de T_D , a transição termodinâmica a T_K fica assim oculta pela dinâmica anômala.)

A temperatura T_D nestes sistemas campo médio é a temperatura da transição *dinâmica*, prevista pela teoria de *Mode-Coupling* (MCT) [11]. Acima de T_D , o padrão de relaxação da função de correlação *instantânea* é similar ao encontrado para vidros estruturais bem acima de T_D , com dois tempos característicos, relaxação β até um *plateau*, cujo tempo característico é independente de temperatura, e, a partir do *plateau*, um segundo processo de relaxação toma lugar, a relaxação α a partir deste *plateau*, cujo tempo de relaxação cresce com *temperaturas* decrescentes, até divergir para $T = T_D$. Em T_D , portanto, diverge o tempo total de relaxação do sistema campo médio, e este conseqüentemente já não consegue equilibrar em $T < T_D \equiv T_{MCT}$. Abaixo de T_D , o regime dinâmico do sistema deixa de ser estacionário - quebra da invariância translacional no tempo -, e o sistema sofre *aging*. O processo de *aging* é caracterizado por duas escalas de tempo separadas na evolução da função de correlação a dois tempos: a primeira relaxação, até um *plateau*, possui invariância translacional no tempo (isto é, depende apenas da *diferença* entre os tempos t_w e $t + t_w$ de medição e comparação do sistema, onde t_w é o tempo de espera entre o preparo ou perturbação do sistema e o tempo da primeira medição), e uma segunda relaxação a partir deste *plateau*, cujo tempo característico aumenta para tempos de espera crescentes (isto é, depende da diferença entre os tempos de medição e comparação do sistema, $t = (t + t_w) - t_w$, e no próprio tempo de espera t_w entre o preparo e a primeira medição, mesmo para tempos de espera relativamente longos). Tal comportamento é evidenciado pela função de correlação *a dois tempos*. Na região intermediária de temperaturas, $T_D < T < T_K$ passam a dominar os mínimos na superfície de energia livre do sistema², separados por barreiras infinitas (no limite termodinâmico) de energia livre; o estado e a dinâmica do sistema ficam então "presos" a algum destes vales, com energia livre

²Exatamente em T_D , em particular, dominam pontos de sela com ordem nula, o Hessiano nos pontos de sela possui apenas autovalores positivos e nulos [9].

extensivamente maior que a de equilíbrio, e não relaxa mais [12–14, 162].

No caso de vidros estruturais, sistemas com interações de alcance finito, não parece haver uma transição dinâmica em T_D . De fato, observa-se que, além da aproximação de *mode-coupling*, o tempo de relaxação do sistema, apesar de ser longo já em T_D , vá divergir apenas mais abaixo, na transição termodinâmica, T_K . A quebra de ergodicidade não é completa. A temperatura T_D , entretanto, marca uma mudança qualitativa no regime dinâmico (*dynamical crossover*), já que esta temperatura marca a primeira ocorrência de estados "vítreos" tendo um peso estatístico não-nulo na função de partição. De fato, T_D marca a transição entre uma região dominada por pontos de sela a uma região dominada por mínimos [17]. Neste caso, porém, estes vales são separados por barreiras finitas de energia livre, e o sistema, após evoluir por um tempo bastante longo dentro de um dado vale, pode eventualmente transitar entre vales, os chamados processos ativados, e assim ir relaxando a vales com energia livre mais baixa.

No laboratório, a uma taxa de resfriamento Γ finita, o líquido superresfriado sai do equilíbrio quando o tempo de relaxação excede as escalas de tempo acessíveis experimentalmente. Isto ocorre à temperatura T_g . Em T_g , o sistema já não relaxa mais, e isso significa que este fica preso a um mínimo metaestável, um estado vítreo, sem mais transitar entre vales, isto é, o sistema se torna um vidro. T_g é, portanto, a temperatura da transição vítrea no laboratório. Abaixo de T_g o sistema sofre aging.

4.1.2 Predições Quantitativas

Em campo médio, na região de temperaturas $T_K < T < T_D$, o espaço de fases é quebrado em componentes ergódicas, separadas por barreiras de energia livre infinitas, chamadas vales de energia ou estados TAP [98, 161]. Cada vale de energia α tem uma energia livre F_α , com densidade de energia livre $f_\alpha = F_\alpha/N \in [f_{min}, f_{max}]$. O peso estatístico de um único estado metaestável, frente ao do estado acessível de mais baixa energia livre, é irrelevante. Para que o sistema apresente dinâmica lenta, isto é, não consiga relaxar para o estado de mais baixa energia, é necessário que o peso estatístico de estados metaestáveis com uma dada energia livre maior que a mínima acessível seja “compensado” pela *multiplicidade* destes estados equivalentes. O número de mínimos locais da densidade de energia livre f é, portanto, exponencialmente grande (com N) nesta região de temperaturas: $\mathcal{N}(f, T, N) \approx \exp(NS_c(f, T))$, onde $S_c(f, T)$ é a entropia configuracional, também chamada *complexidade*. Esta é uma função convexa, crescente com T , que são precisamente propriedades de uma entropia no ensemble “canônico”, e vai a zero continuamente em $f_{min}(T)$. Abaixo de f_{min} ou acima de f_{max} , $\mathcal{N}(f, T, N) = 1$.

A entropia configuracional é a contribuição à entropia total do sistema devida à multiplicidade de estados localmente estáveis, já que podemos pensar na densidade de estados como sendo a contribuição de volume de cada vale de energia no espaço de configurações, multiplicada pela respectiva multiplicidade (tal contribuição, evidentemente, se mostrará relevante apenas no caso de um número extensivo de estados).

Tendo o sistema atingido um regime estacionário, associa-se a cada um dos vales de energia um peso

estatístico, do tipo "peso de Boltzmann". Sendo os vales separados por barreiras de energia livre infinitas, supõe-se que a energia livre total do sistema, Φ , será a soma simples ("diagonal") das contribuições de energia livre de cada vale α , e a função de partição pode ser aproximada por [12, 102, 103]:

$$Z \equiv e^{-\beta N \Phi} \approx \sum_{\alpha} e^{-\beta N f_{\alpha}(T)} = \int_{f_{min}}^{f_{max}} df \exp(-N [\beta f - S_c(f, T)]). \quad (4.1)$$

Na última igualdade, supondo-se N suficientemente grande (de modo que o espectro de energia livre dos estados TAP seja denso no intervalo $[f_{min}(T), f_{max}(T)]$), transformou-se a soma sobre os vales de energia livre, α , em uma integral em energia livre, de $e^{-\beta N f}$, sendo $e^{NS_c(f, T)}$ o número de vales com energia livre f a temperatura T .

A energia livre total do sistema, Φ , devido à perda de entropia - quebra de ergodicidade - será dada pela diferença entre a energia livre de equilíbrio e a entropia configuracional. Com N suficientemente grande, o teorema do ponto de sela aproxima bem a integral (4.1) pela contribuição máxima do integrando dentro dos limites de integração, ou seja, pelo máximo do argumento da exponencial. Os máximos que dominam a integral serão aqueles com energia livre f^* , tal que $\Phi \equiv \Phi(f^*) = \inf_f [f - TS_c(f, T)]$. Na região de temperaturas entre a transição estática e a dinâmica ($T_K < T < T_D$), estados de equilíbrio a temperatura T não são aqueles com energia livre f_{min} , mas aqueles que otimizam o balanço entre a energia livre e a contribuição entrópica devido à presença do número exponencialmente grande de estados metaestáveis com mesma energia livre (contribuição de sinal oposto), em todo o intervalo de energias livres acessíveis, $[f_{min}, f_{max}]$. Os estados com energia livre distinta daquela que minimiza a quantidade $\Phi(f)$ são considerados metaestáveis neste contexto. Todos os estados localmente estáveis, tanto os de equilíbrio quanto os metaestáveis, entretanto, se tomados isoladamente, têm peso nulo no limite termodinâmico. A condição de equilíbrio é um efeito coletivo.

A estrutura de $\Phi(f)$ é similar à estrutura da energia livre usual f , que compõe $\Phi(f)$: $f = \inf_E [E - TS(E)]$, onde $S(E)$ é densidade de entropia como função da densidade de energia interna E . No presente caso, a entropia total se decompõe em uma contribuição devida a flutuações em torno de um mínimo dado, e a contribuição devida à multiplicidade de mínimos, isto é, S_c .

A temperatura suficientemente alta, $f_{max} > f^* > f_{min}(T)$. O sistema pode ficar preso em um dos numerosos mínimos acessíveis, com energia livre f^* , seu número sendo dado por $\exp(NS_c(f^*, T))$. $f^*(T)$ é uma função decrescente de T . A temperatura de Kauzman T_K é aquela abaixo da qual f^* adere ao seu mínimo $f_{min}(T)$ - esta função continua a variar com a temperatura abaixo de T_K -, ou, equivalentemente, a temperatura abaixo da qual $S_c(f^*, T) \equiv S_c^* = 0$, já que $f^* = \Phi(f^*) + TS_c^*$ (minimizar Φ em relação a f equivale a minimizar a própria função $f(T)$, à temperatura de Kauzman). Em T_K , portanto, $\Phi = f_{min}$, e o sistema congela em um estado "vítreo", amorfo. Este é o cenário da transição de vidro ideal.

Observa-se também que a entropia configuracional S_c como função de T e de f depende suavemente na temperatura, o efeito de uma mudança de temperatura é essencialmente um *shift* global, uma translação do suporte da função $S_c(f, T)$ no eixo de energia livre f . Isto é consequência do fato de que, dentro do intervalo $[T_K, T_D]$ de

temperaturas, a estrutura de estados permanece a mesma, estados não se bifurcam ou extinguem com uma mudança na temperatura [13,98].

4.2 Fenomenologia da Transição de Fase em Vidros Reais - Teoria RFOT

Inspirando-se no comportamento termodinâmico e dinâmico que se apresenta em vidros de spin descontínuos em campo médio, já extensivamente estudado e conhecido, elabora-se um cenário análogo para vidros reais (ver [70] por exemplo), motivado pela semelhança existente entre os dois conjuntos de sistemas frustrados [121]. Tal cenário é denominado teoria RFOT, de *Random First Order Transition*. Para temperaturas suficientemente baixas, as dinâmicas de líquidos viscosos (com viscosidade $\gtrsim 10^{-9}$ s) e de outros sistemas formadores de vidros são dominadas pelas barreiras de potencial que são grandes, comparadas à energia térmica dos sistemas. Propõe-se que para vidros estruturais, como no análogo campo médio, também ocorra, abaixo de uma temperatura T_D , um número exponencialmente grande de estados localmente estáveis, mínimos locais do funcional de energia livre $F[\rho]$, aos quais a dinâmica do sistema é sensível, sendo o intervalo $T \in [T_K, T_D]$ definido por uma entropia configuracional finita, e a temperatura T_K definida como o supremo de $\{T\}$ em que $S_c(T) = 0$.

Uma diferença crucial entre o caso de vidros de spin e o de vidros reais é a presença, no primeiro caso, de desordem congelada, enquanto que no segundo caso, a desordem é auto-induzida. No caso de vidros de spin, o método de réplicas pode ser imediatamente aplicado para o cálculo de quantidades "auto-médiantes" (*self averaging*), envolvendo médias sobre as realizações dos graus de liberdade aleatórios do Hamiltoniano. Já no caso de vidros reais, não é de imediato aparente a maneira pela qual a frustração engendra uma entropia configuracional finita e como um cálculo termodinâmico da energia livre poderia capturar a presença, quando estatisticamente relevante, de estados metaestáveis. A introdução de réplicas de um sistema foi originalmente proposta como um "truque" para o cálculo de quantidades auto-médiantes em sistemas com desordem congelada, por exemplo, para o cálculo da média sobre a desordem do logaritmo da função de partição destes sistemas, substituindo-o pelo cálculo da média sobre a desordem de uma potência da função de partição.

Informação sumamente relevante sobre a estrutura da fase de baixa temperatura no sistema original - não replicado - é fornecida pela distribuição de distâncias, ou equivalentemente de "proximidade", *overlaps* - correlações entre réplicas. É possível, por exemplo, definir um parâmetro de ordem a partir da correlação entre pares de réplicas fracamente interagentes do sistema (a interação é eventualmente levada a zero, reobtendo-se o sistema não replicado). O conjunto das funções de correlação de $m = \{2, 3, 4, \dots\}$ réplicas, ou "clones", naturalmente, fornecerá ainda mais informação sobre o sistema³.

Na fase de vidro, a interação (introduzida) entre réplicas as forçará a "condensarem" no mesmo estado

³Em trabalhos mais recentes, tem sido muito explorada a informação relevante contida no comportamento de correlações a quatro pontos, isto é, correlações não-locais no espaço e no tempo [163].

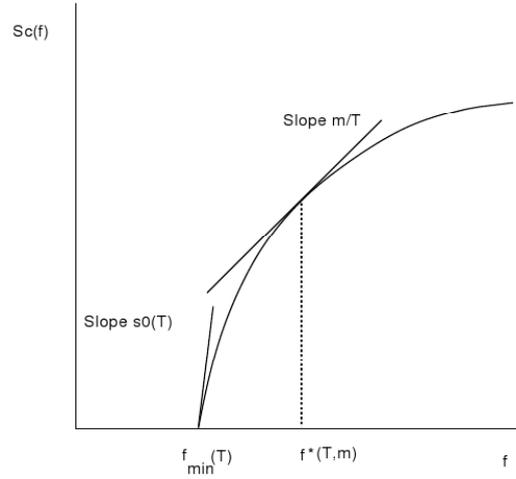


Figura 4.3: Gráfico qualitativo da entropia configuracional $S_c(f, T)$ em função da energia livre f , para temperaturas $T < T_D$. f^* é a solução da equação de ponto de sela (4.3) à temperatura T [101].

vítreo, ou mesmo vale de energia, e assim, a função de partição se simplifica enormemente, sendo dada por:

$$Z_m \approx \sum_{\alpha} e^{-\beta N m f_{\alpha}(T)} = \int_{f_{\min}}^{f_{\max}} df \exp\{N[(S_c)_m(f, T) - m\beta f]\}, \quad (4.2)$$

que é mais simples que a forma completa $Z_m = (Z)^m$. O limite $m \rightarrow 1$ deve ser tomado no final. Evidentemente, este desenvolvimento não leva em conta que, no caso de vidros reais, com interações de alcance finito, a quebra de ergodicidade abaixo de T_D devido à multiplicidade dos referidos mínimos, é apenas parcial. Isto significa que, nos vidros estruturais, além de campo médio, os diferentes estados metaestáveis possuem uma correlação finita. De fato, a dinâmica abaixo de T_D torna-se significativamente mais lenta, porém não há transição dinâmica real em T_D , apenas um *crossover*. A dinâmica abaixo de T_D ainda apresenta processos ativados, caracterizados por dois tempos de relaxação característicos [112]. O sistema evolui em um estado metaestável por um intervalo de tempo grande - porém finito -, até que uma flutuação de energia cinética lhe permita transpor uma barreira de energia - que é finita - e continuar evoluindo até um vale de energia livre mais baixa. O líquido superresfriado pode ser visto como um mosaico de estruturas escolhidas localmente dentre o conjunto de mínimos com energias livres próximas, e que flutuam sob a influência de eventos ativados. Tais processos ativados, entretanto, serão desconsiderados no presente contexto.

No limite termodinâmico, a solução será dada pela equação de ponto de sela para m réplicas do sistema, que é:

$$\frac{m}{T} = \left. \frac{\partial (S_c)_m(\{f^a\}, T)}{\partial f^a} \right|_{f^a=f^*}. \quad (4.3)$$

De forma análoga ao desenvolvimento da seção anterior, o ponto de sela que domina a função de partição é o ponto f^* tal que a derivada da curva $S_c(f)$ contra f seja igual a m/T , como mostra a figura 4.3. A temperatura suficientemente baixa, o ponto de sela "adere" ao mínimo $f^* = f_{\min}(T)$. Para $m = 1$ esta transição termodinâmica acontece em T_K .

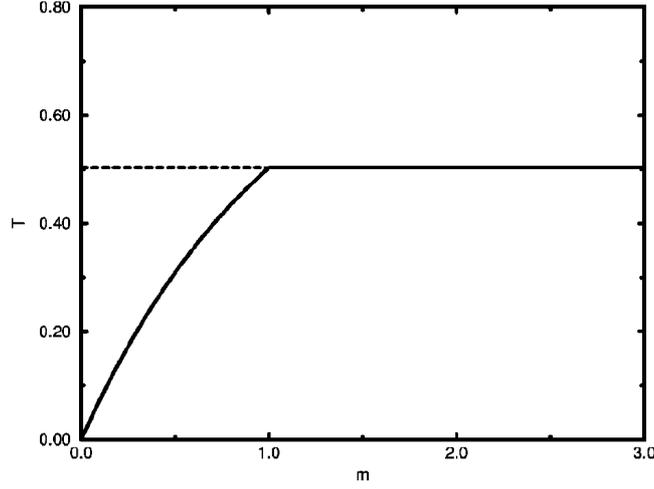


Figura 4.4: Diagrama de fase típico no plano temperatura contra m , para um sistema com m réplicas fracamente interagentes. A curva que separa a fase de vidro e a líquida é $m = m^*(T)$. Há duas fases líquidas. Acima da linha horizontal tracejada $T = T_K$, as réplicas são descorrelacionadas no limite em que a interação entre réplicas vai a zero. Melhor dito, a fase de vidro não existe acima desta linha horizontal. O estado líquido para $m < 1$, e para $T < T_K \approx 0.5$ (na escala de temperaturas acima definida), é um líquido molecular onde as réplicas formam estados moleculares ligados. A região $T < T_K$, com $m > m^*(T)$, é a fase de vidro, em que a energia livre é independente de m [101].

No limite $m \rightarrow 1$ a função de partição Z_m é dominada pelo ponto de sela correto, f^* para $T > T_K$. Por causa da convexidade de S_c como função de f , o ponto de sela está em $f > f_{min}(T)$ para m suficientemente pequeno, e adere a $f^* = f_{min}(T)$ quando m se torna maior que um certo valor $m^*(T)$. Este valor, m^* , é menor que 1 (um) quando $T < T_K$, ou seja, abaixo de T_K , o sistema com $m = 1$ tem energia livre $f_{min}(T)$, e congela em um estado de vidro. A energia livre na fase vidro, $F(m = 1, T \leq T_K) \equiv \lim_{m \rightarrow 1} -\frac{1}{\beta N} \log Z_m(\beta)$, é igual a $F(m^*(T), T \leq T_K)$ (figura 4.4) [103].

A energia livre é contínua ao longo da linha de transição $m = m^*(T)$. Uma das maneiras de se computar $F(m^*(T), T)$, para $T < T_K$, seria a partir da região $m \leq m^*(T)$, região em que o sistema replicado está na fase líquida, e construir a energia livre do vidro como a continuação analítica da função calculada através da linha $m = m^*(T)$. Desta forma, utilizam-se métodos aproximativos para cálculos na fase líquida, para um líquido molecular, como *small cage expansion*, ou *harmonic resummation*, obtendo-se propriedades da fase de vidro a partir da energia livre analiticamente continuada desde a fase líquida [101–103]. Para $T < T_K$, $F(m, T)$ é máxima (em relação ao número de réplicas) no valor $m = m^*$, menor que um, enquanto que, para $T > T_K$ o máximo é atingido em um valor m^* que é maior que um.

A aproximação descrita no próximo capítulo não seguirá esta linha. O próximo capítulo introduz a aproximação conhecida por *self-consistent screening approximation* (SCSA), que consiste em uma expansão em $1/n$, onde n é a dimensão da variável de estado, exata a ordem $\mathcal{O}(1/n)$.

A característica essencial da região de líquido superresfriado ($T_D > T > T_K$) é a ocorrência de uma entropia configuracional finita. Conhecendo-se $F(m, T)$, dada pelo argumento da exponencial do integrando em (4.2), $F(m, T) = \inf_f \{f(T) - \frac{T}{m}(S_c)_m(f, T)\}$, pode-se obter a entropia configuracional $S_c(f, T)$ por uma trans-

formação de Legendre:

$$\begin{aligned}
 dF &= \frac{\partial F}{\partial m} dm + \frac{\partial F}{\partial T} dT = \\
 &= \frac{T}{m^2} S_c(f^*, T) dm - \left[\frac{S_c(f^*, T)}{m} + \frac{T}{m} \frac{\partial S_c}{\partial T} - \frac{\partial f^*}{\partial T} \right] dT.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Considerando f^* e m como parâmetros independentes, transforma-se o espaço de parâmetros de $\{m, T\}$ para $\{f^*, T\}$, e da representação $F(m, T)$ passa-se à representação $TS_c(f^*, T)$. Do primeiro termo de (4.4), infere-se diretamente:

$$S_c(f) = \frac{m^2}{T} \frac{\partial F(m, T)}{\partial m} \Big|_{m=1}. \tag{4.5}$$

Da relação: $S_c = \beta m f^* - \beta m F(m, T)$, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 \beta m^2 \frac{\partial F}{\partial m} &= \beta m f^* - \beta m F(m, T) \Rightarrow m \frac{\partial F}{\partial m} + F(m, T) = f^* \\
 f^* &= \frac{\partial [mF(m, T)]}{\partial m} \Big|_{m=1}.
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

No contexto de vidros estruturais, a temperatura da transição de vidro ideal, T_K , é chamada temperatura de Kauzmann. T_K é a temperatura em que a entropia configuracional de equilíbrio vai a zero, ou, alternativamente, é aquela tal que $m^*(T_K) = 1$.

A equação (4.2) descreve a fenomenologia do cenário abaixo do *crossover* dinâmico, porém requer o conhecimento *a priori* da estrutura de vales $\{f_\alpha\}$, ou, equivalentemente, da entropia configuracional do sistema. A partir deste ponto, se torna necessário estabelecer um método para a introdução de réplicas interagentes do sistema, do que trata o próximo capítulo.

Capítulo 5

Fase de Vidro em Modelo Bidimensional com Interações Competitivas

Este capítulo apresenta um resumo da estática de sistemas com interações competitivas nas aproximações de campo médio e Hartree, e um resumo técnico do método de réplicas aplicado a sistemas com desordem auto-induzida, assim como da expansão perturbativa (self-consistent screening approximation) para a matriz de correlação no espaço de réplicas, que permite obter a entropia configuracional de tais modelos. Finalmente, aplicam-se estas ferramentas técnicas na investigação da ocorrência da fase de vidro em um modelo bidimensional com interações competindo em diferentes escalas de distância. Esta análise é um resultado original apresentado nesta tese.

5.1 Hamiltoniano

5.1.1 Modelo discreto

O sistema que motiva originalmente o presente trabalho é um filme fino ferromagnético, com interação dipolar de longo alcance, e anisotropia magnética de superfície. Tal sistema, na rede bidimensional, pode ser representado pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{lat} = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}') + \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S^\alpha(\mathbf{r}) \Gamma^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') S^\beta(\mathbf{r}') - K \sum_{\mathbf{r}} [S^z(\mathbf{r})]^2, \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ é o momento de dipolo magnético em \mathbf{r} , no caso, um vetor (clássico) de spin de Heisenberg. J , g e K

são parâmetros que medem a intensidade das interações de troca e dipolar e o grau de anisotropia, respectivamente. Índices gregos indicam componentes espaciais, e índices repetidos são somados. A matriz da interação dipolar no espaço real possui elementos $\Gamma^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \Gamma_{(1)}^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Gamma_{(2)}^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} - 3 \frac{(r'^\alpha - r^\alpha)(r'^\beta - r^\beta)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5}$.

A competição entre a anisotropia de superfície e a interação dipolar produz uma transição de reorientação dos spins: acima da temperatura de transição, o momento de dipolo magnético é confinado ao plano da rede (e o modelo se torna equivalente a um modelo XY); abaixo desta temperatura, a componente perpendicular do momento de dipolo magnético é finita. A temperaturas suficientemente baixas, domina a componente do momento de dipolo magnético perpendicular ao plano da rede. Este modelo - e variantes - apresenta um diagrama de fases bastante complexo [128]- [147]. A região de baixas temperaturas supracitada é a relevante para o presente trabalho. Evidentemente, no caso em que os spins são essencialmente perpendiculares ao plano da rede, a forma quadrática $S_\alpha \Gamma_{(2)}^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') S_\beta$, mediada pelo segundo termo da interação dipolar, é identicamente nula (já que a rede - vetores \mathbf{r} - está confinada ao plano xy e as componentes x e y dos spins \mathbf{S} são nulas).

5.1.2 Limite contínuo: funcional de Ginzburg-Landau

Neste contexto, aqui se adotará um funcional de energia livre do tipo de Landau-Ginzburg como Hamiltoniano efetivo, que possui, como no regime de baixas temperaturas do Hamiltoniano (5.1), graus de liberdade escalares. Neste caso, entretanto, os graus de liberdade já não são os momentos de dipolo de Heisenberg no limite Ising, mas um parâmetro de ordem (magnetização) local, obtido através de um processo de *coarse-graining* de (5.1).

Desta forma, o ponto de partida do limite contínuo é o Hamiltoniano ϕ^4 :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ferro} &= \frac{1}{2} \int d^2x \{ (\nabla \phi(\mathbf{x}))^2 + r_0 \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{u}{2} (\phi^2(\mathbf{x}))^2 \} \\ &= \frac{V}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \phi(-\mathbf{k}) [r_0 + k^2] \phi(\mathbf{k}) + \frac{uV}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \phi(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{q}) \phi(\mathbf{p}) \phi(-\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (5.2)$$

que representa o limite contínuo da interação de troca. ϕ é um campo real escalar *coarse-grained*, o termo gradiente favorece a homogeneidade de ϕ no espaço, já que a condição de minimização da energia livre limita o módulo do gradiente¹. A constante $r_0 = a \frac{(T - T_c)}{T_c}$ depende da temperatura (T_c é a temperatura da transição esmética em campo médio, já que a seguir se acrescentará um termo de interação dipolar frustrando a ordem ferromagnética do Hamiltoniano (5.2)), e $r_0 \leq 0$, $u > 0$ de modo que o Hamiltoniano reproduz o poço duplo, abaixo da transição para o ferromagneto.

O Hamiltoniano completo é dado pela adição à equação (5.2) da interação dipolar: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ferro} + \mathcal{H}_{dip}$,

¹Isto implica em que o campo ϕ seja uma função de \mathbf{x} contínua e suave, que não varia muito em escalas de distância menores que uma constante de rede da rede original. Tal escala é estabelecida pelo pré-fator do termo do gradiente, que foi renormalizado.

onde

$$\mathcal{H}_{dip} = \gamma \int d^2x d^2x' \frac{\phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3},$$

com $0 < \gamma < 1$ (γ deve ser comparada ao pré-fator do termo proporcional a ∇^2). γ é de fato a razão entre as constantes de acoplamento das interações dipolar e de troca (todas as demais constantes do Hamiltoniano estão normalizadas pela constante de acoplamento da interação de troca). No espaço de momentum, a interação dipolar é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{dip} &= \gamma \int \frac{d^2k}{2\pi} \hat{\phi}(\mathbf{k}) \hat{\phi}(-\mathbf{k}) k \int_{2\pi k/\Lambda}^{kV^{1/2}} d\rho \frac{J_0(\rho)}{\rho^2} \\ &= \gamma \int \frac{d^2k}{2\pi} \hat{\phi}(\mathbf{k}) \hat{\phi}(-\mathbf{k}) k \left[-\frac{{}_1F_2(\{-1/2\}; \{1/2, 1\}; -z^2/4)}{z} \right]^{kV^{1/2}}_{2\pi k/\Lambda} \\ &\stackrel{V^{1/2} \rightarrow \infty}{=} \gamma \left(\frac{{}_1F_2(\{-1/2\}; \{1/2, 1\}; -\frac{4\pi^2 k^2}{\Lambda^2 \frac{1}{4}})}{2\pi/\Lambda} - k \right), \end{aligned}$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero, e ${}_1F_2(\{\alpha_1\}; \{\beta_1, \beta_2\}; x)$ é uma função hipergeométrica generalizada. O segundo termo da transformada, $-k$, vem do limite superior da integral $V^{1/2} \rightarrow \infty$. $\frac{2\pi}{\Lambda} \equiv a$, o limite inferior da integral em ρ , é o parâmetro de rede do modelo discreto original, que representa uma escala de distâncias mínima para a validade da aproximação contínua.

As integrais envolvendo a interação dipolar completa são intratáveis analiticamente. De maneira a considerar integrais mais acessíveis analiticamente, ao mesmo tempo tomando uma forma mais geral para a interação de longo alcance, contendo os elementos relevantes da competição entre interações em diferentes escalas, a considerada aqui é uma interação que inclui termos até ordem k^2 na expansão de Taylor da interação dipolar no espaço de momentum. Os primeiros termos da expansão da transformada de Fourier são: $-k + \frac{\Lambda}{2\pi} + \frac{2\pi}{\Lambda} \frac{k^2}{4} - \frac{1}{144} \frac{\Lambda}{2\pi} \left(\frac{4\pi^2 k^2}{4\Lambda^2} \right)^2 + \mathcal{O}(k^6)$; tomando como unidade de distância o parâmetro de rede, $\frac{2\pi}{\Lambda} = 1$: $-k + 1 + \frac{k^2}{4} - \frac{1}{144} \frac{k^4}{16} + \mathcal{O}(k^6)$.

Adicionando à expansão acima para a transformada da interação dipolar o termo em k^2 proveniente da transformada do termo gradiente (interação de troca), define-se a forma mais geral da interação de agora em diante considerada: $A_0 + A_2(k - k_0)^2$, onde $A_0 = r_0 + \gamma(1 - \frac{\gamma}{\gamma+4})$, e $A_2 = \frac{\gamma}{4} + 1 \equiv \delta$. A função $A(k)$ tem um mínimo em k_0 , em torno do qual expandimos a função, e que é determinado pela intensidade da interação dipolar: $k_0 = \frac{\gamma}{2(\gamma/4+1)} = 2 - \frac{2}{\delta}$.

A interação considerada é isotrópica, e possui um mínimo em um valor não-nulo do módulo do vetor de onda $k = k_0$ ($A_1 = \partial A(k)/\partial k|_{k_0} = 0$). Uma simplificação adicional é feita levando-se em conta que a expansão harmônica só é válida para k próximo de k_0 :

$$(k - k_0)^2 = \frac{(k + k_0)^2 (k - k_0)^2}{(k + k_0)^2} \approx \frac{(k + k_0)^2 (k - k_0)^2}{4k_0^2} = \frac{(k^2 - k_0^2)^2}{4k_0^2}. \quad (5.3)$$

A motivação para se ter aproximado o termo $(k - k_0)^2$ pela expressão $\frac{(k^2 - k_0^2)^2}{4k_0^2}$ é a simplificação das integrais do modelo ao tratamento analítico, decorrente de tal aproximação. A região de temperaturas de interesse para o presente trabalho será a região de “altas temperaturas”. A investigação da fase de líquido superresfriado, do aparecimento de uma multiplicidade exponencial de estados metaestáveis desordenados e da determinação de uma temperatura “espinodal” associada se dá no entorno da (possivelmente presente) transição isotrópico-esmética evitada pelo resfriamento rápido ($|r_0| \ll 1$). Nesta região de temperaturas, como se descreverá mais adiante, apenas os modos com $|\mathbf{k}|$ muito próximo de k_0 são estáveis. Sob esta perspectiva, os Hamiltonianos que carregam as expressões $(k - k_0)^2$ e $\frac{(k^2 - k_0^2)^2}{4k_0^2}$ são equivalentes no que concerne as propriedades dos sistemas na região de temperaturas especificada. É importante ressaltar que até o presente momento não há um tratamento de grupo de renormalização para a classe de universalidade do modelo de Brazovskii em duas dimensões. Não se sabe rigorosamente, portanto, se a classe de universalidade do modelo inicialmente proposto é invariante sob a adição de uma potência k^4 ao Hamiltoniano através da troca $(k - k_0)^2 \rightarrow \frac{(k^2 - k_0^2)^2}{4k_0^2}$. Entretanto, dentro do escopo do presente trabalho, o argumento de que os modos estáveis na região de temperaturas de interesse estão em uma vizinhança próxima de k_0 é suficientemente convincente.

O Hamiltoniano do modelo no espaço de momentum, nesta aproximação, é portanto dado por $[J = \delta/4k_0^2 = \frac{\delta^3}{16(\delta-1)^2} = \frac{1}{2(2-k_0)k_0^2}]$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[r_0, u, J] &= \frac{V}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \phi(-\mathbf{k}) \left[r_0 + J(k^2 - k_0^2)^2 \right] \phi(\mathbf{k}) \\ &+ \frac{uV}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \phi(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{q}) \phi(\mathbf{p}) \phi(-\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde V é a superfície do filme fino, e $\phi(\mathbf{k}) = \int d^2x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x})$ é a transformada de Fourier do campo $\phi(\mathbf{x})$. A integral é efetuada dentro da região $|\mathbf{k}| < \Lambda$, onde o *cutoff* Λ está relacionado ao inverso da escala mínima a partir da qual passa a valer o funcional de energia livre de Ginzburg-Landau como Hamiltoniano efetivo do modelo discreto, funcional este obtido a partir do Hamiltoniano original através de um processo de *coarse-graining* [164].

A seguir descreve-se de maneira sucinta o comportamento de equilíbrio do sistema definido por (5.4), dentro das aproximações de campo médio e Hartree.

5.2 Estática

5.2.1 Campo médio

Partindo-se da integral funcional da “função” de partição no formalismo de Ginzburg-Landau (por exemplo,

[164, 165]),

$$Z\{\mathcal{H}(\phi)\} = \text{Tr} \exp \left\{ - \left[\mathcal{H}[\phi] - \int d^2x h(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \right] \right\} \equiv \int \mathcal{D}\phi(\mathbf{x}) \exp \left\{ - \left[\mathcal{H}[\phi] - \int d^2x h(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \right] \right\}, \quad (5.5)$$

fica claro que a solução com o maior peso estatístico no traço será o mínimo absoluto de $[\mathcal{H}[\phi] - \int d^2x h(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})]$ no espaço das funções $\phi(\mathbf{x})$. [Por generalidade se incluiu no Hamiltoniano um termo proporcional a $h(\mathbf{x})$, que é um campo externo - não uniforme -, conjugado a $\langle\phi(\mathbf{x})\rangle$, acoplado-se linearmente ao campo $\phi(\mathbf{x})$.] Esta é precisamente a solução do teorema do ponto de sela para a função de partição, truncada ao primeiro termo, e desconsidera flutuações $\delta\langle\phi(\mathbf{x})\rangle$ em torno de $\langle\phi(\mathbf{x})\rangle$. Por isto pode ser vista como uma aproximação de campo médio para o Hamiltoniano (5.4), em que

$$F = -\ln Z = \mathcal{H}(\langle\phi\rangle). \quad (5.6)$$

Tal solução, tomado $h(\mathbf{x}) = 0$, é obtida considerando-se a minimização de \mathcal{H} , com respeito às diferentes soluções do espaço de funções $\phi(\mathbf{x})$. Voltando à representação de \mathcal{H} no espaço de momentum, tem-se que o mínimo deve obedecer à seguinte equação:

$$\frac{\delta\mathcal{H}[\phi]}{\delta\phi(\mathbf{k}')} = \frac{1}{2} \left[r_0 + J(k'^2 - k_0^2)^2 \right] [\phi(\mathbf{k}') + \phi(-\mathbf{k}')] + 2u \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \phi(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{q}) \phi(-\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{k}') = 0, \quad (5.7)$$

onde $\delta F[\eta(\mathbf{x})]/\delta\eta(\mathbf{x}')$ é a derivada funcional² de F com respeito à função $\eta(\mathbf{x}')$. Tendo por um lado coeficientes variáveis de ϕ (funções de \mathbf{k}), e por outro um termo integral em ϕ , não é a princípio trivial determinar qual a forma funcional do mínimo. Entretanto, sendo u um parâmetro pequeno, é possível reduzir o conjunto de soluções a um subespaço do espaço de funções: o mínimo $\phi_{ps}(\mathbf{k}) = \langle\phi(\mathbf{k})\rangle$ será determinado pela minimização do primeiro termo (linear em ϕ). No caso de uma fase de faixas, tal solução terá a seguinte forma:

$$\langle\phi(\mathbf{k})\rangle = \frac{M}{(2\pi)^2} [\delta^{(2)}(\mathbf{k} - k_0\hat{\mathbf{n}}) + \delta^{(2)}(\mathbf{k} + k_0\hat{\mathbf{n}})], \quad (5.8)$$

que toma apenas o modo de Fourier dominante, que ocorre no mínimo do coeficiente deste termo $|\mathbf{k}| = k_0$. $\hat{\mathbf{n}}$ é um versor que define a direção de modulação da fase ordenada. Tal direção será escolhida pelo sistema na temperatura de transição através de flutuações aleatórias. No espaço direto isto corresponde a um cosseno puro: $\phi(\mathbf{x}) = 2M \cos(k_0\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x})$. A energia livre, $F = \mathcal{H}(\langle\phi\rangle) = r_0 M^2 + 3u M^4$, cuja amplitude M deve ser

²Formalmente, a derivada funcional de um funcional $F[\eta(\mathbf{x})]$ com respeito a $\eta(\mathbf{x}')$ é definida como

$$\frac{\delta F[\eta(\mathbf{x})]}{\delta\eta(\mathbf{x}')} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F[\eta(\mathbf{x}) + \varepsilon\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] - F[\eta(\mathbf{x})]}{\varepsilon}.$$

determinada de forma auto-consistente reinserindo o *ansatz* $\langle \phi(\mathbf{k}) \rangle$ na equação de ponto de sela correspondente:

$$\frac{\delta F}{\delta M} = 2 r_0 M + 12 u M^3 = 2 M (r_0 + 6 u M^2) = 0 \rightarrow \begin{cases} M = 0, & \text{se } r_0 > 0, \\ M = \sqrt{-\frac{r_0}{6u}}, & \text{se } r_0 < 0. \end{cases}$$

Para $r_0 > 0$, a única solução real é a desordenada, em que o parâmetro de ordem $M = 0$. Para $r_0 < 0$, o parâmetro de ordem - que é uma “magnetização” *staggered* ou modulada -, é dado por $M = \sqrt{-\frac{r_0}{6u}}$, que vai a zero no limite $r_0 \rightarrow 0^-$ como $M \propto r_0^{1/2}$, como era de se esperar. A transição é, portanto, contínua, de segunda ordem, sendo r_0 , proporcional à temperatura reduzida $\frac{T-T^*}{T^*}$, com T^* , neste caso, a temperatura de campo médio da transição entre as fases paramagnética e esmética.

Para a solução de campo médio, como esperado, a dimensionalidade do sistema não é relevante. Ao se considerarem as flutuações em torno da solução de campo médio, entretanto, a dimensionalidade terá um papel fundamental na solução de sistemas em $d < 4$, pois esta determina a dimensão da variedade invariante de energia livre e as flutuações transversais.

5.2.2 Uma aproximação auto-consistente para o campo: aproximação de Hartree

Como mencionado acima, a presença do termo de curto alcance \mathcal{H}_{ferro} no Hamiltoniano tende a estabilizar uma fase homogênea no sistema (ou uma separação de fases, no caso de um parâmetro de ordem conservado, como em potenciais Coulombianos), que é frustrada pela presença do termo, mais fraco, porém de longo alcance, \mathcal{H}_{dip} . O resultado, como exemplificado pela aproximação de campo médio para a fase de faixas na seção anterior, é o ordenamento a baixas temperaturas em uma fase modulada, caracterizada por estruturas mesoscópicas e um vetor de onda de modulação não-nulo, k_0 .

Como conseqüência, os modos de excitação mais baixos estão distribuídos em torno de uma esfera $(d-1)$ -dimensional no espaço de momentum, em contraste com o que ocorre com um ferromagneto, em que as excitações mais baixas a partir do estado fundamental se dão em torno do ponto $k = 0$. As flutuações $\delta\phi$ em torno de $\langle \phi \rangle$, portanto, correspondendo a um volume importante no espaço de fases, exercem um papel crucial para o comportamento de equilíbrio do sistema.

A aproximação de Hartree fornece uma maneira de levar em conta estas flutuações de maneira auto-consistente. Funções de correlação de Hartree são as funções de correlação Gaussianas, redefinindo o termo de massa no Hamiltoniano de forma auto-consistente.

Na ausência do termo quártico em ϕ , o modelo (5.4) é similar ao modelo Gaussiano, exatamente solúvel

$$\mathcal{H}_{gauss} = \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \phi(\mathbf{x}) K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi(\mathbf{x}') - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}), \quad (5.9)$$

cuja função de correlação é dada por $\overline{G}_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \lim_{h(\mathbf{x}), h(\mathbf{x}') \rightarrow 0} \frac{\delta^2 \log Z}{\delta h(\mathbf{x}) \delta h(\mathbf{x}')}$, é simplesmente dada por

$$\overline{G}_0^{-1}(k) = K(k) = r_0 + J(k^2 - k_0^2)^2, \quad (5.10)$$

onde $\overline{G}_0(k) = \int d^2 \xi \overline{G}_0(\xi) e^{-i\mathbf{k} \cdot \xi}$, onde $\overline{G}_0(\xi) = \overline{G}_0(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$ no sistema com invariância translacional, e portanto $\overline{G}_0(k)$ é uma função de uma só variável no espaço de Fourier.

No contexto da aproximação de Hartree [166], considera-se $\langle (\phi^2(\mathbf{x}))^2 \rangle \propto \langle \phi^2(\mathbf{x}) \rangle^2$, ao substituir $(\phi^2(\mathbf{x}))^2$ por um termo proporcional a $\phi^2(\mathbf{x}) \langle \phi^2(\mathbf{x}) \rangle$ no Hamiltoniano completo (incluindo o termo quártico).

Considera-se a função de correlação conectada³:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle (\phi(\mathbf{x}) - \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle) (\phi(\mathbf{x}') - \langle \phi(\mathbf{x}') \rangle) \rangle = \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}') \rangle - \langle \phi(0) \rangle^2, \quad (5.11)$$

onde a última igualdade se aplica ao sistema com invariância translacional. Ao realizar a substituição no termo quártico, é necessário considerar as $2(n+2)$ maneiras possíveis de se combinarem os diferentes fatores ϕ , onde n representa o número de componentes vetoriais do parâmetro de ordem. Esta aproximação então torna o Hamiltoniano quadrático em ϕ , e a as integrais envolvidas na função de correlação, gaussianas. A equação de auto-consistência⁴ se torna [138]:

$$G_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \overline{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + 2(n+2)u G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + 2(n+2)u \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (5.12)$$

ou, equivalentemente, no espaço de momentum:

$$G_0^{-1}(\mathbf{k}) = \overline{G}_0^{-1}(\mathbf{k}) + 2(n+2)u \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} G_0(\mathbf{p}) + 2(n+2)u \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \langle \phi(\mathbf{p}) \rangle \langle \phi(-\mathbf{p}) \rangle. \quad (5.13)$$

Considerando uma forma funcional análoga a \overline{G}_0 para G_0 :

$$G_0(k) \equiv \langle \phi_i(\mathbf{k}) \phi_i(-\mathbf{k}) \rangle_0 = \frac{1}{r + J(k^2 - k_0^2)^2}, \quad (5.14)$$

onde $k = |\mathbf{k}|$, e $\langle \mathcal{O} \rangle_0 = \left[\int \mathcal{D}\phi e^{-\beta \mathcal{H}[r, 0, J]} \right]^{-1} \cdot \int \mathcal{D}\phi(\mathcal{O}) e^{-\beta \mathcal{H}[r, 0, J]}$ é a média tomada com o peso estatístico $\exp\{-\beta \mathcal{H}[r, 0, J]\}$, que é uma Gaussiana (com o termo de massa modificado $r_0 \rightarrow r$). A expressão acima é válida sob as mesmas hipóteses assumidas ao definir-se o Hamiltoniano (5.4), isto é, que os modos excitados do sistema estejam restritos ao entorno de $|\mathbf{k}| = k_0$, suficientemente próximo da transição. O *ansatz* (5.14) define a função

³O uso das funções de correlação conectadas se justificará mais adiante, no contexto da expansão SCSA, para a qual o propagador de Hartree constitui o termo de ordem zero.

⁴O termo adicional na expressão aqui considerada, quando comparada à expressão usada em [166] vem do fato de se usarem funções de correlação conectadas.

de correlação de Hartree como a função de correlação Gaussiana, com um parâmetro r renormalizado:

$$r = r_0 + 2(n+2)u \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \mathcal{G}_0(\mathbf{p}) + 2(n+2)u \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \langle \phi(\mathbf{p}) \rangle \langle \phi(-\mathbf{p}) \rangle, \quad (5.15)$$

que é definido separadamente para cada fase do sistema: $\langle \phi \rangle = 0$ na fase desordenada, e $\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle = 2M \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x})$, na fase ordenada, sendo $M = \sqrt{-\frac{r}{6u}}$ (tomando $n = 1$).

À medida em que a temperatura é reduzida, a partir da temperatura da transição, outros modos, em torno de $\phi(k_0)$, se tornam estáveis. Pode-se constatar que os modos k estáveis obedecem a $(k^2 - k_0^2)^2 \lesssim -r_0/J$ (figuras 5.1 e 5.2) - processo de decimação de modos de alta energia [138]. Quanto mais próximo de $T = 0$, mais modos comporão o estado estável.

Usando a aproximação de Hartree, em um modelo similar a (5.4) [137, 138], encontra-se que a transição entre as fases isotrópica e modulada é de primeira ordem, sendo a fase desordenada metastável até $T = 0$, enquanto a temperatura espinodal para a fase ordenada é finita. A dimensão crítica inferior da transição isotrópico-esmética no modelo é $d = 3$ (ver discussão no Capítulo 5.4.1) [133].

Neste contexto, encontra-se que a fase modulada é estável frente a flutuações da amplitude M do parâmetro de ordem.

A importância do termo quártico cresce com o pré-fator u , e com este, como se verá mais adiante, a contribuição de momentos de ordem maior na expansão da energia livre, desprezados nesta aproximação de campo médio.

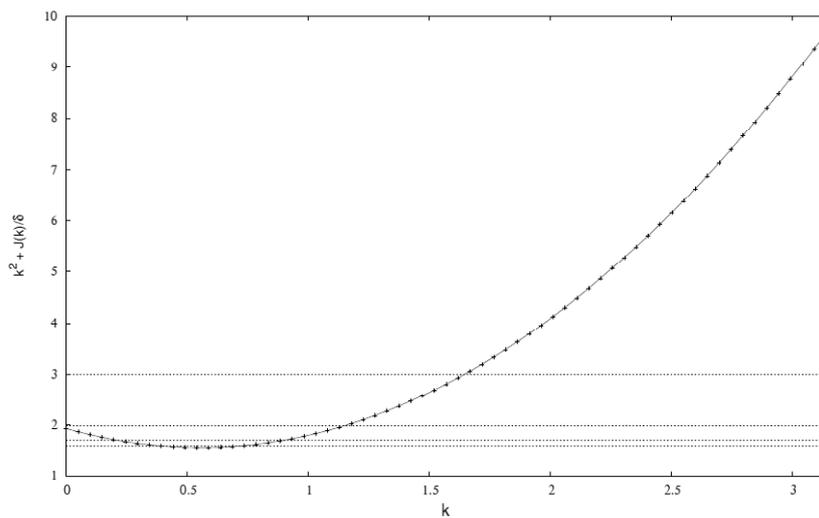


Figura 5.1: Gráfico comparativo de A_0 e A_2 como funções de k , para um modelo de filme ferromagnético dipolar similar ao modelo (5.4). Os modos estáveis a dada temperatura são aqueles que caem abaixo da linha $-r_0(T)$. Graficam-se $-r_0 \doteq 1.6, 1.7, 2, 3$. O mínimo de A_2 encontra-se em k_0 [131].

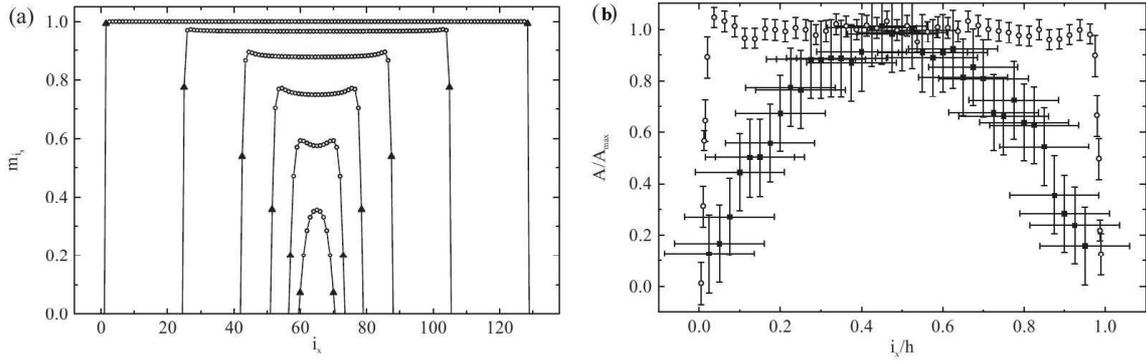


Figura 5.2: Filme ferromagnético dipolar - (a) perfil (transversal) de spin dentro de uma faixa para um modelo de filme fino ferromagnético dipolar (abaixo da transição de reorientação), calculado para a interação de troca dez (10) vezes maior que a constante de acoplamento dipolar para diferentes temperaturas. (b) perfil (transversal) de momentos de spin dentro de uma faixa em uma amostra experimental de filme fino ferromagnético dipolar a temperatura baixa (10 K, largura de faixa, $h = 9\mu\text{m}$, dado pelos círculos vazados), a temperatura logo abaixo da transição (330 K, largura de faixa, $h = 430\text{ nm}$, dado pelos quadrados cheios). Medidas realizadas por SEMPA (*scanning electron microscopy with polarization analysis*) [154].

5.3 Fase de Vidro

5.3.1 Entropia Configuracional

A ocorrência de uma contribuição configuracional finita, $S_c(f^*, T) \neq 0$, à entropia, que vai a zero à temperatura T_K , é o que caracteriza a transição de vidro ideal, como descrito no capítulo 4. A entropia configuracional, ao quantificar o excedente de energia livre do sistema superresfriado em relação à fase ordenada, caracteriza a competição entre a minimização da energia (contribuição energética) e a multiplicidade de estados metaestáveis (contribuição entrópica) e tem papel fundamental, portanto, na determinação de T_K , e na verificação da existência da fase de vidro.

A descrição adotada para o sistema superresfriado se fundamenta no cenário para vidros de spin descritos pela solução de Parisi com uma quebra de simetria de réplicas (1RSB), conhecida como teoria RFOT (*Random First Order Transition*) [70, 167]. Abaixo de dada temperatura $T_A > T_K$ a superfície (do funcional) de energia livre é caracterizada pela abundância de mínimos locais, ou estados metaestáveis. No caso de vidros de spin, em campo médio, a quebra de ergodicidade é completa, mas para sistemas com interações de alcance finito, como no presente caso, processos ativados ainda estão presentes⁵. Ademais, no caso de vidros de spin, um subconjunto de graus de liberdade do Hamiltoniano, $\{\mathcal{J}_{ij}\}$, é fixo, suas realizações, aleatórias, são independente e identicamente distribuídas de acordo com um peso estatístico dado. Diz-se de tal Hamiltoniano que este possui *desordem congelada*. A aleatoriedade intrínseca às realizações de $\{\mathcal{J}_{ij}\}$ introduz frustração no sistema, que resulta em uma multiplicidade de estados metaestáveis amorfos, isto é, sem simetria definida. A amostragem de tais estados metaestáveis em dada temperatura pode ser obtida integrando-se quantidades auto-médiantes (*self-averaging*), como a energia livre (ou outras quantidades extensivas), sobre as possíveis realizações da desordem, ponderadas pelo respectivo peso estatístico. As propriedades termodinâmicas dos estados metaestáveis são assim acessadas através do ensemble

⁵Por isto, no intervalo de temperaturas $T_K < T < T_A$, os tempos experimentais são $\tau_\alpha < t_{\text{exp}} \ll \tau_\beta$.

definido pela distribuição dos $\{\mathcal{J}_{ij}\}$, $\mathcal{P}[\mathcal{J}_{ij}]$ [113, 168].

No caso de sistemas frustrados cujos Hamiltonianos não apresentam desordem congelada explicitamente, ditos com *desordem auto-induzida*, resulta menos evidente como acessar os estados metaestáveis decorrentes da frustração. A situação é análoga à que ocorre em um ferromagneto, a quebra de ergodicidade decorrente da transição de fase e a emergência de magnetização espontânea abaixo de T_c não são observadas através de médias com o peso de Boltzmann. É fácil, entretanto, modificar o peso estatístico introduzindo um campo externo que seleciona um dos estados ferromagnéticos através de um termo com simetria apropriada. A multiplicidade dos estados metaestáveis e a ausência de simetria evidente torna este método muito mais difícil no caso de sistemas frustrados como o da equação (5.4).

Em [169], Monasson propôs um método semelhante, que permite o cálculo da função de partição degenerada de sistemas frustrados. Na equação de Dyson relativa à função de correlação resultante, a “subsérie” de diagramas $\mathcal{O}(1/n)$ ($1/n$ é o parâmetro de expansão, como descrito a seguir) pode ser somada para se obter a contribuição seguinte a Hartree através da aproximação auto-consistente de interação blindada.

No que segue, descreve-se a obtenção da entropia configuracional do modelo (5.4), através do método proposto por Monasson [169], e dentro da aproximação "auto-consistente de interação blindada" (*self-consistent screening approximation*, de agora em diante SCSA), originalmente descrita em [27].

5.3.2 Réplicas em Modelos sem Desordem Congelada

Uma das formas de se introduzirem réplicas em modelos com desordem auto-induzida é através do acoplamento a um campo externo pequeno, que quebra explicitamente uma simetria relevante do Hamiltoniano. Nesta seção apenas, a temperatura será explicitada no peso canônico, ao contrário da convenção das demais seções, em que, como usualmente, a temperatura é absorvida nas constantes do funcional de Ginzburg-Landau, $\mathcal{H}[\phi]$.

A energia livre de Helmholtz, para o sistema no equilíbrio termodinâmico, é dada por:

$$F_\phi(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log \int d\phi(\mathbf{x}) \exp\{-\beta\mathcal{H}[\phi]\}. \quad (5.16)$$

Uma hipótese tácita na noção de equilíbrio termodinâmico acima referido e no cálculo de valores esperados através de médias de *ensemble* é a capacidade do sistema de varrer todo o espaço de fases, populando este espaço de forma a respeitar, no caso particular da média acima, o peso canônico. Admite-se que a ergodicidade se aplique a todo o espaço de fases do sistema.

No caso de um ferromagneto abaixo da temperatura de Curie, na região de temperaturas em que a ergodicidade é quebrada, o espaço de fases se decompõe em duas componentes ergódicas, uma correspondendo a microestados consistentes com uma magnetização positiva, a outra a microestados com magnetização negativa.

Os dois mínimos da energia livre em função da magnetização estão separados por uma barreira de energia, que se torna infinita no limite termodinâmico, quebrando a ergodicidade, e um ou outro mínimo é selecionado pela aplicação de um campo externo, que fixará no espaço as direções de magnetização positiva ou negativa.

No caso de sistemas desordenados ou vidros, frustrados, a quebra de simetria associada à quebra de ergodicidade não é óbvia, não se sabe em princípio que campo externo infinitesimal selecionará um dado estado metaestável. É possível, ainda assim, verificar a quebra de ergodicidade em tais sistemas por um método similar ao supracitado para ferromagnetos. Para estes sistemas com muitos estados metaestáveis em algum intervalo de temperaturas, aplica-se um campo externo arbitrário, que se acopla quadraticamente aos graus de liberdade $\phi(\mathbf{x})$ e que quebra explicitamente a ergodicidade. A fim de computar todos os estados localmente estáveis na fase de líquido superresfriado, integra-se sobre o campo $\psi(\mathbf{x})$, a uma temperatura \tilde{T} ⁶, o que, sob certas condições, equivale a introduzir uma interação entre pares de réplicas distintas do sistema [169, 170], como se mostrará a seguir. A função de partição associada a F_ϕ (eq. (5.16) acima) é modificada da seguinte forma:

$$Z[\psi, \beta] = \lim_{g \rightarrow 0^+} g^{-\frac{1}{2}} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}[\phi]}{T} - \frac{g}{2} \int d^d x [\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x})]^2 \right\}. \quad (5.17)$$

O acoplamento com o campo externo resulta em um fator Gaussiano centrado em ψ no integrando. O limite $g \rightarrow 0$ deve ser tomado após o limite termodinâmico. A figura 5.3 é uma representação pictórica do efeito da modificação do peso estatístico pelo fator Gaussiano sobre a distribuição de probabilidades no espaço de configurações. No primeiro quadro da figura, os máximos da função $\mathcal{P}_B[\phi]$ coincidem com as configurações que minimizam $\mathcal{H}[\phi]$, sendo os máximos locais correspondentes a estados metaestáveis, e o máximo global, estreito, correspondente ao estado termodinamicamente estável, à fase ordenada abaixo da transição. No limite termodinâmico, a função de partição, dada pela integral sobre $\mathcal{P}_B[\phi]$ é dominada apenas pelo máximo global. O segundo quadro da figura representa a combinação do peso estatístico de Boltzmann, $\mathcal{P}_B[\phi]$, e o fator Gaussiano centrado em $\phi = \psi$, que resulta no peso estatístico modificado $\mathcal{P}_M[\phi, \psi]$. Com a “interação” g suficientemente pequena, o efeito da integral sobre o campo auxiliar ψ , ponderada por $\mathcal{P}_M[\phi, \psi]$, é deformar a distribuição de probabilidades de maneira a tornar comparáveis os máximos correspondentes a estados metaestáveis e o estado termodinâmico.

O campo externo minimiza localmente a energia livre $F_\phi[\psi, \beta] = -\beta^{-1} \ln Z[\psi, \beta]$ quando é “próximo” (no espaço de fases) a uma configuração localmente estável do Hamiltoniano $\mathcal{H}[\phi]$. O fator gaussiano

$$\exp \left\{ -\frac{g}{2} \int d^d x [\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x})]^2 \right\}$$

é máximo para $\phi \approx \psi$, e o peso de Gibbs, por sua vez, é maximizado nos mínimos locais de $\mathcal{H}[\phi]$. Os máximos locais do peso estatístico $\mathcal{P}_M[\phi, \psi]$ ocorrerão, portanto, quando o campo auxiliar $\psi(\mathbf{x})$ coincidir com algum campo $\bar{\phi}(\mathbf{x})$, que minimiza (localmente) o Hamiltoniano $\mathcal{H}[\phi]$. Podem-se computar tais mínimos locais ao varrerem-se

⁶Em princípio distinta da temperatura T dos graus de liberdade $\phi(\mathbf{x})$, já que a taxa característica de variação do campo $\psi(x)$ - sendo um campo do tipo *pinning field* - deve ser em princípio menor que a taxa de variação do campo $\phi(x)$. Na escala de tempo de relaxação de $\phi(x)$, $\psi(x)$ pode ser considerado fixo.

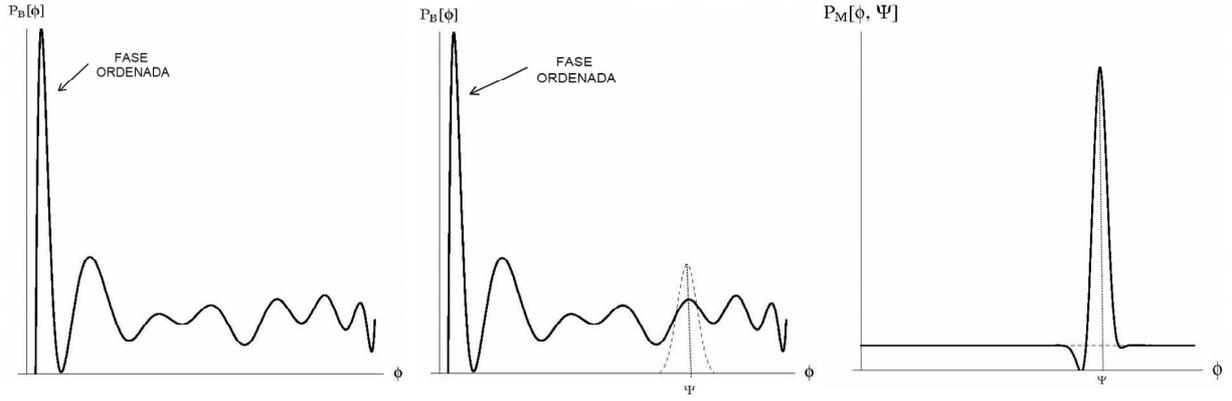


Figura 5.3: Representação pictórica dos pesos estatísticos de Boltzmann e de Monasson como funcionais do parâmetro de ordem ϕ . O gráfico à esquerda representa o peso de Boltzmann $P_B[\phi]$, com um máximo global estreito e acentuado correspondendo à solução mais estável (ordenada) e uma multiplicidade de máximos locais menores. No centro, a superposição do mesmo gráfico de $P_B[\phi]$ e do peso Gaussiano centrado em um dos máximos locais de $P_B[\phi]$. À direita, o gráfico do peso de Monasson, resultado do produto do peso Gaussiano centrado em Ψ com $P_B[\phi]$, que seleciona o máximo em Ψ (Ψ deverá posteriormente ser integrado sobre todo o domínio do parâmetro de ordem).

todas as configurações possíveis de $\psi(\mathbf{x})$ (considerando $\psi(\mathbf{x})$ como uma variável termalizada do “Hamiltoniano” $F_\phi[\psi, \beta]$) pesadas por uma densidade de probabilidade “canônica”, função da temperatura “efetiva” $\tilde{T} \equiv T/m$, onde m é um parâmetro real positivo:

$$\begin{aligned} F_\psi(m, \beta) &= \lim_{g \rightarrow 0^+} -\frac{1}{\beta m} \log \left(\int d\psi(\mathbf{x}) Z^m[\psi, \beta] \right) = \\ &= \lim_{g \rightarrow 0^+} -\frac{1}{\beta m} \log \left(\int d\psi(\mathbf{x}) \exp\{-\beta m F_\phi[\psi, \beta]\} \right), \end{aligned} \quad (5.18)$$

que pode ser vista como uma média sobre o campo aleatório ψ , cuja desordem (infinitesimal) é dada pela largura da Gaussiana, g , e cuja distribuição de probabilidades é dada pela própria função de partição do sistema, donde se diz que a desordem é *auto-induzida*. Diferentemente da interpretação do número de réplicas no truque de réplicas originalmente proposto para vidros de spin em campo médio [113, 168], número este que deve ser levado a zero ao final do cálculo da energia livre, o número de réplicas no caso de sistemas com desordem auto-induzida, m , é interpretado como a razão entre as temperaturas do campo ϕ e do campo ψ : $m = T/\tilde{T}$. Como mencionado no capítulo 4, acima da temperatura de Kauzman, T_K , deve-se tomar o limite $m \rightarrow 1$ ao final do cálculo da energia livre, já que, para $T > T_K$ o sistema é líquido - regular ou superresfriado -, mesmo para $T_K < T < T_D$, ainda que a dinâmica seja lenta, o sistema acessa diferentes estados desordenados metaestáveis, “a desordem deve evoluir” em uma escala de tempo semelhante à escala de tempo típica na qual os graus de liberdade ϕ relaxam. Abaixo de T_K , o sistema “congela” em um estado desordenado. Acessa-se a fase de vidro tomando-se $m < 1$, para $T < T_K$ a desordem é de fato congelada, o que significa que o tempo de relaxação dos campos ψ deve ser muito menor que o tempo de relaxação dos graus de liberdade ϕ . $F_\psi(m, \beta)$ equivale a:

$$F_\psi(m, \beta) = \lim_{g \rightarrow 0^+} \left(-\frac{1}{\beta m} \log \int d\psi(\mathbf{x}) \left[\int d\phi(\mathbf{x}) \exp\{-\beta \mathcal{H}[\phi] - \frac{g}{2} \int d^d x [\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x})]^2\} \right]^m \right).$$

Supondo-se que a razão m entre as duas temperaturas seja um inteiro, pode-se facilmente integrar $\psi(\mathbf{x})$ após

introduzir m cópias ϕ^a ($a=1, \dots, m$) do campo original. Replicando o campo ϕ :

$$\begin{aligned} & \int d\psi(\mathbf{x}) \int \prod_{a=1}^m d\phi^a(\mathbf{x}) \exp \left\{ - \sum_{a=1}^m \beta \mathcal{H}[\phi^a] - \sum_{a=1}^m \frac{g}{2} \int d^d x [\psi(\mathbf{x}) - \phi^a(\mathbf{x})]^2 \right\} = \\ & = \int \prod_{a=1}^m d\phi^a(\mathbf{x}) \exp \left\{ - \sum_{a=1}^m \beta \mathcal{H}[\phi^a] \right\} \int d\psi(\mathbf{x}) \exp \left\{ - \frac{g}{2} \sum_{a=1}^m \int d^d x [\psi(\mathbf{x}) - \phi^a(\mathbf{x})]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Agora é fácil ver que $\sum_{a=1}^m (\psi - \phi^a)^2 = \frac{1}{2m} \sum_{a,b=1}^m (\phi^a - \phi^b)^2 + \frac{1}{m} (\sum_{a=1}^m (\psi - \phi^a))^2$. Assim sendo, tem-se que:

$$\begin{aligned} & \int d\psi \exp \left\{ - \frac{g}{2} \sum_{a=1}^m (\psi - \phi^a, \psi - \phi^b) \right\} = \\ & = \exp \left\{ - \frac{g}{4m} \sum_{a,b=1}^m (\phi^a - \phi^b, \phi^a - \phi^b) \right\} \int d\psi \exp \left\{ - \frac{g}{2m} (m\psi - \sum_{a=1}^m \phi^a, m\psi - \sum_{a=1}^m \phi^a) \right\} = \\ & = \sqrt{\frac{2\pi}{gm}} \exp \left\{ - \frac{g}{4m} \sum_{a,b=1}^m \int d^d x [\phi^a(\mathbf{x}) - \phi^b(\mathbf{x})]^2 \right\}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

onde $(A, B) \equiv \int dx A(x)B(x)$. Portanto, a menos de uma constante aditiva irrelevante:

$$F_\psi(m, \beta) = \lim_{g \rightarrow 0^+} -\frac{1}{\beta m} \log \int \left(\prod_{a=1}^m d\phi^a(\mathbf{x}) \right) \exp \left\{ -\beta \sum_a \mathcal{H}[\phi^a] - \frac{g}{2m} \sum_{a,b=1}^m \int d^d x \phi^a(\mathbf{x}) \phi^b(\mathbf{x}) \right\}. \quad (5.21)$$

É transparente da expressão acima que os fatores gaussianos no integrando de (5.21) são maximizados quando a distância entre as réplicas é pequena (reciprocamente, quando o “overlap” entre as réplicas é grande), o comportamento da integral sendo dominado por esta região do domínio de integração. O resultado (5.21) pode ser interpretado como expressando o fato de que sistemas idênticos acoplados por uma interação atrativa evoluindo sob influência da mesma superfície de energia livre tenderão a “condensar” no mesmo estado metaestável, já que a distância relativa entre réplicas distintas do sistema, dentro de um mesmo estado metaestável, será menor que no estado líquido [169].

A energia livre do sistema estudado será recuperada no limite $m \rightarrow 1$, isto é, quando a temperatura do campo ψ for a mesma que a de ϕ : $F_\phi(\beta) = F_\psi(m = 1, \beta)$. Porém, no caso de existir um número exponencialmente grande de estados metaestáveis em uma dada região de temperatura, $F_\phi(\beta)$ não corresponderá à expressão usual para a energia livre de equilíbrio⁷, equação (5.16), já que neste caso $F_\psi(m = 1, \beta)$ possuirá uma contribuição não-perturbativa em g devida ao termo de entropia configuracional⁸. Em suma, sistemas frustrados podem apresentar os seguintes cenários possíveis. Em geral, eq. (5.16) e $F_\psi(m = 1, \beta)$ serão iguais, possivelmente para toda temperatura real positiva. Porém, para diversos sistemas, é possível que $F_\psi(m = 1, \beta)$ e eq. (5.16) difiram em um intervalo definido de temperatura. A energia livre $F_\psi(m = 1, \beta) \equiv \Phi(\beta)$ - onde $\Phi(\beta)$ é a quantidade definida no

⁷Na acima referida região de temperaturas.

⁸Tal contribuição não-perturbativa se torna aparente no método acima descrito ao se tomar o “limite termodinâmico” antes do limite $g \rightarrow 0$.

parágrafo que segue a equação (4.1) -, decompor-se-á em uma contribuição energética e outra entrópica:

$$S_c(\beta) = \beta[f - \Phi(\beta)]. \quad (5.22)$$

A técnica aqui utilizada para o cálculo da entropia configuracional descreve o sistema como tendo sua ergodicidade completamente quebrada abaixo de T_c , ou seja, com barreiras de energia infinitas abaixo desta temperatura, onde mínimos são exponencialmente dominantes, o que é consistente com a teoria RFOT. Assim sendo, não descreve processos ativados⁹. A expressão (5.21), evidentemente, é inacessível a um tratamento analítico, já que o funcional $\mathcal{H}[\phi^a]$ carrega um termo quártico em ϕ^a . Faz-se assim necessário abordá-la através de métodos aproximativos. Os métodos disponíveis à abordagem da integral funcional (5.21) são expansões perturbativas tendo como parâmetro pequeno o pré-fator do termo quártico, u . Ora, a transição vítrea é em essência uma transição descontínua, e, assim como a emergência da metaestabilidade, envolve portanto contribuições não-perturbativas à energia livre e às funções de correlação. Entretanto, como se verá a seguir, é possível, através de uma expansão no parâmetro $u = \mathcal{O}(n^{-1})$ (onde n é o número de componentes do parâmetro de ordem, que se supõe ser maior que 1) em torno da solução de Hartree ($\mathcal{O}((1/n)^0)$), renormalizar-se a constante de acoplamento de modo a se obterem tais contribuições não-perturbativas, já a partir dos termos $\mathcal{O}(n^{-1})$.

5.3.3 Expansão da Função de Correlação: Aproximação SCSA

Para calcular a energia livre (5.21) e a entropia configuracional (5.22), onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano (5.4), define-se a função de correlação a dois pontos no espaço de réplicas $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q}) = T^{-1}\langle\phi^a(\mathbf{q})\phi^b(-\mathbf{q})\rangle$ [19]. Estas funções de correlação envolvem integrais que necessitam ser calculadas perturbativamente. Para tal, definem-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{a,b=1}^m \left(\frac{r_0 + J(k^2 - k_0^2)^2}{T} \delta_{ab} + \frac{g}{m} \right) \sum_{i=1}^n \phi_i^a(\mathbf{k}) \phi_i^b(-\mathbf{k}) \\ \mathcal{H}_1 &= \frac{u}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \sum_{a=1}^m \sum_{i,j=1}^n \phi_i^a(\mathbf{k}) \phi_i^a(\mathbf{q}) \phi_j^a(\mathbf{p}) \phi_j^a(-\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{p}). \end{aligned} \quad (5.23)$$

O Hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_1 contém a parte quártica da interação, e a constante u fornece uma medida de quanto o peso canônico se desvia da Gaussiana. A temperatura foi absorvida na definição de ambos \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_1 .

Com a introdução da interação entre as réplicas do sistema, através da constante de acoplamento g , a estrutura de \mathcal{H}_0 é distinta daquela que resulta na função de correlação (5.14), pois a matriz de interação entre os campos $\phi^a(\mathbf{k})$, deixando de ser diagonal, passa a ser uma matriz do tipo Toeplitz, com uma estrutura $\mathbf{M} = (A - B)\mathbb{1} + B\mathbb{E}$, onde $\mathbb{1}$ é o produto externo das matrizes identidade no espaço k e de réplicas, \mathbb{E} possui todos os

⁹Generalizações da teoria RFOT podem ser encontradas em [171, 172].

elementos iguais a um, e:

$$\begin{aligned} A &= \frac{r_0 + J(k^2 - k_0^2)^2}{T} + \frac{g}{2m}, \\ B &= \frac{g}{2m}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Ordem Zero - Propagador de Hartree

Exige-se que o Hamiltoniano \mathcal{H} , dado pela equação (5.4), seja extensivo. Entretanto, quando o número de componentes, n , do campo vetorial $\phi(\mathbf{k})$, é grande, \mathcal{H}_1 passa a dominar sobre \mathcal{H}_0 em $\mathcal{O}(n)$, já que, em \mathcal{H}_0 ocorre $\phi^2 = \sum_{i=1}^n \phi_i^2$, enquanto em \mathcal{H}_1 ocorre $(\phi^2)^2 = \sum_{i,j=1}^n \phi_i^2 \phi_j^2$. Para que o limite $n \rightarrow \infty$ esteja bem definido, isto é, para que o Hamiltoniano seja “extensivo”, $u \equiv \frac{U}{n}$ deve ser $\mathcal{O}(1/n)$. Neste contexto, a extensividade significa os dois termos \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_1 serem $\mathcal{O}(n)$. Quando n é suficientemente grande, é natural calcular \mathcal{G} através de uma expansão em torno do limite esférico¹⁰, $n \rightarrow \infty$, em que o parâmetro pequeno da expansão é $1/n$ [19,27,174,175].

Pode-se mostrar, ademais, que a aproximação de campo auto-consistente é exata para o modelo n -vetorial no limite $n \rightarrow \infty$. Assim, o primeiro termo da expansão $1/n$, o termo independente $\mathcal{O}((1/n)^0)$, corresponde ao termo de Hartree [166].

A função de partição completa é dada por:

$$\begin{aligned} Z(m, \beta) &= \lim_{g \rightarrow 0^+} \int \left(\prod_a d\phi_i^a(\mathbf{x}) \right) \exp\{-\mathcal{H}_0\} \exp\{-\mathcal{H}_1\} \\ &= \lim_{g \rightarrow 0^+} \int \left(\prod_a d\phi_i^a(\mathbf{x}) \right) \exp\left\{-\beta \sum_a \mathcal{H}[\phi^a] - \frac{g}{2m} \sum_{a,b=1}^m \sum_{i=1}^n \int d^2x \phi_i^a(\mathbf{x}) \phi_i^b(\mathbf{x})\right\}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Introduz-se uma transformação de Hubbard-Stratonovich¹¹ para a exponencial do termo quártico no campo $\phi(\mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \exp\{-\mathcal{H}_1\} &= \exp\left\{-\frac{U}{2nT}(\phi \cdot \phi)^2\right\} = \\ &= \mathcal{C} \int_{-i\infty}^{i\infty} \mathcal{D}\sigma(\mathbf{x}) \exp\left\{n \frac{\beta}{8U} \int d^2x \sigma^2(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\beta \int d^2x \sigma(\mathbf{x}) \sum_{i,a} (\phi_i^a(\mathbf{x}))^2\right\}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

que define o campo $\sigma(\mathbf{x})$, e onde \mathcal{C} é uma constante irrelevante - que na energia livre corresponde a uma constante aditiva. Note-se que ambos termos no argumento da exponencial no integrando são proporcionais a n . O caminho de integração é ao longo do eixo imaginário devido ao sinal do argumento da exponencial $\exp\{-\frac{U}{2nT}(\phi \cdot \phi)^2\}$. A

¹⁰Tomar o limite $n \rightarrow \infty$ no modelo ϕ^4 (ferromagnético, sem interações competitivas) com simetria $O(n)$ o torna equivalente, com respeito ao comportamento termodinâmico, ao modelo esférico [4] em uma rede de n spins [173].

¹¹Também chamada transformada Gaussiana:

$$\exp\{a x^2\} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left\{-\frac{z^2}{4a} + xz\right\}.$$

função de partição é então reescrita como:

$$\begin{aligned}
Z(m, \beta) &= \int \left(\prod_{i,a} \mathcal{D}\phi_i^a(\mathbf{x}) \right) \int \mathcal{D}\sigma(\mathbf{x}) \exp \left\{ n \frac{\beta}{8U} \int d^2x \sigma^2(\mathbf{x}) \right\} \times \\
&\times \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{i,\{a,b\}} \int d^2x d^2x' \phi_i^a(\mathbf{x}) \left([\overline{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')]_{ab} + \sigma(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{ab} \right) \phi_i^b(\mathbf{x}') \right\} \\
&= \int \mathcal{D}\sigma(\mathbf{x}) \exp \left\{ n \frac{\beta}{8U} \int d^2x \sigma^2(\mathbf{x}) - n w[\sigma(\mathbf{x})] \right\}, \tag{5.27}
\end{aligned}$$

onde se definiu

$$e^{\{-n w[\sigma(\mathbf{x})]\}} = \left[\int \prod_{a=1}^m d\phi^a(\mathbf{x}) \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{a,b} \int d^2x d^2x' \phi^a(\mathbf{x}) \left([\overline{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')]_{ab} + \sigma(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{ab} \right) \phi^b(\mathbf{x}') \right\} \right]^n. \tag{5.28}$$

O membro direito da equação acima é a n -ésima potência de uma integral funcional sobre o campo $\phi(\mathbf{x})$, que é escalar no espaço direto (mas é campo vetorial no espaço de réplicas). A integral funcional (5.28) é uma gaussiana:

$$w[\sigma(\mathbf{x})] = \frac{1}{2} \log \det \left[\frac{\beta}{2\pi} \left([\overline{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')]_{ab} + \sigma(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{ab} \right) \right]. \tag{5.29}$$

Considerando a estrutura não-diagonal no espaço de réplicas do Hamiltoniano \mathcal{H}_0 , eq. (5.23), introduzida pela interação infinitesimal g , resulta, para a função de correlação $\overline{G}_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \overline{G}_0(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$:

$$\overline{G}_0^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int d^2r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \overline{G}_0^{-1}(r) = 2T(A - B)\mathbb{1} - 2TBE = \left[r_0 + J(k^2 - k_0^2)^2 \right] \mathbb{1} - \frac{gT}{m} \mathbb{E}. \tag{5.30}$$

O limite $(g, B) \rightarrow 0$ deverá ser eventualmente tomado. Note-se que neste limite, o termo fora da diagonal $\frac{gT}{m}$ vai trivialmente a zero e será portanto omitido nos desenvolvimentos subsequentes desta Subseção. Equivalentemente, pode-se definir $G_0 \equiv \overline{G}_0 + \mathbb{1} \cdot \sigma$ como a função de Green, solução da equação:

$$\left[\nabla^2 + r_0 + \frac{\gamma}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} + \sigma(\mathbf{x}) \right] G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \tag{5.31}$$

No limite $n \rightarrow \infty$, a solução (exata) da função de partição (5.27) é dada pelo primeiro termo do teorema do ponto de sela aplicado à mesma, que coincide com a equação de auto-consistência para a *auto-energia* $\sigma(\mathbf{x})$ de uma aproximação de Hartree:

$$\sigma = 4U \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{1}{r_0 + \sigma(\mathbf{q}) + J(q^2 - k_0^2)^2} = 4U \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \mathcal{G}_0(\mathbf{q}) = 4U \text{Tr}_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_0(\mathbf{q}), \tag{5.32}$$

que demonstra que a auto-energia de Hartree é independente de momentum.

A auto-energia é toda parte de um diagrama que pode ser ligada ao resto do diagrama por duas linhas

externas \mathcal{G}_0 , e que é *irredutível*¹², isto é, não pode ser separada em duas partes desconexas pela remoção de uma linha de propagador interna [176–178]. Obtém-se a seguinte equação de Dyson para a função de correlação de Hartree:

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{k}) = r_0 + J(k^2 - k_0^2)^2 + \sigma \implies \mathcal{G}_0(\mathbf{k}) = \frac{\overline{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k})}{1 + \overline{\mathcal{G}}_0 \sigma} = \overline{\mathcal{G}}_0(k) - \overline{\mathcal{G}}_0(k) (4u n \text{Tr}_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_0(q)) \mathcal{G}_0(k). \quad (5.33)$$

Este resultado é consequência do teorema do limite central aplicado à quantidade $\sum_{i=1}^n \phi_i^2$, que no limite $n \rightarrow \infty$ deve ser auto-mediante (*self-averaging*). Esta é a hipótese implícita na aproximação de Hartree. É fácil convencer-se de que o limite esférico obedece à aproximação de Hartree, e de que a aproximação é, portanto, exata neste limite. De fato, a aproximação corresponde à identidade: $\langle (\sum_{i=1}^n \phi_i^2)^2 \rangle = \langle \sum_i \phi_i^2 \rangle^2$ [166]. Da lei dos grandes números, a soma de $n \rightarrow \infty$ termos independente e identicamente distribuídos tende à média da distribuição multiplicada pelo número de termos. Assim, a flutuação da quantidade $\langle (\phi^2)^2 \rangle / n$, isto é, $\langle (\phi^2 - \langle \phi^2 \rangle)^2 \rangle / n$, vai a zero no limite $n \rightarrow \infty$, o que equivale às hipóteses da aproximação de Hartree.

Tendo-se determinado o primeiro termo da expansão $1/n$ da função de correlação, resta estabelecerem-se os próximos termos desta expansão. Para tal, expande-se a exponencial do Hamiltoniano perturbado $\mathcal{P}_1 = \exp\{-\mathcal{H}_1\} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^\ell}{\ell!} \mathcal{H}_1^\ell$ na equação (5.25), e obtém-se:

$$Z(m, \beta) = \lim_{g \rightarrow 0^+} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^\ell}{\ell!} \langle \mathcal{H}_1^\ell \rangle_0 \int \prod_{a=1}^m d\phi^a(\mathbf{x}) \exp\{-\mathcal{H}_0\} = \lim_{g \rightarrow 0^+} Z_0 \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^\ell}{\ell!} \langle \mathcal{H}_1^\ell \rangle_0, \quad (5.34)$$

onde $\langle \cdot \rangle_0$ denota a média efetuada com o peso estatístico $\mathcal{P}_0 \sim \exp\{-\mathcal{H}_0\}$. De (5.34), obtém-se, correspondentemente, para a energia livre:

$$F(m, \beta) = F_0(m, \beta) - V^{-1} \log \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^\ell}{\ell!} \langle \mathcal{H}_1^\ell \rangle_0, \quad (5.35)$$

sendo $F_0 = -V^{-1} \log Z_0$.

Analogamente, para o valor esperado de qualquer função Q dos graus de liberdade microscópicos do sistema, expande-se:

$$\langle Q \rangle = \frac{\int d\phi Q e^{-\mathcal{H}}}{\int d\phi e^{-\mathcal{H}}} = \frac{\langle e^{-\mathcal{H}_1} Q \rangle_0}{\langle e^{-\mathcal{H}_1} \rangle_0} = \frac{\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^\ell}{\ell!} \langle \mathcal{H}_1^\ell Q \rangle_0}{\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^\ell}{\ell!} \langle \mathcal{H}_1^\ell \rangle_0}. \quad (5.36)$$

Q em geral será uma função de $\{\phi^a\}$, podendo ser expandida em série de potências dos campos $\{\phi^a\}$. Das expansões (5.35) e (5.36), o cálculo da energia livre e de qualquer quantidade termodinâmica envolve o cálculo de médias Gaussianas de produtos de campos $\{\phi^a\}$. Médias Gaussianas destes produtos são iguais à combinação linear dos produtos de todas as possíveis correlações de pares [174]. Isto se deve à conhecida propriedade de

¹²Os diagramas irredutíveis são classificados por 1PI (*one-particle irreducible*), 2PI, etc, dependendo de quantas linhas internas de propagadores “livres” possam ser removidas sem separá-lo em dois subdiagramas desconexos.

distribuições Gaussianas, cujos momentos de ordem p , com $p > 2$, dados por $\langle \phi^{a_1}(\mathbf{x}_1) \phi^{a_2}(\mathbf{x}_2) \cdots \phi^{a_p}(\mathbf{x}_p) \rangle_0$, se decompõem em combinações lineares de momentos quadráticos da mesma distribuição¹³. Ademais, os momentos da distribuição Gaussiana (centrada em $\mathbf{x} = 0$) de ordem p ímpar são identicamente nulos.

Representação Diagramática da Expansão

À medida em que aumenta a ordem dos termos das expansões (5.34), (5.35) e (5.36), a complexidade e o número de componentes em cada ordem aumenta fatorialmente, como o número de permutações entre os fatores da média. As integrais que aparecem na expansão das quantidades termodinâmicas podem ser expressas de forma muito mais concisa por diagramas de Feynman [176].

Cada fator $u(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ na expressão será representado por uma linha tracejada¹⁴; linhas sólidas entre extremidades livres (extremidades de linhas externas dos diagramas, que são fixas) ou vértices (pontos internos dos diagramas, que são integrados) \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 representarão propagadores $G_0(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ na expressão¹⁵. Como exemplo, o termo de ordem ℓ na expansão (5.34) carrega 4ℓ fatores ϕ , isto é, constitui-se de uma função de correlação a 4ℓ -pontos. Diagramaticamente, a decomposição linear de tais funções de correlação a 4ℓ -pontos em funções de correlação a dois pontos G_0 é dada por todas as combinações possíveis de inserção das linhas sólidas entre pares de vértices, que sejam topologicamente distintas. O termo de ordem ℓ corresponde à potência \mathcal{H}_1^ℓ , que introduz ℓ fatores u , e portanto conterà ℓ linhas tracejadas. Integra-se sobre as coordenadas de todos os vértices (coordenadas internas, mudas) e conta-se um fator n para cada laço fechado de linhas sólidas, o que leva em conta as integrais sobre o espaço e soma sobre componentes espaciais do campo vetorial ϕ que ocorrem em \mathcal{H}_1 , eq. (5.23).

Deve-se dividir o resultado obtido pelo número de permutações de vértices sob as quais o diagrama permanece topologicamente equivalente. Assim, toma-se conta do fato de que cada configuração topologicamente distinta deve ser contada apenas uma vez. Cada laço fechado carrega um fator $1/2$, dada sua simetria em relação à permutação entre as duas "extremidades" ligadas ao mesmo vértice.

Um teorema importante, *linked cluster theorem* (de agora em diante, LCT) [174, 176], permite ainda simplificar o cálculo das contribuições à expansão. A série das partes desconexas dos diagramas (não conectada às extremidades livres) corresponde à expansão para a função de partição $Z(m, \beta)$, compensando exatamente o denominador de (5.36). Este resultado permite omitir o denominador da equação (5.36), ao mesmo tempo considerando apenas os diagramas completamente conexos (ver Apêndice B.1).

¹³Tal propriedade equivale à constatação de que funções de correlação Gaussianas conectadas a p -pontos, com $p > 2$, são nulas.

¹⁴Em princípio, a interação no termo quártico pode ser não-local (e anisotrópica) [155, 156]. No Hamiltoniano aqui considerado, a interação neste termo é local.

¹⁵Lembre-se que todos os valores esperados de ordem ℓ nas expansões (5.34)-(5.36) se decompõem em produtos das funções de correlação a dois pontos, G_0 .

Próximos termos da expansão da função de correlação

Aplicando a expansão (5.36) à função de correlação a dois pontos, $\mathcal{G}(\mathbf{k})$, tem-se:

$$\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^{\ell}}{\ell!} \langle \phi^a(\mathbf{k}) \mathcal{H}_1^{\ell} \phi^b(-\mathbf{k}) \rangle_0}{\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-)^{\ell}}{\ell!} \langle \mathcal{H}_1^{\ell} \rangle_0}. \quad (5.37)$$

Na expansão acima, o primeiro termo, $\ell = 0$, é simplesmente a função de correlação Gaussiana, $[\overline{\mathcal{G}}_0(k)]_{ab} = \langle \phi^a(\mathbf{k}) \phi^b(-\mathbf{k}) \rangle_0$.

Tomando-se conta do teorema LCT descrito na subseção anterior, a primeira contribuição à função de correlação para além do propagador livre (Gaussiana) será

$$\langle \phi_i^a(\mathbf{y}) \mathcal{H}_1 \phi_i^b(\mathbf{z}) \rangle_0 = \frac{1}{8} \int d^2x d^2t \sum_{c=1}^m \sum_{j,k=1}^n u(\mathbf{x} - \mathbf{t}) \langle \phi_i^a(\mathbf{y}) (\phi_j^c(\mathbf{x}))^2 (\phi_k^c(\mathbf{t}))^2 \phi_i^b(\mathbf{z}) \rangle_0. \quad (5.38)$$

Como prescrito pelo teorema LCT, devem-se considerar na equação acima apenas os diagramas conexos, que correspondem aos seguintes termos algébricos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{8} \int d^2x d^2t \sum_{c=1}^m \sum_{j,k=1}^n u(\mathbf{x} - \mathbf{t}) \times \\ & \times \left\{ \delta_{ij} \delta_{jk} \delta_{ki} [(\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|))_{ac} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{x} - \mathbf{t}|))_{cc} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{t} - \mathbf{z}|))_{cb} + (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{y} - \mathbf{t}|))_{ac} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{t} - \mathbf{x}|))_{cc} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{x} - \mathbf{z}|))_{cb}] + \right. \\ & \left. + \delta_{ij} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{y} - \mathbf{t}|))_{ac} (\overline{\mathcal{G}}_0(0))_{cc} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{t} - \mathbf{z}|))_{cb} + \delta_{ik} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|))_{ac} (\overline{\mathcal{G}}_0(0))_{cc} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{x} - \mathbf{z}|))_{cb} \right\} \\ & = \frac{1}{4} \int d^2x d^2t u(\mathbf{x} - \mathbf{t}) \sum_{c=1}^m \left[(\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|))_{ac} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{x} - \mathbf{t}|))_{cc} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{t} - \mathbf{z}|))_{cb} + \right. \\ & \left. + n (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{y} - \mathbf{t}|))_{ac} (\overline{\mathcal{G}}_0(0))_{cc} (\overline{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{t} - \mathbf{z}|))_{cb} \right]. \quad (5.39) \end{aligned}$$

A transformada de Fourier correspondente é:

$$\frac{1}{4} \sum_{c=1}^m (\overline{\mathcal{G}}_0(k))_{ac} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (\overline{\mathcal{G}}_0(q))_{cc} [n \hat{u}(0) + \hat{u}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] (\overline{\mathcal{G}}_0(k))_{cb}. \quad (5.40)$$

Os diagramas que representam os dois termos da contribuição acima são:



Diagrama D6.1

A linha pontilhada representa o propagador Gaussiano, $\overline{\mathcal{G}}_0(k)$. O número de laços é também o número de fatores n na ordem da contribuição do diagrama. O diagrama (a) não possui laços fechados e o diagrama (b) é

multiplicado por n . Como $u = \mathcal{O}(1/n)$, a ordem absoluta dos diagramas é, respectivamente, $1/n$ e 1 .

Fazendo a interação não local do termo quártico - representada em \mathcal{H}_1 - curto alcance, como em (5.23), considera-se $u(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = u\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, ou equivalentemente, $\hat{u}(\mathbf{k}) = u = cte$, como em (5.4). Neste limite, os dois diagramas são idênticos, embora suas expressões algébricas ainda se distingam pelos respectivos pré-fatores: o diagrama (a) carrega o pré-fator $u = \mathcal{O}(1/n)$, enquanto o diagrama (b) carrega o pré-fator $un = \mathcal{O}(1)$ ¹⁶.



Diagrama D6.2

A interação quártica sendo local, tal correção resulta independente de \mathbf{k} . Observe-se que o diagrama (b) dos Diagramas D6.1 corresponde ao termo de auto-energia na aproximação de Hartree.

A contribuição seguinte na expansão da função de correlação, que contém \mathcal{H}_1^2 , será:

$$\langle \phi_i^a(\mathbf{y}) \mathcal{H}_1^2 \phi_i^b(\mathbf{z}) \rangle_0 = \frac{1}{8^2} \int d^2x d^2t d^2x' d^2t' \sum_{c,d=1}^m \sum_{j,k,l,s=1}^n u(\mathbf{x} - \mathbf{x}') u(\mathbf{t} - \mathbf{t}') \times \\ \times \langle \phi_i^a(\mathbf{y}) (\phi_j^c(\mathbf{x}))^2 (\phi_k^c(\mathbf{x}'))^2 (\phi_l^d(\mathbf{t}))^2 (\phi_s^d(\mathbf{t}'))^2 \phi_i^b(\mathbf{z}) \rangle_0. \quad (5.41)$$

A decomposição deste valor esperado em médias de pares constitui-se num número enorme de termos. Da construção diagramática correspondente se vê que ocorrerão nove contribuições distintas apenas, nove diagramas com suas respectivas multiplicidades, quais sejam:

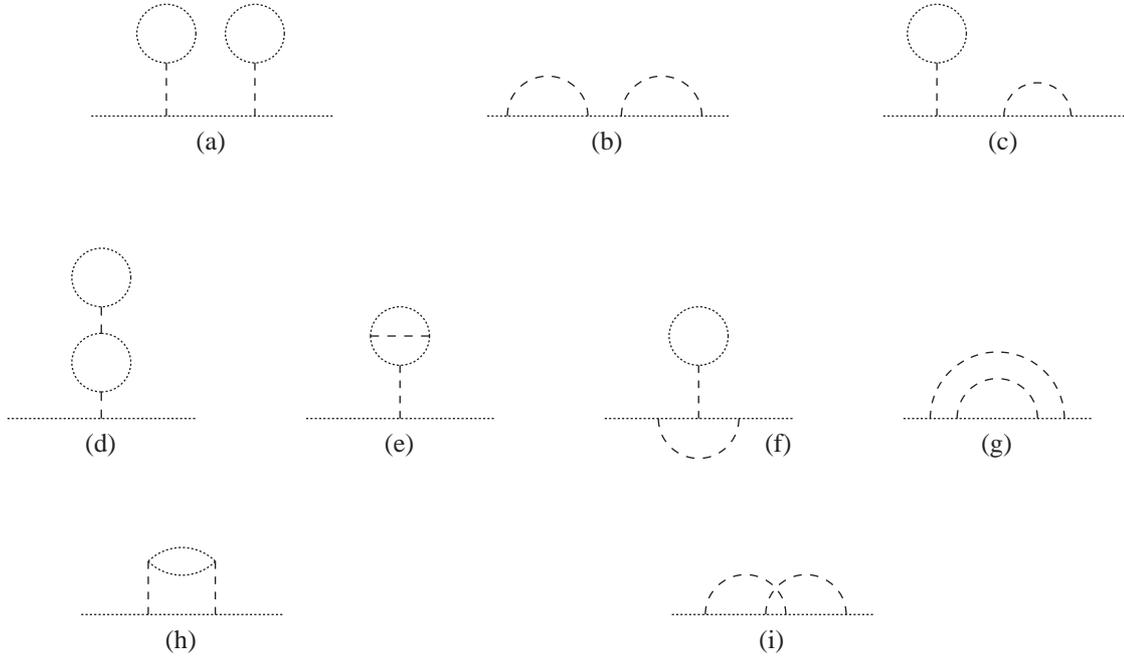


Diagrama D6.3

¹⁶As respectivas expressões são:

$$(a) \propto \frac{u}{4} \sum_{c=1}^m (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ac} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{cc} (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{cb}, \\ (b) \propto \frac{un}{4} \sum_{c=1}^m (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ac} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{cc} (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{cb}.$$

Diagramas (a) e (d) são multiplicados por n^2 e são $\mathcal{O}(1)$, (c), (e), (f) e (h), por n e são $\mathcal{O}(1/n)$, e (b), (g) e (i) não possuem laços fechados e portanto são $\mathcal{O}(1/n^2)$. Tome-se o limite $u(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = u\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, e o número de diagramas distintos se reduz a três (como antes, os respectivos pré-fatores e fatores de simetria, ou multiplicidade, dos Diagramas D6.3 se mantêm)¹⁷:

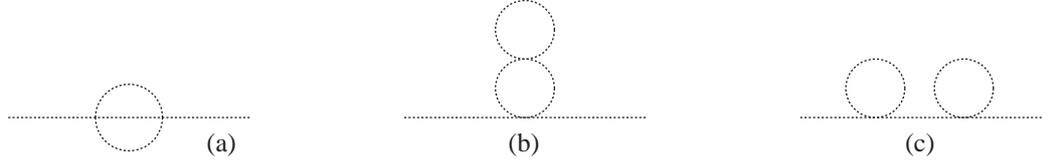


Diagrama D6.4

Nos Diagramas D6.4, o diagrama (a) quebra a simetria esférica de $\mathcal{G}(\mathbf{k})$, pois introduz uma contribuição à auto-energia, que depende de \mathbf{k} , vetor:

$$\begin{aligned} \int \frac{d^2q d^2q'}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{ab} (\bar{\mathcal{G}}_0(q'))_{ab} (\bar{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{q}'|))_{ba} = \\ = \int \frac{d^2p}{2\pi} (\bar{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{k} - \mathbf{p}|))_{ba} \left[\int \frac{d^2q}{2\pi} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{ab} (\bar{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|))_{ab} \right]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

A correção do diagrama (b) à função de correlação é $\int \frac{d^2q d^2q'}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{ab}^2 (\bar{\mathcal{G}}_0(q'))_{bb}$. É possível reconhecer em (c) a estrutura $\bar{\mathcal{G}}_0(k) \sigma \bar{\mathcal{G}}_0(k) \sigma \bar{\mathcal{G}}_0(k)$, onde $\sigma_{ab} = \sigma_{ab}$ é precisamente a auto-energia da aproximação de Hartree, equação (5.32), e corresponde à parte de auto-energia do diagrama (b) dos Diagramas D6.1 (excluídas as linhas externas).

Ao se calcularem os termos subseqüentes na expansão (5.37), nota-se que uma estrutura similar ocorre em todos: todas as potências da auto-energia σ ocorrem na expansão. O mesmo pode ser dito de qualquer diagrama $\Sigma_{ab}^{(i)}(\mathbf{k})$ ocorrendo pela primeira vez em um termo ordem ℓ em \mathcal{H}_1 : este ocorrerá elevado a todas as potências em termos de ordens subseqüentes, "acoplado" a $\mathcal{G}_0(k)$ da mesma maneira que σ na equação (5.33). Nos termos seguintes da expansão, ocorrem diagramas $\mathcal{O}(1/n)$ (e naturalmente também diagramas de maior ordem em $1/n$), fornecendo contribuições irredutíveis à auto-energia que não podem ser expressas pelas contribuições dadas nos Diagramas D6.4¹⁸. Ao se definir a auto-energia $\Sigma_{ab}(\mathbf{k}) = \Sigma_{ab}^{(1)} + \Sigma_{ab}^{(2)}(\mathbf{k}) + \dots + \Sigma_{ab}^{(i)}$ ¹⁹, onde cada um dos

¹⁷A contribuição destes diagramas, no espaço \mathbf{k} , é, respectivamente (desconsiderando pré-fatores):

$$\begin{aligned} (a) & \propto u^2 \sum_{c,d=1}^m (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ac} \left[\int \frac{d^2q d^2q'}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{cd} (\bar{\mathcal{G}}_0(q'))_{cd} (\bar{\mathcal{G}}_0(|\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{q}'|))_{dc} \right] (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{db} \\ (b) & \propto u^2 \sum_{c,d=1}^m (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ac} \left[\int \frac{d^2q d^2q'}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{cd} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{dc} (\bar{\mathcal{G}}_0(q'))_{dd} \right] (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{cb}; \\ (c) & \propto u^2 \sum_{c,d=1}^m (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ac} \left[\int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{cc} \right] (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{cd} \left[\int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} (\bar{\mathcal{G}}_0(q))_{dd} \right] (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{db}. \end{aligned}$$

¹⁸Estas são correções que não ocorrem no termo de segunda ordem da expansão (aquele que carrega a potência \mathcal{H}_1^2), são consideradas menos relevantes e não são incluídas na auto-energia da aproximação SCSA, como será descrito na próxima subseção.

¹⁹Este somatório pode ser uma série infinita truncada a uma certa precisão, no caso de existirem infinitas partes irredutíveis da auto-energia, ou, alternativamente, a auto-energia pode conter apenas um número finito de partes irredutíveis.

termos que compõem a auto-energia são irreduzíveis, $\Sigma_{ab}(\mathbf{k})$ ocorrerá na equação para $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k})$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}) &= (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} - (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} \Sigma_{ab}(\mathbf{k}) \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}) \\ &= (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} - (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} \Sigma_{ab}(\mathbf{k}) (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} + \\ &\quad + (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} \Sigma_{ab}(\mathbf{k}) (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} \Sigma_{ab}(\mathbf{k}) (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab} - \dots, \end{aligned} \quad (5.43)$$

já que, por definição, a auto-energia é toda parte de um diagrama que pode ser ligada ao resto do diagrama por duas linhas $\bar{\mathcal{G}}_0$. A equação acima é, de fato, uma equação de Dyson para \mathcal{G} :

$$\mathcal{G}_{ab}^{-1}(\mathbf{k}) = (\bar{\mathcal{G}}_0(k))_{ab}^{-1} + \Sigma_{ab}(\mathbf{k}), \quad (5.44)$$

onde $\bar{\mathcal{G}}_0(k)$ é a função de correlação Gaussiana, equação (5.10). A quantidade $\Sigma_{ab}(\mathbf{k})$ pode ser calculada usando-se diagramas que difiram dos diagramas para $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k})$ apenas pela ausência das duas linhas externas $\bar{\mathcal{G}}_0(k)$, e que não possam ser divididos em duas partes unidas apenas por uma linha $\bar{\mathcal{G}}_0(k)$ - isto é, irreduzíveis.

Aproximação SCSA

Cada termo de dada ordem - em potências de u - na expansão de $e^{-\mathcal{H}_1}$ na equação (5.37) apresenta termos de diferentes ordens em $1/n$. Da mesma forma, termos de maior ordem em u também apresentarão contribuições ordem $1/n$.

A contribuição ordem $1/n$ a uma auto-energia deve conter uma linha tracejada - um fator u - a mais que o número de laços fechados de linhas sólidas - fatores $\propto \int d^2p \mathcal{G}_0(p)\mathcal{G}_0(p-q)$ -, pois cada laço fechado introduz um fator n ao respectivo termo, que resulta da soma sobre as componentes vetoriais do parâmetro de ordem. Estes laços fechados são comumente chamados “diagramas bolha”. Os diagramas com tal propriedade são os termos da seguinte expansão:

$$\text{~~~~~} = \text{-----} + \text{---}\bigcirc\text{---} + \text{---}\bigcirc\text{---}\bigcirc\text{---} + \dots \quad \text{Diagrama D6.5}$$

e somente estes. A ocorrência de cada um destes termos na expansão da função de correlação terá sinal alternado, dependendo da paridade dos mesmos. A expansão representada pela linha ondulada (expansão D6.5), corresponde à função:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{ab}(\mathbf{k}) &\equiv v - v^2 \Pi_{ab}(\mathbf{k}) + v^3 (\Pi(\mathbf{k}))^2 \Big|_{ab} + \dots \\ &= \frac{v}{1 + v\Pi(\mathbf{k})} \Big|_{ab}, \end{aligned} \quad (5.45)$$

onde $v = uT$ compensa os fatores $1/T$ trazidos por $\Pi(\mathbf{k})$, que é a função (matriz) de polarização. $\mathcal{D}_{ab}(\mathbf{k})$ está, portanto relacionada à matriz $\sim (\mathbb{1} + \Pi)^{-1}$. A função de polarização é definida por (ver equação (5.42)):

$$\Pi_{ab}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} (\mathcal{G}(p))_{ab} (\mathcal{G}(|\mathbf{k} - \mathbf{p}|))_{ba}. \quad (5.46)$$

As demais partes, que se conectam aos diagramas na expansão (5.45) para formar a auto-energia, serão ordem 1: estruturas irreduzíveis com uma linha tracejada para cada laço fechado, ou nenhuma linha tracejada e nenhum laço fechado. Os diagramas irreduzíveis até ordem $1/n$ serão estas partes, "conectadas" aos diagramas ordem $1/n$, na expansão D6.5 (equação (5.45)).

As contribuições até $\mathcal{O}(1/n)$ à expansão da função de correlação podem ser expressas nos três diagramas (em que a única parte redutível aparece representada pela linha ondulada, função $\mathcal{D}(\mathbf{k})$):

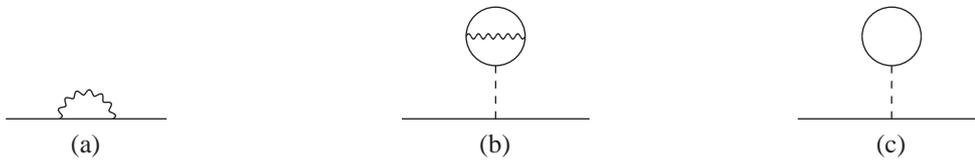


Diagrama D6.6

A linha ondulada representa a soma infinita dos diagramas ordem $1/n$, e se pode identificar o diagrama (c) nos Diagramas D6.6 acima (excluídas as duas linhas externas) com a auto-energia σ definida à equação (5.32), o diagrama (b) dos Diagramas D6.4 como o primeiro termo do diagrama (b) dos Diagramas D6.6 acima, e o diagrama (a) dos Diagramas D6.4 como o segundo termo do diagrama (a) acima. Note-se que as partes de auto-energia nos diagramas D6.6 (b) e (c) são independentes de momentum.

Voltando à expansão (5.37), constata-se a ocorrência de todas as potências (inteiras positivas) das contribuições à auto-energia nos Diagramas D6.4, "intercaladas" por propagadores $\bar{\mathcal{G}}_0(k)$: $\bar{\mathcal{G}}_0(k)\Sigma(k)\bar{\mathcal{G}}_0(k)\Sigma(k)\dots\bar{\mathcal{G}}_0(k)$ (onde $\Sigma(k)$ está para alguma destas contribuições). Observa-se, ademais, que ocorrem produtos entre as diferentes contribuições dos Diagramas D6.4 (diagramas (a)-(c), excluídas as linhas externas). Somando-se a subsérie destas contribuições, obtém-se a seguinte equação para a função de correlação até $\mathcal{O}(1/n)$:

$$\equiv = \left[\dots + \dots + \dots \right] \times \left[\mathbb{1} + \dots \right]. \quad \text{Diagrama D6.7}$$

Analisando a expressão dentro do primeiro par de colchetes $[\cdot]$, se reconhece o propagador de Hartree (a expressão coincide com o lado direito da equação de Dyson (5.33)), onde a soma dos dois laços corresponde ao traço do propagador completo ou, de forma equivalente, ao traço de um propagador de Hartree com a constante de interação u renormalizada ($u \rightarrow \mathcal{D}(q)$):

$$\text{Tr}_{\mathbf{q}} \mathcal{G}(q) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2},$$

de modo que a expressão dentro do primeiro par de colchetes é dada por: $\bar{\mathcal{G}}_0(k) + \bar{\mathcal{G}}_0(k) (\text{Tr}_{\mathbf{q}} \mathcal{G}(\mathbf{q})) \mathcal{G}_0(k)$, que coincide com o lado direito da equação (5.33), isto é, tal expressão corresponde ao propagador de Hartree, $\mathcal{G}_0(q)$.

A equação do Diagrama D6.7, portanto, equivale à equação de Dyson para o propagador completo:

$$\text{Diagram 3} = \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5}, \quad \text{Diagrama D6.8}$$

onde a auto-energia é dada pelo diagrama

$$\Sigma(k) = \text{Diagram 6}. \quad \text{Diagrama D6.9}$$

Os diagramas D6.8 e D6.9 definem a expansão SCSA para a função de correlação.

No processo de redefinição da auto-energia, absorveram-se no termo de massa do propagador de Hartree as contribuições do Diagrama D6.6 (b) e (c) para a auto-energia, que são independentes de momentum, como descrito

a seguir. Define-se: $\sigma_h = \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} = u \text{Tr}_{\mathbf{q}} \mathcal{G}(\mathbf{q})$. A última igualdade decorre da comparação de σ_h com o lado direito do Diagrama D6.8.

A absorção das contribuições σ_h a r_0 , que redefine o termo de massa do propagador livre para $r \equiv r_0 + \sigma_h$ equivale à redefinição da auto-energia da SCSA para $\Sigma(k) - \Sigma(0)$, isto é, equivale à subtração de todos os termos independentes de momentum das contribuições à auto-energia. Assim, a função de correlação a dois pontos na aproximação SCSA é dada por:

$$\mathcal{G}_{ab}^{-1}(\mathbf{k}) = (r + J(k^2 - k_0^2)^2) \delta_{ab} - \frac{gT}{m} + \Sigma_{ab}(\mathbf{k}). \quad (5.47)$$

A modificação do peso estatístico em (5.17), que introduz uma interação efetiva entre réplicas distintas (como mostrado na seção 5.3.3), transforma a função de correlação Gaussiana $(\bar{\mathcal{G}}_0)_{ab}$ (equação (5.30)). Assim também se transformam todas as funções do problema para matrizes no espaço de réplicas com uma estrutura similar à de (5.30), já que, como se viu nas equações (5.35) e (5.36), as respectivas expansões (dentro da SCSA) envolvem médias sobre distribuições Gaussianas, cuja medida é dada pelo peso estatístico de Hartree. Desta maneira, é razoável propor que a estrutura das matrizes envolvidas se mantenha a mesma:

$$A = a_1 \mathbb{1} + a_2 \mathbb{E}, \quad (5.48)$$

onde \mathbb{E} é a matriz com todos os elementos iguais a 1 (um). A estrutura matricial da solução corresponde, portanto, a uma solução réplica-simétrica (RS) [169].

Em suma, o sistema de equações que define, dentro da SCSA, a matriz de correlação a dois pontos é:

$$\mathcal{G}_{ab}^{-1}(\mathbf{k}) = \left(\mathcal{G}_0^{-1}(k) + \Sigma_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) \right) \delta_{ab} + \Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}) (1 - \delta_{ab}), \quad (5.49)$$

$$\Sigma_{ab}(\mathbf{k}) = \frac{n}{2} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \mathcal{D}_{ab}(\mathbf{p}) \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{p} + \mathbf{k}), \quad (5.50)$$

$$\mathcal{D}_{ab}(\mathbf{k}) = \frac{v}{1 + v\Pi(\mathbf{k})} \Big|_{ab}, \quad (5.51)$$

$$\Pi_{ab}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} (\mathcal{G}(p))_{ab} (\mathcal{G}(|\mathbf{k} - \mathbf{p}|))_{ba}. \quad (5.52)$$

O sistema acima é consistentemente fechado inserindo-se na integral (5.52) a matriz do propagador livre, em ordem zero. Deve-se notar que nas equações (5.50) e (5.52) os produtos são produtos simples entre elementos das matrizes \mathcal{G}_0 e/ou \mathcal{D} ; as fórmulas não envolvem produtos matriciais. A definição da matriz \mathcal{D} renormaliza a interação u , e a aproximação de Hartree acaba sendo renormalizada de maneira correspondente.

5.3.4 Matriz da função de correlação no espaço de réplicas

Constatou-se acima que, devido ao alcance finito da interação no Hamiltoniano (5.4), a região intermediária de temperaturas, $T_K < T < T_D$, caso ocorra, não é marcada por uma quebra completa de ergodicidade (ao contrário do que ocorre em sistemas desordenados em campo médio) e o regime dinâmico neste intervalo de temperaturas apresenta processos ativados. Este trabalho, entretanto, é desenvolvido dentro das aproximações da RFOT, que se limitam a um cenário de quebra completa de ergodicidade abaixo de T_D , no correspondente estático do cenário proposto pela teoria de *Mode Coupling* [179]. Tal quebra de ergodicidade, relacionada à emergência da fase vítrea, implica em um limite *finito* para a função de correlação a dois tempos no limite de tempos infinitos:

$$C(\infty) = C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv T^{-1} \lim_{t-t' \rightarrow \infty} \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', t') \rangle = T^{-1} \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}', 0) \rangle, \quad (5.53)$$

onde a segunda igualdade assume que se fixa a origem $t' = 0$ em um instante posterior à instauração de um regime estacionário no sistema (isto é, em que correlações dinâmicas são invariantes frente a translações temporais e, portanto, dependem apenas da diferença $t - t'$)²⁰. Ao contrário, na fase líquida, com relaxação exponencial, e em que a ergodicidade é verificada, as correlações a tempos longos vão a zero.

É possível demonstrar que a função de correlação $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q})$ apresentará a mesma estrutura matricial de (5.48) [180]. Propõe-se, assim, a exemplo do que é feito em [19], como *ansatz* para a forma da solução $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q})$:

$$\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q}) = \mathcal{G}(\mathbf{q}) \delta_{ab} + \mathcal{F}(\mathbf{q}) (1 - \delta_{ab}), \quad (5.54)$$

²⁰Para tempos de espera suficientemente longos, no caso da fase líquida, ou para temperaturas suficientemente baixas, $T < T_D$.

onde $\mathcal{G}(\mathbf{q})$ e $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ são funções independentes dos índices de réplicas. Os elementos não-diagonais de (5.54) correspondem à correlação entre réplicas distintas. Na fase líquida (correspondentemente, paramagnética), as diferentes réplicas do sistema são descorrelacionadas, e a matriz $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q})$ é diagonal (e proporcional à matriz identidade). Os elementos diagonais são, por definição, dados pela função de correlação instantânea: $\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv T^{-1} \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle$. A correlação entre réplicas distintas deve ser finita apenas na fase de vidro. Argumenta-se, assim, que os elementos fora da diagonal de (5.54) devem corresponder a um “parâmetro de ordem” da transição dinâmica em T_D .

A emergência de uma fase vítrea no sistema, marcada por uma entropia configuracional não-nula em um intervalo de temperaturas $T_K < T < T_D$, está portanto ligada à ocorrência de elementos não-diagonais na matriz \mathcal{G} , ou seja, quando a correlação entre réplicas distintas existe - o que força as réplicas a condensarem no mesmo estado metaestável da superfície de energia livre do sistema replicado. Alternativamente, caracteriza-se a emergência da fase de vidro pela descontinuidade na função de correlação a dois tempos assintótica, $\mathcal{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = C(\infty)$, de zero em $T > T_D$ para um valor finito em $T < T_D$.

O método de réplicas de fato torna possível uma análise de equilíbrio das propriedades dos estados metaestáveis, embora estes sejam definidos em um contexto dinâmico. A estrutura matricial de (5.54) e o significado físico de $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ podem ser elucidados quando se estabelece a equivalência entre a solução estacionária da dinâmica de Langevin do sistema e a estatística canônica do mesmo. Em [180], Crisanti prova que o limite $t - t' \rightarrow \infty$ da função de correlação de equilíbrio a dois tempos

$$C(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') \rangle_{eq} \quad (5.55)$$

de um sistema desordenado cuja solução estática possui estrutura IRSB pode ser obtido através da teoria estática do sistema m -vezes replicado, no limite $m \rightarrow 1$. Observe-se que a estrutura matricial “réplica-simétrica” (5.54) no esquema de réplicas aqui aplicado corresponde à estrutura IRSB (com uma quebra de simetria de réplicas) no esquema de réplicas convencional. [Ver Apêndice B.2.] Voltando ao *ansatz* (5.54), tal resultado permite identificar $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ com a função de correlação a dois tempos no limite $t - t' \rightarrow \infty$: $\mathcal{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = C(\infty)$.

Devido à descontinuidade associada à transição em $T = T_D$, que caracteriza a transição vítrea como um efeito não-linear sobre $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q})$, uma teoria perturbativa na correção não-diagonal $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$ à auto-energia não é sensível a esta transição e só fornece para $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$ a solução trivial. A aproximação de Hartree é insensível à (eventual) ocorrência da fase de vidro. No contexto desta aproximação, os elementos não-diagonais da matriz de correlação (5.33) vão a zero de maneira trivial no limite $g \rightarrow 0$ (da mesma maneira que acontece na equação (5.30) para o propagador gaussiano). Isto também indica que o propagador de ordem zero, $\mathcal{G}_0(q)$, será diagonal. Já no contexto da SCSA, onde uma subsérie infinita de diagramas é somada à auto-energia, a existência da fase de vidro pode ser verificada. A matriz de correlação $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q})$ será não-diagonal, portanto, se a correção da SCSA à auto-energia for não-nula para $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$.

Está claro que a estrutura (5.54) se verificará se e somente se a auto-energia $\Sigma_{ab}(\mathbf{q})$ for dada por:

$$\Sigma_{ab}(\mathbf{k}) = (\Sigma_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}))\delta_{ab} + \Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}). \quad (5.56)$$

Como produtos matriciais entre matrizes do tipo (5.48), e a inversa de matrizes deste tipo, todos herdam a mesma estrutura matricial:

$$\begin{aligned} A = a_1\mathbb{1} + a_2\mathbb{E}; B = b_1\mathbb{1} + b_2\mathbb{E} &\implies AB = (a_1b_1)\mathbb{1} + (a_1b_2 + a_2b_1 + ma_2b_2)\mathbb{E}; \\ A^{-1} &= \frac{1}{a_1}\mathbb{1} - \frac{a_2}{a_1(a_1 + ma_2)}\mathbb{E}, \end{aligned} \quad (5.57)$$

infere-se para a estrutura de $\mathcal{D}_{ab}(\mathbf{k})$ e $\Pi_{ab}(\mathbf{k})$ (equações (5.45) e (5.46)) no espaço de réplicas:

$$\mathcal{D}_{ab}(\mathbf{k}) = (\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) - \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}))\delta_{ab} + \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}), \quad (5.58)$$

$$\Pi_{ab}(\mathbf{k}) = (\Pi_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) - \Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}))\delta_{ab} + \Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}). \quad (5.59)$$

Ademais das equações (5.45), (5.46) e (5.50), para fechar o sistema de equações da aproximação, tem-se a equação de Dyson (matricial):

$$\left[\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q}) \right]_{ab} = [\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q}) + \Sigma_{\mathcal{G}}(\mathbf{q})] \delta_{ab} + \Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q}) (1 - \delta_{ab}), \quad (5.60)$$

onde $\mathcal{G}_0(\mathbf{q})$ é a correlação de Hartree (5.33).

A equação acima para $\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q})$ define as funções diagonal e não-diagonal da matriz de correlação no espaço de réplicas (equação (5.54)), dentro da aproximação SCSA:

$$\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q}) = \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q}) + \Sigma_{\mathcal{G}}(\mathbf{q}) \quad (5.61)$$

$$\mathcal{F}(\mathbf{q}) = \mathcal{G}(\mathbf{q}) - \frac{\mathcal{G}(\mathbf{q})}{1 - \Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})\mathcal{G}(\mathbf{q})} \equiv \mathcal{G}(\mathbf{q}) - \mathcal{K}(\mathbf{q}), \quad (5.62)$$

onde, a exemplo da referência [19], definiu-se a função $\mathcal{K}(\mathbf{q})$, cuja "semelhança" com $\mathcal{G}(\mathbf{q})$ mede a proximidade da solução à fase líquida. No estado líquido $\mathcal{K}(\mathbf{q}) = \mathcal{G}(\mathbf{q})$, e as correlações decaem exponencialmente com o tempo, isto é, $\mathcal{F}(\mathbf{q}) = 0$. Na fase de vidro, tem-se $0 < \mathcal{K}(\mathbf{q}) < \mathcal{G}(\mathbf{q})$, e a correlação a tempos longos $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ é finita. $\mathcal{K}(\mathbf{q})$ pode ser interpretada como uma função resposta estática (retardada) do sistema [19].

5.3.5 Funções não-diagonais no espaço de réplicas: emergência da fase de vidro

Como acima argumentado, a emergência de uma correlação finita entre réplicas distintas, isto é, fora da diagonal no espaço de réplicas, é a assinatura da emergência, em $T = T_D$, de uma fase de líquido superresfriado

e, mais abaixo, uma transição de fase a um estado termodinâmico amorfo, em $T = T_K$. Da equação (5.62), fica claro que a condição para tal está na ocorrência da função $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}) \neq 0$.

Naturalmente, o cálculo das auto-energias diagonal $\Sigma_{\mathcal{G}}(\mathbf{k})$ e não-diagonal $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k})$ envolve a matriz $\mathcal{D}_{ab}(\mathbf{k})$ e, por conseguinte, $\Pi_{ab}(\mathbf{k})$. Das equações (5.58) e (5.45), e das identidades (5.57), obtêm-se:

$$\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{v^{-1} + n\Pi_{\mathcal{G}}(\mathbf{k})}, \quad (5.63)$$

$$\mathcal{D}_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}) = \mathcal{D}_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) - \frac{\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(\mathbf{k})}{1 - \Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{k})\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(\mathbf{k})}. \quad (5.64)$$

Da mesma forma, da estrutura de $\Pi_{ab}(\mathbf{k})$, equação (5.59), no espaço de réplicas, juntamente com a equação (5.46) (onde os produtos não são produtos matriciais, são produtos simples entre elementos matriciais), obtêm-se:

$$\Pi_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \mathcal{G}(\mathbf{p}) \mathcal{G}(\mathbf{p} + \mathbf{k}), \quad (5.65)$$

$$\Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \mathcal{F}(\mathbf{p}) \mathcal{F}(\mathbf{p} + \mathbf{k}), \quad (5.66)$$

onde $\mathcal{G}(\mathbf{p})$ em (5.65) e (5.62) será substituída por $\mathcal{G}_0(p)$ de (5.33) para fechar de forma auto-consistente a aproximação SCSA.

5.3.6 Expansão SCSA para a energia livre de Helmholtz

A relação (4.5) obtida no capítulo anterior relaciona a entropia configuracional S_c à energia livre de Helmholtz do sistema replicado no limite $m \rightarrow 1$: $S_c(f) = \left. \frac{m^2}{T} \frac{\partial F(m,T)}{\partial m} \right|_{m=1}$. Assim, a verificação da ocorrência de uma fase de vidro no sistema (equivalentemente, da ocorrência de uma entropia configuracional finita, $S_c \neq 0$, abaixo de dada temperatura) no contexto da SCSA depende da determinação da energia livre de Helmholtz do sistema replicado, $F(m, T)$, dentro desta aproximação. Dentro deste propósito, demonstra-se abaixo a relação entre $F(m, T)$ e a função de correlação \mathcal{G} e outras funções definidas no contexto da expansão SCSA.

Em [181], A. J. Bray obtém os três primeiros termos da expansão auto-consistente de interação blindada (renormalizada) para a energia livre de Helmholtz (total), até ordem $\mathcal{O}(n^{-1})$. No presente trabalho, consideram-se todos os diagramas até ordem $\mathcal{O}(n^{-1})$ para a *densidade de energia livre por componente*. Derivações alternativas podem ser encontradas em [182, 183].

A contribuição $\mathcal{O}(n^0)$ corresponde à aproximação de campo auto-consistente de Hartree. Como se sabe, os diagramas de Hartree que entram na equação de Dyson para a função de correlação a dois pontos devem ser todos aqueles que possuam o mesmo número de laços (cada laço carrega um fator n) que de linhas de interação (que carregam um fator $u = \mathcal{O}(n^{-1})$).

onde a linha cheia representa o propagador de Hartree (5.14) e a linha pontilhada, o propagador Gaussiano (5.10), como na seção anterior. Em representação algébrica:

$$\mathcal{G}_0(k) = \bar{\mathcal{G}}_0(k) + \bar{\mathcal{G}}_0(k) \left(\int dq \mathcal{G}_0(q) \right) \mathcal{G}_0(k) = \bar{\mathcal{G}}_0(k) [1 + (\text{Tr}_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_0(\mathbf{q})) \mathcal{G}_0(k)]. \quad (5.67)$$

Considerando-se a identidade termodinâmica para a entropia *total* do sistema:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial F}{\partial T} \propto -\frac{\partial F}{\partial r_0} = \frac{\partial \log Z}{\partial r_0} = \\ &= \lim_{g \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial r_0} \log \left\{ \int \prod d\phi_i^a(\mathbf{x}) \exp \left\{ -\beta \sum_a \mathcal{H}[\phi^a] - \frac{g}{2m} \sum_{a,b=1}^m \sum_{i=1}^n \int d^2x \phi_i^a(\mathbf{x}) \phi_i^b(\mathbf{x}) \right\} \right\} = \\ &= \lim_{g \rightarrow 0^+} \frac{1}{Z(m, \beta)} \left\{ -\frac{1}{2} \int \prod d\phi_i^a(\mathbf{k}) \left(\text{Tr}_k \sum_{i=1}^n \sum_{a=1}^m \phi_i^a(k) \phi_i^a(-k) \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left\{ -\beta \sum_a \mathcal{H}[\phi^a] - \frac{g}{2m} \sum_{a,b=1}^m \sum_{i=1}^n \int d^2q \phi_i^a(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \phi_i^b(\mathbf{q}) \right\} \right\} = \\ &= -\frac{1}{2} \lim_{g \rightarrow 0^+} (n \cdot m) \text{Tr}_k \mathcal{G}_0(k), \end{aligned} \quad (5.68)$$

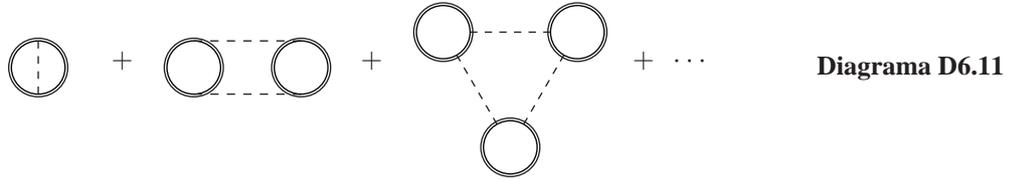
onde $r_0 = a(T - T^*)/T^*$ é o termo de massa *nu* (*bare*) (ver equação (5.10)). A contribuição de Hartree ($\mathcal{O}(n^0)$) à energia livre de Helmholtz será portanto:

$$\begin{aligned} f^{(0)} \equiv F_0(m, \beta) &= -\int S dr_0 = \\ &= \frac{1}{2} \lim_{g \rightarrow 0^+} (n \cdot m) \int dr_0 \text{Tr}_k \mathcal{G}_0(k) = \\ &= \frac{1}{2} \lim_{g \rightarrow 0^+} (n \cdot m) \text{Tr}_k \int \frac{d\mathcal{G}(k)}{\mathcal{G}(k)} \frac{1}{(1 - \Sigma(k)\mathcal{G}(k))} = \\ &= \frac{1}{2} (n \cdot m) \text{Tr} \log \left[\frac{1 - \Sigma(k)\mathcal{G}(k)}{\mathcal{G}(k)} \right] = -\frac{1}{2} \text{Tr} \log \mathcal{G}^{-1}(k) - \frac{1}{2} \text{Tr} \log (1 - \Sigma(k)\mathcal{G}(k)) \approx \\ &\approx -\frac{1}{2} \text{Tr} \log \mathcal{G}^{-1}(k) + \frac{1}{2} \text{Tr} (\Sigma(k)\mathcal{G}(k)) + \mathcal{O}(n^{-2}), \end{aligned} \quad (5.69)$$

onde a última igualdade decorre de ser $\Sigma(k)\mathcal{G}(k) = \mathcal{O}(n^{-1})$. A ocorrência da contribuição $\mathcal{O}(n^{-1})$ no termo de Hartree decorre de haver-se expressado o propagador de Hartree $\mathcal{G}_0(k)$ como a diferença entre o propagador SCSA, $\mathcal{G}(k)$, e a auto-energia $\Sigma(k)$, que é $\mathcal{O}(n^{-1})$.

Considera-se uma expansão para a densidade de energia livre de Helmholtz por componente do parâmetro de ordem: $f = F/(nm) = f^{(0)} + (nm)^{-1} f^{(1)} + (nm)^{-2} f^{(2)} + \dots$. As próximas contribuições a $f(m, \beta)$, $\mathcal{O}(n^{-1})$, $\mathcal{O}(n^{-2})$, etc, podem ser determinadas diretamente dos diagramas de Feynman para a energia livre. A soma da subsérie de diagramas $\mathcal{O}(n^{-1})$ permite considerar, caso ocorram, contribuições não-perturbativas à

energia livre através da renormalização do parâmetro da expansão, $u = \mathcal{O}(n^{-1})$ (interação blindada ou "dressed interaction"). Como $F \propto \log Z$, sabe-se, do teorema LCT, que estes diagramas serão todos diagramas conectados e *sem* linhas externas [176] (ver Apêndice B.1). Dentre estes, em particular, aqueles diagramas que possuírem mesmo número de laços e de linhas de interação (linhas tracejadas) contribuirão a $f^{(1)}$, que é $\mathcal{O}(n^0)$. A expansão D6.11 representa a série infinita destes diagramas.



É fácil verificar que cada diagrama da expansão D6.11 possuindo j laços é invariante frente ao grupo de simetria $C_{\frac{\pi}{j}}$, isto é, o diagrama com j laços carrega um fator $1/j$, e a simetria interna do laço, por sua vez, carrega um fator $1/2$ à expressão algébrica do diagrama [177]. Levando-se em conta os fatores de simetria respectivos a cada diagrama da série, obtém-se a seguinte expressão para $f^{(1)}$:

$$f^{(1)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{2j} \text{Tr}_q (-1)^{j+1} u^j (\text{Tr}_k \mathcal{G}(k) \mathcal{G}(k+q))^j = \frac{1}{2} \text{Tr}_q \log (1 + u \Pi(q)) \propto \frac{1}{2} \text{Tr} \mathcal{D}^{-1}, \quad (5.70)$$

a menos de uma constante aditiva irrelevante.

Somando as contribuições (5.69) e (5.70) (com os respectivos sinais e pré-fatores), obtém-se para a energia livre de Helmholtz $F(m, T) = -T \log Z(m, \beta)$, até ordem $\mathcal{O}(n^{-1})$:

$$\frac{m F(m, T)}{T} = \frac{1}{2} \text{Tr} \log \mathcal{G}^{-1} + \frac{1}{2} \text{Tr} \mathcal{D}^{-1} - \frac{1}{2} \text{Tr} (\Sigma \mathcal{G}). \quad (5.71)$$

5.3.7 Obtenção da temperatura "espinodal" T_D : condição para a ocorrência do líquido superresfriado

Viu-se que a informação relevante sobre a fase de vidro na matriz de correlação $\mathcal{G}_{ab}(q)$ no espaço de réplicas está contida nas correlações entre réplicas distintas, $\mathcal{F}(q)$, que correspondem a correlações a dois tempos no limite assintótico. Quando aplicada a um sistema formador de vidro, a expansão SCSA de Bray [27] para a correlação $\mathcal{G}(q)$ não é completa, já que, diferentemente dos elementos diagonais da matriz de correlação, os elementos fora da diagonal são dados por uma correlação dinâmica. Para contornar este problema, fazem-se necessárias hipóteses adicionais sobre a matriz $\mathcal{G}_{ab}(q)$. Westfahl, Schmalian e Wolynes [18, 19, 184], ao introduzirem um *ansatz* para a função dinâmica $\mathcal{F}(q)$, conseguiram fechar a expansão para a matriz $\mathcal{G}_{ab}(q)$ de forma auto-consistente. Os autores, ademais, propuseram uma interpretação coerente para o mecanismo de formação da fase de vidro em sistemas com interações competitivas em diferentes escalas de distância, que condiciona a ocorrência da fase desordenada a uma relação entre o comprimento de correlação ξ e o comprimento de modulação l_m de tais sistemas. Ocorre que tal

mecanismo está estreitamente ligado a um comprimento dinâmico, λ , que mede o “grau de fluidez” dos padrões da fase lamelar no sistema, e corresponde ao deslocamento quadrático médio de defeitos no sistema.

Viu-se na seção 5.3.3 que o sistema de equações (5.49)-(5.52) da aproximação SCSA deve ser fechado de forma consistente com a matriz do propagador de ordem zero. Entretanto, a expansão SCSA é desenvolvida em torno do comportamento estático do sistema. Ora, viu-se na seção 5.3.4 que as réplicas do sistema introduzem funções de correlação dinâmicas ao problema. Portanto, a aproximação SCSA apenas não fornece os elementos fora da diagonal da matriz de correlação $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{q})$ - correspondentes à correlação entre réplicas distintas -, em ordem zero, que devem ser inseridos na equação (5.52) a fim de tornar o sistema consistente. Melhor dito, a SCSA, como proposta por Bray [27], não fornece *a priori* a função $\mathcal{F}_0(\mathbf{q})$.

No caso da aproximação SCSA no espaço de réplicas, faz-se necessária, em função da estrutura da equação (5.62), uma suposição adicional sobre a própria auto-energia $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k})$. Supõe-se então que a dependência desta função no momentum seja fraca, e onde ocorre o produto $\mathcal{G}(\mathbf{k})\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k})$, a dependência no momentum seja determinada por $\mathcal{G}(\mathbf{k})$. Esta suposição deverá ser verificada *ad hoc*.

Uma forma alternativa de abordar esta aproximação é propor que abaixo da temperatura “espinodal” T_D , em que passa a existir uma solução de líquido superresfriado (não-ergódico), a função $\mathcal{K}(q)$ tenha a mesma forma funcional de $\mathcal{G}(q)$. Acima de T_D , tem-se $\mathcal{K}(q) = \mathcal{G}(q)$, de modo que a correlação a dois tempos assintótica se anula no limite $t - t' \rightarrow \infty$. Propõe-se que o “termo de massa” em $\mathcal{K}(q)$ sofre uma descontinuidade de zero acima de T_D para um valor finito $\zeta = \zeta(T)$ abaixo de T_D , e como *ansatz* para a função inversa resulta: $\mathcal{K}_0^{-1}(\mathbf{q}) = \zeta + J(q^2 - k_0^2)^2$. Assim, para $T \lesssim T_D$, para todo q , $\mathcal{F}(q) = \mathcal{G}(q) - \mathcal{K}(q) \ll 1$. De (5.62), $\Sigma_{\mathcal{F}}(q) = \mathcal{G}^{-1}(q) - \mathcal{K}^{-1}(q)$, que está em acordo com a suposição acima de que $\Sigma_{\mathcal{F}}$ seja aproximadamente independente de momentum. De fato, substituindo $\mathcal{G}_0(k)$ para $\mathcal{G}(\mathbf{k})$, e $\mathcal{K}_0(k)$ para $\mathcal{K}(\mathbf{k})$:

$$\Sigma_{\mathcal{F}} \approx r - \zeta. \quad (5.72)$$

Com o *ansatz* proposto para o termo de ordem zero da função de correlação dinâmica no limite assintótico, $\mathcal{F}(\mathbf{q})$, se completa de forma apropriada o sistema de equações da SCSA generalizada ao espaço de réplicas (5.49)-(5.52).

Líquido superresfriado como fase desordenada de defeitos com baixa mobilidade

A análise dimensional da função de correlação \mathcal{G}_0 (equação (5.33)) e a consistência dimensional requerida pela equação (5.60) mostra que $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{k})$ possui dimensão (comprimento) $^{-2}$, como no caso do gás de Coulomb frustrado [19]. Introduce-se assim um novo comprimento característico, λ , relacionado a $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$ através de

$$\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m) \equiv -(2/\lambda)^2. \quad (5.73)$$

Enfatizou-se acima que a quebra de ergodicidade na transição dinâmica em $T = T_D$ é marcada pelo “parâmetro de ordem” $\mathcal{F}(\mathbf{q})$, que se anula acima da transição. Tal fato, aliado à definição de $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$, equação (5.73), permite inferir que o comprimento λ deve ter um papel importante no mecanismo da transição dinâmica. Em particular, tal comprimento deve estar relacionado a uma propriedade dinâmica do sistema, dada a natureza dinâmica de $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ e, por conseguinte, de $\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$. Ademais, da definição (5.73), é lícito afirmar que acima da transição o comprimento λ deve ser infinito.

Acima de T_D , a fase de líquido isotrópico é caracterizada por muitos (escalando exponencialmente com o tamanho do sistema) defeitos ao padrão de faixas. A fluidez do sistema, entretanto, permite que estes defeitos evoluam espacialmente, movendo-se dentro da amostra. Dois defeitos compatíveis, aproximando-se suficientemente um do outro, podem se aniquilar mutuamente, reduzindo a desordem do sistema. Quando se resfria o sistema, espera-se que a mobilidade dos defeitos evidentemente diminua. A desordem da fase de vidro neste sistema se origina da multiplicidade de defeitos “congelados” ao padrão de faixas. A emergência do líquido super-resfriado abaixo de T_D deve corresponder a uma condição sobre a mobilidade dos defeitos, de modo a que a taxa de aniquilação de pares de defeitos se torne nula - ou suficientemente baixa (Figura 5.4). Neste contexto, o comprimento dinâmico λ pode ser interpretado como o deslocamento quadrático médio de defeitos em uma amostra, ou comprimento de Lindemann para os defeitos no sistema.

Como os defeitos acima mencionados são desvios ao padrão de faixas, o comportamento relevante do sistema deve estar contido nas funções $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$ e $\mathcal{F}(q_m)$, calculadas em $|\mathbf{q}| = q_m = 2\pi/l_m$, onde l_m é o comprimento de modulação do padrão de faixas (e, eventualmente em menor grau, em valores de $|\mathbf{q}|$ que sejam frações de q_m : $q_m/2$, $q_m/3$, etc). Daí a relação (5.73) estabelecida entre $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$ e λ . Note-se que para o modelo estudado neste trabalho, (eq. (5.4)), o vetor de modulação $q_m \approx k_0$, é aproximadamente independente de temperatura.

Restringe-se assim o cálculo da auto-energia não-diagonal a $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$, onde q_m é o vetor de onda que maximiza o fator de estrutura $\mathcal{G}_0(k)$, ou seja, o inverso da largura média das faixas em equilíbrio. Substituindo para $\Sigma_{\mathcal{F}}$ em função de λ em (5.72):

$$\lambda^{-1} = \frac{1}{2} \sqrt{\zeta - r}. \quad (5.74)$$

A temperatura “espinodal” T_D é obtida através da equação algébrica para o par de parâmetros (r, ζ) dada de um lado, pela expressão (5.72) para $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$ (conseqüência do *ansatz* proposto para a função $\mathcal{K}_0(q)$), e de outro, pela expressão para $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$ obtida através da inserção de $\mathcal{G}_0(q)$ e $\mathcal{K}_0(q)$ na equação (5.52) e resolução do sistema (5.49)-(5.52). A solução para $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$ do referido sistema é:

$$\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(p) \mathcal{F}(|\mathbf{p} + \mathbf{q}_m|), \quad (5.75)$$

que é uma função de r e ζ . A equação acima, (5.75), juntamente com (5.72), define uma equação algébrica para os parâmetros r e ζ . A solução $r = \zeta$ sempre existe e corresponde ao estado líquido. Na ocorrência de outra solução não trivial, definem-se os valores do comprimento λ e de temperatura em que emerge a fase de líquido superresfriado.

Expandindo-se a solução $\Sigma_{\mathcal{F}}(q_m)$ do sistema (5.49)-(5.52) em série de potências, a equação algébrica para (r, ζ) se torna uma equação polinomial. A raiz $\tilde{r} = \tilde{\zeta}$ sempre existe, corresponde ao estado líquido e pode ser fatorada. Na ocorrência de solução não trivial, a temperatura da transição dinâmica T_D é aquela em que surgem raízes $(\tilde{r}, \tilde{\zeta})$, com $\tilde{r} < \tilde{\zeta}$ (lembrando que $r \propto T$, da equação de auto-consistência da aproximação de Hartree). O comprimento de Lindemann λ_D , na transição dinâmica, será dado por²¹: $\lambda_D = \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{\zeta}(T_D) - \tilde{r}(T_D)}$.

Estas soluções, quando existem, correspondem a uma temperatura, a temperatura T_D da transição dinâmica, abaixo da qual o líquido é superresfriado, e o sistema pode ficar preso em um estado desordenado metaestável. Esta temperatura é determinada pela equação de auto-consistência de Hartree:

$$r(T) = r_0 + 2(n+2)uTG_0(\mathbf{x}=0), \quad (5.76)$$

onde u é uma interação renormalizada por $\mathcal{D}(q)$. A temperatura espinodal T_D do modelo (5.4) é determinada na Seção 5.4 abaixo, para a qual se obtém $T_D = \frac{(\bar{r}-r_0)}{u(2-k_0)}$, onde \bar{r} , se existir, é o supremo das soluções da equação algébrica correspondente, e é uma função dos parâmetros livres do modelo.

A cada temperatura (5.92) (Seção 5.4, abaixo) corresponderá um valor \bar{r} do termo de massa, e a cada valor de \bar{r} , por sua vez, corresponderá um par $(\tilde{r}, \tilde{\zeta})$, solução da equação algébrica mencionada. O comprimento de Lindemann $\lambda = 2/\sqrt{\tilde{\zeta} - \tilde{r}}$, pode então ser determinado a partir do par $(\tilde{r}, \tilde{\zeta})$ obtido, como função da temperatura. Acima da temperatura $T_D(\bar{r})$, isto é, para $r > \bar{r}$, a equação algébrica não possui solução real com $\frac{r}{\zeta} < 1$, e apenas subsiste a solução de líquido, que corresponde a $r = \zeta$, e portanto $\lambda = \infty$. De fato, espera-se que na fase de líquido os defeitos encontrem-se livres para evoluir no sistema. A divergência de λ indica que o deslocamento quadrático médio dos defeitos neste regime é a dimensão linear do sistema. Abaixo de T_D , se existir o *crossover* dinâmico, espera-se que λ seja finito e decresça com a temperatura decrescente. A mobilidade dos defeitos é limitada, de modo que a taxa de "regeneração" de defeitos por aniquilação entre pares seja (aproximadamente) zero.

Para o gás de Coulomb frustrado em três dimensões [19], a condição sobre o deslocamento quadrático médio dos defeitos no sistema para a emergência do líquido superresfriado resulta em um valor finito para $\lambda_D \lesssim \frac{2}{3}l_m$ (onde l_m é o comprimento de modulação do gás de Coulomb frustrado). É interessante constatar que em [19], a condição encontrada para a ocorrência de fase desordenada abaixo de T_D não impõe defeitos perfeitamente fixos no sistema, a mobilidade é pequena, mas ainda finita até $T \rightarrow T_K^+$. Tal condição impõe um supremo à relação entre λ e q_m (vetor de modulação do sistema à temperatura T), e é evidentemente menos restritiva que a condição de defeitos congelados ($\lambda = 0$).

²¹ Para T_D finita, espera-se um comprimento λ_D finito.

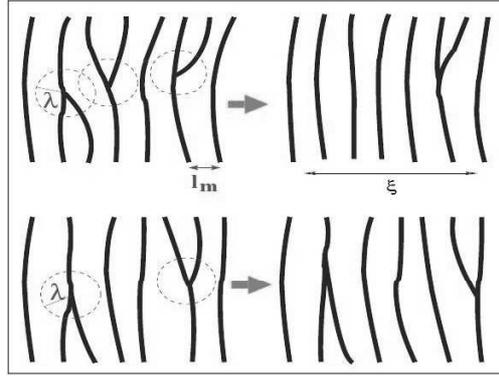


Figura 5.4: Representação do cenário proposto por Westfahl e colaboradores na emergência da fase de vidro: acima, na fase de líquido, os defeitos têm mobilidade alta, e podem se aproximar, aniquilando-se em pares; abaixo, na fase de vidro, os defeitos têm mobilidade finita porém limitada, de modo que não se aproximam o suficiente para se aniquilar mutuamente [19].

5.3.8 Entropia Configuracional

Obtida a temperatura T_D em que emerge a fase de líquido superresfriado²², resta calcular a entropia configuracional S_c do modelo. S_c será finita abaixo de T_D , acusando a presença de um número exponencialmente grande de estados metaestáveis, responsáveis pela dinâmica lenta do sistema. A dinâmica (lenta) de um líquido superresfriado é intrinsecamente ligada ao comportamento termodinâmico observado. No contexto da aproximação SCSA, a energia livre $F(m, \beta)$ pode ser calculada através das funções de correlação instantânea, $\mathcal{G}(k)$, e a dois tempos, $\mathcal{F}(k)$, através da equação (5.71):

$$\frac{2m F(m)}{T} = \text{Tr} \log \mathcal{G}^{-1} + \text{Tr} \log \mathcal{D}^{-1} - \text{Tr} \Sigma \mathcal{G}. \quad (5.77)$$

A entropia configuracional, por sua vez, é obtida a partir de $F(m, \beta)$, pela equação (4.5).

Extrapolando a entropia configuracional até $S_c(T_K) = 0$ obtém-se a temperatura de Kauzmann T_K , onde o estado amorfo se torna tão estável quanto o esmético.

A estrutura matricial no espaço de réplicas da matriz de correlação $\mathcal{G}_{ab}(k)$ revela que esta e as demais matrizes $\mathcal{D}_{ab}(k)$ e $\Sigma_{ab}(k)$, de ordem m , são do tipo Toeplitz, com uma estrutura tipo RS (réplica simétrica, no esquema de quebra de simetria de réplicas de Parisi):

$$T = \begin{pmatrix} a & b & b & \cdots \\ b & a & b & \cdots \\ b & b & a & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

²²Neste regime, o sistema experimental, resfriado a uma taxa finita, pode “vitrificar”, ficar preso em um dos estados metaestáveis desordenados.

cujos autovalores são:

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 &= a + (m-1)b, & \text{n\~{a}o-degenerado,} \\ \varepsilon_1 &= a - b, & (m-1) \text{ vezes degenerado.}\end{aligned}\tag{5.78}$$

No argumento do logaritmo no primeiro termo de (5.77) tem-se $(\mathcal{G}^{-1})_{ab} = (\mathcal{G}_0^{-1} + \Sigma_{\mathcal{G}})\delta_{ab} + \Sigma_{\mathcal{F}}(1 - \delta_{ab}) = \mathcal{G}^{-1}\delta_{ab} + \Sigma_{\mathcal{F}}(1 - \delta_{ab})$, e o primeiro termo é dado por:

$$\text{Tr log } \mathcal{G}^{-1} = \int \frac{d^2q}{4\pi^2} \left\{ \log \left[\mathcal{G}_0^{-1}(q) + \Sigma_{\mathcal{G}}(q) + (m-1)\Sigma_{\mathcal{F}}(q) \right] + (m-1) \log \left[\mathcal{G}_0^{-1}(q) + \Sigma_{\mathcal{G}}(q) - \Sigma_{\mathcal{F}}(q) \right] \right\}.\tag{5.79}$$

Da mesma forma, do segundo termo vem $(\mathcal{D}^{-1})_{ab} = (v^{-1} + \Pi_{\mathcal{G}})\delta_{ab} + \Pi_{\mathcal{F}}(1 - \delta_{ab}) = \mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1}\delta_{ab} + \Pi_{\mathcal{F}}(1 - \delta_{ab})$, de forma que se obtém, para o segundo termo:

$$\text{Tr log } \mathcal{D}^{-1} = \int \frac{d^2q}{4\pi^2} \left\{ \log[\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1} + (m-1)\Pi_{\mathcal{F}}] + (m-1) \log[\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1} - \Pi_{\mathcal{F}}] \right\}.\tag{5.80}$$

Para o terceiro termo, tem-se $(\Sigma\mathcal{G})_{ab} = (\Sigma_{\mathcal{G}} - \Sigma_{\mathcal{F}})(\mathcal{G} - \mathcal{F})\delta_{ab} + (\Sigma_{\mathcal{G}} - \Sigma_{\mathcal{F}})\mathcal{F} + (\mathcal{G} - \mathcal{F})\Sigma_{\mathcal{F}} + m\Sigma_{\mathcal{F}}\mathcal{F}$, de maneira que:

$$\text{Tr } \Sigma\mathcal{G} = \int \frac{d^2q}{4\pi^2} m(\Sigma_{\mathcal{G}}\mathcal{G} + (m-1)\Sigma_{\mathcal{F}}\mathcal{F}).\tag{5.81}$$

A entropia configuracional é obtida a partir da energia livre através da equação (4.5): $S_c(T) = \frac{1}{T} \frac{\partial F(m,T)}{\partial m} \Big|_{m=1}$.

Assim:

$$\begin{aligned}S_c(T) &= \lim_{m \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial m} \int \frac{d^2q}{4\pi^2} \frac{1}{2m} \left\{ \log \left[\mathcal{G}_0^{-1} + \Sigma_{\mathcal{G}} + (m-1)\Sigma_{\mathcal{F}} \right] + (m-1) \log \left[\mathcal{G}_0^{-1} + \Sigma_{\mathcal{G}} - \Sigma_{\mathcal{F}} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \log[\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1} + (m-1)\Pi_{\mathcal{F}}] + (m-1) \log[\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1} - \Pi_{\mathcal{F}}] + \right. \\ &\quad \left. - m(\Sigma_{\mathcal{G}}\mathcal{G} + (m-1)\Sigma_{\mathcal{F}}\mathcal{F}) \right\}\end{aligned}\tag{5.82}$$

$$\begin{aligned}S_c(r, \zeta) &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2q}{4\pi^2} \left\{ -\log(\mathcal{G}^{-1}(q)) - \log(\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1}(q)) + \frac{\Sigma_{\mathcal{F}}(q)}{\mathcal{G}^{-1}(q)} + \log(\mathcal{G}^{-1}(q) - \Sigma_{\mathcal{F}}(q)) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Pi_{\mathcal{F}}(q)}{\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1}(q)} + \log(\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1}(q) - \Pi_{\mathcal{F}}(q)) - \Sigma_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{F}(q) \right\} \\ S_c(r, \zeta) &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2q}{4\pi^2} \left\{ -\log \left[1 - \frac{\mathcal{F}(q)}{\mathcal{G}(q)} \right] + \log \left[1 - \frac{v\Pi_{\mathcal{F}}}{1 + v\Pi_{\mathcal{G}}} \right] - \frac{\mathcal{F}(q)}{\mathcal{G}(q)} + \frac{v\Pi_{\mathcal{F}}}{1 + v\Pi_{\mathcal{G}}} \right\},\end{aligned}\tag{5.83}$$

já que, da equação (5.62): $\Sigma_{\mathcal{F}} = \mathcal{G}^{-1}(q) - [\mathcal{G}(q) - \mathcal{F}(q)]^{-1}$, e da equação (5.63), tem-se: $\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1}(q) = \frac{1}{v} [1 + v\Pi_{\mathcal{G}}(q)]$. Para $\mathcal{G}(q)$ e $\mathcal{F}(q)$ tomam-se as funções a ordem zero.

A entropia configuracional resultante de (5.83) será função dos parâmetros r e ζ , já que as funções $\mathcal{G}(q)$ e

$\Pi_{\mathcal{G}}(q)$ dependem de r , enquanto $\mathcal{F}(q)$ e $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$ dependem de ζ . A fim de expressar a entropia configuracional (5.83) como função da temperatura explicitamente, deve-se recorrer à equação algébrica descrita na Seção 5.3.7, cujas raízes $(\tilde{r}, \tilde{\zeta})$ fornecem as soluções de líquido superresfriado para cada temperatura $T < T_D$ dada.

5.4 Da Fase de Vidro no Modelo Proposto

Para verificar a existência de uma fase de vidro no modelo (5.4), faz-se necessário obter uma temperatura espinodal T_D , abaixo da qual a entropia configuracional $S_c(T)$ do modelo, por sua vez obtida através da equação (5.83), seja finita. Da extrapolação de $S_c(T)$ para temperaturas mais baixas, pode-se ademais determinar a temperatura de Kauzman T_K , onde a entropia configuracional do modelo se anula (crise de entropia).

Da descrição acima, é evidente que tal análise deve partir do cálculo da matriz de polarização $\Pi_{ab}(\mathbf{q})$ do modelo, isto é, da inserção das funções $\mathcal{G}_0(q)$ e $\mathcal{F}_0(q)$ nas integrais (5.52) (ou, equivalentemente, (5.46)). As convoluções (5.66) e (5.65) resultam equivalentes a:

$$\begin{aligned}\Pi_{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \mathcal{G}_0^2(x), \\ \Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \mathcal{F}_0^2(x).\end{aligned}\quad (5.84)$$

Abaixo, desenvolve-se a obtenção dos elementos diagonal e fora da diagonal da matriz polarização $\Pi_{ab}(\mathbf{q})$.

Função de Correlação $G_0(\mathbf{x})$ no espaço direto

No espaço de momentum, a recíproca da função de correlação $\mathcal{G}_0(k)$ é dada por (equação (5.14)):

$$\mathcal{G}_0^{-1}(k) = r + J(k^2 - k_0^2)^2, \quad (5.85)$$

que é uma função polinomial em k : $\mathcal{G}_0^{-1}(k) = ak^4 + bk^2 + c = a(k^2 - \alpha^2)(k^2 - (\alpha^*)^2)$, onde: $a = J = \frac{\delta}{4k_0^2}$, $b = -2Jk_0^2$ e $c = r + Jk_0^4$, e a raiz: $\alpha^\pm = \pm k_0 \sqrt{1 + \frac{i}{k_0^2} \sqrt{\frac{r}{J}}}$.

A transformada inversa de $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned}G_0(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) &= \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \mathcal{G}_0(k) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} = \int_0^\infty \frac{dk}{(2\pi)^2} k \mathcal{G}_0(k) \int_0^{2\pi} d\theta e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\cos\theta} \\ &= \frac{1}{2\pi J} \int_0^\infty dk \frac{k J_0(k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{(k^2 + (i\alpha)^2)(k^2 + (i\alpha^*)^2)} \\ &= \frac{1}{2\pi J(\alpha^2 - (\alpha^*)^2)} \left[\int_0^\infty dk \frac{k J_0(k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{k^2 + (i\alpha)^2} - \int_0^\infty dk \frac{k J_0(k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{k^2 + (i\alpha^*)^2} \right],\end{aligned}\quad (5.86)$$

onde $J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iz \cos \theta}$ é a função de Bessel de ordem zero. No caso de pólos imaginários puros no integrando, a função de correlação correspondente no espaço direto é dada por [96]:

$$\begin{aligned} G_0(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) &= \frac{1}{2\pi J((\alpha^*)^2 - \alpha^2)} [K_0(\alpha|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) - K_0(\alpha^*|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)] \\ &= \frac{1}{2\pi J(-i4\alpha_R\alpha_I)} [K_0(\alpha|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) - K_0(\alpha^*|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)], \end{aligned} \quad (5.87)$$

onde $K_0(z)$ é a função de Hankel de ordem zero, de argumento imaginário, $K_\nu(z) = \frac{\pi i}{2} e^{i\pi\nu/2} H_\nu^{(1)}(iz)$. Pode-se tomar a continuação analítica de (5.87) para qualquer valor real de r , isto é, para α em geral complexo. Esta função possui como aproximação assintótica, para argumentos grandes:

$$K_0(z) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, \quad |z| \gg 1. \quad (5.88)$$

$G_0(x)$ tem como aproximação assintótica, para $|\mathbf{x}| \gg 1$:

$$G_0(|\mathbf{x}| \gg 1) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi} \alpha_R \alpha_I} \frac{e^{-\alpha_I |\mathbf{x}|}}{(\alpha_R^2 + \alpha_I^2)^{1/4}} \frac{\sin(\alpha_R |\mathbf{x}| - \frac{1}{2} \arg(\alpha) + \frac{\pi}{4})}{|\mathbf{x}|^{1/2}}, \quad (5.89)$$

onde α_R e α_I são, respectivamente, as partes real e imaginária de α ($\alpha_R, \alpha_I > 0$). Da expressão acima identificam-se claramente $\alpha_R = k_m$ e $\alpha_I = 1/\zeta$, o vetor de onda de modulação e a recíproca do comprimento de correlação, respectivamente. Em particular, espera-se, na fase ordenada: $\zeta > 2\pi/k_m$, ou seja, $\alpha_I \ll \alpha_R$, isto é, para que as faixas caracterizadas por um comprimento de modulação $l_m = 2\pi/q_m$ se ordenem de forma coerente, é necessário que o comprimento de correlação no sistema, ζ , seja superior a l_m . De fato, quanto maior ζ , mais estável será a fase modulada.

A dependência de α_R com a temperatura é fraca. Em primeira aproximação,

$$\alpha \approx k_0 \left(1 + i \frac{1}{2k_0^2} \sqrt{\frac{r}{J}} \right). \quad (5.90)$$

Assim, o vetor de modulação α_R em primeira aproximação é constante: $\alpha_R \simeq k_0$.

A função resposta $\mathcal{K}_0(k)$, possui a mesma forma funcional de $\mathcal{G}_0(k)$, com o intercâmbio r por ζ . Assim, correspondentemente, tem-se, para a respectiva transformada ao espaço direto:

$$K(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi J((\beta^*)^2 - \beta^2)} [K_0(\beta|\mathbf{x}|) - K_0(\beta^*|\mathbf{x}|)], \quad (5.91)$$

onde $\beta = \beta_R + i\beta_I$ é uma raiz (β^+) da equação $\mathcal{K}_0^{-1}(k) = 0$. Analogamente, $\beta^\pm = \pm k_0 \sqrt{1 + i \frac{1}{k_0^2} \sqrt{\frac{\zeta}{J}}}$.

Eventualmente, far-se-á necessário calcular o limite para $|\mathbf{x}| \rightarrow 0$ de $G_0(\mathbf{x})$. Para tal, toma-se o limite

correspondente de (5.87)²³. Resulta, para este limite: $\lim_{x \rightarrow 0} (K_0(\alpha|x|) - K_0(\alpha^*|x|)) \approx -2 \arctan(y_a)$. Este limite é importante, por exemplo, para se obter a dependência com a temperatura das soluções $(r(T), \zeta(r(T)))$ da fase de vidro, dadas pela equação algébrica descrita na Seção 5.3.7. Da equação (5.76) naquela Seção, tem-se:

$$T = (r - r_0) \frac{2\pi J k_0 \alpha_I}{(n+2) u \arctan\left(\frac{\alpha_I}{k_0}\right)} \approx \frac{(r - r_0)}{u(2 - k_0)} \frac{1}{(1 - y_a^2/3)} \approx \frac{(r - r_0)}{u(2 - k_0)}, \quad (5.92)$$

que relaciona o termo de massa renormalizado com a temperatura do sistema.

Matriz de Polarização $\Pi(\mathbf{k})$

As integrais envolvidas em Π_G e Π_F (equação (5.84)), respectivamente) são dadas por:

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{q}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} G_0^2(\mathbf{x}) = \int dr r 2\pi J_0(qr) G_0^2(r), \\ I_2(\mathbf{q}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} K^2(\mathbf{x}) = \int dr r 2\pi J_0(qr) K^2(r), \\ I_3(\mathbf{q}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} G_0(\mathbf{x}) K(\mathbf{x}) = \int dr r 2\pi J_0(qr) G_0(r)K(r), \end{aligned} \quad (5.93)$$

onde $J_0(z)$ é a função de Bessel de ordem zero, resultante da integral na variável angular, já definida anteriormente. No Apêndice B.3, apresentam-se detalhes da obtenção de $\Pi_G(\mathbf{q})$ e a respectiva expansão. A função de polarização diagonal, $\Pi_G(q)$, é dada por:

$$\Pi_G(q) = \frac{1}{\pi J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)^2} \left[\frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right)}{q \sqrt{4\alpha^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right)}{q \sqrt{4(\alpha^*)^2 + q^2}} - 2 \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{1}{2|\alpha|} \sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}\right)}{\sqrt{(\alpha + \alpha^*)^2 + q^2} \sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}} \right]. \quad (5.94)$$

Aproxima-se, para esta função:

$$\Pi_G(q) \approx \begin{cases} \frac{1}{12\pi J^2 \beta_R^6 \left(1 + \frac{q^2}{4\beta_R^2}\right)^2}, & \text{para } 0 < q < 2\beta_R; \\ \frac{1}{2\pi J^2 \beta_R q^5}, & \text{para } q > 2\beta_R, \end{cases}$$

²³Para tal, consideram-se as expansões [96]:

$$K_0(z) = -\ln\left(\frac{z}{2}\right) I_0(z) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\psi(k+1)}{(k!)^2} \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}; \quad I_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}; \quad \psi(k+1) = -C + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n},$$

onde $I_0(z)$ é a função de Bessel modificada, ψ é a função *psi* de Euler e $C \equiv -\psi(1) = 0.577\dots$ a constante de Euler. A partir das relações acima é fácil concluir para o limite $|x| \rightarrow 0$ de $G_0(x)$:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} (K_0(\alpha|x|) - K_0(\alpha^*|x|)) &= \lim_{x \rightarrow 0} 2\Im\{K_0(\alpha|x|)\} \\ &\approx \lim_{x \rightarrow 0} \left[-\ln(\alpha) + \ln(\alpha^*) + \frac{x^2}{4} (-C + 1 + \ln\left(\frac{x}{2}\right)) (\alpha^2 - (\alpha^*)^2) - \frac{x^2}{4} (\alpha^2 \ln(\alpha) - (\alpha^*)^2 \ln(\alpha^*)) \right] \\ &= \lim_{x \rightarrow 0} \left[-\ln(e^{i \arg(\alpha)}) + \ln(e^{-i \arg(\alpha)}) \right] = \arg\{-i\alpha_I + k_0\} - \arg\{i\alpha_I + k_0\} = -2 \arctan\left(\frac{\alpha_I}{k_0}\right) = -2 \arctan(y_a). \end{aligned}$$

onde se considera $\alpha_R \approx \beta_R$ (e doravante, considerar-se-ão α_R e $\beta_R \approx k_0$ sempre indistintos).

Para os elementos fora da diagonal da matriz de polarização, $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, mais uma vez, remete-se o leitor ao Apêndice B.3 para os detalhes da obtenção do comportamento dominante da função de polarização fora da diagonal, $\Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$. O primeiro termo da equação acima é $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$ (equação (5.94)). Analogamente, o segundo termo da equação acima possui a mesma forma funcional de $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$, substituindo-se o parâmetro α por β . Aproxima-se, para $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$:

$$\Pi_{\mathcal{F}}(q) \approx \frac{(y_a^2 - y_b^2)^2 \Theta(2\beta_R - q)}{10\pi J^2 \beta_R^6 \left(1 + \frac{q^2}{4\beta_R^2}\right)^6}, \quad (5.95)$$

onde $\Theta(x)$ é a distribuição de Heaviside. Definiram-se as constantes $y_a \equiv \frac{\alpha_I}{\beta_R} \approx \frac{1}{2k_0^2} \sqrt{\frac{r}{J}}$ e $y_b \equiv \frac{\beta_I}{\beta_R} \approx \frac{1}{2k_0^2} \sqrt{\frac{\zeta}{J}}$.

A região relevante é aquela em que $\frac{1}{2k_0^2} \sqrt{\frac{r}{J}} \ll 1$ e $\frac{1}{2k_0^2} \sqrt{\frac{\zeta}{J}} \ll 1$, isto é, abaixo da transição esmética. A ordem relevante, que é frustrada pela fase de vidro, é de fato a esmética, já que a equação (5.89) demonstra, na função de correlação $G_0(x)$, a existência de um parâmetro de ordem *posicional*, ligado à modulação k_0 . A análise da aproximação assintótica para a função de correlação no espaço direto, equação (5.89) (e a correspondente aproximação para a função $K(x)$), mostra que esta região corresponde a temperaturas para as quais $\alpha_I, \beta_I \ll \beta_R$, isto é, para as quais o comprimento de correlação $\zeta \sim (\alpha_I)^{-1}$ seja muito *maior* que o comprimento de modulação do sistema, $l_m \sim \beta_R^{-1}$. Tal região corresponde a temperaturas abaixo da transição esmética, caso esta ocorra, isto é, caso o sistema suporte uma ordem esmética de longo alcance termodinamicamente estável (correlações espaciais com decaimento geométrico, no lugar de exponencial). A proximidade da transição de vidro, ademais, exige que $\zeta \approx r$; em particular, da definição de λ como um comprimento característico da fase de vidro, deve-se ter $\zeta \gtrsim r$.

5.4.1 Cálculo da Auto-Energia fora da diagonal $\Sigma_{\mathcal{F}}(k_m)$

As expressões para as funções de polarização $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$ e $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$ deverão ser usadas na expansão, equação (5.45), representada pela matriz $\mathcal{D}(q) = (\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q) - \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q))\mathbb{1} + \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q)\mathbb{E}$, que então entrará no cálculo da auto-energia $\Sigma_{\mathcal{F}}(k_m = \alpha_R)$ ($\alpha_R \approx k_0$ é o vetor de onda de modulação da função de correlação $G_0(|\mathbf{x}|)$, eq. (5.89), e é aproximadamente independente de temperatura no presente caso), que é dada por

$$\Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q}) = 2 \int \frac{d^2 p}{4\pi^2} \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \mathcal{F}(\mathbf{p}). \quad (5.96)$$

A função $\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q) = [v^{-1} + \Pi_{\mathcal{G}}]^{-1}$, é dada por (equação (5.63)):

$$\mathcal{D}_{\mathcal{G}} \approx \begin{cases} \left[v^{-1} + \left(12\pi J^2 k_0^6 \left(1 + \frac{q^2}{4k_0^2} \right)^2 \right)^{-1} \right]^{-1}, & \text{para } 0 < q < 2k_0; \\ \left[v^{-1} + (2\pi J^2 k_0 q^5)^{-1} \right]^{-1}, & \text{para } q > 2k_0, \end{cases}$$

onde $v = uT$ e se substituiu $\beta_R \approx k_0$. A função fora da diagonal, $\mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q)$, é dada por (5.64):

$$\mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q) = \mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q) - \frac{1}{\mathcal{D}_{\mathcal{G}}^{-1}(q) - \Pi_{\mathcal{F}}(q)} = -\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q) \frac{\Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)}{1 - \Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)} \quad (5.97)$$

No intervalo $0 < q < 2k_0$ - que contém $q = k_0$ -, o produto $\Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)$ é dado por:

$$\Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q) = \frac{(y_a^2 - y_b^2)^2}{10\pi J^2 k_0^6 \left(1 + \frac{q^2}{4k_0^2}\right)^6} \left[v^{-1} + \frac{1}{12\pi J^2 k_0^6 \left(1 + \frac{q^2}{4k_0^2}\right)^2} \right]^{-1} \approx \frac{6(y_a^2 - y_b^2)^2}{5(1+\omega)} \frac{1}{\left[1 + \left(2 + \frac{\omega}{1+\omega}\right) \frac{q^2}{2k_0^2}\right]}, \quad (5.98)$$

lembrando-se que $y_a = \frac{1}{2k_0} \sqrt{\frac{r}{J}} = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{(2-k_0)r}{2}}$ e $y_b = \frac{1}{k_0} \sqrt{\frac{(2-k_0)\zeta}{2}}$, e onde se definiu $\omega \equiv 12\pi J^2 k_0^6 v^{-1}$. Da equação (5.95) é evidente que $\Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q) = 0$, para $q = |\mathbf{q}| > 2k_0$. A expressão para $\frac{\Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)}{1 - \Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)}$, correspondentemente, é dada por:

$$\frac{\Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)}{1 - \Pi_{\mathcal{F}}(q)\mathcal{D}_{\mathcal{G}}(q)} \approx \frac{\frac{6(y_a^2 - y_b^2)^2}{5(1+\omega)} \left[1 + \left(2 + \frac{\omega}{1+\omega}\right) \frac{q^2}{2k_0^2}\right]^{-1}}{\left[1 - \frac{6(y_a^2 - y_b^2)^2}{5(1+\omega)} \left[1 + \left(2 + \frac{\omega}{1+\omega}\right) \frac{q^2}{2k_0^2}\right]^{-1}\right]} \approx \frac{\frac{6(y_a^2 - y_b^2)^2}{5(1+\omega)}}{\left[1 - \frac{6(y_a^2 - y_b^2)^2}{5(1+\omega)}\right]} \frac{1}{\left[1 + \left(2 + \frac{\omega}{1+\omega}\right) \frac{q^2}{2k_0^2}\right]}. \quad (5.99)$$

Vem em tempo uma análise das constantes que parametrizam o modelo. Na definição das constantes do Hamiltoniano, observou-se que $k_0 = 2 - \frac{2}{\delta}$, $J = \frac{\delta}{4k_0^3}$. A constante δ , por sua vez, está relacionada à razão entre a constante de interação dipolar e a constante de interação de troca, $\gamma \in (0; 1)$, através de $\delta = \frac{\gamma}{4} + 1$. O intervalo de definição de k_0 é $(0; 4)$. Destes dados, resulta para ω uma função monotônica crescente com k_0 :

$$\omega = \frac{3\pi k_0^2}{v(2 - k_0)^2} \rightarrow \begin{cases} \frac{3\pi}{16v}, & \text{quando } k_0 \rightarrow 0.4, \\ 0, & \text{quando } k_0 \rightarrow 0. \end{cases}$$

A função $\mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q)$, (5.97), é então aproximada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q) &\approx -\frac{\mathcal{C}(y_a, y_b, \omega)}{(1 - \mathcal{C}(y_a, y_b, \omega))} \frac{1}{\left[1 + \left(2 + \frac{\omega}{1+\omega}\right) \frac{q^2}{2k_0^2}\right]} \frac{v}{\left[1 + \frac{1}{\omega \left(1 + \frac{q^2}{4k_0^2}\right)^2}\right]} \approx \\ &\approx -\frac{\mathcal{C}(y_a, y_b, \omega)}{(1 + \omega)(1 - \mathcal{C}(y_a, y_b, \omega))} \frac{v\omega}{\left[1 + \left(1 + \frac{2\omega}{1+\omega}\right) \frac{q^2}{2k_0^2}\right]}, \end{aligned} \quad (5.100)$$

onde se definiu $\mathcal{C}(y_a, y_b, \omega) \equiv \frac{6(y_a^2 - y_b^2)^2}{5(1+\omega)}$.

Finalmente, a auto-energia $\Sigma_{\mathcal{F}}$ será calculada através da convolução (5.96). Como descrito anteriormente, a informação sobre a fase de vidro no sistema deve estar contida na auto-energia $\Sigma_{\mathcal{F}}(|\mathbf{q}| = k_0)$, calculada em

$|\mathbf{q}| = k_0$ onde k_0 aproxima muito bem o vetor de modulação q_m do sistema. Resulta, para $\Sigma_{\mathcal{F}}(|\mathbf{q}| = k_0)$:

$$\Sigma_{\mathcal{F}}(|\mathbf{q}| = k_0) = - \int \frac{d^2 p}{2\pi^2} \frac{\mathcal{C}(y_a, y_b, \omega)}{(1 + \omega)(1 - \mathcal{C}(y_a, y_b, \omega))} \frac{v \omega}{\left[1 + \left(1 + \frac{2\omega}{1+\omega}\right) \frac{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{p}|^2}{2k_0^2}\right]} \left[\frac{1}{r + J(p^2 - k_0^2)^2} - \frac{1}{\zeta + J(p^2 - k_0^2)^2} \right].$$

É possível trabalhar a integral acima, simplificando seu integrando através de frações parciais, por exemplo. Ainda assim, as integrais resultantes não podem ser tratadas analiticamente. A exemplo de [19], recorre-se então a uma aproximação da integral acima. Por inspeção do comportamento das funções que entram no integrando de (5.96), constata-se que a dependência de $\mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q)$ no momentum é muito mais fraca que a de $\mathcal{F}(q)$. A primeira função é monotônica crescente em q , enquanto $\mathcal{F}(q)$ possui um pico acentuado em torno de $q \approx k_0$. A amplitude relativa de $\mathcal{D}_{\mathcal{F}}(q)$ é várias ordens de grandeza menor que a amplitude relativa de $\mathcal{F}(q)$ em seus respectivos domínios, para os mesmos valores de parâmetros. Já que $\mathcal{F} = \mathcal{G} - \mathcal{K}$ depende apenas do módulo do momentum, a simplificação consistirá em considerar-se a fatoração:

$$\Sigma_{\mathcal{F}}(|\mathbf{q}| = k_0) \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\int_0^{2\pi} d\theta \mathcal{D}_{\mathcal{F}} \left(\sqrt{2k_0^2(1 + \cos[\theta])} \right) \right) \left(\int_0^{2k_0} dp p \mathcal{F}_0(p) \right). \quad (5.101)$$

Sem perda de generalidade, alinhou-se na integral acima a direção p_x com \mathbf{k}_0 , de modo que vale: $|\mathbf{k}_0 + \mathbf{p}| = \sqrt{(k_0 + p \cos \theta)^2 + p^2 \sin^2 \theta} = k_0 \sqrt{2 + 2 \cos \theta}$, usando-se que $|\mathbf{p}| = k_0$ no argumento de $\mathcal{D}_{\mathcal{F}}$ na integral angular. Na integral no módulo de momentum, acima, assumiu-se que $2k_0 < \Lambda$ (sendo Λ o *cutoff* nos momenta).

Denota-se a integral angular por I_{θ} :

$$I_{\theta} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \mathcal{D}_{\mathcal{F}} \left(\sqrt{2k_0^2(1 + \cos[\theta])} \right) = - \frac{\mathcal{C}(y_a, y_b, \omega)}{(1 - \mathcal{C}(y_a, y_b, \omega))} \frac{v \omega}{\pi \sqrt{1 + \omega} \sqrt{3 + 7\omega}}. \quad (5.102)$$

A integral no módulo do momentum, que é denotada I_p , será dada por:

$$I_p(\mathcal{F}) = I_p(\mathcal{G}(r)) - I_p(\mathcal{K}(\zeta)) \equiv \int_0^{2k_0} dp p [\mathcal{G}_0(p) - \mathcal{K}(p)] = \frac{1}{2} \int_{-k_0^2}^{3k_0^2} dz \left[\frac{1}{r + Jz^2} - \frac{1}{\zeta + Jz^2} \right], \quad (5.103)$$

cujo resultado, por sua vez, é

$$I_p(\mathcal{G}(r)) = \frac{1}{2} \left[\frac{\arctan \left(\sqrt{\frac{I}{r} z} \right)}{\sqrt{Jr}} \right]_{-k_0^2}^{3k_0^2} \approx \frac{(2 - k_0)}{2y_a} \left[\pi - \arctan \left(\frac{8y_a}{3} \right) \right]. \quad (5.104)$$

Expandindo a expressão (5.104), obtém-se para a auto-energia fora da diagonal:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathcal{F}}(q = k_0) &\approx -\frac{\mathcal{C}(y_a, y_b, \omega)}{(1 - \mathcal{C}(y_a, y_b, \omega))} \frac{v \omega}{\pi \sqrt{3 + 10\omega + 7\omega^2}} \times \\ &\times \left[\frac{(2 - k_0)}{2y_a} \left(\pi - \frac{8y_a}{3} + \frac{512y_a^3}{81} \right) - \frac{(2 - k_0)}{2y_b} \left(\pi - \frac{8y_b}{3} + \frac{512y_b^3}{81} \right) \right]. \\ \Sigma_{\mathcal{F}}(q = k_0) &\approx -\frac{9\pi k_0^2}{5(2 - k_0)(1 + \omega)\sqrt{3 + 10\omega + 7\omega^2}} \frac{(y_b - y_a)}{y_a y_b} \frac{(y_a^2 - y_b^2)^2}{\left(1 - \frac{6}{5(1 + \omega)}(y_a^2 - y_b^2)^2\right)}. \end{aligned} \quad (5.105)$$

O resultado acima deve ser coerente com o *ansatz* proposto para $\mathcal{F}_0(q)$, que leva à equação (5.72). De fato, a equação (5.72) fornece a ordem de grandeza esperada de $\Sigma_{\mathcal{F}}(q)$, que, sendo consistente com a ordem de grandeza do resultado (5.105), assinala a possibilidade de uma fase de vidro no sistema. Desta relação, obtém-se uma equação algébrica que relaciona r e ζ :

$$-\frac{2k_0^2}{(2 - k_0)} (y_b - y_a) (y_b + y_a) = -\frac{9\pi k_0^2}{5(2 - k_0)(1 + \omega)\sqrt{3 + 10\omega + 7\omega^2}} \frac{(y_b - y_a)}{y_a y_b} \frac{(y_a^2 - y_b^2)^2}{\left(1 - \frac{6}{5(1 + \omega)}(y_a^2 - y_b^2)^2\right)}. \quad (5.106)$$

Observe-se que a solução de líquido superresfriado ($y_a = y_b$, ou, equivalentemente, $r = \zeta$) está sempre presente. Fatorando esta solução, obtém-se a equação:

$$1 = \frac{z}{\theta \tau} \frac{(\tau^2 - \theta^2)(\tau - \theta)}{[1 - (\tau^2 - \theta^2)^2]}. \quad (5.107)$$

onde se definiram as variáveis auxiliares: $\theta \equiv \left(\frac{6}{5}\right)^{1/4} \frac{y_a}{(1 + \omega)^{1/4}}$, $\tau \equiv \left(\frac{6}{5}\right)^{1/4} \frac{y_b}{(1 + \omega)^{1/4}}$; e o parâmetro: $z \equiv \frac{9\pi}{2 \cdot 6^{1/4} 5^{3/4}} \frac{1}{(1 + \omega)^{3/4} \sqrt{3 + 10\omega + 7\omega^2}}$. O parâmetro z é função dos parâmetros k_0 e v do sistema. Como k_0 é independente de temperatura, z dependerá de T apenas através de $v = uT$.

Definindo-se as novas variáveis: $\Phi \equiv \tau - \theta$ e $\Psi \equiv \tau + \theta$, as variáveis na equação (5.107) são separáveis:

$$\frac{1}{\Phi^2} + \Phi^2 = \frac{4z}{\Psi} + \frac{1}{\Psi^2} + \Psi^2 \equiv f(\Psi, z), \quad (5.108)$$

cujas soluções não negativas²⁴ podem ser dadas por $\bar{\Phi}^{\pm}(\Psi, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{f(\Psi, z) \pm \sqrt{f^2(\Psi, z) - 4}} > 0$, que são sempre reais para $\Psi, z > 0$. De fato, para z não negativo, está claro que o ínfimo de $f(\Psi, z)$ ocorre em $z = 0$. Os mínimos de $f(\Psi, 0) = \frac{1 + \Psi^4}{\Psi^2}$ estão em $\Psi_m = \{1, -1, i, -i\}$; para $0 < \Psi \lesssim \frac{2\left(\frac{6}{5}\right)^{1/4}}{(1 + \omega(z \rightarrow 0))^{1/4}}$, $f(\Psi, 0)$ possui um mínimo local em $\Psi_m = 1$, tal que $f(\Psi_m = 1, 0) = 2$. $\bar{\Phi}^{\pm}(\Psi, z)$, no intervalo relevante, são reais.

Das definições de $\Phi(\theta, \tau)$ e $\Psi(\theta, \tau)$, deve-se ter, sempre, $\Phi(\theta, \tau) < \Psi(\theta, \tau)$. Deve-se impor, portanto,

²⁴Da definição do comprimento de Lindemann λ , equação (5.74), fica claro que só são válidas soluções $\tau > \theta$, de maneira que λ seja real.

sobre $\bar{\Phi}^\pm(\Psi, z)$, a seguinte condição:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{4z}{\Psi} + \frac{1}{\Psi^2} + \Psi^2 \pm \sqrt{\left(\frac{4z}{\Psi} + \frac{1}{\Psi^2} + \Psi^2\right)^2 - 4}} < \Psi \\ \therefore \quad \bar{\Gamma}^\pm & \equiv \frac{4z}{\Psi} + \frac{1}{\Psi^2} - \Psi^2 \pm \sqrt{\left(\frac{4z}{\Psi} + \frac{1}{\Psi^2} + \Psi^2\right)^2 - 4} < 0. \end{aligned} \quad (5.109)$$

$z(k_0, v)$ é uma função decrescente de k_0 , e uma função crescente da “temperatura“ v (é também, portanto uma medida da ”temperatura“). A função $\bar{\Gamma}^+(\Psi, z)$ é uma função crescente da temperatura, e portanto de z :

$$\begin{aligned} \sup \bar{\Gamma}^+(\Psi, z) &= \bar{\Gamma}^+(\Psi, \sup\{z\}) = \bar{\Gamma}^+\left(\Psi, \lim_{k_0 \rightarrow 0, v \rightarrow \infty} z(k_0, v)\right) \approx \bar{\Gamma}^+(\Psi, 3), \\ \inf \bar{\Gamma}^+(\Psi, z) &= \bar{\Gamma}^+(\Psi, \inf\{z\}) \approx \bar{\Gamma}^+(\Psi, 0). \end{aligned} \quad (5.110)$$

onde se usou que $z(k_0 \rightarrow 0, v \rightarrow \infty) = 3\pi \left(\frac{3}{250}\right)^{1/4} \approx 3$. Por outro lado, a função $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z)$ é decrescente com a temperatura, e portanto, com z .

$$\begin{aligned} \sup \bar{\Gamma}^-(\Psi, z) &= \bar{\Gamma}^-(\Psi, \inf\{z\}) \approx \bar{\Gamma}^-(\Psi, 0), \\ \inf \bar{\Gamma}^-(\Psi, z) &= \bar{\Gamma}^-(\Psi, \sup\{z\}) = \bar{\Gamma}^-\left(\Psi, \lim_{k_0 \rightarrow 0, v \rightarrow \infty} z(k_0, v)\right) \approx \bar{\Gamma}^-(\Psi, 3). \end{aligned} \quad (5.111)$$

Voltando à inequação (5.109), constata-se para $\bar{\Gamma}^+(\Psi, z)$ o seguinte:

$$\bar{\Gamma}^+(\Psi, z) \geq \bar{\Gamma}^+(\Psi, 0) = \frac{1}{\Psi^2} - \Psi^2 + \left| \frac{1}{\Psi^2} - \Psi^2 \right| \geq 0, \quad (5.112)$$

sobre todo o suporte de $\bar{\Gamma}^+(\Psi, z)$. A função $\bar{\Phi}^+(\Psi, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{f(\Psi, z) + \sqrt{f^2(\Psi, z) - 4}}$ não corresponde a uma solução física para $\bar{\Phi}(y_a, y_b)$, já que $\bar{\Phi}^+(\Psi, z) > \Psi$ a qualquer temperatura, isto é, $y_a < 0$.

Aplicando a inequação (5.109) à função $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z)$, constata-se o seguinte:

$$\bar{\Gamma}^-(\Psi, z) \leq \bar{\Gamma}^-(\Psi, 0) = \frac{1}{\Psi^2} - \Psi^2 - \left| \frac{1}{\Psi^2} - \Psi^2 \right| \leq 0, \quad (5.113)$$

também sobre todo o suporte de $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z)$. A inequação (5.109) é obedecida por $\bar{\Gamma}^-(\Psi, 0)$, e portanto, também por $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z)$, $z > 0$. Espera-se, assim, que $\bar{\Phi}^-(\Psi, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{f(\Psi, z) - \sqrt{f^2(\Psi, z) - 4}}$ possa corresponder a uma solução física viável para a fase de vidro. A solução $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z)$ é uma função decrescente de z , isto é, $\bar{\Phi}^-(\Psi, z)$ é uma função decrescente para temperaturas crescentes. Acima da temperatura espinodal T_D , tem-se $y_a = y_b$, e portanto $\bar{\Phi} = 0$. Espera-se que a diferença $\bar{\Phi} = \tau - \theta \propto y_b - y_a$ varie de um valor positivo finito, próximo de zero, a temperaturas $T \lesssim T_D$, para valores gradualmente maiores ($y_b - y_a$ ainda é pequeno, se comparado com k_0) para temperaturas decrescentes. Abaixo de T_D , quanto menor a temperatura, menor, espera-se, será a mobilidade dos defeitos, e conseqüentemente menor será λ , que é inversamente proporcional a $\sqrt{y_b - y_a} \propto \sqrt{\zeta - r}$.

Embora o comportamento de $\bar{\Phi}^-(\Psi, z)$ seja consistente com o esperado para uma solução para o par (r, ζ) na fase de vidro, também se encontra neste caso que a condição $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z) < 0$ vale para qualquer temperatura, e que, quanto *maior* a temperatura, mais negativa é $\bar{\Gamma}^-(\Psi, z)$, donde se interpreta que para temperaturas *maiores*, a solução de vidro metaestável é *mais estável*. Este resultado sugere que $T_D \rightarrow \infty$, e que, portanto a fase de vidro existe como “estado” metaestável para qualquer temperatura. Claramente, as soluções fornecidas pela equação algébrica (5.108) são espúrias do ponto de vista físico.

Tal resultado sugere a *inexistência* de uma transição dinâmica entre um regime de dinâmica líquida regular e um regime dinâmico lento, superresfriado. O modelo efetivo estudado para um filme ferromagnético dipolar não apresenta fase de vidro. Esta conclusão poderia ser antecipada do comportamento encontrado para a função de polarização fora da diagonal, $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, em que as primeiras contribuições da respectiva expansão se anulam. A contribuição finita encontrada para $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$ corresponde a um termo de mais alta ordem na expansão, portanto, de menor relevância, e é claro, não é uma estimativa tão confiável comparada à margem de erro da aproximação.

Comparação com o Gás de Coulomb Frustrado

A fim de esclarecer a interpretação dos resultados obtidos no modelo efetivo de filme ferromagnético dipolar, apresentam-se a seguir resultados correspondentes obtidos para o gás de Coulomb frustrado [19].

No caso do gás de Coulomb frustrado, a auto-energia fora da diagonal $\Sigma_{\mathcal{F}}(q = q_m)$ é dada por:

$$\Sigma_{\mathcal{F}}(q = q_m) = -\frac{8q_m^2\varepsilon}{\pi} \frac{\left(1 - \frac{\varepsilon}{\kappa}\right)^3}{\left[1 - \left(1 - \frac{\varepsilon}{\kappa}\right)^2\right]}, \quad (5.114)$$

onde q_m é o vetor de modulação do modelo, $\varepsilon = \frac{2}{q_m\zeta}$ é inversamente proporcional ao comprimento de correlação ζ e é a variável correspondente a r (ou α_I) no modelo estudado neste capítulo, e κ é a variável no gás de Coulomb frustrado que corresponde a ζ (ou β_I) no modelo dipolar 2d. Ao se comparar (5.114) ao *ansatz* correspondente, obtém-se a seguinte equação algébrica para ε e κ :

$$-\frac{8q_m^2\varepsilon}{\pi} \frac{\left(1 - \frac{\varepsilon}{\kappa}\right)^3}{\left[1 - \left(1 - \frac{\varepsilon}{\kappa}\right)^2\right]} = -(\kappa^2 - \varepsilon^2)q_m^2. \quad (5.115)$$

Buscam-se soluções para $x \equiv \frac{\varepsilon}{\kappa}$ que sejam menores que 1. Do contrário $\lambda^{-1} = \frac{\sqrt{\kappa^2 - \varepsilon^2}q_m}{2}$ se torna imaginário. Para um valor fixo de $8/(\pi\varepsilon)$, a figura (5.4.1) esquematiza o comportamento dos lados esquerdo e direito da equação algébrica:

$$f(x, \varepsilon) \equiv x \left[\frac{8}{\pi\varepsilon}(1-x)^2 - (1-x) \right] = 2, \quad (5.116)$$

onde se fatorou a solução de líquido superresfriado ($x_{liq} = 1$).

A fase líquida corresponde à ausência de soluções reais $x < 1$, para ε fixo, existindo somente a solução

$x_{liq} = 1$: o máximo local da expressão do lado esquerdo da equação (5.116) está abaixo da linha $f(x, \varepsilon) = 2$. Note-se que pela definição do comprimento de Lindemann acima, esta solução corresponde a defeitos não localizados no sistema, no sentido de que o caminho quadrático médio percorrido pelos defeitos diverge. O sistema pode ser caracterizado como líquido superresfriado quando soluções reais diferentes de x_{liq} , ainda que metaestáveis, passam a existir. A condição para que existam estas soluções (instáveis) "de vidro" (desordenadas) será o surgimento de raízes \bar{x} reais e menores que 1. No contexto da aproximação SCSA, a temperatura abaixo da qual surgem estas soluções metaestáveis é a temperatura de transição dinâmica T_D (análoga à temperatura de *Mode Coupling*, em que diverge o tempo de relaxação do sistema em campo médio), descrita no Capítulo 4. A condição crítica é portanto aquela em que a *menor* raiz da derivada implícita da equação (5.116) - o máximo da expressão do lado esquerdo de (5.116) - coincide com a (parte real da) menor raiz da mesma. Este é o ponto em que as raízes \bar{x} se tornam reais.

A menor raiz da derivada $\frac{\partial f(x, \varepsilon)}{\partial x} = \frac{1}{\pi\varepsilon/8}(1-x)^2 - \left(\frac{2x}{\pi\varepsilon/8} + 1\right)(1-x) + 1$ define uma função $\bar{x}(\varepsilon)$, que deve ser reinserida no lado esquerdo da equação (5.116), resultando em uma equação

$$f(\bar{x}(\varepsilon), \varepsilon) = 2 \quad (5.117)$$

para ε . A solução de (5.117), $(\bar{x}(\bar{\varepsilon}), \bar{\varepsilon})$, fornece a condição para a transição dinâmica. Em números: $\bar{\varepsilon}^{-1} \approx 15$, $\bar{x}(\bar{\varepsilon}) \approx 0.35$. Estas soluções correspondem a uma temperatura, a temperatura T_D da transição dinâmica, abaixo da qual o líquido é superresfriado. Esta temperatura é determinada pela equação de auto-consistência de Hartree do modelo.

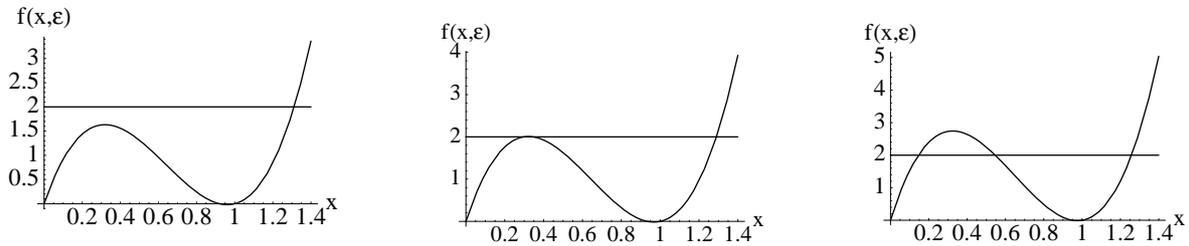


Figura 5.5: Representação dos dois membros da equação (5.116). O painel à esquerda corresponde a $T > T_D$: apenas a solução de líquido está presente. O painel central corresponde exatamente a $T = T_D$, quando as soluções $x = \varepsilon/\kappa < 1$ reais surgem. O painel à direita corresponde a $T < T_D$: a solução de vidro é a menor solução x representada.

A equação (5.116) define os pares de soluções (ε, κ) metaestáveis. Das duas soluções $\bar{x} < 1$ ilustradas na figura (5.4.1), a menor delas corresponde ao menor λ . Por ser a mais restritiva quanto à mobilidade de defeitos, esta é a solução de vidro buscada. Ademais, para ε decrescente, a temperatura também é decrescente. Espera-se que λ igualmente decresça para T decrescente, e este é o comportamento da menor das soluções, e apenas desta.

Voltando à condição para o surgimento da solução de vidro como estado metaestável, a temperatura espinal T_D pode ser obtida substituindo-se $\bar{\varepsilon}^{-1} = 15$ na equação de auto-consistência de Hartree do gás de Coulomb frustrado, que relaciona o termo de massa ε e a temperatura T [19]. Como o comprimento de correlação ζ é determinado pelo vetor de modulação q_m e por ε , é possível obter uma condição para a razão ζ/l_m , acima da qual o estado de vidro pode existir: $\frac{\zeta}{l_m} \gtrsim 2$. O valor de \bar{x} à temperatura T_D também permite determinar a razão $\frac{\lambda}{l_m}$

abaixo da qual o estado de vidro pode existir: $\frac{\lambda}{l_m} \lesssim \frac{2}{3}$. Um aspecto interessante deste resultado é que, ainda que os defeitos possuam alguma mobilidade, um estado metaestável de vidro²⁵ pode ocorrer, desde que esta mobilidade não supere uma fração do comprimento de modulação das faixas no sistema.

²⁵De tempo de vida finito, mas que supera o tempo de observação acessível ou considerado.

Discussão, Conclusões e Perspectivas

Na Parte II desta tese, estudou-se a ocorrência de uma fase desordenada, de vidro, a baixas temperaturas em um modelo bidimensional frustrado por interações competitivas em escalas de distância distintas. Este modelo bidimensional fornece uma descrição aproximada de filmes finos ferromagnéticos com interações dipolares: o Hamiltoniano apresenta uma interação de troca (ferromagnética) de curto alcance, frustrada por uma interação mais fraca, de longo alcance, que tende a anti-alinhar os spins. Além da importância teórica na caracterização de modelos desta natureza, o grande número de aplicações físicas e tecnológicas de tais sistemas motiva seu estudo [18, 19, 21, 23–26, 127–158, 158, 159, 184].

Westfahl, Schmalian e Wolynes (WSW) introduziram um método para a obtenção da entropia configuracional $S_c(T)$ de sistemas como o estudado nesta tese, caracterizados por interações competitivas e que não possuem desordem congelada, modificando o peso estatístico de Boltzmann por um peso estatístico proposto por Monasson [169] na função de partição do modelo frustrado, e fazendo uso de uma expansão auto-consistente de campo blindado (SCSA), originalmente proposta por Bray [27], para a matriz de correlação no espaço de réplicas [18, 19, 184]. Mais importante, os autores WSW conseguiram identificar um comprimento dinâmico λ (Seção 5.3.7) que diverge acima da temperatura da transição dinâmica, T_D . Segue, da identificação deste comprimento dinâmico, a interpretação para o mecanismo de formação de vidro em sistemas frustrados por interações competindo em diferentes escalas de distância: que a mobilidade dos defeitos ao padrão lamelar seja suficientemente baixa. A solução metaestável de vidro pode ocorrer mesmo que os defeitos tenham mobilidade finita.

A investigação da existência de vidro no modelo estudado nesta tese está calcada na ocorrência ou não de uma contribuição finita à entropia configuracional $S_c(T)$ em algum intervalo de temperatura. O cálculo de $S_c(T)$ é baseado em um método aplicado a sistemas sem desordem congelada. As réplicas foram introduzidas integrando-se sobre um campo que quebra explicitamente a simetria, selecionando os estados metaestáveis desordenados [169]. A entropia configuracional como função da temperatura e parâmetros do modelo pode ser obtida a partir da expansão para a energia livre dentro da aproximação auto-consistente de campo blindado (*self-consistent screening approximation*, SCSA). A fase de *stripe-glass*, quando ocorre, está ligada à mobilidade dos defeitos no sistema, e é caracterizada pela ocorrência de uma correlação a dois tempos finita no limite assintótico $t - t' \rightarrow \infty$, abaixo da transição para o regime de dinâmica lenta, cenário que está ilustrado pela Figura 5.4. O esquema de réplicas aplicado a modelos sem desordem congelada permite obter, no contexto de um formalismo estático, infor-

mações sobre a dinâmica do sistema, pois a correlação dinâmica no limite assintótico é dada pelos elementos *fora* da diagonal da matriz de correlação no espaço de réplicas, isto é, pela correlação entre réplicas distintas.

No modelo estudado, constatou-se a ausência da fase de vidro a qualquer temperatura finita. No cálculo da função de polarização fora da diagonal, $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, realiza-se uma expansão desta função em potências da diferença $(\zeta - r) \ll k_0^2$, que é finita somente na fase de vidro, e encontra-se que as primeiras contribuições a $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$ são nulas. Ademais, não ocorrem soluções $(r(T), \zeta[r(T)])$ fisicamente aceitáveis com $\zeta(r) \neq r$ para qualquer temperatura. De fato, a entropia configuracional $S_c(T)$ do modelo bidimensional supracitado, como função da temperatura, sempre é nula, o que indica que a topologia da superfície de energia livre no espaço de fases do sistema *não* induz um regime de dinâmica lenta [185].

Muitas questões ainda permanecem em aberto, com relação a uma teoria geral para sistemas com interações competitivas, em particular com relação às condições determinantes da ocorrência de transições isotrópico-esméticas, isotrópico-nemáticas, nemático-esméticas em diferentes modelos, e com relação à natureza destas transições em sistemas realísticos, para além de aproximações de campo médio. Não obstante, é possível propor uma explicação para as evidências contrárias à ocorrência de vidro no sistema bidimensional (5.4) com base nos resultados já conhecidos para sistemas similares.

Da competição entre interações “atractiva” e “repulsiva”, dominantes em escalas de distância distintas, resulta que o mínimo do funcional de energia livre de Ginzburg-Landau é deslocado para um valor finito, k_0 , no espaço de momentum. Se ordem de longo alcance emergir no sistema, o estado ordenado tenderá a se organizar em torno do modo dominante, k_0 . Da frustração da ordem uniforme ferromagnética resultam fases moduladas, caracterizadas por estruturas espaciais mesoscópicas, como fases de faixas, hexáticas, etc. Ademais, enquanto em um ferromagneto (um antiferromagneto) os modos de baixa energia se concentram em torno de um ponto $k = 0$ (ou em torno de qualquer ponto de um conjunto de pontos isolados) no espaço de momentum, que possuem média nula no espaço recíproco, em um sistema com interações competitivas os modos de baixa energia distribuem-se em torno da esfera $(d - 1)$ -dimensional de raio k_0 (que é a variedade invariante do Hamiltoniano), e fase condensada pode “escolher” qualquer um dentre os infinitos modos \mathbf{q} sobre a esfera, tais que $|\mathbf{q}| = k_0$ [133]. Neste último caso, o volume no espaço de momentum representado pelas flutuações em torno dos modos de baixa energia é substancialmente maior, inibindo a emergência de ordem posicional de longo alcance a temperatura finita em dimensões $d \lesssim 3$. A temperaturas suficientemente baixas, *mono-domínios* com padrões modulados podem ocorrer no sistema bidimensional, porém, dado que o comprimento de correlação do sistema é sempre finito, estes mono-domínios serão pequenos, tipicamente muito menores que o tamanho do sistema, e não terão estabilidade diante das flutuações térmicas. Neste contexto, a mobilidade de defeitos à pseudo-ordem modulada dentro de um mono-domínio é necessariamente alta, já que as faixas não são estáveis.

É importante destacar que na literatura sobre sistemas com interações competitivas, ocorrem resultados contraditórios. Em [134], por exemplo, estuda-se um Hamiltoniano análogo a (5.4) em dimensão d , em torno da transição de fase de primeira ordem induzida por flutuações, através de um *coarse-graining* dos modos fora de uma

vizinhança de q_0 . A análise da barreira de energia livre entre as fases estável isotrópica (esmética) e metaestável esmética (isotrópica), acima (abaixo) do ponto de coexistência de fases, sugere que a dimensão crítica inferior seja $d = 2$. Em contrapartida, definindo-se um Hamiltoniano efetivo de excitações correspondendo a deslocamentos $u(x)$ transversais às faixas na fase lamelar de um modelo com interações competitivas como (5.4), pode-se verificar como escalam as flutuações transversais às faixas com o tamanho do sistema [133, 138] (e referências citadas neste trabalho). Resulta que em dimensão $d = 2$ a correlação entre flutuações transversais às faixas em pontos x e x' cresce linearmente com o tamanho do sistema, e que portanto as flutuações divergem *linearmente* no limite termodinâmico, destruindo a ordem de longo alcance. Em dimensão $d = 3$, tal correlação cresce *logaritmicamente* com o tamanho do sistema, o que caracteriza uma ordem de “pseudo longo alcance”, e $d = 3$ como a dimensão crítica inferior. Em [133], argumenta-se que, sendo $d = 3$ a dimensão crítica inferior de um modelo do tipo Brazovskii, e não existindo portanto ordem de longo alcance real em $d = 2$, pode-se entretanto obter resultados significativos acerca da fase ordenada modulada em um sistema *finito* (com dimensão linear suficientemente pequeno).

Conclui-se finalmente que da solução tipo Brazovskii para modelos similares ao estudado nesta tese [133], $d = 2$ está *abaixo* da dimensão crítica inferior da transição para a fase esmética dentro da aproximação de Hartree. A fase esmética, com ordem posicional e orientacional de longo alcance, é caracterizada pela estabilização de fases moduladas por estruturas mesoscópicas no sistema. Como a dimensão crítica inferior é $d = 3$, o modelo bidimensional possui fase isotrópica até $T = 0$: as flutuações transversais às estruturas moduladas (perpendiculares à variedade invariante do Hamiltoniano no espaço de configurações) destróem a transição esmética em $d = 2$. Espera-se, portanto, que a dinâmica do modelo bidimensional seja rápida mesmo a temperaturas baixas, o que inibe igualmente a emergência de uma grande multiplicidade de defeitos à fase modulada (dentro de cada domínio finito formado no sistema a temperaturas suficientemente baixas), com baixa mobilidade, ou “congelados”. No âmbito deste argumento, a ausência da fase de vidro no modelo (5.4) estudado é explicada.

Vale salientar que o cálculo da função de correlação conectada $\mathcal{G}(q)$ e das funções correlatas, na Seção 5.4, é realizado com relação à fase isotrópica, em que $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = 0$. Uma maneira de contornar o problema da ausência da fase esmética no modelo bidimensional é impor que a média local do momento de dipolo *coarse-grained* seja dada por uma função modulada, como: $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = M \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})$, sendo \mathbf{k}_0 um vetor fixo no plano. Desta forma, a função de correlação conectada por exemplo seria calculada em torno da fase esmética: $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}') \rangle - M^2 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}')$. Caso, neste contexto, ocorra uma contribuição finita a $\Sigma_{\mathcal{F}}(q)$ em um intervalo de temperaturas, isto é, caso ocorra uma fase de vidro no sistema, mostrar-se-á que a ausência do vidro no contexto estudado nesta tese - com as correlações calculadas em torno da fase isotrópica - se deve à ausência de ordem esmética de longo alcance em $d = 2$.

A inconsistência - do ponto de vista físico - da solução $\bar{\Phi}^-(\Psi, z)$ pode, por outro lado, sugerir que a estrutura com simetria de réplicas proposta *a priori* para a correlação $\mathcal{G}_{ab}(q)$ não seja estável. Em [22], investiga-se a fase de *stripe-glass* no modelo de Brazovskii, aplicando o método de Westfahl, Schmalian e Wolynes através da solução por DMFT (como descrito na Introdução). A análise da estabilidade da solução de vidro encontrada com

a suposição de simetria de réplicas revela que tal estrutura matricial no espaço de réplicas é marginalmente estável à temperatura espinodal T_D , em que o vidro passa a existir, e se torna *instável* abaixo de T_D no limite do número de réplicas $\lim_{m \rightarrow 1}$. Abaixo de T_D , a estabilidade da solução com simetria de réplicas só é recuperada ao se tomar o número de réplicas $m = \frac{T}{T_{ef}}$, onde T_{ef} é a temperatura efetiva do vidro²⁶ [20].

Apesar da ausência da fase de vidro no modelo (5.4) aqui estudado, evidências experimentais apontam para a existência de uma fase vítrea em filmes finos ferromagnéticos com interação dipolar [25,26]. Supõe-se, portanto, que a fase vítrea ocorra para o Hamiltoniano microscópico que inclui as interações de troca e a dipolar²⁷, mesmo em $d = 2$. Entretanto, o modelo efetivo contínuo considerado na Parte II desta tese não foi capaz de modelar tal comportamento. Em particular, este modelo bidimensional não apresenta transição isotrópica-esmética, que é possivelmente a razão para a ausência da transição para o vidro. Alguns argumentos mais recentes [154] sugerem que a forma específica da interação dipolar em $d = 2$ seja importante para o comportamento do modelo a baixas temperaturas.

Neste contexto, um passo válido a partir do resultado obtido será modificar o Hamiltoniano (5.4) de forma a incluir-lhe um termo adicional que quebrará espontaneamente a simetria orientacional nemática para temperaturas suficientemente baixas [155, 156]:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}[\phi] &= \mathcal{H}_0[\phi] + \mathcal{H}_{int}[\phi] \\ \mathcal{H}_0[\phi] &= \int_{\Lambda} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \phi(\mathbf{k}) \left[r_0 + \frac{1}{m} (k - k_0)^2 \right] \phi(-\mathbf{k}) \\ \mathcal{H}_{int}[\phi] &= \int_{\Lambda} \frac{d^2k_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2k_2}{(2\pi)^2} \frac{d^2k_3}{(2\pi)^2} u(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \phi(\mathbf{k}_1) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_3) \phi(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3),\end{aligned}\quad (5.118)$$

onde Λ é o domínio de integração $0 \leq |k - k_0| \leq \Lambda$, a função $u(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)$, devido à isotropia das interações no modelo bidimensional, depende de um único ângulo e pode ser expandida como $u(\theta) \approx u_0 + u_2 \cos(2\theta)$. O Hamiltoniano de interação pode ser representado no espaço direto como:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{int} &= \int d^2x \{ u_0 \phi^4(\mathbf{x}) + u_2 \text{tr} \hat{Q}^2 \}, \\ \hat{Q}_{ij}(\mathbf{x}) &= \phi(\mathbf{x}) \left(\nabla_i \nabla_j - \frac{1}{2} \nabla^2 \delta_{ij} \right) \phi(\mathbf{x}),\end{aligned}\quad (5.119)$$

onde \hat{Q}_{ij} é o momento de quadrupolo da densidade do parâmetro de ordem $\phi(\mathbf{x})$. Note-se que a principal diferença entre o Hamiltoniano (5.118) e o Hamiltoniano (5.4) é que o acoplamento u no primeiro possui um termo adicional que pode ser relacionado ao parâmetro de ordem nemático $\alpha = -\frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} k^2 \cos(2\theta) C(\mathbf{k})$, onde $C(\mathbf{k})$ é o fator

²⁶Observe-se que a definição da temperatura efetiva de um vidro depende de sua história, da maneira como o sistema é preparado/resfriado.

²⁷Os sistemas experimentais, efetivamente bidimensionais, estudados apresentam especificidades peculiares, ligadas à preparação e manuseio de amostras, como por exemplo, a necessidade de um substrato. Este substrato pode, eventualmente, produzir uma anisotropia de rede efetiva sobre o filme fino, que pode facilitar a estabilização de uma fase ordenada. Tal aspecto não é, evidentemente, levado em consideração no funcional de Ginzburg-Landau do modelo teórico contínuo.

de estrutura do modelo²⁸.

Dentro de uma aproximação de campo auto-consistente de Hartree, Barci e Stariolo mostram a ocorrência da transição isotrópica-nemática em $d = 2$, no modelo (5.118). Neste modelo, é razoável esperar a ocorrência da fase de vidro. A fim de verificar esta hipótese, pretende-se reproduzir o cálculo realizado na Parte II desta tese para o novo modelo, isto é, calcular sua entropia configuracional através de uma expansão SCSA da função de partição replicada.

Confirmada tal hipótese, pretende-se posteriormente corroborar o resultado com a integração direta da característica de Euler do modelo. A característica de Euler como função da energia E do sistema²⁹, restrita a uma energia suficientemente pequena, é dada por [13]:

$$\chi(E) = \frac{1}{N} \log \int d\varphi \delta[\partial_\varphi \mathcal{H}(\{\varphi\})] \det[\partial_\varphi \partial_\varphi \mathcal{H}(\{\varphi\})],$$

onde $\{\varphi\}$ representa o conjunto de graus de liberdade do sistema, ∂_φ a derivada funcional com respeito a φ , $\mathcal{H}(\{\varphi\})$, o Hamiltoniano efetivo, introduzido como um funcional de energia livre, e a integral acima garante que sejam considerados todos os estados metaestáveis com energia igual ou abaixo de E .

O cálculo da característica de Euler deste modelo é relevante já que servirá como uma verificação independente dos resultados obtidos pela expansão auto-consistente de campo blindado e, principalmente, porque a similaridade entre os dois resultados obtidos de forma independente servirá de corroboração do cenário RFOT para vidros estruturais.

De fato, D. Nelson argumenta, para uma mistura binária de partículas evoluindo em uma bandeja plana, que a emergência de ordem orientacional de longo alcance, combinada com a frustração da ordem translacional (devido à dispersão na densidade de partículas produzida por uma concentração pequena de partículas do tamanho “errado”), pode originar uma fase desordenada, de vidro [160]. Ainda que as origens da frustração neste sistema e no modelo com interações competitivas de interesse sejam distintas, e do primeiro ser discreto enquanto o segundo é contínuo, os modelos possuem similaridades. Por exemplo, a isotropia das interações em ambos casos permite emprestar informações de vidros metálicos (cujas ligações não são direcionais) em sua descrição.

No contexto da mistura binária de partículas restritas a duas dimensões, Nelson propõe uma alternativa de ataque do problema da formação de vidro que poderia eventualmente ser aplicada ao modelo com interações competitivas (5.118). Observações experimentais dos sistemas de partículas permitem constatar que, na região de “temperaturas” para a qual o comprimento de correlação orientacional é muito maior que o comprimento de correlação translacional³⁰, $\xi_\sigma \gg \xi_T$, defeitos topológicos como dislocações são “armadilhados” pelas impurezas,

²⁸O efeito que a inclusão do parâmetro de ordem nemático produz sobre a equação auto-consistente de Hartree para o termo de massa é remanescente do efeito produzido pela anisotropia de rede.

²⁹Alternativamente, da temperatura T , supondo-se que estados metaestáveis a temperatura zero não são criados ou extintos para $T < T_D$.

³⁰O comprimento de correlação translacional ou posicional deve ser da ordem da distância média entre dislocações, que é pequena.

as partículas maiores, em menor concentração que frustram a ordem cristalina hexagonal. Com a discrepância entre ζ_6 e ζ_T , e quando se diminui a temperatura, o sistema superresfriado consegue diminuir sua entropia criando ordem orientacional de longo alcance, ainda que tendo sua ordem cristalina, a invariância translacional, frustrada. Como descrito no Capítulo 4, o excesso de entropia será dado pela diferença em entropia entre a fase de líquido isotrópico e a fase cristalina hexática.

Para descrever o quanto o sistema se desvia da ordem cristalina hexática, Nelson propõe um funcional de energia livre em uma aproximação harmônica, tendo como parâmetro de ordem excitações do tipo fônons. A *desordem congelada* caracterizada pelo “armadilhamento” das dislocações nas impurezas estáticas³¹ é introduzida através de um campo que se acopla linearmente com a dilatação elástica local e obedece a uma distribuição de probabilidade canônica. O Hamiltoniano efetivo (funcional de energia livre), neste caso, apresenta desordem congelada e portanto deve-se considerar, como para vidros de spins, a média sobre a desordem de quantidades auto-mediantes. Espera-se então que o ferramental para vidros de spin seja útil na solução do modelo.

A investigação da fase de vidro no modelo (5.118) através da aproximação SCSA, através do cálculo da característica de Euler da variedade de energia livre, $\chi(E)$, ou através de uma adaptação da abordagem de Nelson, são propostas importantes dentro das perspectivas do trabalho descrito na Parte II desta tese.

³¹Na escala de tempo de observação experimental, que deve ser muito menor que o inverso da constante de difusão de impurezas.

Apêndices

Apêndice A

Parte I

A.1 Resumo de Teoria de Morse

Descrições da Teoria de Morse podem ser encontradas em [93, 95, 186]. Este resumo é essencialmente baseado em [93] e no Apêndice que se encontra em [2].

A idéia central da Topologia é estudar espaços que sejam continuamente “deformáveis” uns nos outros, a fim de classificá-los a partir de suas propriedades topológicas. O conceito matemático de deformação contínua de um espaço em outro é o de homeomorfismo, que é um mapa: $\alpha : T_1 \rightarrow T_2$, contínuo e com inversa contínua. Em especial, quando a aplicação α entre duas variedades diferenciáveis é diferenciável sobre T_1 e sua inversa α^{-1} é diferenciável sobre T_2 , diz-se que esta é um difeomorfismo. A relação difeomórfica é simétrica, reflexiva e transitiva, e se constitui portanto em uma relação de equivalência. Isto implica em que, se existe um difeomorfismo entre duas variedades diferenciáveis, estas são topologicamente equivalentes, e que conjuntos de variedades (diferenciáveis) podem ser partidos em classes de equivalência invariantes sob difeomorfismos.

O objetivo da teoria de Morse, por sua vez, é estudar a relação entre pontos críticos de funções reais, analíticas, definidas em M : $f : M \rightarrow \mathbf{R}$, e a topologia das variedades M . Consideram-se aqui variedades compactas e de dimensão finita, porém os resultados podem ser estendidos para variedades não-compactas e de dimensão infinita.

Considera-se a variedade M como uma decomposição, folheação ou estratificação nos “conjuntos de nível”¹ da função f , sendo um conjunto de nível a dado por:

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

Sendo M compacta, toda função f definida sobre esta terá um mínimo, f_{min} e um máximo f_{max} : pode-se assim “construir” M a partir de $f^{-1}(f_{min})$, adicionando os conjuntos de nível $f^{-1}(a)$ ($f_{min} \leq a \leq f_{max}$), variando-se

¹Tradução literal do inglês “level sets”.

continuamente a até $f^{-1}(f_{max})$. Para um valor intermediário de a , esta “construção” define os setores, conjuntos², de M abaixo de a :

$$M_a = f^{-1}(-\infty, a] = \{x \in M \mid f(x) \leq a\}. \quad (\text{A.2})$$

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

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

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^i \partial x^j}, \quad (\text{A.3})$$

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

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

$$f(x) = f(0) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x^i} x^i + \dots, \quad \forall x \in N(P). \quad (\text{A.4})$$

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

$$f(y) = f(0) - \sum_{i=1}^{\lambda} (y^i)^2 + \sum_{i=\lambda+1}^n (y^i)^2 + \dots, \quad \forall y \in N(P). \quad (\text{A.5})$$

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

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

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

Assim, à medida em que a varia, a topologia de M_a não muda até que a passe por um valor crítico de f , f_c , onde então a variedade M_a tem “agregada” a ela (ou “retirada” da mesma, caso o parâmetro seja variado em

²Rigorosamente, as variedades M_a não são subvariedades de M .

sentido inverso) uma célula de ordem λ , e_λ , onde λ é o índice do ponto crítico: $M_{f_c+\varepsilon} \simeq M_{f_c-\varepsilon} \cup e_\lambda$ ($\varepsilon > 0$ é menor que o intervalo entre dois valores críticos adjacentes). O símbolo \simeq representa uma relação difeomórfica. Considera-se a variedade M como sendo decomposta ou estratificada em um conjunto de células

$$M = \bigcup_{\lambda} e_{\lambda}, \quad (\text{A.6})$$

sendo o número de células igual ao número de pontos críticos (considerando-se apenas pontos críticos não-degenerados,) e a dimensão das células dada pelo índice dos pontos críticos.

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

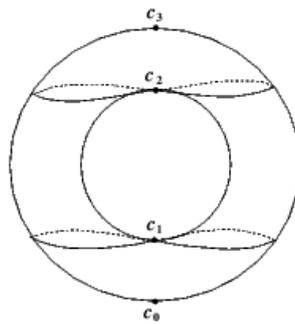


Figura A.1: Toro bidimensional \mathbb{T}^2 (imersão no \mathbb{R}^3) com os pontos (c_0, c_1, c_2 e c_3) e níveis críticos da função f indicados [2].

A decomposição do toro bidimensional em suas células “primitivas” e_k só foi possível devido à escolha da função f (f é uma função de Morse “perfeita”). Em geral, no entanto, esta decomposição será um tanto complexa, às vezes impossível. Recorre-se então à caracterização das classes de equivalência de variedades/espacos topológicos através de um número suficiente de invariantes topológicos, de modo a especificar univocamente cada classe. Invariantes topológicos são objetos ou propriedades matemáticas invariantes sob difeomorfismos. Estes podem ser

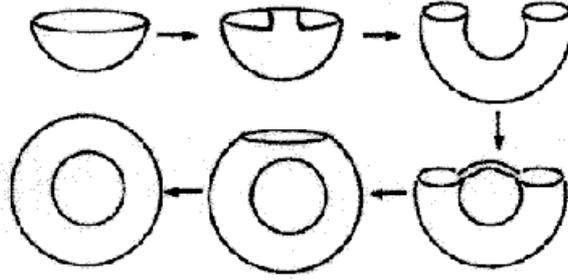


Figura A.2: Construção do toro bidimensional através de sua estratificação nos conjuntos de nível de f [2].

números inteiros (como a dimensão das variedades ou os números de Betti), números reais (como a característica de Euler), grupos (grupo de Homotopia, Homologia, Cohomologia). Assim a investigação da topologia de variedades se dá de forma indireta. Um invariante topológico é constante sobre todas as variedades pertencentes a uma mesma classe, porém, nem sempre será diferente para classes diferentes. Daí a requisição de um número suficiente de invariantes na caracterização de uma dada classe.

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

$$M_t(f) = \sum_{\text{todos } P} t^{\lambda_P} = \sum_i \mu_i t^i, \quad (\text{A.7})$$

onde P é um ponto crítico genérico de f , de índice λ_P e μ_i , chamado número de Morse, é o número de pontos críticos de f com índice i . A série sempre convergirá. A topologia de M entra através de $P_t(M)$, que é a sua correspondente série de Poincaré, dada por

$$P_t(M) = \sum_{i=0}^n b_i t^i, \quad (\text{A.8})$$

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

Algumas das chamadas desigualdades de Morse são:

$$\begin{aligned} M_t(f) &\geq P_t(M), \\ \mu_i &\geq b_i, \quad i = 0, \dots, n \\ \pm \mu_0 + \sum_{i=1}^{j < n} (-1)^i \mu_i &\geq \pm b_0 + \sum_{i=1}^{j < n} (-1)^i b_i. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

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

$$M_{-1}(f) = P_{-1}(M) = \sum_{i=0}^n (-1)^i b_i = \chi(M), \quad (\text{A.10})$$

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

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

$$t^{\lambda_C} P_t(C), \quad (\text{A.11})$$

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

$$M_t(f) = \sum_{\text{todas } C} t^{\lambda_C} P_t(C), \quad (\text{A.12})$$

e continuam valendo as desigualdades de Morse acima.

A.2 Alguns Conceitos de Homotopia

Como Homotopia é um assunto particularmente amplo e abrangente, e existem muitos bons textos no assunto (por exemplo [94]), restringe-se esta Seção à enumeração simples de alguns conceitos básicos de homotopia que são usados na solução da topologia das variedades M_ν do Modelo Esférico com interações a vizinhos próximos na rede hipercúbica, descrita no Capítulo 3.

Homotopia é uma relação entre dois espaços topológicos X e Y , que estabelece o homomorfismo entre os grupos de homotopia correspondentes, que são invariantes topológicos de seus respectivos espaços³.

Homotopia

Tomam-se X e Y dois espaços topológicos. Uma homotopia é uma família de mapas contínuos de X em Y , dada por $f_t : X \rightarrow Y$, $t \in I = [0, 1]$, tal que o mapa associado $F : X \times I \rightarrow Y$ dado por $F(x, t) = f_t(x)$ é contínuo.

Diz-se que dois mapas $f_0, f_1 : X \rightarrow Y$ são homotópicos se existe uma homotopia $F(x, t) : x \mapsto f_t(x)$ conectando-os, isto é, tal que $F(x, 0) = f_0(x)$ e $F(x, 1) = f_1(x)$. De forma similar escreve-se $f_0 \simeq f_1$ ⁴.

³Em contraste com a homologia, que estabelece o *isomorfismo* entre os grupos de homologia que caracterizam a topologia. Todo homeomorfismo é uma equivalência homotópica, mas nem toda equivalência homotópica é um homeomorfismo. A relação de homologia, neste contexto, é mais restritiva.

⁴Com uma reparametrização apropriada é fácil convencer-se de que quaisquer dois mapas intermediários f_t e $f_{t'}$ também serão homotópicos neste caso.

Homotopia como uma Relação de Equivalência

Como mencionado acima, uma homotopia não é sempre uma relação de equivalência.

Entretanto, se esta homotopia for “inversível”, simétrica, isto é, se existir $g_0 : Y \rightarrow X$, tal que $g_0 \circ f_0$ seja *homotópico* ao mapa identidade no espaço X , $\mathbb{1}_X$, e $f_0 \circ g_0$ seja *homotópico* ao mapa identidade no espaço Y , $\mathbb{1}_Y$, diz-se que X e Y possuem o mesmo tipo de homotopia e a existência desta homotopia mostra que X e Y são homotopicamente equivalentes: $X \simeq Y$. Neste caso a homotopia entre os dois espaços X e Y é uma relação de equivalência e implica no *isomorfismo* dos respectivos grupos de homotopia: $\pi_n(X) \simeq \pi_n(Y)$.

Como uma relação de equivalência, a homotopia deve ser uma propriedade transitiva. Isto é estabelecido através da composição de funções: Se $f_0, f_1 : X \rightarrow Y$ são homotópicas, e $g_0, g_1 : Y \rightarrow Z$ são homotópicas, então as composições $g_0 \circ f_0 : X \rightarrow Z$ e $g_1 \circ f_1 : X \rightarrow Z$ também serão homotópicas. Em outras palavras, se o espaço X é homotopicamente equivalente ao espaço Y , Y é homotopicamente equivalente ao espaço Z , então também $X \simeq Z$.

Se dois espaços X e Y são homotópicos, então todas as funções contínuas de X em Y são homotópicas, isto é, existem homotopias conectando quaisquer duas funções contínuas de X em Y .

De forma familiar, para estabelecer a equivalência homotópica entre dois espaços topológicos X e Y , as seguintes “operações” são permitidas: pode-se “dobrar”, “encolher” ou “espichar” o espaço X de forma a transformá-lo em Y ; porém, não se pode “cortar” ou “colar” pedaços de X a fim de transformá-lo em Y , já que estas duas últimas operações alteram as vizinhanças originais de pontos em X e portanto alteram o tipo de homotopia/topologia do espaço.

Deformação de Retração

Uma deformação de retração de um espaço topológico X em um subespaço $A \subset X$ é uma família de mapas $f_t : X \rightarrow X$, $t \in I$, tal que $f_0 = \mathbb{1}_X$ (o mapa identidade em X), $f_1(X) = A$, e a restrição $f_t|_A = \mathbb{1}_X$ para todo $t \in I$. A família de mapas f_t ademais deve ser contínua, isto é, o mapa associado $F : X \times I \rightarrow X$, $(x, t) \mapsto f_t(x)$ é contínuo em x e em t . Quando um espaço topológico X pode ser continuamente deformado a uma subespaço $A \subset X$, diz-se que X e A são homotopicamente equivalentes. De fato, uma deformação de retração é um caso especial da noção mais geral de homotopia.

Uma relação de equivalência, além de reflexiva e transitiva, deve ser simétrica. Como em uma deformação de retração de um espaço X em um subespaço A diversos pontos de X são mapeados sobre um mesmo ponto de A , o mapa $F(x, t) = f_t(x)$ claramente não será injetivo e portanto em geral não possuirá inversa. No entanto, a existência de uma deformação de retração de X em A implica em que os dois espaços sejam homotópicos através da propriedade de **extensão de homotopia**, que garante que X e A sejam homotopicamente equivalentes se e somente se existir um terceiro espaço Z contendo *ambos* X e A como deformações de retração. Se A for um subespaço de X , a existência do espaço Z está condicionada a A ser uma deformação de retração de X . Por outro

lado, um mapa $f : X \rightarrow Y$ é chamado uma equivalência homotópica se existir um mapa $g : Y \rightarrow X$ tal que suas composições sejam homotópicas às identidades nos respectivos espaços topológicos: $f \circ g \simeq \mathbb{1}_Y$ e $g \circ f \simeq \mathbb{1}_X$ (já descritas acima). Ora, tomando a retração $r(X) = f_1(X) = A$, a inclusão $i : A \hookrightarrow X$ é tal que sua composição à direita e à esquerda da retração r é homotópica ao mapa identidade: $ri \simeq \mathbb{1}_A$ e $ir \simeq \mathbb{1}_X$.

Uma função f é chamada *null-homotópica* quando existe uma homotopia que leva f ao mapa constante (o mapa que leva todos os pontos do domínio a um único ponto no conjunto imagem). Um espaço topológico X é dito *contrátil* quando existe uma deformação de retração de X a um ponto. O espaço X será contrátil se e somente se o mapa identidade $\mathbb{1}_X : x \mapsto x$ for null-homotópico.



Figura A.3: À esquerda, a deformação de retração de uma fita de Möbius em sua circunferência base. Os três desenhos à direita representam três possíveis deformações de retração do espaço bidimensional com dois orifícios em seus subespaços. Os pontos à fronteira do espaço mencionado sofrem a deformação seguindo os segmentos transversais representados [94].

Homotopia Relativa

Sejam dois mapas f e g que levam pontos em X sobre pontos em Y . Seja A um subespaço de X : $A \subset X$. Diz-se que f e g são homotópicos com relação a A , quando existe uma homotopia $F : X \times [0, 1] \rightarrow Y$ que leva f em g , isto é, tal que $F(x, 0) = f(x)$ e $F(x, 1) = g(x)$, $\forall x \in X$, e para a qual a restrição $F|_{A \times I}$ é independente de t , $F(a, t) = f(a) = g(a)$, $\forall a \in A$ e $\forall t \in I$. Diz-se que $F(x, t)$ é uma homotopia rel A .

Grupos de Homotopia

Tomando $X_n = [0, 1]^n$ (n inteiro), e o subespaço de $A_n \subset X_n$ como sua fronteira: $A_n = \partial([0, 1]^n)$, podem-se buscar por homotopias $f_t^{(n)} : X_n \rightarrow Y$ relativas a A_n . Como a relação de homotopia relativa a um subespaço é uma relação de equivalência, o conjunto de homotopias $f_t^{(n)}$ que relacionam X_n a Y pode ser dividido em *classes de equivalência*. Estas classes de equivalência, por sua vez, formam um grupo, denotado $\pi_n(Y, y_0)$, onde $y_0 \in f_t^{(n)}(\partial([0, 1]^n))$ é chamado *ponto-base*. Os grupos $\pi_n(Y, y_0)$ são chamados *grupos de homotopia*. O grupo $\pi_1(Y, y_0)$, em particular, é chamado grupo fundamental.

Para citar alguns exemplos: o grupo fundamental da esfera S^1 é $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$; os primeiros grupos de homotopia da esfera S^2 são $\pi_1(S^2) = 0$, $\pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$ e $\pi_3(S^2) = \mathbb{Z}$; uma relação geral pode ser inferida para os primeiros $(n - 1)$ grupos de homotopia da esfera S^n : $\pi_i(S^n) = 0$; o grupo fundamental do toro bidimensional $\mathbb{T}^2 = S^1 \times S^1$ é $\pi_1(\mathbb{T}^2) = \mathbb{Z}^2$; por indução se pode mostrar que o grupo fundamental do toro \mathbb{T}^n é $\pi_1(\mathbb{T}^n) = \mathbb{Z}^n$ [94].

Conseqüências da Invariância Homotópica

Sejam X e Y dois espaços topológicos homotopicamente equivalentes. Importantes propriedades topológicas são conservadas sob homotopia. Se X é um espaço trajeto-conectado, Y também é, se X é simplesmente conectado, Y também é. Se X e Y são trajeto-conectados, seus grupos fundamentais e grupos de homotopia de maior ordem são isomórficos, como já foi mencionado. Caso a condição de conectividade por trajeto não seja cumprida pelos espaços, então o isomorfismo entre os grupos de homotopia correspondentes ainda pode ser estabelecido, mas dependerá do ponto-base definido para as homotopias.

A.3 Topologia das subvariedades M_v do Modelo Esférico na Rede

Esta Seção é uma elaboração mais detalhada da Seção 3.2, que se encontra no Capítulo 3 da Parte I, em que se apresentam resultados originais obtidos sobre o Modelo Esférico Curto Alcance.

No estudo da topologia das subvariedades $M_v \subset \Gamma$, computam-se e caracterizam-se as transições topológicas ocorrendo à medida em que se varia v dentro do intervalo de energias acessível. Estabelecer-se uma relação entre a topologia das M_v e o comportamento termodinâmico equivale a definir um mapa entre o parâmetro topológico v e a energia potencial média $\langle v \rangle$, que não é uma tarefa evidente. A HT conjectura que a relação deva se dar pela identidade: $v_\theta = \langle v_c \rangle$ (equações (3.17) e (3.21)). Deste mapeamento entre topologia e termodinâmica para o modelo esférico curto alcance mostra-se, nesta seção, que o primeiro teorema FPS [28], sobre a necessidade de uma TT coincidindo com a TF no modelo, é satisfeito. Entretanto, este trabalho também mostra a *inexistência* de uma condição de suficiência que relacione transições topológicas e termodinâmicas para o modelo [6, 7].

De acordo com a teoria de Morse [92], transições topológicas nas subvariedades $M_v = \{\epsilon \in \Gamma \mid V(\{\epsilon\})/N \leq v\}$ somente ocorrem em valores de (Nv) que sejam imagens de *pontos críticos*, $\epsilon_{tt} = ((\epsilon_1)_{tt}, \dots, (\epsilon_N)_{tt})$, da função $V(\{\epsilon\})$ (isto é, pontos em que $\partial_{\epsilon_i} V(\epsilon_{tt}) = 0$)⁵. Quando ocorre um (único) ponto crítico de $V(\{\epsilon\})/N$ em um valor $v = v_{tt}$, a subvariedade $M_{v_{tt}+\delta}$ é homeomórfica a $M_{v_{tt}-\delta} \cup e_k$, onde e_k é uma célula de ordem k - um disco aberto de dimensão k -, que é *agregada* à subvariedade M_v ao atravessar $v = v_{tt}$ no sentido de v crescente⁶. k é o índice ou a ordem do ponto crítico⁷. Para um resumo mais elaborado de elementos e conceitos de Topologia utilizados ao longo do texto, remete-se o leitor ao Apêndice A.

A análise da topologia e da ocorrência de transições topológicas nas subvariedades M_v , definidas a partir da função $V(\epsilon)$, deve iniciar, portanto, pelo estudo das soluções de $\partial_{\epsilon_i} V(\{\epsilon\}) = 0$. A representação do sistema de equações na base que diagonaliza a matriz de interação simplifica o problema. Para impor o vínculo esférico, introduz-se um multiplicador de Lagrange μ , redefinindo-se o Hamiltoniano $\tilde{V} = V - \mu \sum_{i=1}^N \epsilon_i^2$. Na base $\{\epsilon\}$, a invariância translacional e as condições de contorno periódicas (que induzem uma topologia $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 \times \dots \times \mathbb{S}^1 = \mathbb{T}^d$, o toro d -dimensional, à rede de spins [4]) produzem uma matriz de interação circulante e simétrica. As equações de pontos estacionários, nesta base, são dadas pelo sistema de equações lineares:

$$\begin{pmatrix} (c_1 - \mu) & c_2 & c_3 & \cdots & c_{N-1} & c_N \\ c_N & (c_1 - \mu) & c_2 & \cdots & c_{N-2} & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_N & (c_1 - \mu) & \cdots & c_{N-3} & c_{N-2} \\ & \vdots & & \ddots & \vdots & \\ c_2 & c_3 & c_4 & \cdots & c_N & (c_1 - \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \vdots \\ \epsilon_N \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

⁵A correspondência biunívoca entre *um ponto crítico* e uma transição topológica é garantida quando o Hessiano da função $V(\{\epsilon\})$ é não-singular, não possui autovalores nulos, isto é, os pontos críticos da função são *isolados*.

⁶ $\delta > 0$ deve ser suficientemente pequeno, isto é, o intervalo $v \in [v_{tt} - \delta, v_{tt} + \delta]$ contém apenas um valor crítico de V .

⁷O índice ou a ordem de um ponto crítico é o número de autovalores negativos do Hessiano no ponto dado (ver Apêndice A).

onde c_k são os elementos da matriz de interação no Hamiltoniano na rede hipercúbica $\epsilon^T M \epsilon = \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_i \epsilon_j$, que são tais que $c_{N+k} \equiv c_k = c_{N-k+2}$. O índice dos elementos c_k corresponde univocamente a um spin na posição (p_1, p_2, \dots, p_d) na rede de dimensão linear L , dado que $k = p_1 + L p_2 + L^2 p_3 + \dots + L^{d-1} p_d$. A forma específica da matriz M depende da dimensão d da rede.

As equações do sistema (A.13) são acopladas. Supondo que a matriz principal (isto é, matriz dos coeficientes dos ϵ_i), \mathbf{M} , seja inversível, usa-se o método de Crámer para se obter a solução: $\epsilon_i = \frac{\Delta_i}{\Delta}$, onde Δ é o determinante da matriz principal, ou de interação \mathbf{M} , aplicado o vínculo esférico através do multiplicador μ , e Δ_i , o determinante da matriz dada pela matriz principal, substituída sua i -ésima coluna pelo vetor de termos independentes (lado direito da equação (A.13)).

As derivadas com respeito a ϵ_i se transformam como $\frac{\partial}{\partial \epsilon_i} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_i} \frac{\partial}{\partial y_j} = \sum_{j=1}^N J_{ij} \frac{\partial}{\partial y_j}$. Em [4] a matriz Jacobiana J_{ij} que leva a matriz de interação \mathbf{M} à sua forma diagonal, foi obtida, a partir dos autovetores de \mathbf{M} : o elemento J_{ij} é dado pela i -ésima componente do j -ésimo autovetor,

$$J_{ij} = \Psi_{j,i} = N^{-1/2} \left[\cos \frac{2\pi}{N} (j-1)(i-1) + \sin \frac{2\pi}{N} (j-1)(i-1) \right],$$

que formam uma base ortogonal, com vetores reais normalizados a 1. A transformação mediada pela matriz Jacobiana \mathbf{J} é ortogonal, já que a matriz de interação é simétrica: $\det \mathbf{J} = 1$. O Hamiltoniano na base $\{y\}$, é dado por ($J = 1$):

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\mathbf{y}) &= \sum_{i,j,k,l,m,n} (y_i J_{ik}^{-1}) (J_{km} M_{mn} J_{nl}^{-1}) (J_{lj} y_j) - H \sum_{i,j} J_{ij} y_j - \mu \sum_{i,j,k} (y_i J_{ij}^{-1}) (J_{jk} y_k) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i^2 - \sqrt{N} y_1 H - \mu \sum_{i=1}^N y_i^2, \end{aligned}$$

onde $\{\lambda_i\}$ caracteriza o espectro da matriz de interação. Com a transformação de $\partial \epsilon_i$, o vetor de termos independentes se transforma como:

$$H \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial \epsilon_1} & \frac{\partial y_2}{\partial \epsilon_1} & \dots & \frac{\partial y_N}{\partial \epsilon_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial \epsilon_2} & \frac{\partial y_2}{\partial \epsilon_2} & \dots & \frac{\partial y_N}{\partial \epsilon_2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial \epsilon_N} & \frac{\partial y_2}{\partial \epsilon_N} & \dots & \frac{\partial y_N}{\partial \epsilon_N} \end{pmatrix} H \begin{pmatrix} \sqrt{N} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

e o lado esquerdo de (A.13) se transforma como:

$$\begin{pmatrix} (c_1 - \mu) & c_2 & \dots & c_N \\ c_N & (c_1 - \mu) & \dots & c_{N-1} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ c_2 & c_3 & \dots & (c_1 - \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_N \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial \epsilon_1} & \frac{\partial y_2}{\partial \epsilon_1} & \cdots & \frac{\partial y_N}{\partial \epsilon_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial \epsilon_2} & \frac{\partial y_2}{\partial \epsilon_2} & \cdots & \frac{\partial y_N}{\partial \epsilon_2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial \epsilon_N} & \frac{\partial y_2}{\partial \epsilon_N} & \cdots & \frac{\partial y_N}{\partial \epsilon_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -(2\lambda_1 + \mu) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -(2\lambda_2 + \mu) & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -(2\lambda_N + \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

Aplicando o método de Crámer ao sistema de equações lineares na base $\{y\}$: $y_i = \frac{\Delta'_i}{\Delta'}$, onde os determinantes Δ' e Δ claramente se relacionam como $\Delta = \det(\mathbf{J}) \Delta' = \Delta'$, os vetores de termos independentes, $\mathbf{b} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{b}'$ e as matrizes principais \mathbf{M} e \mathbf{M}' se relacionam como $\mathbf{M} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{M}' \cdot \mathbf{J}'$. Igualando-se lados direitos (esquerdos) de (A.15) e (A.14) obtém-se o sistema de equações lineares na base $\{y\}$. O sistema de equações, na base que diagonaliza a matriz de interação, é dado por:

$$\begin{aligned} y_1(2\mu + \lambda_1) + \sqrt{NH} &= 0, \\ y_i(2\mu + \lambda_i) &= 0 \quad i = 2, \dots, N, \\ \sum_{j=1}^N y_j^2 &= N, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

cujas equações são evidentemente acopladas apenas pelo vínculo esférico. O espectro da matriz de interação é dado pelos autovalores [4]:

$$\lambda_i \equiv \lambda(\mathbf{p}) = 2 \sum_{i=0}^d \cos\left(\frac{2\pi p_i}{N^{1/d}}\right), \quad (\text{A.17})$$

onde $p_i = 0, \dots, N^{1/d} - 1$. A estrutura de (A.17) mostra que a degenerescência máxima dos autovalores com N finito é $P_d 2^d$ (onde P_d é o número de permutações de d elementos). O teorema de Perron-Frobenius garante que o máximo autovalor, λ_0 , é não-degenerado.

A estrutura das soluções de (A.16) dependerá de forma crucial na degenerescência dos autovalores. Assim, é conveniente definirem-se os conjuntos C_a , com $a = 0, \dots, \hat{N}$, onde $\hat{N} + 1$ é o número de autovalores *distintos*. C_a é o conjunto contendo os índices de autovalores (vetores \mathbf{p}) correspondendo ao $(a + 1)$ -ésimo maior valor. O índice a ordena os autovalores distintos do maior ($a = 0$) ao menor ($a = \hat{N}$). A cardinalidade $|C_a|$ destes conjuntos fornece a degenerescência do $(a + 1)$ -ésimo maior autovalor. Por exemplo, como mencionado acima, $|C_0| = 1$.

A degenerescência reduz o número de equações efetivamente independentes a $\hat{N} + 1$, e portanto ao mesmo número de soluções. Cada solução corresponde a um valor crítico de v , $v_a = h(\lambda_a, H)$ (que é uma função biunívoca de λ_a), $a = 0, \dots, \hat{N} + 1$, ordenados do menor ao maior.

A degenerescência das soluções de (A.16) resulta, não em pontos críticos, mas em *subvariedades críticas*, já que qualquer ponto sobre esta se constitui em um extremo da função V , isto é, $dV = 0$ quando restrita à subvariedade crítica. Isto implica em um Hessiano singular para a função de energia potencial quando calculado

na energia crítica correspondente, já que a esta energia o Hessiano de $V(y)$ será nulo nas direções tangentes à subvariedade crítica. Um Hessiano não-inversível deriva de uma função $V(\epsilon)$ ($V(y)$) que não é uma função de Morse própria, no sentido estrito. Não obstante, a caracterização da topologia das M_v através do formalismo da teoria de Morse ainda é possível recorrendo a uma extensão da mesma por Bott [92, 93].

Quando o multiplicador μ coincide com o $(a + 1)$ -ésimo maior autovalor, especificamente $\mu = -\lambda_j/2$, com $j \in C_a$, emerge como solução de (A.16) a subvariedade crítica Σ_{v_a} , em um valor crítico $v = v_a$, que é o $(a + 1)$ -ésimo *menor* valor crítico. A subvariedade crítica Σ_{v_a} é uma hipersfera de dimensão $|C_a|$, onde $|C_a|$ é a degenerescência do autovalor correspondente a v_a . No limite termodinâmico, o espectro de autovalores se torna denso em $[-2d, 2d]$: $\lim_{N \rightarrow \infty} \lambda(\mathbf{p}) \rightarrow \lambda(\omega) = 2 \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i)$, onde $\omega_i \in [0, 2\pi)$ são parâmetros contínuos. Neste limite, a densidade espectral da matriz de interação, normalizada por N , é dada pela função:

$$c(v) = \int_0^{2\pi} \left(\prod_{i=1}^d \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \delta[v - h(\lambda(\omega), H)], \quad (\text{A.18})$$

onde $h(\lambda(\omega), H)$ é a função que relaciona os valores críticos de v aos autovalores $\lambda(\omega)$ no limite termodinâmico. A densidade de degenerescência dos autovalores mostrar-se-á, mais adiante, crucial na caracterização da topologia das subvariedades M_v .

Na análise da topologia do modelo, não se sabem *a priori* quais as assinaturas topológicas da transição de fase pelas quais se procurar. De fato, este trabalho busca determinar uma condição de suficiência que mapeie TTs em TFs no modelo esférico, de maneira a definir uma assinatura topológica. Assim, é imprescindível dispor de dois modelos similares, variantes de um Hamiltoniano diferindo por um parâmetro, por exemplo. O objetivo é verificar se o efeito que a variação de tal parâmetro produz para a presença ou ausência de transição de fase é acompanhado por algum efeito equivalente na topologia, por exemplo, presença e ausência de dada transição topológica. No caso do modelo esférico, estes dois modelos são o modelo sem campo externo, que sofre transição de fase para dimensão inteira da rede $d \geq 3$, e o modelo com campo externo, que não possui transição de fase.

Nas subseções que seguem, desenvolve-se em detalhe a análise topológica do modelo com $H = 0$, em campo externo nulo. No âmbito da teoria de Morse, não é possível obter explicitamente os números de Betti $\{b_i\}$ das variedades M_v , somente limites superiores para estes ou a soma alternada dos mesmos (que equivale à obtenção de um invariante topológico, a característica de Euler-Poincaré). As próximas seções se dedicam à obtenção de todos os números de Betti das variedades M_v , para qualquer v (pelo menos no caso $H = 0$). Mostrar-se-á, então, a caracterização completa dos grupos de homotopia [94, 95] das subvariedades M_v , pelo menos para o modelo sem campo externo. No caso do modelo com campo externo, conseguiu-se caracterizar completamente a topologia na vizinhança da transição topológica mais relevante [6, 7].

A.3.1 Topologia em campo nulo: $H = 0$

A cada valor crítico v_a de $v \in [-d, d]$, M_v sofre uma transição topológica. As variedades críticas que emergem neste valor de energia caracterizam a TT. Para analisar a evolução da topologia das M_v 's devem-se retomar as equações (A.16) de pontos críticos de $\tilde{V}(y)$ para $H = 0$:

$$\begin{aligned} y_i(2\mu + \lambda_i) &= 0, \quad i = 1, \dots, N, \\ \sum_{j=1}^N y_j^2 &= N, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

que neste caso são homogêneas. Desta maneira, apenas haverá solução não-trivial caso a matriz principal do sistema seja singular. Em particular, tem-se $y_i = 0$, exceto pelas variáveis pertencentes ao subespaço de autovalores nulos da matriz principal: variáveis $y_j \neq 0$, tais que $2\mu + \lambda_j = 0$ com $j \in C_a$, $v = v_a$. Estas últimas devem garantir o vínculo esférico, que equivale à condição: $\sum_{j=1}^{|C_a|} y_j^2 = N$. Resulta, para a subvariedade crítica Σ_{v_a} ocorrendo no valor crítico $v = v_a$: $\Sigma_{v_a} = \{y \in \Gamma \mid \sum_{j \in C_a} y_j^2 = N \vee y_i = 0, \text{ para } i \notin C_a\}$, que é portanto uma hipersfera $\mathbb{S}^{|C_a|-1}$, cuja dimensão é dada pela degenerescência do autovalor correspondente, $|C_a| - 1$.

A menos que a função $V(\{y\})$ seja uma função de Morse perfeita [93], o conhecimento das subvariedades críticas não é suficiente para determinar completamente a topologia de M_v entre dois valores críticos consecutivos, já que as células $\{e_k^{(a)}\}$ agregadas a M_{v_a} em $v = v_a$ podem sê-lo de diferentes maneiras, através de diferentes mapas característicos $\Phi_a : e_k^{(a)} \rightarrow \partial M_{v_a} = \Sigma_{v_a}$, resultando em diferentes topologias para $M_{v > v_a}$. O conhecimento das Σ_{v_a} e suas propriedades relevantes permitem calcular exatamente os números de Morse μ_i e a série de Morse, $M_t(V)$, relativos a $V : M_v \rightarrow \mathbb{R}$ porém fornecem apenas um limite superior para os números de Betti b_i e a série de Poincaré, $P_t(M_v)$, relativos a M_v ⁸.

A substituição da solução Σ_{v_a} na função $v(y) = V(y)/N$ resulta em um valor crítico v_a a campo nulo, a função $v_a = h(\lambda_j, 0) = -\lambda_j/2$, onde $j \in C_a$ e $\mu = -\lambda_j/2$.

O cálculo do Hessiano em $v = v_a$ é trivial e resulta em uma matriz diagonal na base $\{y\}$:

$$\mathcal{H}_{ij} = \frac{\partial^2 V(y)}{\partial y_i \partial y_j} = \begin{pmatrix} -(2\mu + \lambda_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -(2\mu + \lambda_2) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -(2\mu + \lambda_3) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -(2\mu + \lambda_N) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.20})$$

O Hessiano é singular, já que possui $|C_a|$ autovalores nulos. Para caracterizar a transição topológica em $v = v_a$ neste contexto, é preciso estabelecer um conceito para subvariedades críticas não-degeneradas que equivalha ao

⁸Como mencionado anteriormente, no âmbito da teoria de Morse é possível calcular a característica de Euler, mas não se pode determinar um número suficiente de invariantes topológicos de M_v .

conceito de ordem ou índice de pontos críticos não-degenerados no caso de um Hessiano inversível. A subvariedade crítica Σ_{v_a} será não-degenerada já que $\det \mathcal{H} \neq 0$, quando restrito ao subespaço das direções normais a Σ_{v_a} (considerando a imersão de $\Sigma_{v_a} = \mathbb{S}^{|C_a|-1}$ em $\mathbb{R}^{|C_a|}$, o subespaço normal a Σ_{v_a} se constitui das direções radiais). Usando uma extensão da teoria de Morse [92, 93], define-se a *ordem de uma subvariedade crítica* não-degenerada, conectada, orientável como o número de autovalores negativos do Hessiano à energia v_a , quando restrito às direções *normais* à subvariedade crítica Σ_{v_a} (ver Apêndice A). Fica evidente de (A.20) que os autovalores do Hessiano, $V_{ii} = -(2\mu + \lambda_i) = (\lambda_j - \lambda_i)$, com $j \in C_a$, serão negativos para $i \in C_b$, onde $b < a$. Assim, à energia v_a o Hessiano possuirá $\sum_{b=0}^{a-1} |C_b|$ autovalores negativos, que corresponde à ordem da subvariedade crítica Σ_{v_a} .

No que diz respeito à série de Morse, $M_t(V)$, a contribuição de uma subvariedade crítica é mais substancial que a de um ponto crítico. De fato, enquanto a contribuição de um ponto crítico isolado é proporcional a um monômio t^k , a de uma subvariedade crítica é dada por um polinômio $t^k P_t(\Sigma_{v_a})$, onde k é a ordem do ponto crítico ou da subvariedade crítica. $P_t(\Sigma_{v_a})$ é o polinômio de Poincaré de Σ_{v_a} , ao qual naturalmente podem-se aplicar as relações entre P_t e M_t descritas no Apêndice A, sendo o polinômio de Morse neste caso relativo à restrição $V|_{\Sigma_{v_a}}$. Conhecida a ordem de cada subvariedade e, é claro, o polinômio de Poincaré de uma hipersfera, é possível construir o polinômio de Morse e, conseqüentemente, a característica de Euler $\chi(v) = M_{-1}(V)$ das subvariedades M_v para todo v .

Deformação de retração das variedades M_v

Na caracterização da topologia das M_v se seguirá um caminho mais direto, aproveitando a simetria do modelo esférico para determinar exatamente os números de Betti que definem M_v entre dois valores críticos consecutivos v_a e v_{a+1} . De fato, ao encontrar a deformação de retração que mapeia continuamente M_v na hipersfera \mathbb{S}^{D_a-1} , onde $D_a = \sum_{b=0}^a |C_b|$, se estabelece a equivalência homotópica entre M_v , para $v \in (v_a, v_{a+1})$, e \mathbb{S}^{D_a-1} . Em cada $v = v_a$, a TT muda a topologia de M_v de $\mathbb{S}^{D_{a-1}-1}$ para \mathbb{S}^{D_a-1} . Ademais, a característica de Euler de um espaço topológico depende somente de seu tipo de homotopia, portanto os resultados revelam imediatamente o invariante topológico $\chi(v)$.

Uma deformação de retração de um espaço topológico X em um subespaço $A \subset X$ é uma família de mapas $f_t : X \rightarrow X$, $t \in I = [0, 1]$, tal que $f_0 = \mathbb{1}$ (o mapa identidade), $f_1(X) = A$, e a restrição $f_t|_A = \mathbb{1}$ para todo $t \in I$. A família de mapas f_t ademais deve ser contínua, isto é, o mapa associado $F : X \times I \rightarrow X$, $(x, t) \mapsto f_t(x)$ é contínuo em x e em t . Quando um espaço topológico X pode ser continuamente deformado a um subespaço $A \subset X$, diz-se que X e A são homotopicamente equivalentes. De fato, uma deformação de retração é um caso especial da noção mais geral de homotopia (ver Apêndice A).

Quer-se encontrar uma deformação de retração que leve M_v , com $v \in (v_a, v_{a+1})$, à hipersfera \mathbb{S}^{D_a-1} , onde $D_a = \sup\{k \mid \lambda_k > -2v\}$, o índice k rotula uma ordenação de *todos* os autovalores (incluindo autovalores

degenerados) do maior ao menor. O valor crítico $v_a = -\lambda_j/2$, onde $j \in C_a$. Por inspeção, mostra-se que uma homotopia possível é a que leva $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N) \mapsto \mathbf{y}^{(t)} = (y_1^{(t)}, y_2^{(t)}, \dots, y_N^{(t)})$ através de:

$$y_k^{(t)} = \begin{cases} y_k \sqrt{1 + t \frac{\sum_{j=D_a+1}^N y_j^2}{\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2}}, & \text{para } 1 \leq k \leq D_a, \\ y_k \sqrt{1 - t}, & \text{para } D_a < k \leq N. \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Deve-se mostrar que esta função é contínua, que obedece ao vínculo esférico para todo $t \in I$, que $\mathbf{y}^{(t)}(M_v) \subseteq M_v$, que $\mathbf{y}^{(0)}(M_v) = \mathbb{1}$, $\mathbf{y}^{(1)}(M_v) = \mathbb{S}^{D_a-1}$, e que a restrição $\mathbf{y}^{(t)}|_{\mathbb{S}^{D_a-1}} = \mathbb{1}, \forall t$.

Tomando-se $t = 0$ em (A.21) fica de imediato evidente que $\mathbf{y}^{(0)}$ é o mapa identidade.

Tomando-se $t = 1$ na mesma equação, obtém-se $y_k^{(1)} = 0$, para $k > D_a$, e:

$$\sum_{j=1}^{D_a} (y_j^{(1)})^2 = \sum_{j=1}^{D_a} y_j^2 \left(1 + \frac{\sum_{j>D_a} y_j^2}{\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2} \right) = \sum_{j=1}^N y_j^2 = N, \quad (\text{A.22})$$

onde a última igualdade resulta do fato de que qualquer ponto $\mathbf{y} \in M_v$ obedece ao vínculo esférico. Isto é, um ponto qualquer $\mathbf{y} \in M_v$ será mapeado em um ponto $\mathbf{y}^{(1)} \in \mathbb{S}^{D_a-1}$ através do mapa $\mathbf{y} \mapsto \mathbf{y}^{(1)}$, já que $\sum_{j=1}^{D_a} (y_j^{(1)})^2 = N$, que define uma hipersfera $(D_a - 1)$ -dimensional de raio \sqrt{N} - o que demonstra que $\mathbf{y}^{(1)}$ obedece ao vínculo esférico, e ao mesmo tempo que $\mathbf{y}^{(1)}(M_v) = \mathbb{S}^{D_a-1}$.

Também é imediato mostrar que a restrição da deformação à esfera \mathbb{S}^{D_a-1} é a identidade para qualquer $t \in I$, já que, quando se escolhe $\mathbf{y} \in \mathbb{S}^{D_a-1}$, tem-se: $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_{D_a}, 0, 0, \dots, 0)$, com $\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2 = N$. Ora, a imagem de qualquer destes pontos sob o mapa (A.21) resulta em:

$$y_k^{(t)} = \begin{cases} y_k \sqrt{1 + t \left(\frac{\sum_{j>D_a} y_j^2}{\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2} \right)^{-1}} = y_k, & \text{para } 1 \leq k \leq D_a, \\ y_k \sqrt{1 - t} = 0 = y_k, & \text{para } D_a < k \leq N. \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

Dado que qualquer ponto $\mathbf{y} \in M_v$ obedece ao vínculo esférico, o mesmo se aplica à respectiva imagem sob o mapa $\mathbf{y}^{(t)}$:

$$\sum_{k=1}^N (y_k^{(t)})^2 = \sum_{k=1}^{D_a} y_k^2 \left(1 + t \frac{\sum_{j>D_a} y_j^2}{\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2} \right) + \sum_{k>D_a} y_k^2 (1 - t) = \sum_{k=1}^N y_k^2 = N. \quad (\text{A.24})$$

Ademais do vínculo esférico, todo ponto $\mathbf{y} \in M_v$ deve ser mapeado em M_v . Pela própria definição de M_v , para qualquer $v' \in [-d, v]$ tem-se $M_{v'} \subseteq M_v$. Assim, mostrar que para qualquer t a imagem de qualquer \mathbf{y} em M_v sob o mapa $\mathbf{y}^{(t)}$ sempre pertence a M_v equivale a mostrar que $V(\mathbf{y}^{(t)})/N \leq v$ (nunca é maior que v). Ora, $V(\mathbf{y}^{(t)})$ é

uma função quadrática dos $\{y_k^{(t)}\}$ e, portanto, uma função linear de t :

$$\begin{aligned} \frac{V(\mathbf{y}^{(t)})}{N} &= -\frac{1}{2N} \sum_{k=1}^N \lambda_k \left(y_k^{(t)}\right)^2 = -\frac{1}{2N} \sum_{k=1}^{D_a} \lambda_k y_k^2 \left(1 + t \frac{\sum_{j>D_a} y_j^2}{\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2}\right)^2 - \frac{1}{2N} \sum_{k=D_a+1}^N \lambda_k y_k^2 (1-t) \\ &= v - \frac{t}{2N} \sum_{k>D_a} y_k^2 \left[\frac{\sum_{j\leq D_a} \lambda_j y_j^2}{\sum_{j\leq D_a} y_j^2} - \lambda_k \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Pode-se mostrar que o fator entre colchetes $[\cdot]$ na equação (A.25) é sempre positivo: $\frac{\sum_{j\leq D_a} \lambda_j y_j^2}{\sum_{j\leq D_a} y_j^2} > \frac{\inf_\ell \{\lambda_\ell\} \sum_{j\leq D_a} y_j^2}{\sum_{j\leq D_a} y_j^2} = \lambda_{D_a}$, e o somatório em k na última linha de (A.25) está entre $k = D_a + 1$ e $k = N$, e como $\lambda_{D_a} > \lambda_k$, $\forall k \in [D_a + 1, N]$:

$$\frac{V(\mathbf{y}^{(t)})}{N} \leq v - \frac{t}{2N} \sum_{j>D_a} y_j^2 (\lambda_{D_a} - \lambda_j) \leq v, \quad (\text{A.26})$$

onde a igualdade valerá somente no caso $t = 0$. A equação (A.26) mostra que a deformação de retração mapeia qualquer ponto $\mathbf{y} \in M_v$ em um ponto $\mathbf{y}^{(t)} \in M_v$, também.

Da análise da deformação de retração, equação (A.21), vê-se que para $t \leq 1$ descontinuidades nas funções $y_k^{(t)}$ somente podem ocorrer nos pólos $\sum_{j=1}^{D_a} y_j^2 = 0$. Como todos os termos neste somatório são positivos, os pólos em (A.21) são os pontos \mathbf{y}_p tais que $y_k = 0$, para $k \leq D_a$. Neste caso, como a energia potencial $v \in (v_a, v_{a+1})$, $-\frac{\lambda_{D_a}}{2} < v < -\frac{\lambda_{D_a+1}}{2}$:

$$\frac{V(\mathbf{y}_p)}{N} = -\frac{1}{2N} \sum_{k=D_a+1}^N \lambda_k y_k^2 \geq \frac{1}{N} \sum_{k=D_a+1}^N v y_k^2. \quad (\text{A.27})$$

e, aplicando o vínculo esférico $\mathbf{y}_p \cdot \mathbf{y}_p = \sum_{k=1}^N y_k^2 = \sum_{k=D_a+1}^N y_k^2 = N$:

$$\frac{V(\mathbf{y}_p)}{N} \geq v, \quad (\text{A.28})$$

e portanto estes pólos nunca pertencerão a M_v .

O mapa (A.21) possui todas as propriedades que definem uma deformação de retração e, portanto, prova-se que S^{D_a-1} é uma deformação de retração de M_v , com $v \in (v_a, v_{a+1})$. Tal resultado define o tipo de homotopia de M_v .

Como os números de Betti de uma variedade são invariantes frente ao tipo de homotopia, os números de Betti b_i de M_v com $v \in (v_a, v_{a+1})$ são:

$$b_i(M_v) = b_i(S^{D_a-1}) = \begin{cases} 1, & \text{para } i = \sum_{b=0}^a |C_b| - 1 = D_a - 1, \text{ e } i = 0, \\ 0, & \text{para } i \neq 0, (D_a - 1). \end{cases}$$

Em $v = v_a$, a homotopia das variedades M_v muda de S^{D_a-1} para S^{D_a-1} . Em $v = v_a$, a dimensão da deformação de retração de M_v é acrescida de $|C_a|$ - a degenerescência do $(a+1)$ -ésimo maior autovalor - e, para $v \in (v_a, v_{a+1})$, se torna igual a $D_a - 1 = \sum_{b=0}^a |C_b| - 1$. Se a degenerescência dos autovalores cresce menos

que linearmente com N (para *quase* todo $v \in [-d, d)$), D_a coincide no limite termodinâmico com a *ordem da subvariedade crítica* Σ_{v_a} que emerge em $v_a: \sum_{b=0}^{a-1} |C_b|$. Embora a dimensão da deformação de retração de M_v seja D_a , a variedade M_v sempre é dimensão N^9 . A variedade M_v emerge em $v = v_0 = -\lambda_0/2$ como dois estados fundamentais, dois pontos isolados. Como a energia potencial deve ser contínua sobre cada componente ergódica de M_v , na vizinhança imediata da energia v_0 , a variedade $M_{v_0+\delta}$ deve ser a união disjunta de dois discos N -dimensionais. Ora, para todo $v \geq v'$, vale que $M_{v'} \subseteq M_v$, e assim, para todo $v \geq v_0$, $M_{v_0} \subseteq M_v$: todas as variedades M_v com $v \geq v_0$ também serão N -dimensionais.

Em comparação à TT observada no modelo XY campo médio que corresponde à respectiva transição de fase, em que números de Betti de $\mathcal{O}(N)$ diferentes índices sofrem uma variação $\mathcal{O}\left(\frac{N!}{(N-k)!}\right)$ (onde k é o respectivo índice do número de Betti), no presente caso o que se observa é distinto. A cada TT ocorrendo no modelo esférico na rede, apenas dois índices de números de Betti sofrerão saltos, e estes saltos são $\mathcal{O}(1)$. Isto sugere que a quantidade topológica relevante, cuja variação deve estar relacionada à transição de fase no modelo, não seja o módulo do salto dos números de Betti ou o número de b_i 's a sofrerem tal salto, mas sim o índice do máximo número de Betti a sofrer um salto na TT, qual seja, $D_a - 1$, ou, possivelmente, a diferença entre os índices do número de Betti que salta de $1 \rightarrow 0$ e o índice do número de Betti que salta de $0 \rightarrow 1$, qual seja, $(D_a - 1) - (D_{a-1} - 1) = (D_a - D_{a-1})$.

Espectro e degenerescência da matriz de interação em $N \rightarrow \infty$

A invariância translacional da energia potencial do modelo, que depende, inclusive, da definição de condições de contorno apropriadas para a rede, resulta em uma matriz de interação *circulante*, que é um tipo de matriz de Toeplitz, com uma estrutura como a dada pela matriz $\tilde{\mathbf{M}}$ em (A.13)¹⁰. Para interações de suficientemente curto alcance¹¹, pode-se mostrar que o espectro de autovalores de uma matriz circulante se torna contínuo quando a ordem da matriz tende ao infinito. No modelo esférico curto alcance, a interação se dá apenas entre primeiros vizinhos, depende apenas da distância entre spins e é simétrica.

Sabe-se que os autovalores $\{\Psi_k\}$ de matrizes circulantes como em (A.13) são dados por:

$$\Psi_k = \sum_{n=0}^N c_n e^{-2\pi i n k/N}.$$

Em particular, no caso do modelo esférico na rede hipercúbica, cada spin possui $2d$ primeiros vizinhos, e este é o número de elementos c_k não-nulos em cada linha da matriz \mathbf{M} , os demais $N - 2d$ elementos de cada linha são nulos. Em dimensão 1, tem-se $c_2 = c_N = 1$, e os demais elementos de cada linha são nulos. Em dimensão 2, os únicos elementos não-nulos em cada linha de \mathbf{M} são $c_2 = c_{L+1} = c_N = c_{N-L+1} = 1$, onde $L = N^{1/d} = \sqrt{N}$.

⁹No que se refere à homotopia, as dimensões “adicionais” de M_v são topologicamente irrelevantes.

¹⁰Uma matriz de Toeplitz tem elementos $t_{i,j}$ tais que $t_{i,j} = t_{i+1,j+1}$, e uma matriz circulante é uma matriz de Toeplitz com as condições adicionais: $t_{i,N-j} = t_{i+j+1,1}$ e $t_{N-i,j} = t_{1,j+i+1}$.

¹¹Tal que cada spin não interaja com vizinhos a distâncias de ordem maior que $\mathcal{O}(\sqrt{N})$, em unidades do parâmetro de rede.

Em dimensão 3, estes são $c_2 = c_{L+1} = c_{L^2+1} = c_N = c_{N-L+1} = c_{N-L^2+1} = 1$. Em geral, os únicos c 's não-nulos serão: $c_{L^{k+1}} = c_{N-L^{k+1}}$, onde $k=0, \dots, d$.

Reescrevendo os autovalores da matriz \mathbf{M} a partir da forma dada para Ψ_m :

$$\lambda_m = \sum_{k=0}^{d-1} \left[c_{L^{k+1}} \exp\{-2\pi i(m-1)N^{k/d}/N\} + c_{N-L^{k+1}} \exp\{-2\pi i(m-1)(N-N^{k/d})/N\} \right],$$

a diferença entre dois autovalores consecutivos é obtida:

$$\begin{aligned} \Psi_{m+1} - \Psi_m &= \sum_{k=0}^{d-1} \left\{ \cos\left(2\pi m N^{(k-d)/d}\right) \left[2 - e^{2\pi i N^{(k-d)/d}} - e^{-2\pi i N^{(k-d)/d}}\right] + \right. \\ &\quad \left. + i \sin\left(2\pi m N^{(k-d)/d}\right) \left[e^{2\pi i N^{(k-d)/d}} - e^{-2\pi i N^{(k-d)/d}}\right] \right\} \\ &= -4 \sum_{k=0}^{d-1} \sin\left(\pi N^{(k-d)/d}\right) \sin\left(\pi N^{(k-d)/d}(2m+1)\right) \\ &= -2 \sum_{k=0}^{d-1} \left\{ \cos\left(\phi_N(m, k)\right) - \cos\left(\phi_N(m, k) + \delta_N(k)\right) \right\} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0, \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

onde $\phi_N(m, k) = \pi N^{(k-d)/d} 2m$ e $\delta_N(k) = 2\pi N^{(k-d)/d}$ é tal que $\frac{2\pi}{N} \leq \delta_N(k) \leq \frac{2\pi}{N^{1/d}}$. Tomando o limite termodinâmico: $\lim_{N \rightarrow \infty} \delta_N(k) = 0, \forall k$, o que significa que o espectro de autovalores da matriz de interação é um subconjunto denso do intervalo $[-2d, +2d]$.

Como os $\hat{N} + 1$ valores críticos da energia potencial, $v_a = h(\lambda_a, 0)$, são uma função contínua dos autovalores, conclui-se que haverá um *contínuo de transições topológicas* nas variedades M_v no intervalo de energias acessíveis, $[-d, d]$.

No limite termodinâmico, considerando que D_a seja $\mathcal{O}(N)$, é conveniente introduzir uma função finita contínua, dada pela normalização de D_a : $d(v) \equiv D_a/N$. Dada a relação entre D_a e a degenerescência dos autovalores λ : $D_a = \sum_{b=0}^a |C_b|$, é imediato expressar a densidade de degenerescência $c(v)$ no limite termodinâmico:

$$d(v) = \int_{-d}^v c(v') dv' \quad \text{ou, equivalentemente} \quad c(v) = \frac{\partial d(v)}{\partial v}. \quad (\text{A.30})$$

Como as subvariedades M_v são sempre homotopicamente equivalentes a esferas cuja dimensão muda com v , o comportamento de D_a (equivalentemente de $d(v)$ no limite $N \rightarrow \infty$) como função de v determina completamente a topologia do modelo (ver equação (A.29)). A seguir, analisar-se-á o comportamento da ordem (normalizada) das subvariedades críticas, a função $d(v)$, e de sua derivada, a densidade de degenerescência¹² $c(v)$, a fim de caracterizar a evolução da topologia das variedades M_v . Diante da multiplicidade das transições topológicas¹³, espera-se encontrar assinaturas da transição de fase em transições topológicas que possuam alguma característica distintiva das demais. É imediato esperar que tais TTs estejam associadas a singularidades da função $d(v)$, isto é,

¹²A dimensão (normalizada) das subvariedades críticas.

¹³No limite termodinâmico, o contínuo de transições topológicas implica em $\hat{N} + 1 \rightarrow \infty$, um número infinito de TTs.

descontinuidades em alguma de suas derivadas - já que a própria função $d(v)$ é finita e contínua.

Reconsiderando o espectro (A.17) da matriz de interação, no limite termodinâmico é conveniente reexpressar o índice discreto $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d)$ através do vetor $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_d)$, onde $\omega_i = \frac{2\pi p_i}{N}$ são funções contínuas, com $0 \leq \omega_i < 2\pi$. Os autovalores são então dados por: $\lambda(\omega) = 2 \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i)$. A densidade de degenerescência, $c(v)$, é então dada por (ver equação (A.18)):

$$\begin{aligned}
c(v) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \delta_{\lambda(\mathbf{p}), -2v} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \\
&= \int_0^{2\pi} \left(\prod_{i=1}^d \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \delta(v + \lambda(\omega)/2) \\
&= \int_0^{2\pi} \left(\prod_{i=1}^d \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \exp\{ix(v + \sum_{i=1}^d \cos(\omega_i))\} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \exp\{ixv\} \left[\int_0^{2\pi} \frac{d\omega}{2\pi} \exp\{ix \cos(\omega)\} \right]^d \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} (\cos(xv) + i \sin(xv)) [J_0(x)]^d, \tag{A.31}
\end{aligned}$$

onde $\delta_{i,j}$ está para a delta de Kronecker, $\delta(x)$, para a delta de Dirac e $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero. A forma para a equação (A.31) foi obtida usando-se a representação de Fourier da delta de Dirac. Finalmente, considerando a paridade das funções seno e cosseno em relação ao centro do intervalo de integração, resulta para $c(v)$:

$$c(v) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \cos(xv) [J_0(x)]^d. \tag{A.32}$$

A função $d(v)$, conseqüentemente, é dada por:

$$d(v) = \int_{-d}^v dv' \int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \cos(xv') [J_0(x)]^d = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \frac{(\sin(vx) + \sin(dx))}{x} [J_0(x)]^d. \tag{A.33}$$

Convergência da densidade de degenerescência $c(v)$ e suas derivadas

Voltando a atenção à integral imprópria (A.32) e definindo-se o integrando $f(x, v) = \cos(xv) [J_0(x)]^d$, constata-se que $f(x, v)$ é o produto de duas funções contínuas, $\cos(xv)$ e $[J_0(x)]^d$, e portanto também é uma função contínua¹⁴. Tomando uma aproximação assintótica de $J_0(x)$, para $|x|$ grande [96]

$$\begin{aligned}
J_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left\{ \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \left[\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k}} \frac{\Gamma[2k+1/2]}{(2k)! \Gamma[-2k+1/2]} + R_1 \right] + \right. \\
&\quad \left. - \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \left[\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(-1)^k}{(2x)^{2k+1}} \frac{\Gamma[2k+3/2]}{(2k+1)! \Gamma[-2k-1/2]} + R_2 \right] \right\}, \tag{A.34}
\end{aligned}$$

¹⁴Dado que $\cos(xv)$ é contínua, para cada $(x, v) \in \mathbb{R}^2$, e $\epsilon_1 > 0$ arbitrário, existe um $\delta_1 > 0$, tal que $|x' - x| < \epsilon_1 \Rightarrow |\cos(x'v) - \cos(xv)| < \delta_1$; da mesma forma, para $[J_0(x)]^d$, a cada $x \in \mathbb{R}$ e $\epsilon_2 > 0$, corresponde um $\delta_2 > 0$: $|x' - x| < \epsilon_2 \Rightarrow |(J_0(x'))^d - (J_0(x))^d| < \delta_2$. Assim, para $f(x, v)$, para cada $(x, v) \in \mathbb{R}^2$, e $\epsilon \equiv \inf\{\epsilon_1, \epsilon_2\}$, existe um $\delta = \delta_1 \delta_2$, tal que $|x' - x| < \epsilon \Rightarrow |f(x', v) - f(x, v)| < \delta$, e, portanto, $f(x, v)$ é contínua.

onde $|R_1| < \left| \frac{\Gamma[2n+1/2]}{(2x)^{2n}(2n)!\Gamma[-2n+1/2]} \right|$ e $|R_2| < \left| \frac{\Gamma[2n+3/2]}{(2x)^{2n+1}(2n+1)!\Gamma[-2n-1/2]} \right|$, isto é, o módulo dos “restos“ é inferior ao módulo dos últimos termos descartados em cada somatório (série alternada). Truncando a expansão à ordem $\mathcal{O}(1)$:

$$J_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[\cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + R(x) \right], \quad (\text{A.35})$$

onde $|R(x)| < \frac{1}{4(2x)}$, que é uma função oscilante amortecida por $\propto x^{-1/2}$.

A densidade de degenerescência $c(v)$ é uma integral uniformemente convergente no intervalo $v \in [-d, d]$ para qualquer dimensão de rede d , exceto $d = 1$. Para $d \neq 1, 2$, podem-se obter diretamente as respectivas integrais $c(v)$:

$$c(v) = \begin{cases} \int_0^\infty \frac{dx}{\pi} \cos(xv) J_0(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{1-v^2}}, & \text{para } d = 1, \\ \int_0^\infty \frac{dx}{\pi} \cos(xv) (J_0(x))^2 = \frac{1}{2\pi} P_{-1/2}\left(\frac{v^2}{2} - 1\right), & \text{para } d = 2. \end{cases}$$

A primeira integral converge para $v \in (-d, d)$ (fica evidente da equação acima que $\lim_{v \rightarrow \pm d} c(v) = \infty$). Na segunda integral, $P_{-1/2}(x)$ é uma função de Legendre (de ordem $-1/2$), que converge no intervalo de energias acessíveis em $d = 2$, $v \in [-2, 0) \cup (0, 2]$, exceto pelo ponto $v = 0$ ¹⁵. É importante ressaltar que, apesar do contradomínio da função Hamiltoniana (3.1) ser dado pelo intervalo $[-d, d]$, está claro que o intervalo relevante para a termodinâmica é aquele dado pela energia interna acessível ao sistema termodinâmico, isto é, $\langle v \rangle \in [-d, 0)$ (ver análise ao final da Seção 3.1.2).

Para mostrar a convergência (uniforme) de $c(v)$ para $d \geq 3$, recorre-se ao teste de Weierstrass aplicado a integrais [97]. Ao decompor o domínio de integração em dois subintervalos: $\int_0^\infty dx f(x, v) = \int_0^r dx f(x, v) + \int_r^\infty dx f(x, v)$, onde r é tal que a aproximação assintótica (A.35) é precisa para $|x| > r$. Dado que o integrando $f(x, v)$ é uma função contínua, inclusive para $x \rightarrow 0$, a contribuição da integral sobre o domínio finito $\int_0^r dx f(x, v)$ é finita. Assim, a convergência uniforme de $c(v)$ está condicionada à convergência uniforme da integral imprópria $\int_r^\infty dx f(x, v)$:

$$\left| \int_r^\infty dx f(x, v) \right| < \left| \int_r^\infty \cos(xv) \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{d/2} \left[\cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + (2x)^{-1} \right]^d \right|. \quad (\text{A.36})$$

Usando a expansão do binômio de Newton para o fator entre colchetes:

$$\begin{aligned} & \left| \int_r^\infty dx \cos(xv) \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{d/2} \left[\cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + (2x)^{-1} \right]^d \right| = \\ & = \left| \int_r^\infty dx \cos(xv) \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{d/2} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \cos^{(d-j)}\left(x - \frac{\pi}{4}\right) (2x)^{-j} \right| \\ & = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{d/2} \left| \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} 2^{-j} \int_r^\infty dx x^{-d/2-j} \cos(xv) \cos^{(d-j)}\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \right|. \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

¹⁵A função $P_{-1/2}(x)$ possui singularidades em $x = -1$ e $x = \infty$, apenas.

Para $j > 0$,

$$\left| \int_r^\infty dx x^{-d/2-j} \cos(xv) \cos^{(d-j)}\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \right| < \int_r^\infty dx x^{-d/2-j} < \infty, \quad (\text{A.38})$$

para todo $d \geq 1$. Para $j = 0$, tem-se

$$\left| \int_r^\infty dx x^{-d/2} \cos(xv) \cos^d\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \right| < \int_r^\infty dx x^{-d/2}, \quad (\text{A.39})$$

que é finita para $d \geq 3$.

Da continuidade de $c(v)$ decorre a continuidade de $d(v)$ ¹⁶.

Resta analisar as derivadas de $c(v)$ em relação a v , em busca de descontinuidades nestas funções. Caso exista uma relação biunívoca entre transições topológicas e transições de fase, estas são as prováveis candidatas a estabelecerem tal relação.

As derivadas podem ser obtidas intercambiando-se derivação e integração, sob certas condições: $\partial/\partial v$ comuta com a integral sobre a variável x se e somente se a integral *resultante* for convergente. Querem-se calcular as seguintes integrais impróprias:

$$g_k(v) = (-1)^{[(k-1) \bmod 2] + 1} \int_0^\infty dx x^k f_k(xv) [J_0(x)]^d, \quad (\text{A.40})$$

onde $f_k(xv) = \sin(xv)$ para k ímpar e $f_k(xv) = \cos(xv)$ para k par. Quando a função $g_k(v)$ converge, esta corresponde à k -ésima derivada de $c(v)$, $\frac{\partial^k c(v)}{\partial v^k}$ (doravante, o sinal de g_k , irrelevante, será omitido).

Novamente, os integrandos de (A.40) são contínuos, e assim, a convergência da mesma integral com limite inferior em $r > 0$ (com r definido como acima) garante a convergência de $g_k(v)$. Nesta integral pode-se aproximar $J_0(x)$ pela sua expansão assintótica:

$$g_k(v) \propto \int_r^\infty dx x^k f_k(xv) [J_0(x)]^d \propto \sum_{i=0}^d \binom{d}{i} \int_r^\infty dx x^{k-i-d/2} f_k(xv) (\cos(x - \pi/4))^{d-i}. \quad (\text{A.41})$$

De maneira similar à análise para (A.37), vê-se que dentre as integrais acima, à medida em que k aumenta, a primeira a apresentar alguma divergência será aquela com $i = 0$. Assim, (A.41) convergirá se e somente se o termo $i = 0$ convergir. A condição para que este termo seja convergente é dada pelo expoente de x : $k - \frac{d}{2} < -1$. As k primeiras derivadas de $c(v)$ são contínuas e dadas por $g_k(v)$, onde $k = \sup\{n \in \mathbb{N} : n < d/2 - 1\}$. Para inteiros $k \geq d/2$, $g_k(v)$ diverge e portanto, como explicado anteriormente, nada se pode afirmar sobre a derivada $\frac{\partial^k c(v)}{\partial v^k}$ a partir da equação (A.40).

O inteiro \bar{k} no intervalo $[d/2 - 1, d/2)$ pertence ao caso limite entre a convergência e a divergência - sep-

¹⁶De fato, do teorema de Heine-Cantor, toda função contínua em um domínio compacto é uniformemente contínua. Fixando $\epsilon > 0$, existe, para cada $v \in [-d, d]$, $\delta(v) > 0$, tal que $|v' - v| < \epsilon \Rightarrow |c(v') - c(v)| < \delta$. Tomando-se $\bar{\delta} = \sup_{v' \in [v'', v]} \{\delta(v')\}$, e $v > v''$, constata-se que $|v - v''| < \epsilon \Rightarrow |d(v) - d(v'')| = \left| \int_{-d}^v c(v') dv' - \int_{-d}^{v''} c(v') dv' \right| = \left| \int_{v''}^v c(v') dv' \right| < \tau$, onde $\tau \equiv (v - v'') \left[\inf_{v' \in [v'', v]} \{c(v')\} + \frac{1}{2} \frac{(v - v'')}{\epsilon} \bar{\delta} \right]$.

arados pelo expoente $d/2 - 1$, que corresponde à divergência logarítmica. Neste caso limite, somente o primeiro termo $i = 0$ em (A.41) diverge. Como a dimensão da rede d é inteira, \bar{k} será dado por uma das duas expressões: $d/2 - 1$ ou $d/2 - 1/2$, que podem ser expressas simplesmente por $\lceil d/2 - 1 \rceil$ (onde $\lceil \arg \rceil = \inf\{n \in \mathbb{N} \mid n \geq \arg\}$). O termo $i = 0$, por sua vez, assume uma dentre as quatro formas:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \int_r^\infty dx x^{-1/2} \cos(xv) \cos^d(x - \pi/4), & \text{para } d \text{ ímpar, } (d-1) \text{ múltiplo de } 4, \quad \bar{k} = d/2 - 1/2; \\ \int_r^\infty dx x^{-1/2} \sin(xv) \cos^d(x - \pi/4), & \text{para } d \text{ ímpar, } (d-1) \text{ não é múltiplo de } 4, \quad \bar{k} = d/2 - 1/2; \\ \int_r^\infty dx x^{-1} \cos(xv) \cos^d(x - \pi/4), & \text{para } d \text{ par, } (d-2) \text{ múltiplo de } 4, \quad \bar{k} = d/2 - 1; \\ \int_r^\infty dx x^{-1} \sin(xv) \cos^d(x - \pi/4), & \text{para } d \text{ par, } (d-2) \text{ não é múltiplo de } 4, \quad \bar{k} = d/2 - 1. \end{array} \right.$$

Usando identidades trigonométricas¹⁷ [96], estes termos podem ser reexpressos como:

$$\begin{aligned} & \int_r^\infty \frac{dx}{\hat{g}_d(x)} \frac{1}{2} \left[(1 + (-1)^{\bar{k}}) \cos(xv) + (1 - (-1)^{\bar{k}}) \sin(xv) \right] \cos^d \left(x - \frac{\pi}{4} \right) = \\ = & \int_r^\infty \frac{dx}{\hat{g}_d(x)} \frac{1}{2} \left[(1 + (-1)^{\bar{k}}) \cos(xv) + (1 - (-1)^{\bar{k}}) \sin(xv) \right] \times \\ & \times \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \{ \cos[(d-2j)x] \cos[(d-2j)\pi/4] + \sin[(d-2j)x] \sin[(d-2j)\pi/4] \} = \\ = & \frac{1}{2^{d+1}} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \int_r^\infty \frac{dx}{\hat{g}_d(x)} \left\{ -f_{\bar{k}+1}((d-2j-2)\pi/4) \left[\cos((d-2j+v)x) + (-1)^{\bar{k}} \cos((d-2j-v)x) \right] + \right. \\ & \left. + (-1)^{\bar{k}} f_{\bar{k}}((d-2j-2)\pi/4) \left[\sin((d-2j+v)x) + (-1)^{\bar{k}} \sin((d-2j-v)x) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Acima, usa-se novamente a notação $f_k(x) = \sin(x)$, para k ímpar, e $f_k(x) = \cos(x)$, para k par. A função $\hat{g}_d(x) = \sqrt{x}$, para d ímpar, e $\hat{g}_d(x) = x$, para d par. As integrais:

$$\begin{aligned} S(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x^2} dt \frac{\sin t}{\sqrt{t}}, \\ C(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x^2} dt \frac{\cos t}{\sqrt{t}}, \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

$$\begin{aligned} \text{si}(x) &= - \int_x^\infty dt \frac{\sin t}{t}, \\ \text{ci}(x) &= - \int_x^\infty dt \frac{\cos t}{t}, \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

são integrais de Fresnel (A.43) e funções integrais seno e cosseno (A.44), e emprestam suas propriedades às integrais em (A.42), que podem ser expressas em função daquelas. Para valores ímpares de d , e quando nenhum

¹⁷Quais sejam:

$$\cos^n x = \frac{1}{2^n} \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} \cos[(n-2j)x]; \quad \sin(x) = \cos(\pi/2 - x).$$

$$2 \cos(A) \cos(B) = \cos(A+B) + \cos(A-B); \quad 2 \sin(A) \sin(B) = \cos(A-B) - \cos(A+B); \quad 2 \sin(A) \sin(B) = \sin(A+B) + \sin(A-B).$$

dos argumentos dos cossenos se anula, a expressão (A.42) fica dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2^{d+1}} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \sqrt{2\pi} \left\{ -f_{\bar{k}+1}((d-2j-2)\pi/4) \times \right. \\ & \times \left[\frac{1}{\sqrt{d-2j+v}} \left(\frac{1}{2} - C\left(\sqrt{(d-2j+v)r}\right) \right) + \frac{(-1)^{\bar{k}}}{\sqrt{d-2j-v}} \left(\frac{1}{2} - C\left(\sqrt{(d-2j-v)r}\right) \right) \right] + \\ & + (-1)^{\bar{k}} f_{\bar{k}}((d-2j-2)\pi/4) \times \\ & \times \left. \left[\frac{1}{\sqrt{d-2j+v}} \left(\frac{1}{2} - S\left(\sqrt{(d-2j+v)r}\right) \right) + \frac{(-1)^{\bar{k}}}{\sqrt{d-2j-v}} \left(\frac{1}{2} - S\left(\sqrt{(d-2j-v)r}\right) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

onde se usou $\lim_{x \rightarrow \infty} S(x) = 1/2$, $\lim_{x \rightarrow \infty} C(x) = 1/2$. Claramente (A.45) é uniformemente convergente em $v \in (-d, d)$ ¹⁸. Por outro lado, os argumentos dos cossenos em (A.42) se anulam¹⁹ quando $v = 2j - d$ ou $v = d - 2j$, para $0 \leq j \leq d$, e (A.42) será dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2^{d+1}} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \left\{ \pm f_{\bar{k}+1}((d-2j-2)\pi/4) \left[\int_r^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} - \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2v}} \left(\frac{1}{2} - C(\sqrt{2vr}) \right) \right] + \right. \\ & \left. \pm f_{\bar{k}}((d-2j-2)\pi/4) \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2v}} \left(\frac{1}{2} - S(\sqrt{2vr}) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

A primeira integral na expressão acima evidentemente diverge. Como d é ímpar e j , um natural, as divergências na n -ésima derivada de $c(v)$, onde $n = \lceil \frac{d}{2} - 1 \rceil = \left(\frac{d}{2} - \frac{1}{2} \right)$, ocorrem em valores *inteiros ímpares* de v - inclusive $v = \pm d$.

Para valores pares de d , a equação (A.42) fica dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2^{d+1}} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \left\{ f_{\bar{k}+1}((d-2j-2)\pi/4) \left[\text{ci}[(d-2j+v)r] + (-1)^{\bar{k}} \text{ci}[(d-2j-v)r] \right] + \right. \\ & \left. + f_{\bar{k}}((d-2j-2)\pi/4) \left[(-1)^{\bar{k}+1} \text{si}[(d-2j+v)r] - \text{si}[(d-2j-v)r] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

A expressão (A.47) é igualmente (uniformemente) convergente em $v \in (-d, d)$. Entretanto, quando algum dos argumentos dos cossenos em (A.42) se anula, isto é, quando $v = \pm(d-2j)$ com $0 \leq j \leq d$, a expressão correspondente é dada por:

$$\frac{1}{2^{d+1}} \sum_{j=0}^d \binom{d}{j} \left\{ \pm f_{\bar{k}+1}((d-2j-2)\pi/4) \left[\int_r^\infty \frac{dx}{x} - \text{ci}(2vr) \right] \pm f_{\bar{k}}((d-2j-2)\pi/4) \text{si}(2vr) \right\}. \quad (\text{A.48})$$

Claramente, a primeira integral na expressão acima diverge. Sendo d neste caso um inteiro par, as divergências na $\left(\frac{d}{2} - 1 \right)$ -ésima derivada de $c(v)$ ocorrem em valores *inteiros pares* de v .

¹⁸Note-se que a continuidade do integrando, isto é, da função $x^k f_k(xv) (J_0(x))^d$, no intervalo $x \in [0, r]$ é imediatamente estabelecida, o que implica que singularidades nas derivadas de $c(v)$ são originadas na integral imprópria, sobre um domínio semi-infinito.

¹⁹Os argumentos não podem se anular simultaneamente.

Apêndice B

Parte II

B.1 Teorema LCT

O teorema LCT (*linked cluster theorem*) permite ainda simplificar o cálculo das contribuições à expansão [174, 176]. Tome-se como exemplo a expansão da função de correlação a dois pontos, $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Podem-se dividir os diagramas de Feynman em conexos e desconexos. Um diagrama conexo é aquele em que todos os vértices estão conectados por linhas (sólidas ou tracejadas) às extremidades livres \mathbf{x} e \mathbf{x}' . A contribuição de um diagrama desconexo é composta de dois fatores: um fator conectado às extremidades livres \mathbf{x} e \mathbf{x}' , e outra parte em que as linhas sólidas fecham-se em laços. Assim, a expressão representada por um diagrama de ordem ℓ desconexo, composto por um diagrama conexo de ordem k , e um outro desconexo de ordem $\ell - k$, será:

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \int \left(\prod_{i=1}^k d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{t}_1) \phi^2(\mathbf{t}'_1) \cdots \phi^2(\mathbf{t}_k) \phi^2(\mathbf{t}'_k) \phi(\mathbf{x}') \rangle_{con} \\ & \times \int \left(\prod_{i=k+1}^{\ell} d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi^2(\mathbf{t}_{k+1}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+1}) \cdots \phi^2(\mathbf{t}_\ell) \phi^2(\mathbf{t}'_\ell) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

onde $\langle \cdot \rangle_{con}$ no momento denota o diagrama conexo, enquanto $\langle \cdot \rangle$ denota o diagrama desconexo.

Permutar campos $\phi^2(\mathbf{t}_i)$'s entre os colchetes de média $\langle \cdot \rangle_{con}$ e $\langle \cdot \rangle$, corresponde simplesmente a rotular de forma distinta as variáveis de integração, permutando vértices entre as duas partes desconexas do diagrama. O número de tais permutações, isto é, o número de diagramas que correspondem à mesma contribuição é $\ell! / (k!(\ell - k)!)$ (que é o número de combinações possíveis das ℓ funções \mathcal{H}_1 's em grupos de k e $\ell - k$ funções).

A contribuição destes diagramas é, portanto

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^k}{k!} \int \left(\prod_{i=1}^k d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{t}_1) \phi^2(\mathbf{t}'_1) \cdots \phi^2(\mathbf{t}_k) \phi^2(\mathbf{t}'_k) \phi(\mathbf{x}') \rangle_{con} \\ & \times \frac{(-1)^{\ell-k}}{(\ell-k)!} \int \left(\prod_{i=k+1}^{\ell} d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi^2(\mathbf{t}_{k+1}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+1}) \cdots \phi^2(\mathbf{t}_{\ell}) \phi^2(\mathbf{t}'_{\ell}) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Considerando agora termos de diferentes ordens ℓ na expansão do numerador de (5.36), e em particular os diagramas contendo partes conexas $\langle \cdots \rangle_{con}$ idênticas, é fácil verificar que a contribuição correspondente será dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^k}{k!} \int \left(\prod_{i=1}^k d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{t}_1) \phi^2(\mathbf{t}'_1) \cdots \phi^2(\mathbf{t}_k) \phi^2(\mathbf{t}'_k) \phi(\mathbf{x}') \rangle_{con} \\ & \times \left[1 - \int d^3 t_{k+1} d^3 t'_{k+1} u(\mathbf{t}_{k+1} - \mathbf{t}'_{k+1}) \langle \phi^2(\mathbf{t}_{k+1}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+1}) \rangle \right. \\ & + \frac{1}{2} \int \left(\prod_{i=k+1}^{k+2} d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi^2(\mathbf{t}_{k+1}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+1}) \phi^2(\mathbf{t}_{k+2}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+2}) \rangle + \cdots \\ & \left. + \frac{(-1)^s}{s!} \int \left(\prod_{i=k+1}^{k+s} d^3 t_i d^3 t'_i u(\mathbf{t}_i - \mathbf{t}'_i) \right) \langle \phi^2(\mathbf{t}_{k+1}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+1}) \cdots \phi^2(\mathbf{t}_{k+s}) \phi^2(\mathbf{t}'_{k+s}) \rangle + \cdots \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

O sinal dos termos dentro dos colchetes varia com a alternância da paridade da ordem $(k+s)$ dos diagramas. Vê-se facilmente que a expressão entre colchetes compensa exatamente o denominador da equação (5.36), que é a expansão para a função de partição $Z(m, \beta)$. Este resultado permite omitir o denominador da equação (5.36), ao mesmo tempo considerando *apenas os diagramas completamente conexos*.

B.2 Elementos não-diagonais da função de correlação no espaço de réplicas

A estrutura matricial de (5.54) e o significado físico de $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ podem ser elucidados quando se estabelece a equivalência entre a solução estacionária da dinâmica de Langevin do sistema¹ e a estatística canônica do mesmo. Em [180], Crisanti prova que o limite $t - t' \rightarrow \infty$ da função de correlação de equilíbrio a dois tempos

$$C(t, t') = \langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') \rangle_{eq} \quad (\text{B.4})$$

de um vidro pode ser obtido através da teoria estática do sistema m -vezes replicado com uma estrutura 1RSB, no limite $m \rightarrow 1$. Na teoria de perturbação dinâmica gerada pela equação de Langevin, a emergência de uma fase

¹A dinâmica de Langevin para os graus de liberdade $\phi(\mathbf{x}, t)$ é dada pela equação $\partial_t \phi = \frac{\delta \mathcal{H}[\phi]}{\delta \phi} + \eta(\mathbf{x}, t)$, onde $\eta(\mathbf{x}, t)$ é uma força estocástica de distribuição Gaussiana, com média nula e segundo momento $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2T \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t')$ (isto é, um ruído branco). Mostra-se que com esta definição para $\eta(\mathbf{x}, t)$ a distribuição de probabilidade associada às soluções da dinâmica de Langevin, $\mathcal{P}(\phi, t)$, se aproxima assintoticamente da distribuição de equilíbrio canônica para $t \rightarrow \infty$.

de vidro está ligada a uma solução não-trivial da *equação de bifurcação* para a função de correlação assintótica $C(\infty) = \lim_{t-t' \rightarrow \infty} C(t, t')$:

$$\frac{C(\infty)}{C(0)} - C(0)\Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(\infty) \left[1 - \frac{C(\infty)}{C(0)} \right] = 0, \quad (\text{B.5})$$

onde $C(0) = C(t, t)$ e $\Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(\infty) = \lim_{t-t' \rightarrow \infty} \Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(t, t')$ é o limite assintótico da auto-energia dinâmica (associada à função de correlação de equilíbrio dinâmica). $C(\infty) = 0$ (líquido) sempre é solução. A demonstração procede provando que a mesma expansão diagramática resulta para as auto-energias dinâmica e estática (do sistema replicado) e que a auto-energia estática do sistema replicado também obedece à equação de bifurcação da dinâmica. A expansão diagramática da auto-energia dinâmica $\Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(t, t')$ no limite $t - t' \rightarrow \infty$ coincide com a expansão da auto-energia estática gerada pelo Hamiltoniano replicado $\mathcal{H}_m[\{\phi^a\}] = \sum_{a=1}^m \mathcal{H}[\phi^a]$ da estatística de equilíbrio canônica associada:

$$\lim_{t-t' \rightarrow \infty} \Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(t, t') = \lim_{m \rightarrow 1} \Sigma_{ab}, \quad a \neq b, \quad (\text{B.6})$$

onde a auto-energia estática, gerada no equilíbrio por \mathcal{H}_m é associada à função de correlação com estrutura 1RSB:

$$\mathcal{G}_{ab} = C(0)\delta_{ab} + C(\infty)(1 - \delta_{ab}), \quad (\text{B.7})$$

que obedece à equação de Dyson:

$$\sum_{c=1}^m [(\mathcal{G}_0^{-1})_{ac} - \Sigma_{ac}]\mathcal{G}_{cb} = \delta_{ab}, \quad (\text{B.8})$$

e $(\mathcal{G}_0^{-1})_{ac} = \frac{\delta^2 \mathcal{H}_m[\phi]}{\delta\phi\delta\phi} \Big|_{\phi=0} \delta_{ac} = \mathcal{H}''(0)\delta_{ac}$. Com a estrutura 1RSB dada acima para a função de correlação a dois tempos, e sendo $(\mathcal{G}_0)_{ac}$ diagonal, a auto-energia estática Σ_{ab} necessariamente herdarà a estrutura 1RSB de \mathcal{G}_{ab} : $\Sigma_{ab} = \Sigma_{\mathcal{G}}\delta_{ab} + \Sigma_{\mathcal{F}}(1 - \delta_{ab})$. Os elementos diagonais $\Sigma_{\mathcal{G}}$ correspondem, para $m \rightarrow 1$, à auto-energia dinâmica a tempos iguais, $\Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(0)$. Inserindo a estrutura de \mathcal{G}_{ab} e Σ_{ab} na equação de Dyson (B.8), obtém-se para os elementos não-diagonais: $[\mathcal{H}''(0) - \Sigma_{\mathcal{G}}]C(\infty) - \Sigma_{\mathcal{F}}C(0) - (m-2)\Sigma_{\mathcal{F}}C(\infty) = 0$, cujo limite $m \rightarrow 1$ resulta em

$$[\mathcal{H}''(0) - \Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(0)]C(\infty) + \Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(\infty)[C(\infty) - C(0)] = 0. \quad (\text{B.9})$$

Da mesma forma, os elementos diagonais da eq. de Dyson resultam, no limite $m \rightarrow 1$ em: $[\mathcal{H}''(0) - \Sigma_{\hat{\phi}\hat{\phi}}(0)]C(0) = 1$. Esta equação e (B.9) combinadas resultam na equação de bifurcação fornecida pela dinâmica de Langevin.

Voltando ao *ansatz* (5.54), o resultado acima permite identificar $\mathcal{F}(\mathbf{q}) = \Sigma_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$ com a função de correlação a dois tempos no limite $t - t' \rightarrow \infty$: $\mathcal{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = C(\infty)$.

B.3 Obtenção da matriz de polarização do modelo estudado [eq. (5.4)]

B.3.1 Forma exata da função $\Pi_G(q)$

As integrais envolvidas em Π_G e Π_F (equação (5.84)), respectivamente) são dadas por:

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{q}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} G_0^2(\mathbf{x}) = \int dr r 2\pi J_0(qr) G_0^2(r), \\ I_2(\mathbf{q}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} K^2(\mathbf{x}) = \int dr r 2\pi J_0(qr) K^2(r), \\ I_3(\mathbf{q}) &= \int d^2x e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} G_0(\mathbf{x}) K(\mathbf{x}) = \int dr r 2\pi J_0(qr) G_0(r)K(r), \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

onde $J_0(z)$ é a função de Bessel de ordem zero, resultante da integral na variável angular, já definida anteriormente.

As integrais I_1 , I_2 e I_3 podem ser obtidas a partir da integral [96]:

$$\int_0^\infty dx x^{v+1} K_\mu(ax) K_\mu(bx) J_\nu(cx) = \frac{\sqrt{\pi}c^\nu \Gamma(\nu + \mu + 1) \Gamma(\nu - \mu + 1)}{2^{3/2}(ab)^{\nu+1} (u^2 - 1)^{\nu/2+1/4}} P_{\mu-1/2}^{-\nu-1/2}(u), \quad (\text{B.11})$$

onde $P_\nu^\mu(z)$ é a função de Legendre associada, $\Gamma(z)$ é a função Gama, e $u = (a^2 + b^2 + c^2)/(2ab)$. A função de Legendre associada pode ser dada em termos de uma série hipergeométrica $F(\alpha, \beta; \gamma; z)$ através de:

$$P_\nu^\mu(z) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left(\frac{z+1}{z-1} \right)^{\mu/2} F(-\nu, \nu+1; 1-\mu; \frac{1-z}{2}). \quad (\text{B.12})$$

Em particular,

$$\int_0^\infty d\rho \rho J_0(q\rho) K_0(a\rho) K_0(b\rho) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma^2(1)}{2\Gamma(3/2)} \frac{1}{\sqrt{ab}} \frac{F(1/2, 1/2; 3/2; -\frac{(a-b)^2+q^2}{4ab})}{|(a+b)^2+q^2|^{1/2}}. \quad (\text{B.13})$$

Representando a série hipergeométrica em termos de funções elementares [96]:

$$h(a, b; q) \equiv \int_0^\infty d\rho \rho J_0(q\rho) K_0(a\rho) K_0(b\rho) = \frac{2 \sinh^{-1} \left(\sqrt{\frac{(a-b)^2+q^2}{4ab}} \right)}{\sqrt{(a+b)^2+q^2} \sqrt{(a-b)^2+q^2}}, \quad (\text{B.14})$$

onde $\sqrt{[(a+b)^2+q^2]^2} = |\Re\{(a+b)^2+q^2\}| + i|\Im\{(a+b)^2+q^2\}| = (a+b)^2+q^2$, já que em todos os casos abaixo considerados $(a+b)^2+q^2$ pertence ao primeiro quadrante do plano complexo. [$\Gamma(1) = 1$, $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$.]

A função de polarização diagonal, $\Pi_G(q)$, é então dada por:

$$\begin{aligned}
\Pi_G(q) &= \frac{2\pi}{4\pi^2 J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)^2} \int_0^\infty d\rho \rho J_0(q\rho) \left[K_0^2(\alpha\rho) + K_0^2(\alpha^*\rho) - 2K_0(\alpha\rho) K_0(\alpha^*\rho) \right] \\
&= \frac{2\pi}{4\pi^2 J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)^2} [h(\alpha, \alpha; q) + h(\alpha^*, \alpha^*; q) - 2h(\alpha, \alpha^*; q)] \\
&= \frac{1}{\pi J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)^2} \left[\frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right)}{q\sqrt{4\alpha^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right)}{q\sqrt{4(\alpha^*)^2 + q^2}} - 2 \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{1}{2|\alpha|}\sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}\right)}{\sqrt{(\alpha + \alpha^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}} \right].
\end{aligned} \tag{B.15}$$

O terceiro termo da expressão (5.94) é dado por:

$$-2 \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{1}{2|\alpha|}\sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}\right)}{\sqrt{(\alpha + \alpha^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}} = -2 \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{\sqrt{q^2 - 4\alpha_I^2}}{2\sqrt{\beta_R^2 + \alpha_I^2}}\right)}{\sqrt{4\beta_R^2 + q^2}\sqrt{q^2 - 4\alpha_I^2}}. \tag{B.16}$$

Para os dois primeiros termos, tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right)}{\sqrt{4\alpha^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right)}{\sqrt{4(\alpha^*)^2 + q^2}} &= \Re \left\{ \left(4\alpha^2 + q^2\right)^{-1/2} \right\} \left[\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right) + \sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right) \right] + \\
&+ i\Im \left\{ \left(4\alpha^2 + q^2\right)^{-1/2} \right\} \left[\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right) - \sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right) \right].
\end{aligned} \tag{B.17}$$

Definindo-se a variável $x \equiv \frac{q}{2\beta_R}$, e a constante $y_a \equiv \frac{\alpha_I}{\beta_R}$, ambas adimensionais (tomam-se $\beta_R, \alpha_I > 0$):

$$\begin{aligned}
\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right) + \sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right) &= \sinh^{-1}\left(\frac{\sqrt{2}x}{(1+y_a^2)}\sqrt{1+x^2-y_a^2}\sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}+1}}\right), \\
\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right) - \sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right) &= -i \sin^{-1}\left(\frac{\sqrt{2}x}{(1+y_a^2)}\sqrt{1+x^2-y_a^2}\sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}-1}}\right).
\end{aligned} \tag{B.18}$$

O pré-fator dos \sinh^{-1} pode ser reexpresso como:

$$\begin{aligned}
\left(4\alpha^2 + q^2\right)^{-1/2} &= \frac{1}{2\beta_R \sqrt{1+x^2-y_a^2} \sqrt{1+\frac{i2y_a}{(1+x^2-y_a^2)}}} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{22}\beta_R \sqrt{1+x^2-y_a^2}} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}}} \left\{ \sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}+1}} - i \sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}-1}} \right\}.
\end{aligned} \tag{B.19}$$

A função de polarização na diagonal, $\Pi_G(q)$ é dada de maneira exata por:

$$\begin{aligned}
\Pi_G(x) = & -\frac{1}{64\pi J^2 \beta_R^6 y_a^2} \left\{ \frac{1}{x \sqrt{1+x^2-y_a^2}} \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}}} \times \right. \\
& \times \left[\sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}} + 1} \sinh^{-1} \left(\frac{2x \sqrt{1+x^2} \sqrt{1-\frac{y_a^2}{1+x^2}}}{(1+y_a^2) \sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}} + 1} \right) + \right. \\
& \left. - \sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}} - 1} \sinh^{-1} \left(\frac{2x \sqrt{1+x^2} \sqrt{1-\frac{y_a^2}{1+x^2}}}{(1+y_a^2) \sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{1+\frac{4y_a^2}{(1+x^2-y_a^2)^2}} - 1} \right) \right] + \\
& \left. - \frac{\sinh^{-1} \left(\frac{2x \sqrt{1+x^2} \sqrt{1-\frac{y_a^2}{x^2}}}{(1+y_a^2)} \right)}{x \sqrt{1+x^2} \sqrt{1-\frac{y_a^2}{x^2}}} \right\}, \tag{B.20}
\end{aligned}$$

onde se reconhece $2 \sinh^{-1} \left(\frac{x \sqrt{1-(y_a/x)^2}}{\sqrt{1+y_a^2}} \right) = \sinh^{-1} \left(\frac{2x \sqrt{1+x^2} \sqrt{1-\frac{y_a^2}{x^2}}}{(1+y_a^2)} \right)$ (usando-se a identidade $2 \sinh^{-1}(x) = \sinh^{-1}(2x \sqrt{1+x^2})$).

Na figura B.1, grafica-se a função de polarização na diagonal, $\Pi_G(q)$, dada pela equação (B.20).

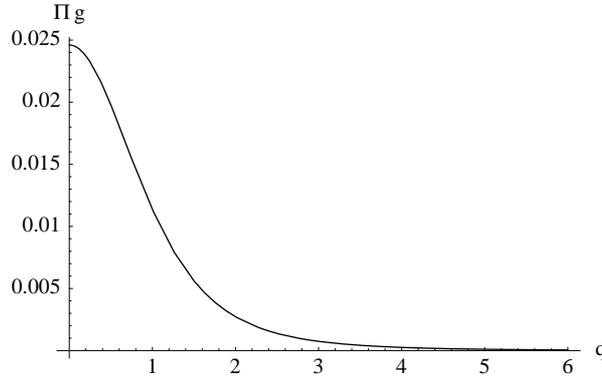


Figura B.1: Gráfico da função de polarização na diagonal, $\Pi_G(q)$, para $\beta_R = 0.8$, $\alpha_I = 0.1$ e $J = 2.0$.

B.3.2 Forma exata da função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$

A função de polarização fora da diagonal, $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, é dada por:

$$\begin{aligned}
\Pi_{\mathcal{F}}(q) &= \int_0^\infty d\rho \, 2\pi \rho J_0(q\rho) \mathcal{F}_0^2(\rho) = \int_0^\infty d\rho \, 2\pi \rho J_0(q\rho) [G_0(\rho) - \mathcal{K}_0(\rho)]^2 \\
&= \int_0^\infty d\rho \, \rho J_0(q\rho) \left\{ \frac{[K_0(\alpha\rho) - K_0(\alpha^*\rho)]^2}{2\pi J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)^2} + \frac{[K_0(\beta\rho) - K_0(\beta^*\rho)]^2}{2\pi J^2((\beta^*)^2 - \beta^2)^2} - \frac{[K_0(\alpha\rho) - K_0(\alpha^*\rho)][K_0(\beta\rho) - K_0(\beta^*\rho)]}{\pi J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)((\beta^*)^2 - \beta^2)} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\pi J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)^2} \left[\frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha}\right)}{q\sqrt{4\alpha^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\alpha^*}\right)}{q\sqrt{4(\alpha^*)^2 + q^2}} - 2 \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{1}{2|\alpha|}\sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}\right)}{\sqrt{(\alpha + \alpha^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \alpha^*)^2 + q^2}} \right] + \\
&\quad + \frac{1}{\pi J^2((\beta^*)^2 - \beta^2)^2} \left[\frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\beta}\right)}{q\sqrt{4\beta^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{q}{2\beta^*}\right)}{q\sqrt{4(\beta^*)^2 + q^2}} - 2 \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{1}{2|\beta|}\sqrt{(\beta - \beta^*)^2 + q^2}\right)}{\sqrt{(\beta + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\beta - \beta^*)^2 + q^2}} \right] + \\
&\quad - \frac{2}{\pi J^2((\alpha^*)^2 - \alpha^2)((\beta^*)^2 - \beta^2)} \left[\frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2 + q^2}{4\alpha\beta}}\right)}{\sqrt{(\alpha + \beta)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta^*}}\right)}{\sqrt{(\alpha^* + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha^* - \beta^*)^2 + q^2}} + \right. \\
&\quad \left. - \frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha\beta^*}}\right)}{\sqrt{(\alpha + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}} - \frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta}}\right)}{\sqrt{(\alpha^* + \beta)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha^* - \beta)^2 + q^2}} \right]. \tag{B.21}
\end{aligned}$$

As duas primeiras linhas no membro direito da equação acima são funcionalmente idênticas à expressão (B.15). A terceira linha pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
&\frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2 + q^2}{4\alpha\beta}}\right)}{\sqrt{(\alpha + \beta)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta^*}}\right)}{\sqrt{(\alpha^* + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha^* - \beta^*)^2 + q^2}} = \\
&= \Re \left\{ \frac{1}{\sqrt{(\alpha^2 + \beta^2 + q^2)^2 - 4\alpha^2\beta^2}} \right\} \left[\sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2 + q^2}{4\alpha\beta}} \right] + \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta^*}} \right] \right] + \\
&+ i \Im \left\{ \frac{1}{\sqrt{(\alpha^2 + \beta^2 + q^2)^2 - 4\alpha^2\beta^2}} \right\} \left[\sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2 + q^2}{4\alpha\beta}} \right] - \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta^*}} \right] \right]. \tag{B.22}
\end{aligned}$$

e a quarta linha de (B.21):

$$\begin{aligned}
&\frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha\beta^*}}\right)}{\sqrt{(\alpha + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}} + \frac{\sinh^{-1}\left(\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta}}\right)}{\sqrt{(\alpha^* + \beta)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha^* - \beta)^2 + q^2}} = \\
&= \Re \left\{ \frac{1}{\sqrt{(\alpha + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}} \right\} \left[\sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha\beta^*}} \right] + \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta}} \right] \right] + \\
&+ i \Im \left\{ \frac{1}{\sqrt{(\alpha + \beta^*)^2 + q^2}\sqrt{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}} \right\} \left[\sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha\beta^*}} \right] - \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha^* - \beta)^2 + q^2}{4\alpha^*\beta}} \right] \right]. \tag{B.23}
\end{aligned}$$

Definem-se as constantes $z_+ \equiv \frac{(\beta_I + \alpha_I)}{2\beta_R}$, $z_- \equiv \frac{(\beta_I - \alpha_I)}{2\beta_R}$ e $y_b \equiv \frac{\beta_I}{\beta_R}$. Na expressão (B.22), se reescreve:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{q^2 - (\alpha_I - \beta_I)^2}\sqrt{q^2 + 4\beta_R^2 - (\alpha_I + \beta_I)^2} + i4\beta_R(\alpha_I + \beta_I)} = \\
&= \frac{1}{4\beta_R^2 x \sqrt{1 - \frac{z_-^2}{x^2}} \sqrt{1 + x^2 - z_+^2}} \frac{\left[\sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1+x^2-z_+^2)^2}} + 1} - i \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1+x^2-z_+^2)^2}} - 1} \right]}{\sqrt{2}\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1+x^2-z_+^2)^2}}},
\end{aligned}$$

e também:

$$\begin{aligned} \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2 + q^2}{4\alpha\beta}} \right] + \text{c.c.} &= \sinh^{-1} \left[\frac{2\sqrt{\frac{x^2 - z_-^2}{1 - y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2 - z_-^2}{1 - y_a y_b}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1 + x^2 - y_a y_b - z_-^2)^2} + 1}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1 - y_a y_b)^2}} \sqrt{2}} \right], \\ \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2 + q^2}{4\alpha\beta}} \right] - \text{c.c.} &= -i \sinh^{-1} \left[\frac{2\sqrt{\frac{x^2 - z_-^2}{1 - y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2 - z_-^2}{1 - y_a y_b}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1 + x^2 - y_a y_b - z_-^2)^2} - 1}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1 - y_a y_b)^2}} \sqrt{2}} \right]. \end{aligned}$$

Na expressão (B.23), se reescreve:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{q^2 - (\alpha_I + \beta_I)^2} \sqrt{q^2 + 4\beta_R^2 - (\alpha_I - \beta_I)^2 + i4\beta_R(\alpha_I - \beta_I)}} = \\ &= \frac{1}{4\beta_R^2 x \sqrt{1 - \frac{z_+^2}{x^2}} \sqrt{1 + x^2 - z_-^2}} \frac{\left[\sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + x^2 - z_-^2)^2} + 1}} + i \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + x^2 - z_-^2)^2} - 1}} \right]}{\sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + x^2 - z_-^2)^2}}}, \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

e também:

$$\begin{aligned} \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha\beta^*}} \right] + \text{c.c.} &= \sinh^{-1} \left[\frac{2\sqrt{\frac{x^2 - z_+^2}{1 + y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2 - z_+^2}{1 + y_a y_b}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + x^2 + y_a y_b - z_+^2)^2} + 1}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + y_a y_b)^2}} \sqrt{2}} \right], \\ \sinh^{-1} \left[\sqrt{\frac{(\alpha - \beta^*)^2 + q^2}{4\alpha\beta^*}} \right] - \text{c.c.} &= +i \sinh^{-1} \left[\frac{2\sqrt{\frac{x^2 - z_+^2}{1 + y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2 - z_+^2}{1 + y_a y_b}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + x^2 + y_a y_b - z_+^2)^2} - 1}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1 + y_a y_b)^2}} \sqrt{2}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

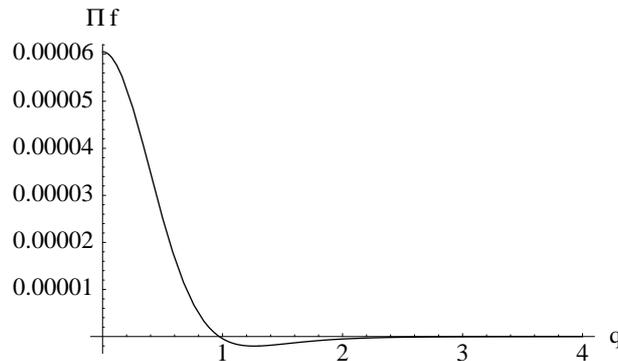


Figura B.2: Função de polarização fora da diagonal, $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, para $\beta_R = 0.8$, $\alpha_I = 0.1$, $\beta_I = 0.2$ e $J = 2.0$.

Assim, a função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$ pode ser exatamente expressa por:

$$\begin{aligned}
\Pi_{\mathcal{F}}(x) &= h(x; y_a) + h(x; y_b) + \\
&+ \frac{1}{32\pi J^2 \beta_R^6 y_a y_b} \left\{ \frac{1}{x \sqrt{1 - (z_-/x)^2} \sqrt{1 + x^2 - z_+^2}} \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1+x^2-z_+^2)^2}}} \times \right. \\
&\times \left[\sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1+x^2-z_+^2)^2}} + 1} \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{2} \sqrt{\frac{x^2-z_-^2}{1-y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2-z_-^2}{1-y_a y_b}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1-y_a y_b)^2}}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1-y_a y_b)^2}} + 1} \right] + \right. \\
&- \left. \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1+x^2-z_+^2)^2}} - 1} \sin^{-1} \left[\frac{\sqrt{2} \sqrt{\frac{x^2-z_-^2}{1-y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2-z_-^2}{1-y_a y_b}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1-y_a y_b)^2}}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_+^2}{(1-y_a y_b)^2}} - 1} \right] \right] + \\
&- \frac{1}{x \sqrt{1 - (z_+/x)^2} \sqrt{1 + x^2 - z_-^2}} \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+x^2-z_-^2)^2}}} \times \\
&\times \left[\sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+x^2-z_-^2)^2}} + 1} \sinh^{-1} \left[\frac{\sqrt{2} \sqrt{\frac{x^2-z_+^2}{1+y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2-z_+^2}{1+y_a y_b}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+y_a y_b)^2}}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+y_a y_b)^2}} + 1} \right] + \right. \\
&- \left. \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+x^2-z_-^2)^2}} - 1} \sin^{-1} \left[\frac{\sqrt{2} \sqrt{\frac{x^2-z_+^2}{1+y_a y_b}} \sqrt{1 + \frac{x^2-z_+^2}{1+y_a y_b}}}{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+y_a y_b)^2}}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{4z_-^2}{(1+y_a y_b)^2}} - 1} \right] \right] \left. \right\}, \tag{B.26}
\end{aligned}$$

onde a função $h(x; u)$ é definida na equação (B.14), na seção 5.4. A função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$ é representada no gráfico B.2, para o mesmo conjunto de parâmetros do gráfico da função $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$, Figura B.1. Note-se que $\frac{\Pi_{\mathcal{F}}(q)}{\Pi_{\mathcal{G}}(q)} \sim 10^{-3}$. [Como $\mathcal{F}(\mathbf{q})$ é uma função não-negativa, da definição (5.66) constata-se que $\Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$ também deve ser não-negativa. Entretanto, o gráfico da figura B.2 se torna negativo para q suficientemente grande. Tal *anomalia* se deve ao limite de precisão do programa que gerou o gráfico, e indica que $\Pi_{\mathcal{F}}(\mathbf{q})$ se torna essencialmente zero nesta região.]

Aproximações para as funções $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$ e $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$

Nesta seção são obtidas expansões para as funções $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$ e $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, dadas exatamente por (B.20) e (B.26). Na expansão de $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, observa-se que as duas primeiras contribuições se anulam, como antecipado pela ordem de grandeza relativa de $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, quando comparada a $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$. Cabe assim a questão de qual a ordem da função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$. Para tal, é necessário calcular uma a uma as contribuições de diferentes ordens a fim de determinar a menor ordem de aproximação a produzir uma contribuição finita à função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$.

Ao analisarem-se as contribuições dominantes a $\Pi_G(q)$ e $\Pi_F(q)$, constata-se que $\Pi_F(q)/\Pi_G(q)$ não é independente de momentum. Assim, $\Pi_F(q) \approx \mathcal{C}(y_a, y_b) \Pi_G(q)$, onde $\mathcal{C}(y_a, y_b)$ é um pré-fator independente de momentum e tal que $\mathcal{C}(y_a, y_a) = 0$; ou seja, $\Pi_F(q)$ não é bem aproximada por uma função proporcional a $\Pi_G(q)$.

No caso de $\Pi_G(q)$, a seguinte aproximação resulta mais conveniente:

$$\begin{aligned} \Pi_G(x) &= -\frac{1}{64\pi J^2 \beta_R^6} \frac{1}{x\sqrt{1+x^2}} \left\{ \Lambda^+(y_a, y_b) \sinh^{-1} \left[2x\sqrt{1+x^2} \Theta^+(y_a, y_b) \right] + \right. \\ &\quad \left. - \Sigma^+(y_a, y_b) \sin^{-1} \left[2x\sqrt{1+x^2} \Omega^+(y_a, y_b) \right] - \Lambda^-(y_a, y_b) \sinh^{-1} \left[2x\sqrt{1+x^2} \Theta^-(y_a, y_b) \right] \right\} \approx \\ &\approx \frac{1}{64\pi J^2 \beta_R^6} \left\{ \frac{2 \sinh^{-1}(x)}{x\sqrt{1+x^2}} [\Lambda^-(y_a, y_b) - \Lambda^+(y_a, y_b)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(1+2x^2)} \left[\Lambda^+(y_a, y_b) \left(1 - (\Theta^+(y_a, y_b))^2 \right) - \Lambda^-(y_a, y_b) \left(1 - (\Theta^-(y_a, y_b))^2 \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + 2\Sigma^+(y_a, y_b) \Omega^+(y_a, y_b) + \frac{4}{3} x^2 (1+x^2) \Sigma^+(y_a, y_b) (\Omega^+(y_a, y_b))^3 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

onde definiram-se:

$$\Lambda^\pm(y_a, y_b) \equiv \frac{\sqrt{\sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{\left(1+x^2 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4}\right)^2}} + 1}}{\sqrt{2} y_a y_b \sqrt{1 - \frac{(y_a \mp y_b)^2}{4x^2}} \sqrt{1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}} \sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{\left(1+x^2 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4}\right)^2}}}; \quad (\text{B.28})$$

$$\Sigma^\pm(y_a, y_b) \equiv \frac{\sqrt{\sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{\left(1+x^2 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4}\right)^2}} - 1}}{\sqrt{2} y_a y_b \sqrt{1 - \frac{(y_a \mp y_b)^2}{4x^2}} \sqrt{1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}} \sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{\left(1+x^2 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4}\right)^2}}}. \quad (\text{B.29})$$

De forma análoga, no argumento das funções \sinh^{-1} , definiram-se:

$$\begin{aligned} \sinh^{-1} \left[2x\sqrt{1+x^2} \frac{\sqrt{1 - \frac{(y_a \mp y_b)^2}{4x^2}} \sqrt{1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}}}{\sqrt{1+y_a^2} \sqrt{1+y_b^2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{\left(1+x^2 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4}\right)^2}} + 1} \right] &= \\ &\equiv \sinh^{-1} \left[2x\sqrt{1+x^2} \Theta^\pm(y_a, y_b) \right]; \\ \Theta^\pm(y_a, y_b) &= 1 + \xi^\pm(y_a, y_b), \text{ onde } \xi^\pm(y_a, y_b) = \mathcal{O} \left((y_a \pm y_b)^2 \right); \quad (\text{B.30}) \\ \therefore \sinh^{-1} \left[2x\sqrt{1+x^2} \Theta^\pm(y_a, y_b) \right] &\approx 2 \sinh^{-1}(x) - \frac{x\sqrt{1+x^2}}{(1+2x^2)} \left[1 - (\Theta^\pm(y_a, y_b))^2 \right]; \quad [x > |y_a - y_b|/2]. \end{aligned}$$

$$\sin^{-1} \left[2x \sqrt{1+x^2} \frac{\sqrt{1 - \frac{(y_a \mp y_b)^2}{4x^2}} \sqrt{1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}}}{\sqrt{1+y_a^2} \sqrt{1+y_b^2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4})^2}} - 1} \right] =$$

$$\equiv \sin^{-1} \left[2x \sqrt{1+x^2} \Omega^\pm(y_a, y_b) \right];$$

$$\Omega^\pm(y_a, y_b) = \chi^\pm(y_a, y_b), \text{ onde } \chi^\pm(y_a, y_b) = \mathcal{O}((y_a \pm y_b)); \quad (\text{B.31})$$

$$\therefore \sin^{-1} \left[2x \sqrt{1+x^2} \Omega^\pm(y_a, y_b) \right] \approx 2x \sqrt{1+x^2} \Omega^\pm(y_a, y_b) + \frac{4}{3} x^3 (1+x^2)^{3/2} (\Omega^\pm(y_a, y_b))^3. \quad (\text{B.32})$$

Tomando apenas a primeira contribuição não-nula à expansão de $\Pi_G(x)$, que é independente de y_a , resulta, para (B.27):

$$\Pi_G(x) \approx \frac{1}{64\pi J^2 \beta_R^6} \left\{ \frac{\sinh^{-1}(x)}{\sqrt{1+x^2}} \frac{(1+4x^2)}{x^3(1+x^2)^2} - \frac{1}{x^2(1+x^2)^2} + \frac{2}{(1+x^2)^2} \right\} \approx \begin{cases} \frac{1}{12\pi J^2 \beta_R^6 (1+x^2)^2}, & \text{para } 0 < x < 1; \\ \frac{1}{64\pi J^2 \beta_R^6 x^5}, & \text{para } x > 1. \end{cases} \quad (\text{B.33})$$

No caso de $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, a aproximação abaixo resulta mais conveniente: Pode-se aproximar a função $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, para $x < (y_a + y_b)/2$:

$$\begin{aligned} \Pi_{\mathcal{F}}(x) \approx & \frac{1}{64\pi J^2 \beta_R^6} x \left\{ \sum_{\sigma=\{+,-\}} (-\sigma) \left[\tilde{\Lambda}^\sigma(y_a, y_a) \left(\tilde{\Theta}^\sigma(y_a, y_a) + \frac{1}{6}(1+x^2) (\tilde{\Theta}^\sigma(y_a, y_a))^3 \right) + \right. \right. \\ & + \tilde{\Lambda}^\sigma(y_b, y_b) \left(\tilde{\Theta}^\sigma(y_b, y_b) + \frac{1}{6}(1+x^2) (\tilde{\Theta}^\sigma(y_b, y_b))^3 \right) - 2\tilde{\Lambda}^\sigma(y_a, y_b) \left(\tilde{\Theta}^\sigma(y_a, y_b) + \frac{1}{6}(1+x^2) (\tilde{\Theta}^\sigma(y_a, y_b))^3 \right) \left. \right] + \\ & + \tilde{\Sigma}^+(y_a, y_a) \left(\tilde{\Omega}^+(y_a, y_a) - \frac{1}{6}(1+x^2) (\tilde{\Omega}^+(y_a, y_a))^3 \right) + \tilde{\Sigma}^+(y_b, y_b) \left(\tilde{\Omega}^+(y_b, y_b) - \frac{1}{6}(1+x^2) (\tilde{\Omega}^+(y_b, y_b))^3 \right) + \\ & \left. + 2 \sum_{\sigma=\{+,-\}} (-\sigma) \left[\tilde{\Sigma}^\sigma(y_a, y_b) \left(\tilde{\Omega}^\sigma(y_a, y_b) - \frac{1}{6}(1+x^2) (\tilde{\Omega}^\sigma(y_a, y_b))^3 \right) \right] \right\}, \quad (\text{B.34}) \end{aligned}$$

onde se definiram:

$$\tilde{\Lambda}^\pm(y_a, y_b) \equiv \frac{\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}\right)^2} + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2)^2}} + \frac{\left(1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}\right)}{\left(1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}\right)^2 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2)^2}}}}{\sqrt{2} y_a y_b \frac{|y_b \mp y_a|}{2x} \sqrt{1 - \frac{4x^2}{(y_a \mp y_b)^2}}}; \quad (\text{B.35})$$

$$\tilde{\Sigma}^\pm(y_a, y_b) \equiv \frac{\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}\right)^2} + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2)^2}} - \frac{\left(1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}\right)}{\left(1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}\right)^2 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2)^2}}}}{\sqrt{2} y_a y_b \frac{|y_b \mp y_a|}{2x} \sqrt{1 - \frac{4x^2}{(y_a \mp y_b)^2}}}. \quad (\text{B.36})$$

Também se definiram:

$$\begin{aligned} \sin^{-1} \left[\sqrt{1+x^2} |y_a \mp y_b| \frac{\sqrt{1 - \frac{4x^2}{(y_a \mp y_b)^2}} \sqrt{1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}}}{\sqrt{1+y_a^2} \sqrt{1+y_b^2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2 - (y_a \pm y_b)^2/4)^2}} + 1} \right] = \\ \equiv \sinh^{-1} \left[\sqrt{1+x^2} \tilde{\Theta}^{\pm}(y_a, y_b) \right]; \\ \tilde{\Theta}^{\pm}(y_a, y_b) = \mathcal{O}(|y_a \mp y_b|); \\ \therefore \sin^{-1} \left[\sqrt{1+x^2} \tilde{\Theta}^{\pm}(y_a, y_b) \right] \approx \sqrt{1+x^2} \tilde{\Theta}^{\pm}(y_a, y_b) + \frac{1}{6} (1+x^2)^{3/2} (\tilde{\Theta}^{\pm}(y_a, y_b))^3; \quad [x < |y_a \mp y_b|/2]. \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

$$\begin{aligned} \sinh^{-1} \left[\sqrt{1+x^2} |y_a \mp y_b| \frac{\sqrt{1 - \frac{4x^2}{(y_a \mp y_b)^2}} \sqrt{1 - \frac{(y_a \pm y_b)^2}{4(1+x^2)}}}{\sqrt{1+y_a^2} \sqrt{1+y_b^2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{(y_a \pm y_b)^2}{(1+x^2 - (y_a \pm y_b)^2/4)^2}} - 1} \right] = \\ \equiv \sinh^{-1} \left[\sqrt{1+x^2} \tilde{\Omega}^{\pm}(y_a, y_b) \right]; \\ \tilde{\Omega}^{\pm}(y_a, y_b) = \mathcal{O}(|y_a^2 \mp y_b^2|); \\ \therefore \sinh^{-1} \left[\sqrt{1+x^2} \tilde{\Omega}^{\pm}(y_a, y_b) \right] \approx \sqrt{1+x^2} \tilde{\Omega}^{\pm}(y_a, y_b) - \frac{1}{6} (1+x^2)^{3/2} (\tilde{\Omega}^{\pm}(y_a, y_b))^3; \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Ao desenvolver-se a expansão (B.34), fica claro que a função de polarização referente a réplicas distintas, $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, é no máximo $\mathcal{O}((y_a^2 - y_b^2)^2)$. As duas contribuições de mais baixa ordem da respectiva expansão se anulam. A partir das aproximações acima, obtém-se para a função $\Pi_{\mathcal{F}}(x)$:

$$\Pi_{\mathcal{F}}(x) \approx \frac{(y_a^2 - y_b^2)^2 \Theta(1-x)}{10\pi J^2 \beta_R^6 (1+x^2)^6}, \quad (\text{B.39})$$

onde $\Theta(x)$ é a distribuição de Heaviside.

Nas aproximações acima para $\Pi_{\mathcal{G}}(q)$ e $\Pi_{\mathcal{F}}(q)$, se usaram as expansões em série de \sinh^{-1} e \sin^{-1} para $z < 1$:

$$\begin{cases} \sinh^{-1}(z) = z - \frac{1}{2} \frac{z^3}{3} + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \frac{z^5}{5} - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6} \frac{z^7}{7} + \dots, & [z < 1] \\ \sin^{-1}(z) = z + \frac{1}{2} \frac{z^3}{3} + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \frac{z^5}{5} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6} \frac{z^7}{7} + \dots, & [z < 1] \end{cases} \\ \sinh^{-1} \left(\frac{1}{z} \right) = \ln \frac{2}{z} + \frac{z^2}{4} - \frac{3z^4}{32} + \frac{5z^6}{96} - \dots, \quad [0 < z < 1] \\ \frac{\sinh^{-1}(z)}{\sqrt{1+z^2}} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{2^{2k} (k!)^2}{(2k+1)!} z^{2k+1}, \quad [z^2 < 1]. \quad (\text{B.40})$$

Bibliografia

- [1] Roberto Franzosi, Lapo Casetti, Lionel Spinelli, and Marco Pettini. Topological aspects of geometrical signatures of phase transitions. *Phys. Rev. E*, 60(5):R5009–R5012, Nov 1999.
- [2] Lapo Casetti, Marco Pettini, and E. G. D. Cohen. Geometric approach to hamiltonian dynamics and statistical mechanics. *Physics Reports*, 337(3):237 – 341, 2000.
- [3] Roberto Franzosi, Marco Pettini, and Lionel Spinelli. Topology and phase transitions: Paradigmatic evidence. *Phys. Rev. Lett.*, 84(13):2774–2777, Mar 2000.
- [4] T. H. Berlin and M. Kac. The spherical model of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, 86(6):821–835, Jun 1952.
- [5] Ana C. Ribeiro Teixeira and Daniel A. Stariolo. Topological hypothesis on phase transitions: The simplest case. *Phys. Rev. E*, 70(1):016113, Jul 2004.
- [6] Sebastián Risau-Gusman, Ana C. Ribeiro-Teixeira, and Daniel A. Stariolo. Topology, phase transitions, and the spherical model. *Phys. Rev. Lett.*, 95(14):145702, Sep 2005.
- [7] Sebastián Risau-Gusman, Ana Ribeiro-Teixeira, and Daniel Stariolo. Topology and phase transitions: The case of the short range spherical model. *Journal of Statistical Physics*, 124:1231–1253, 2006. 10.1007/s10955-006-9178-8.
- [8] Kurt Broderix, Kamal K. Bhattacharya, Andrea Cavagna, Annette Zippelius, and Irene Giardina. Energy landscape of a lennard-jones liquid: Statistics of stationary points. *Phys. Rev. Lett.*, 85(25):5360–5363, Dec 2000.
- [9] Tomás S. Grigera, Andrea Cavagna, Irene Giardina, and Giorgio Parisi. Geometric approach to the dynamic glass transition. *Phys. Rev. Lett.*, 88(5):055502, Jan 2002.
- [10] L. Angelani, R. Di Leonardo, G. Ruocco, A. Scala, and F. Sciortino. Quasisaddles as relevant points of the potential energy surface in the dynamics of supercooled liquids. *The Journal of Chemical Physics*, 116(23):10297–10306, 2002.

- [11] J. P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mézard. Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems. In A. P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, 1997. (Série Directions in Condensed Matter Physics, Vol 12).
- [12] Andrea Cavagna, Irene Giardinà, and Giorgio Parisi. An investigation of the hidden structure of states in a mean-field spin-glass model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 30(20):7021, 1997.
- [13] Andrea Cavagna, Irene Giardinà, and Giorgio Parisi. Stationary points of the Thouless-Anderson-Palmer free energy. *Phys. Rev. B*, 57(18):11251–11257, May 1998.
- [14] A. Crisanti, L. Leuzzi, and T. Rizzo. The complexity of the spherical p-spin spin glass model, revisited. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 36:129–136, 2003. 10.1140/epjb/e2003-00325-x.
- [15] Tommaso Castellani and Andrea Cavagna. Spin-glass theory for pedestrians. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005(05):P05012, 2005.
- [16] Andrea Cavagna. Supercooled liquids for pedestrians. *Physics Reports*, 476(4-6):51 – 124, 2009.
- [17] Gabriel Fabricius and Daniel A. Stariolo. Distance between inherent structures and the influence of saddles on approaching the mode coupling transition in a simple glass former. *Phys. Rev. E*, 66(3):031501, Sep 2002.
- [18] Jörg Schmalian and Peter G. Wolynes. Stripe glasses: Self-generated randomness in a uniformly frustrated system. *Phys. Rev. Lett.*, 85(4):836–839, Jul 2000.
- [19] Harry Westfahl, Jörg Schmalian, and Peter G. Wolynes. Self-generated randomness, defect wandering, and viscous flow in stripe glasses. *Phys. Rev. B*, 64(17):174203, Oct 2001.
- [20] Sangwook Wu, Harry Westfahl Jr., Jörg Schmalian, and Peter G. Wolynes. Theory of microemulsion glasses. *Chemical Physics Letters*, 359(1-2):1 – 7, 2002.
- [21] Harry Westfahl, Jörg Schmalian, and Peter G. Wolynes. Dynamical mean-field theory of quantum stripe glasses. *Phys. Rev. B*, 68(13):134203, Oct 2003.
- [22] Sangwook Wu, Jörg Schmalian, Gabriel Kotliar, and Peter G. Wolynes. Solution of local-field equations for self-generated glasses. *Phys. Rev. B*, 70(2):024207, Jul 2004.
- [23] Marco Tarzia and Antonio Coniglio. Pattern formation and glassy phase in the ϕ^4 theory with a screened electrostatic repulsion. *Phys. Rev. Lett.*, 96(7):075702, Feb 2006.
- [24] Marco Tarzia and Antonio Coniglio. Lamellar order, microphase structures, and glassy phase in a field theoretic model for charged colloids. *Phys. Rev. E*, 75(1):011410, Jan 2007.

- [25] N Saratz, T Michlmayr, O Portmann, U Ramsperger, A Vaterlaus, and D Pescia. Stripe-domain nucleation and creep in ultrathin Fe films on Cu(1 0 0) imaged at the micrometre scale. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40(5):1268, 2007.
- [26] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. Observation of stripe mobility in a dipolar frustrated ferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 96(4):047212, Feb 2006.
- [27] Alan J. Bray. Self-consistent screening calculation of the critical exponent η . *Phys. Rev. Lett.*, 32(25):1413–1416, Jun 1974.
- [28] Roberto Franzosi, Marco Pettini, and Lionel Spinelli. Topology and phase transitions i. preliminary results. *Nuclear Physics B*, 782(3):189 – 218, 2007.
- [29] C. N. Yang and T. D. Lee. Statistical theory of equations of state and phase transitions. i. theory of condensation. *Phys. Rev.*, 87(3):404–409, Aug 1952.
- [30] T. D. Lee and C. N. Yang. Statistical theory of equations of state and phase transitions. ii. lattice gas and Ising model. *Phys. Rev.*, 87(3):410–419, Aug 1952.
- [31] H. E. Gross. *Microcanonical Thermodynamics: Phase Transitions in "Small" Systems*. World Scientific Publishing, Cingapura, 2001. (World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol. 66).
- [32] Ana C. Ribeiro Teixeira. *O Modelo Esférico e a Hipótese Topológica sobre Transições de Fase*. Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2004. Dissertação de Mestrado.
- [33] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 1987.
- [34] Herbert B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley and Sons, Nova Iorque, EUA, 1985.
- [35] D. Ruelle. *Thermodynamic Formalism*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, EUA, 1978. (Encyclopaedia of Mathematics and its Applications).
- [36] L. P. Eisenhart. Dynamical trajectories and geodesics. *Ann. Math.*, 30:591, 1929.
- [37] Marco Pettini. Geometrical hints for a nonperturbative approach to hamiltonian dynamics. *Phys. Rev. E*, 47(2):828–850, Feb 1993.
- [38] Lapo Casetti, Cecilia Clementi, and Marco Pettini. Riemannian theory of hamiltonian chaos and Lyapunov exponents. *Phys. Rev. E*, 54(6):5969–5984, Dec 1996.
- [39] Lando Caiani, Lapo Casetti, Cecilia Clementi, and Marco Pettini. Geometry of dynamics, Lyapunov exponents, and phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 79(22):4361–4364, Dec 1997.

- [40] Lando Caiani, Lapo Casetti, and Marco Pettini. Hamiltonian dynamics of the two-dimensional lattice model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(15):3357, 1998.
- [41] Lando Caiani, Lapo Casetti, Cecilia Clementi, Giulio Pettini, Marco Pettini, and Raoul Gatto. Geometry of dynamics and phase transitions in classical lattice φ^4 theories. *Phys. Rev. E*, 57(4):3886–3899, Apr 1998.
- [42] Ch. Dellago, H. A. Posch, and W. G. Hoover. Lyapunov instability in a system of hard disks in equilibrium and nonequilibrium steady states. *Phys. Rev. E*, 53(2):1485–1501, Feb 1996.
- [43] Ch. Dellago and H. A. Posch. Lyapunov instability, local curvature, and the fluid-solid phase transition in two-dimensional particle systems. *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, 230(3-4):364 – 387, 1996.
- [44] Mickael Antoni and Stefano Ruffo. Clustering and relaxation in hamiltonian long-range dynamics. *Phys. Rev. E*, 52(3):2361–2374, Sep 1995.
- [45] Vito Latora, Andrea Rapisarda, and Stefano Ruffo. Lyapunov instability and finite size effects in a system with long-range forces. *Phys. Rev. Lett.*, 80(4):692–695, Jan 1998.
- [46] Vito Latora, Andrea Rapisarda, and Stefano Ruffo. Chaos and statistical mechanics in the hamiltonian mean field model. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 131(1-4):38 – 54, 1999. Classical Chaos and its Quantum Manifestations.
- [47] Marie-Christine Firpo. Analytic estimation of the lyapunov exponent in a mean-field model undergoing a phase transition. *Phys. Rev. E*, 57(6):6599–6603, Jun 1998.
- [48] Marco Pettini, Roberto Franzosi, and Lionel Spinelli. Topology and phase transitions: towards a proper mathematical definition of finite n transitions. *pré-impressão cond-mat/0104110*, 2001.
- [49] Monica Cerruti-Sola, Cecilia Clementi, and Marco Pettini. Hamiltonian dynamics and geometry of phase transitions in classical xy models. *Phys. Rev. E*, 61(5):5171–5190, May 2000.
- [50] Lapo Casetti, E. G. D. Cohen, and Marco Pettini. Exact result on topology and phase transitions at any finite n. *Phys. Rev. E*, 65(3):036112, Feb 2002.
- [51] Lapo Casetti, E. G. D. Cohen, and Marco Pettini. Topological origin of the phase transition in a mean-field model. *Phys. Rev. Lett.*, 82(21):4160–4163, May 1999.
- [52] Lapo Casetti, Marco Pettini, and E. G. D. Cohen. Phase transitions and topology changes in configuration space. *Journal of Statistical Physics*, 111:1091–1123, 2003. 10.1023/A:1023044014341.
- [53] L. Angelani, L. Casetti, M. Pettini, G. Ruocco, and F. Zamponi. Topological signature of first-order phase transitions in a mean-field model. *Europhys. Lett.*, 62(6):775–781, 2003.

- [54] Luca Angelani, Lapo Casetti, Marco Pettini, Giancarlo Ruocco, and Francesco Zamponi. Topology and phase transitions: From an exactly solvable model to a relation between topology and thermodynamics. *Phys. Rev. E*, 71(3):036152, Mar 2005.
- [55] F Zamponi, L Angelani, L F Cugliandolo, J Kurchan, and G Ruocco. Dynamics and geometric properties of the k -trigonometric model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(32):8565, 2003.
- [56] L. Angelani and G. Ruocco. Phase transitions and topology in $2 + k$ xy mean-field models. *Phys. Rev. E*, 76(5):051119, Nov 2007.
- [57] Roberto Franzosi and Marco Pettini. Theorem on the origin of phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 92(6):060601, Feb 2004.
- [58] Roberto Franzosi and Marco Pettini. Topology and phase transitions ii. theorem on a necessary relation. *Nuclear Physics B*, 782(3):219 – 240, 2007.
- [59] Marco Pettini. *Geometry and Topology in Hamiltonian Dynamics*. Springer, 2007. (Série Interdisciplinary Applied Mathematics, editores S. S. Antman, J. E. Marsden, L. Sirovich).
- [60] Paolo Grinza and Alessandro Mossa. Topological origin of the phase transition in a model of dna denaturation. *Phys. Rev. Lett.*, 92(15):158102, Apr 2004.
- [61] L. Angelani, G. Ruocco, and F. Zamponi. Relationship between phase transitions and topological changes in one-dimensional models. *Phys. Rev. E*, 72(1):016122, Jul 2005.
- [62] Michael Kastner. Unattainability of a purely topological criterion for the existence of a phase transition for nonconfining potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 93(15):150601, Oct 2004.
- [63] T W Burkhardt. Localisation-delocalisation transition in a solid-on-solid model with a pinning potential. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 14(3):L63, 1981.
- [64] M. Peyrard and A. R. Bishop. Statistical mechanics of a nonlinear model for dna denaturation. *Phys. Rev. Lett.*, 62(23):2755–2758, Jun 1989.
- [65] A. Andronico, L. Angelani, G. Ruocco, and F. Zamponi. Topological properties of the mean-field ϕ^4 model. *Phys. Rev. E*, 70(4):041101, Oct 2004.
- [66] D. A. Garanin, R. Schilling, and A. Scala. Saddle index properties, singular topology, and its relation to thermodynamic singularities for a ϕ^4 mean-field model. *Phys. Rev. E*, 70(3):036125, Sep 2004.
- [67] Ingo Hahn and Michael Kastner. The mean-field ϕ^4 model: Entropy, analyticity, and configuration space topology. *Phys. Rev. E*, 72(5):056134, Nov 2005.

- [68] I. Hahn and M. Kastner. Application of large deviation theory to the mean-field ϕ^4 -model. *Eur. Phys. J. B*, 50(1-2):311–314, 2006.
- [69] L. Angelani, R. Di Leonardo, G. Ruocco, A. Scala, and F. Sciortino. Saddles in the energy landscape probed by supercooled liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 85(25):5356–5359, Dec 2000.
- [70] T. R. Kirkpatrick and P. G. Wolynes. Stable and metastable states in mean-field potts and structural glasses. *Phys. Rev. B*, 36(16):8552–8564, Dec 1987.
- [71] Michael Kastner. Phase transitions and configuration space topology. *Rev. Mod. Phys.*, 80(1):167–187, Jan 2008.
- [72] Michael Kastner. On the origin of phase transitions in long- and short-range interacting systems. In Thierry Dauxois, Steffano Ruffo, and Leticia F. Cugliandolo, editors, *Long-Range Interacting Systems: Les Houches 2008 Session XC*, volume XC, pages 329–346. Oxford University Press, Nova Iorque, EUA, 2010.
- [73] Marius Costeniuc, Richard S. Ellis, and Hugo Touchette. Nonconcave entropies from generalized canonical ensembles. *Phys. Rev. E*, 74(1):010105, Jul 2006.
- [74] F. Bouchet and J. Barré. Classification of phase transitions and ensemble inequivalence, in systems with long range interactions. *Journal of Statistical Physics*, 118:1073–1105, 2005. 10.1007/s10955-004-2059-0.
- [75] Richard S. Ellis. *Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag, Berlin, Alemanha, 1985. (Série A Series of Comprehensive Studies in Mathematics, Vol. 271).
- [76] Richard S. Ellis. The theory of large deviations and applications to statistical mechanics. In Thierry Dauxois, Steffano Ruffo, and Leticia F. Cugliandolo, editors, *Long-Range Interacting Systems: Les Houches 2008 Session XC*, volume XC, pages 227–349. Oxford University Press, Nova Iorque, EUA, 2010.
- [77] Michael Kastner and Oliver Schnetz. On the mean-field spherical model. *Journal of Statistical Physics*, 122:1195–1214, 2006. 10.1007/s10955-005-8031-9.
- [78] Lapo Casetti and Michael Kastner. Nonanalyticities of entropy functions of finite and infinite systems. *Phys. Rev. Lett.*, 97(10):100602, Sep 2006.
- [79] Lapo Casetti and Michael Kastner. Partial equivalence of statistical ensembles and kinetic energy. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 384(2):318 – 334, 2007.
- [80] *resultado não publicado* D. Stariolo, Ana C. Ribeiro-Teixeira. 2005. 2005.
- [81] Michael Kastner and Oliver Schnetz. Phase transitions induced by saddle points of vanishing curvature. *Phys. Rev. Lett.*, 100(16):160601, Apr 2008.

- [82] Michael Kastner, Steffen Schreiber, and Oliver Schnetz. Phase transitions from saddles of the potential energy landscape. *Phys. Rev. Lett.*, 99(5):050601, Jul 2007.
- [83] Michael Kastner, Oliver Schnetz, and Steffen Schreiber. Nonanalyticities of the entropy induced by saddle points of the potential energy landscape. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008(04):P04025, 2008.
- [84] F. A. N. Santos and M. D. Coutinho-Filho. Topology, symmetry, phase transitions, and noncollinear spin structures. *Phys. Rev. E*, 80(3):031123, Sep 2009.
- [85] Fernando Antônio Nóbrega dos Santos. *Topology, Symmetry, and Phase Transitions in Spins Models*. Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Brasil, 2009. Tese de Doutorado.
- [86] G S Joyce and I J Zucker. Evaluation of the watson integral and associated logarithmic integral for the d -dimensional hypercubic lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(36):7349, 2001.
- [87] Paul R. Gerber and Michael E. Fisher. Critical temperatures of classical n -vector models on hypercubic lattices. *Phys. Rev. B*, 10(11):4697–4703, Dec 1974.
- [88] Jörn Dunkel and Stefan Hilbert. Phase transitions in small systems: Microcanonical vs. canonical ensembles. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 370(2):390 – 406, 2006.
- [89] Michael Kastner. Topological approach to phase transitions and inequivalence of statistical ensembles. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 359:447 – 454, 2006.
- [90] Hans Behringer. Critical properties of the spherical model in the microcanonical formalism. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005(06):P06014, 2005.
- [91] Michael Kastner. Microcanonical entropy of the spherical model with nearest-neighbour interactions. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2009(12):P12007, 2009.
- [92] Raoul Bott 7:331. Lectures on morse theory, old and new. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 7:331–358, 1982.
- [93] Charles Nash. *Differential Topology and Quantum Field Theory*. Academic Press, Londres, Reino Unido, 1991.
- [94] Allen Hatcher. *Algebraic Topology*. Cambridge University Press, 2003.
- [95] Charles Nash and Siddharta Sen. *Topology and Geometry for Physicists*. Academic Press, Londres, Reino Unido, 1983.
- [96] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and other Products*. Academic Press, 1994.

- [97] Elon Lages Lima. *Curso de Análise vol. I*. Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada (IMPA), Rio de Janeiro, Brasil, 1995. (Projeto Euclides).
- [98] J. Kurchan, G. Parisi, and M.A. Virasoro. Barriers and metastable states as saddle points in the replica approach. *J. Phys. I France*, 3(8):1819–1838, 1993.
- [99] Alessandro Campa, Thierry Dauxois, and Stefano Ruffo. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Physics Reports*, 480(3-6):57 – 159, 2009.
- [100] L. Angelani and G. Ruocco. Role of saddles in topologically driven phase transitions: The case of the d -dimensional spherical model. *Phys. Rev. E*, 77(5):052101, May 2008.
- [101] Marc Mézard and Giorgio Parisi. A first-principle computation of the thermodynamics of glasses. *The Journal of Chemical Physics*, 111(3):1076–1095, 1999.
- [102] Marc Mézard. First steps in glass theory. In Ong and Bhatt, editors, *More is Different*. Princeton University Press, 2002.
- [103] Marc Mézard and Giorgio Parisi. Statistical physics of structural glasses. *pré-impressão cond-mat/0002128*, 2000.
- [104] Pablo G. Debenedetti and Frank H. Stillinger. Supercooled liquids and the glass transition. *Nature*, 410:259–267, 2001.
- [105] M. Scott Shell and Pablo G. Debenedetti. Thermodynamics and the glass transition in model energy landscapes. *Phys. Rev. E*, 69(5):051102, May 2004.
- [106] Frank H. Stillinger. A Topographic View of Supercooled Liquids and Glass Formation. *Science*, 267(5206):1935–1939, 1995.
- [107] C. A. Angell. Formation of Glasses from Liquids and Biopolymers. *Science*, 267(5206):1924–1935, 1995.
- [108] L.-M. Martinez and C. A. Angell. A thermodynamic connection to the fragility of glass-forming liquids. *Nature*, 410:663–667, 2001.
- [109] C. Austen Angell and Kazuhide Ueno. Materials science: Soft is strong. *Nature*, 462:45–46, 2009.
- [110] H Frauenfelder, SG Sligar, and PG Wolynes. The energy landscapes and motions of proteins. *Science*, 254(5038):1598–1603, 1991.
- [111] D. J. Gross and M. Mézard. The simplest spin glass. *Nuclear Physics B*, 240(4):431 – 452, 1984.
- [112] Wolynes Peter G. Spatiotemporal structures in aging and rejuvenating glasses. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(5):1353–1358, 2009.

- [113] G. Parisi. Infinite number of order parameters for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 43(23):1754–1756, Dec 1979.
- [114] D. J. Thouless, P. W. Anderson, and R. G. Palmer. Solution of "solvable model of a spin glass". *Philosophical Magazine*, 35(3):593–601, 1977.
- [115] T. R. Kirkpatrick and D. Thirumalai. p-spin-interaction spin-glass models: Connections with the structural glass problem. *Phys. Rev. B*, 36(10):5388–5397, Oct 1987.
- [116] A. Crisanti and H. J. Sommers. The spherical p-spin interaction spin glass model: the statics. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 87:341–354, 1992. 10.1007/BF01309287.
- [117] Barbara Coluzzi, Marc Mezard, Giorgio Parisi, and Paolo Verrocchio. Thermodynamics of binary mixture glasses. *The Journal of Chemical Physics*, 111(19):9039–9052, 1999.
- [118] V. S. Dotsenko and G. Blatter. Mean-field glass transition in a model liquid. *Phys. Rev. E*, 72(2):021502, Aug 2005.
- [119] Stephan Büchner and Andreas Heuer. Metastable states as a key to the dynamics of supercooled liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 84(10):2168–2171, Mar 2000.
- [120] Stephan Büchner and Andreas Heuer. Potential energy landscape of a model glass former: Thermodynamics, anharmonicities, and finite size effects. *Phys. Rev. E*, 60(6):6507–6518, Dec 1999.
- [121] J.P. Bouchaud and M. Mézard. Self induced quenched disorder: a model for the glass transition. *J. Phys. I France*, 4(8):1109–1114, 1994.
- [122] Marcos P. O. Loureiro, Jeferson J. Arenzon, Leticia F. Cugliandolo, and Alberto Sicilia. Curvature-driven coarsening in the two-dimensional potts model. *Phys. Rev. E*, 81(2):021129, Feb 2010.
- [123] Alberto Sicilia, Jeferson J. Arenzon, Ingo Dierking, Alan J. Bray, Leticia F. Cugliandolo, Josu Martínez-Perdiguero, Ibon Alonso, and Inmaculada C. Pintre. Experimental test of curvature-driven dynamics in the phase ordering of a two dimensional liquid crystal. *Phys. Rev. Lett.*, 101(19):197801, Nov 2008.
- [124] Leticia F. Cugliandolo. Topics in coarsening phenomena. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(20):4360 – 4373, 2010. Proceedings of the 12th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.
- [125] Steven T. Bramwell and Michel J. P. Gingras. Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials. *Science*, 294(5546):1495–1501, 2001.
- [126] C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi. Magnetic monopoles in spin ice. *Nature*, 451:42–45, 2008.

- [127] Michael Seul and David Andelman. Domain Shapes and Patterns: The Phenomenology of Modulated Phases. *Science*, 267(5197):476–483, 1995.
- [128] K. De’Bell, A. B. MacIsaac, and J. P. Whitehead. Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 72(1):225–257, Jan 2000.
- [129] M. Grousson, G. Tarjus, and P. Viot. Phase diagram of an ising model with long-range frustrating interactions: A theoretical analysis. *Phys. Rev. E*, 62(6):7781–7792, Dec 2000.
- [130] T. Garel and S. Doniach. Phase transitions with spontaneous modulation-the dipolar ising ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 26(1):325–329, Jul 1982.
- [131] Lucas Nicolao. *Fases Moduladas em Filmes Ferromagnéticos Dipolares*. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil, 2005. Dissertação de Mestrado.
- [132] F. Cinti, O. Portmann, D. Pescia, and A. Vindigni. One-dimensional ising ferromagnet frustrated by long-range interactions at finite temperatures. *Phys. Rev. B*, 79(21):214434, Jun 2009.
- [133] J. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15(1):319–328, Jan 1977.
- [134] P. C. Hohenberg and J. B. Swift. Metastability in fluctuation-driven first-order transitions: Nucleation of lamellar phases. *Phys. Rev. E*, 52(2):1828–1845, Aug 1995.
- [135] S. A. Brazovskii, I. E. Dzyaloshinskiĭ, and B. G. Kukhareno. First-order magnetic phase transitions and fluctuations. *Sov. Phys. - JETP*, 43:1178, 1976. [publicado originalmente em russo em Zh. Eksp. Teor. Fiz.].
- [136] S. A. Brazovskii and S. G. Dmitriev. Phase transitions in cholesteric liquid crystals. *Sov. Phys. - JETP*, 42:497, 1976. [publicado originalmente em russo em Zh. Eksp. Teor. Fiz.].
- [137] S. A. Brazovskii. Phase transitions of an isotropic system to a nonuniform state. *Sov. Phys. - JETP*, 41:85, 1975. [publicado originalmente em russo em Zh. Eksp. Teor. Fiz., vol. 68, p. 175].
- [138] Rafael Monteiro Fernandes. *Propriedades Físicas De Sistemas Com Interações Competitivas*. Unicamp, Campinas, Brasil, 2008. Tese de Doutorado.
- [139] Sergio A. Cannas, Mateus F. Michelon, Daniel A. Stariolo, and Francisco A. Tamarit. Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: A monte carlo study. *Phys. Rev. B*, 73(18):184425, May 2006.
- [140] Roberto Mulet and Daniel A. Stariolo. Langevin dynamics of fluctuation-induced first-order phase transitions: Self-consistent hartree approximation. *Phys. Rev. B*, 75(6):064108, Feb 2007.
- [141] E. A. Jagla. Numerical simulations of two-dimensional magnetic domain patterns. *Phys. Rev. E*, 70(4):046204, Oct 2004.

- [142] Christopher Harrison, Douglas H. Adamson, Zhengdong Cheng, John M. Sebastian, Srinivasan Sethuraman, David A. Huse, Richard A. Register, and P. M. Chaikin. Mechanisms of Ordering in Striped Patterns. *Science*, 290(5496):1558–1560, 2000.
- [143] Ar. Abanov, V. Kalatsky, V. L. Pokrovsky, and W. M. Saslow. Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy. *Phys. Rev. B*, 51(2):1023–1038, Jan 1995.
- [144] A. B. Kashuba and V. L. Pokrovsky. Stripe domain structures in a thin ferromagnetic film. *Phys. Rev. B*, 48(14):10335–10344, Oct 1993.
- [145] Lucas Nicolao and Daniel A. Stariolo. Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 76(5):054453, Aug 2007.
- [146] Rogelio Díaz-Méndez and Roberto Mulet. $h - t$ phase diagram of the two-dimensional ising model with exchange and dipolar interactions. *Phys. Rev. B*, 81(18):184420, May 2010.
- [147] Sergio A. Cannas, Daniel A. Stariolo, and Francisco A. Tamarit. Stripe-tetragonal first-order phase transition in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 69(9):092409, Mar 2004.
- [148] A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robinson, and K. De’Bell. Striped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets. *Phys. Rev. B*, 51(22):16033–16045, Jun 1995.
- [149] I. Booth, A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, and K. De’Bell. Domain structures in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. Lett.*, 75(5):950–953, Jul 1995.
- [150] A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, K. De’Bell, and P. H. Poole. Phase diagram for a magnetic thin film with dipolar interactions and magnetic surface anisotropy. *Phys. Rev. Lett.*, 77(4):739–742, Jul 1996.
- [151] Santiago A. Pighín and Sergio A. Cannas. Phase diagram of an ising model for ultrathin magnetic films: Comparing mean field and monte carlo predictions. *Phys. Rev. B*, 75(22):224433, Jun 2007.
- [152] A. Moschel and K. D. Usadel. Influence of the dipole interaction on the direction of the magnetization in thin ferromagnetic films. *Phys. Rev. B*, 49(18):12868–12871, May 1994.
- [153] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, 422:701–704, Apr 2003.
- [154] Alessandro Vindigni, Niculin Saratz, Oliver Portmann, Danilo Pescia, and Paolo Politi. Stripe width and nonlocal domain walls in the two-dimensional dipolar frustrated ising ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 77(9):092414, Mar 2008.
- [155] Daniel G. Barci and Daniel A. Stariolo. Orientational order in two dimensions from competing interactions at different scales. *Phys. Rev. B*, 79(7):075437, Feb 2009.

- [156] Daniel G. Barci and Daniel A. Stariolo. Competing interactions, the renormalization group, and the isotropic-nematic phase transition. *Phys. Rev. Lett.*, 98(20):200604, May 2007.
- [157] Daniel Kivelson and Gilles Tarjus. The kuzmann paradox interpreted via the theory of frustration-limited-domains. *The Journal of Chemical Physics*, 109(13):5481–5486, 1998.
- [158] M. Grousson, V. Krakoviack, G. Tarjus, and P. Viot. Langevin dynamics of the coulomb frustrated ferromagnet: A mode-coupling analysis. *Phys. Rev. E*, 66(2):026126, Aug 2002.
- [159] M. Grousson, G. Tarjus, and P. Viot. Evidence for “fragile” glass-forming behavior in the relaxation of coulomb frustrated three-dimensional systems. *Phys. Rev. E*, 65(6):065103, Jun 2002.
- [160] David R. Nelson. *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2002.
- [161] A. Crisanti and H.-J. Sommers. Thouless-anderson-palmer approach to the spherical p-spin spin glass model. *J. Phys. I France*, 5(7):805–813, 1995.
- [162] A. Crisanti, L. Leuzzi, G. Parisi, and T. Rizzo. Spin-glass complexity. *Phys. Rev. Lett.*, 92(12):127203, Mar 2004.
- [163] F. Lechenault, O. Dauchot, G. Biroli, and J. P. Bouchaud. Lower bound on the four-point dynamical susceptibility: Direct experimental test on a granular packing. *EPL (Europhysics Letters)*, 83(4):46002, 2008.
- [164] Nigel Goldenfeld. *Lectures on phase transitions and critical phenomena*. Perseus Books Publishing, Reading, Massachussets, EUA, 1992. (Série Frontiers in Physics).
- [165] Jean Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford University Press, EUA, 2002. (Série The International Series of Monographs on Physics).
- [166] P. M. Chaikin. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1995.
- [167] T. R. Kirkpatrick, D. Thirumalai, and P. G. Wolynes. Scaling concepts for the dynamics of viscous liquids near an ideal glassy state. *Phys. Rev. A*, 40(2):1045–1054, Jul 1989.
- [168] Viktor Dotsenko. *Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems*. Cambridge University Press, 2001.
- [169] Rémi Monasson. Structural glass transition and the entropy of the metastable states. *Phys. Rev. Lett.*, 75(15):2847–2850, Oct 1995.
- [170] Marc Mézard and Giorgio Parisi. Thermodynamics of glasses: A first principles computation. *Phys. Rev. Lett.*, 82(4):747–750, Jan 1999.

- [171] Maxim Dzero, Jörg Schmalian, and Peter G. Wolynes. Activated events in glasses: The structure of entropic droplets. *Phys. Rev. B*, 72(10):100201, Sep 2005.
- [172] Peter Mayer, Kunimasa Miyazaki, and David R. Reichman. Cooperativity beyond caging: Generalized mode-coupling theory. *Phys. Rev. Lett.*, 97(9):095702, Aug 2006.
- [173] H. E. Stanley. Spherical model as the limit of infinite spin dimensionality. *Phys. Rev.*, 176(2):718–722, Dec 1968.
- [174] Shang-Keng Ma. *Modern Theory of Critical Phenomena*. W. A. Benjamin, Reading, Massachusetts, EUA, 1976. (Advanced Book Program).
- [175] Shang-Keng Ma. , cap. 4. In C. Domb and M. S. Green, editors, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, volume 6. Academic Press, 1976.
- [176] A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover Publications, Nova Iorque, EUA, 1975. (Traduzido e Editado por Richard A. Silverman).
- [177] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. E. J. Newman. *The Theory of Critical Phenomena - An Introduction to the Renormalization Group*. Oxford University Press, Londres, Reino Unido, 1995.
- [178] Richard D. Mattuck. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*. Dover Publications, Nova Iorque, EUA, 1992.
- [179] Wolfgang Götze. Recent tests of the mode-coupling theory for glassy dynamics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 11(10A):A1, 1999.
- [180] A. Crisanti. Long time limit of equilibrium glassy dynamics and replica calculation. *Nuclear Physics B*, 796(3):425 – 456, 2008.
- [181] A J Bray. Statistical mechanics of one-dimensional ginzburg-landau fields: Feynman graph evaluation of the screening approximation ($n - 1$ expansion). *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, 7(17):2144, 1974.
- [182] John M. Cornwall, R. Jackiw, and E. Tomboulis. Effective action for composite operators. *Phys. Rev. D*, 10(8):2428–2445, Oct 1974.
- [183] D. Dominici and U. Marini Bettolo Marconi. Effective action method for computing next to leading corrections of $o(n)$ models. *Physics Letters B*, 319(1-3):171 – 177, 1993.
- [184] Jörg Schmalian, Jr. Harry Westfahl, and Peter G. Wolynes. On the number of metastable states in a stripe glass. *International Journal of Modern Physics B*, 15(24-25):3292–3295, Oct 2001.
- [185] D. A. Stariolo Ana C. Ribeiro-Teixeira. 2010. (Em Preparação).

[186] J. Milnor. *Morse Theory*. Princeton University Press, Nova Jersey, EUA, 1973. (Annals of Mathematics Studies).