

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Dissertação de Mestrado

**Interação Geométrica de Defeitos Topológicos em
Sistemas Bidimensionais**

por

Marcelo da Silva Vieira

João Pessoa - Paraíba - Brasil

Setembro, 2006

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Marcelo da Silva Vieira

Interação Geométrica de Defeitos Topológicos em Sistemas
Bidimensionais

Dissertação de mestrado apresentada
à Coordenação do Programa de Pós-
graduação em Física da Universidade
Federal da Paraíba como parte dos
requisitos para a obtenção do grau de
Mestre em Física

Orientador: Cláudio B. S. Furtado

João Pessoa - Paraíba - Brasil

Julho, 2006

A meus pais.

Agradecimentos

A meus pais por todas as batalhas, dificuldades enfrentadas que me fizeram chegar onde cheguei, ao professor Cláudio Furtado por ter aceitado me orientar, pela paciência e boa orientação e por servir de inspiração a um pesquisador iniciante como eu. Agradeço também às amigas Astéria, Aparecida e Gisalva por terem me apoiado nas horas em que mais precisei e por terem acreditado no meu potencial; aos grandes brothers Bruno e Allan pela amizade em todos estes anos; aos grandes brothers e colegas Caio, Anibal, Knut, Cleverson, André(És tu um?), Aléssio, Emérson, Miguel(tô comendo feijão), Rodrigo, Alisson, Lúcio, Jamilton, Erms, Ferdinande. Agradeço também ao professor Fernando Moraes pelo grande exemplo a ser seguido, tanto pelo excelente professor e pesquisador que ele é como pela pessoa simples que este é; à Josélia da biblioteca pela ótima pessoa que é e também por perdoar alguns livros atrasados meus, hehe; à Virgínia pelos ótimos serviços prestados na coordenação de pós graduação e por estar sempre a disposição quando presisamos dela. E claro, à CAPES pelo apoio financeiro, afinal sem dinheiro ninguém vive e muito menos trabalha.

RESUMO

O objetivo principal deste trabalho é a caracterização termodinâmica de sistemas bidimensionais em geometrias não euclidianas tais como modelos XY, filmes de Hélio superfluido, filmes finos de cristal líquido. E como em duas dimensões estes sistemas apresentam apenas ordem local, então neles surgem naturalmente os *defeitos topológicos*. A contribuição significativa para a energia deve-se ao defeitos topológicos, então uma boa caracterização destes sistemas se dá pelo entendimento da física dos defeitos topológicos.

Sendo assim desenvolvemos o conteúdo deste trabalho de tal forma que ao final podemos entender como os sistemas descritos aqui se comportam em geometrias não euclidianas, bem como contribuições destas geometrias para transições de fase sofridas por estes, como fazemos no caso da esfera, do cone e do hiperbolóide.

Palavras Chaves: Defeitos Topológicos; Interação Geométrica.

ABSTRACT

The principal aim this work is the thermodynamic characterization of bidimensional systems in non-Euclidian geometries as XY models, Helium superfluids films and liquid crystal films. These systems present local order in two dimensions, then topological defects arise naturally. The significative contribution for the free energy in this systems it must at the topological defects, then a good characterization these systems is given by understanding the physics of topological defects.

This way, we develop the content of this dissertation with the purpose of to understanding the behave of the systems described here in non-euclidian geometries, as well contributions of these geometries for the phase transitions occurred in these systems, as we do in case of sphere, cone, hyperboloid.

Keywords: Topological Defects;Geometric Interaction.

Sumário

1	Introdução	12
1.1	Considerações Gerais	12
1.2	Parâmetro de Ordem de alguns Sistemas Ordenados	14
1.2.1	Ferromagnetos	14
1.2.2	Cristais Líquidos Nemáticos	18
1.2.3	Hélio Superfluido	19
2	Modelos XY e Defeitos Topológicos	21
2.1	Defeitos em Filmes Finos de Cristais Líquidos Nemáticos	23
2.2	Defeitos em Hélio Superfluido	26
3	Modelos XY em Espaços Curvos e Aplicações em Geometrias Usuais	30
3.1	Generalização da Energia Livre de Modelos XY para Espaços Curvos.	30
3.2	Interação Geométrica de Defeitos	33
3.3	Interação Geométrica de Defeitos em Geometrias não-Euclidianas . .	36
3.3.1	Interação de Defeitos no Carço Gaussiano	37
3.3.2	Interação de Defeitos na Esfera	39
3.3.3	Interação de defeitos na Geometria do Hiperbolóide	41
3.4	Interação Geométrica de Defeitos na Geometria do Cone	44

3.4.1	Interação Geométrica de Defeitos na Geometria do Toro . . .	45
4	Transições de Fase em Duas Dimensões	49
4.1	Ausência de Ordem de Longo Alcance em Sistemas Bidimensionais . .	49
4.2	Transição de Kosterlitz-Thouless	52
4.3	Transição de Kosterlitz Thouless na Presença de Espaços Curvos . . .	54
4.3.1	Transição de Kosterlitz-Thouless na Geometria da Esfera . . .	54
4.3.2	Transição de Kosterlitz-Thouless na Geometria do Hiperbolóide	55
4.3.3	Transição de kosterlitz-Thouless na Geometria do Cone	58
5	Conclusões e Perspectivas Futuras	61

Lista de Figuras

- 1.1 Fonte: SETHNA, *Order Parameters, Broken Symmetry, and Topology*, <http://www.lassp.cornell.edu/sethna>. (A) Distribuição dos constituintes na fase sólida. (B) Distribuição dos constituintes da água na fase líquida. 14
- 1.2 Fonte: KLEMAN and LAVRENTOVICH, *Soft Matter Physics: an Introduction*, Springer, 2001.
Dois estados de magnetização uniforme e suas representações no espaço do parâmetro de ordem. Cada representação corresponde a um único ponto em S^2 16
- 1.3 Fonte: KLEMAN and LAVRENTOVICH, *Soft Matter Physics: an Introduction*, Springer, 2001.
Modelo XY: em (a) temos um paramagneto, já em (b) temos um estado de magnetização uniforme e sua representação pontual em S^1 e em (c) temos um estado com magnetização não uniforme. Como em (b) a magnetização é uniforme, o caminho γ é representado por um ponto no espaço do parâmetro de ordem, enquanto que em (c) devido ao fato da magnetização não ser uniforme o caminho γ é representado pelo caminho Γ no espaço do parâmetro de ordem. 17

- 1.4 Fonte: SETHNA, *Order Parameters, Broken Symmetry, and Topology*,
<http://www.lassp.cornell.edu/sethna> . Representação no espaço do
 parâmetro de ordem para um defeito num cristal líquido nemático. 20
- 2.1 Fonte: KLEMAN and LAVRENTOVICH, *Soft Matter Physics: an
 Introduction*, Springer, 2001.
 Construção de Volterra para uma disclinação num nemático e medida
 de q via circuito de Burgers. (a) Corte Σ na linha L. (b) Abertura das
 bordas de Σ por um ângulo π e inserção do setor extra de matéria.
 (c) Configuração de equilíbrio do sistema após a inserção do setor
 extra de matéria. (d) Circuito de Burgers γ e caminho angular Γ
 feito pelo vetor diretor no transporte paralelo pelo circuito de Burgers. 24
- 3.1 Fonte: VITELLI and TURNER, PRL **93**, p. 215301, 2004.
 Em filmes de Hélio superfluido a energia de um vórtice é menor na
 região plana da superfície do que na no topo do "morro". Com isso
 é mais favorável ao vórtice se encontrar na região plana. 32
- 3.2 Fonte: Fonte: VITELLI and TURNER, PRL **93**, p. 215301, 2004.
 Temos aqui uma disclinação em um filme de cristal líquido depositado
 em dois "morro". O primeiro morro é mais suave e assim a energia
 devido a curvatura é menor, mas em contra partida a energia de
splay é maior. O contrário acontece no segundo morro; este é mais
 acentuado aumentando a energia de curvatura enquanto a energia de
splay diminui. 33
- 3.3 Autoenergia para um filme de superfluido na esfera experimentada
 pelo defeito. 40
- 3.4 Autoenergia E que um defeito experimenta na geometria do
 hiperbolóide em função de r 44

3.5	Parametrização do toro pelos ângulos ϕ e η	46
3.6	Energia de autointeração em função de η experimentada por um defeito no toro para um filme de superfluido	48
4.1	Diagrama de fases para uma membrana hiperbólica de um filme de superfluido para diferentes valores do raio de curvatura	57
4.2	Diagrama de fases para uma membrana hiperbólica de um filme de cristal líquido para diferentes valores do raio de curvatura com cargas topológicas no intervalo $q < -\frac{1}{2}$ ou $q > 2$	58
4.3	Diagrama de fases para uma membrana hiperbólica de um filme de cristal líquido para diferentes valores do raio de curvatura no caso de cargas topológicas no intervalo $1 < q < 2$	59
4.4	Temperatura de transição para uma membrana cônica de superfluido	60

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Gerais

A matéria no universo é organizada numa estrutura hierarquica. Como constituintes fundamentais desta estrutura temos quarks, glúons, elétrons, etc. Pelo menos até hoje estas partículas são tidas como fundamentais. Quarks e glúons formam os prótons e nêutrons que junto com os elétrons formam os átomos que conhecemos, os quais juntos formam as moléculas. Um aglomerado muito grande de moléculas através das interações entre elas formam estruturas que resultam a matéria do jeito que conhecemos na natureza, como por exemplo: gases, líquidos, sólidos, etc.

A Física da Matéria Condensada se encarrega de estudar o comportamento destes sistemas devido a interação dos seus "zilhões" de constituintes. Estruturas de átomos e moléculas podem dar origem desde sistemas mais simples como gases como até a sistemas bastante complexos como os sistemas biológicos. E como mais exemplos destas estruturas temos também os sólidos cristalinos, cristais Líquidos, os ferromagnetos, os superfluidos, os supercondutores, etc.

Alguns destes sistemas em certas condições podem se arranjar de maneira regular e assim temos os *sistemas ordenados*, enquanto que podemos ter também sistemas que não se arranjam de maneira regular e assim estes sistemas são desordenados. Os cristais, por exemplo, apresentam ordem posicional e orientacional de *longo alcance*, ou seja, propaga-se por toda a extensão do sistema. Já nos gases e nos líquidos os seus constituintes se distribuem de uma maneira desordenada.

Uma coisa muito importante a ser observada na ordem que estes sistemas apresentam é a simetria. Sistemas desordenados são mais simétricos que sistemas ordenados. Ao observarmos a estrutura de um líquido ordinário como a água por exemplo, vemos que os seus constituintes se distribuem de uma maneira desorganizada e assim se fizermos uma translação de um ponto a outro no líquido ou uma rotação de um ponto a outro, observamos em média a mesma coisa na vizinhança destes pontos, ou seja, o líquido apresenta *simetria contínua de translação* e *simetria contínua de rotação*. Mas quando baixa-se a temperatura chegará uma temperatura que a nova configuração de equilíbrio do sistema é tal que os constituintes do sistema estarão em posições devidamente ordenadas, formando-se o sólido cristalino(o gelo no caso da água). A figura 1.1 ilustra a diferença da configuração da água nos regimes líquido e sólido.

Neste processo ocorre o fenômeno chamado de *quebra de simetria*, ou seja, uma diminuição da simetria do sistema quando passa de um regime para o outro. No caso da água, a passagem do regime líquido para o regime sólido se dá pela quebra das simetrias contínuas de rotação e translação. O que podemos concluir de tudo isso é que a transição de fase de um regime menos ordenado para um regime mais ordenado ocorre com quebra de simetria.

Para se estudar em geral sistemas em matéria condensada, nós atentamos apenas para os graus de liberdade mais importantes do sistema, e no caso de

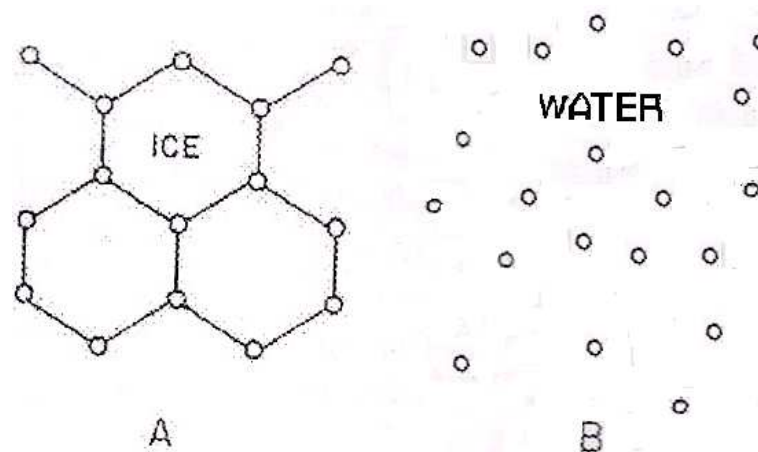


Figura 1.1: Fonte: SETHNA, *Order Parameters, Broken Symmetry, and Topology*, <http://www.lasp.cornell.edu/sethna>. (A) Distribuição dos constituintes na fase sólida. (B) Distribuição dos constituintes da água na fase líquida.

sistemas ordenados eles estão contidos numa variável chamada *parâmetro de ordem*. Parâmetro de ordem é uma grandeza escolhida para existir no regime ordenado de um sistema e se anular no regime desordenado. Na próxima seção vamos ver algumas escolhas de parâmetros de ordem para sistemas particulares.

1.2 Parâmetro de Ordem de alguns Sistemas Ordenados

O objetivo desta seção é entender o que é parâmetro de ordem. Para isso vamos considerar três sistemas particulares como exemplo: ferromagnetos, cristais líquidos na fase nemática e Hélio superfluido.

1.2.1 Ferromagnetos

Vamos considerar aqui sistemas que apresentam o fenômeno chamado *ferromagnetismo*. Sistemas que apresentam o fenômeno do ferromagnetismo chamam-se *ferromagnetos*. Um ferromagneto consiste de um conjunto de dipolos magnéticos no espaço que numa certa temperatura crítica se alinham numa mesma direção, o que resulta numa magnetização macroscópica. no espaço correlacionados. O resultado desta correlação resulta numa grandeza que é medida macroscopicamente, a chamada *magnetização*. Consideremos uma rede de spins no espaço na qual as interações relevantes ocorrem entre pares [1, 2, 3](Falaremos com mais detalhes dos ferromagnetos no próximo capítulo ao tratarmos dos modelos XY). A altas temperaturas a entropia domina o sistema e assim os spins não tem uma direção preferencial, mas a baixas temperaturas a entropia perde força e sob a ação de um campo magnético externo os spins da rede se alinham com este, resultando numa fase mais ordenada que é a *fase ferromagnética*. Então qual seria a melhor escolha para o parâmetro de ordem da fase ferromagnética? A resposta para isso está no fato de que na fase ferromagnética os spins estão correlacionados e contribuem macroscopicamente para a *magnetização* $\mathbf{M}(T, \mathbf{r})$ do sistema, ou seja, na fase ferromagnética o sistema apresenta magnetização e na fase desordenada não. Então a magnetização é uma ótima escolha para o parâmetro de ordem da fase ferromagnética. Um outro fato a se observar é que na fase ferromagnética na ausência do campo externo poderemos ter duas configurações diferentes para o estado fundamental do sistema, ou seja, $\mathbf{M} \neq -\mathbf{M}$.

Para este mesmo parâmetro de ordem podemos usar uma outra representação que é o chamado *espaço do parâmetro de ordem*. Para a fase ferromagnética o espaço do parâmetro de ordem é uma aplicação que pega cada ponto do sistema no espaço físico e associa a uma esfera de raio $|\mathbf{M}|$ denotada por S^2 . A vantagem do espaço do parâmetro de ordem é que a visualização da ordem do sistema se torna muito simples.

Se o sistema apresenta magnetização uniforme então no espaço do parâmetro de ordem temos um único ponto na direção associada a direção da magnetização no espaço físico. Dois diferentes estados de magnetização estão contidos em dois pontos em S^2 . E quando o estado de magnetização é deformado com uma mudança contínua em $\mathbf{M}$ de um ponto a outro por um caminho γ então esta deformação no espaço do parâmetro de ordem é vista como uma curva Γ em S^2 . A figura (1.2) ilustra o espaço do parâmetro de ordem para ferromagnetos.

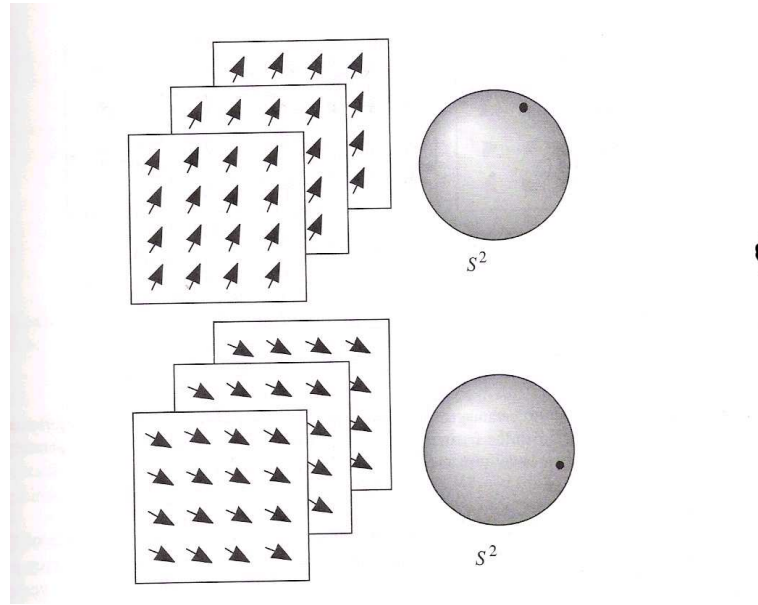


Figura 1.2: Fonte: KLEMAN and LAVRENTOVICH, *Soft Matter Physics: an Introduction*, Springer, 2001.

Dois estados de magnetização uniforme e suas representações no espaço do parâmetro de ordem. Cada representação corresponde a um único ponto em S^2 .

A versão bidimensional destes sistemas ferromagnéticos é o que chamamos de *modelos XY* e estes modelos serão muito importantes para se estudar defeitos topológicos em sistemas físicos. Para modelos XY, o espaço do parâmetro de ordem é um círculo com raio $|\mathbf{M}|$. A figura 1.3 mostra a representação no espaço do

parâmetro para modelos XY num de magnetização uniforme e a representação para um estado deformado.

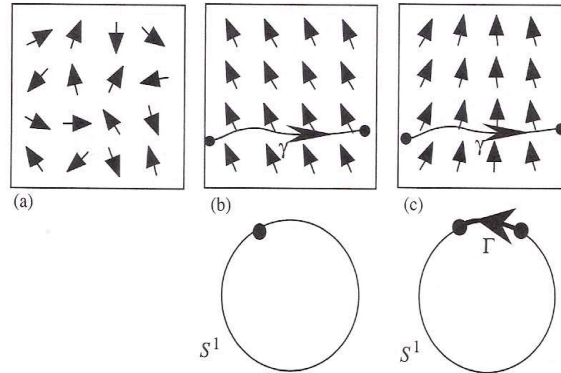


Figura 1.3: Fonte: KLEMAN and LAVRENTOVICH, *Soft Matter Physics: an Introduction*, Springer, 2001.

Modelo XY: em (a) temos um paramagneto, já em (b) temos um estado de magnetização uniforme e sua representação pontual em S^1 e em (c) temos um estado com magnetização não uniforme. Como em (b) a magnetização é uniforme, o caminho γ é representado por um ponto no espaço do parâmetro de ordem, enquanto que em (c) devido ao fato da magnetização não ser uniforme o caminho γ é representado pelo caminho Γ no espaço do parâmetro de ordem.

1.2.2 Cristais Líquidos Nemáticos

É bem conhecido na natureza que muitas substâncias podem apresentar fases líquidas e fases sólidas cristalinas, como por exemplo a água. A diferença entre estas fases está na ordem que estas apresentam. A fase sólida cristalina é caracterizada por ordem posicional e ordem orientacional enquanto a fase líquida é caracterizada por desordem orientacional e translacional. Ou em termos de simetria, a fase líquida apresenta simetria de rotação e translação enquanto a fase sólida cristalina apresenta a quebra destas duas simetrias. Mas existem na natureza materiais que apresentam propriedades intermediárias entre líquidos e sólidos cristalinos. São os chamados *cristais líquidos*. Os cristais líquidos se caracterizam por apresentarem desordem posicional e ordem orientacional, ou em termos de simetria, apresentam simetria orientacional e quebra de simetria translacional [1, 4].

Vamos tratar particularmente do cristal líquido nemático. Este se caracteriza por apresentar moléculas alongadas com uma orientação comum $\mathbf{n}$ e com desordem nas posições destas moléculas. Mas diferente dos sistemas ferromagnéticos que apresentam duas configurações possíveis para o estado fundamental, o cristal líquido nemático não distingue as orientações $\mathbf{n}$ e $-\mathbf{n}$, ou seja, com isso então o vetor diretor $\mathbf{n}$ não é uma boa escolha para o parâmetro de ordem. Um bom parâmetro de ordem para descrever a ordem nemática num cristal líquido nemático deve ser invariante pela transformação $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$. A escolha que adotaremos aqui para o parâmetro de ordem foi feita por Tserkov [1, 4, 5]. Vamos fazer o eixo z coincidir com a direção $\mathbf{n}$, e assim as direções espaciais serão definidas por um ângulo polar θ e por um ângulo azimutal ϕ . Seja $f(\theta, \phi)d\Omega$ a probabilidade de se encontrar a molécula orientada no eixo $\mathbf{a}$ num ângulo sólido $d\Omega$. Como as direções $\mathbf{a}$ e $-\mathbf{a}$ são equivalentes então $f(\theta, \phi) \equiv f(\pi - \theta, \phi)$. É bem razoável admitir que a probabilidade de se encontrar

alguma molécula não dependa do ângulo azimutal, assim com esta hipótese temos $f(\theta, \phi) = f(\theta)$. Como a molécula está orientada entre 0 e π então a normalização de $f(\theta)$ é dada por:

$$2\pi \int_0^\pi f(\theta) \sin \theta d\theta = 1 \quad (1.1)$$

Como na fase nemática a maior probabilidade de se encontrar a molécula é em $\theta = 0$, então a função de distribuição $f(\theta)$ tem um pico em $\theta = 0$. A escolha de Tsvetkov [5] para se medir a ordem nemática é dada por:

$$s = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle \quad (1.2)$$

Para a fase isotrópica $f(\theta) = \frac{1}{4\pi}$ e assim $s = 0$. Para a fase perfeitamente nemática temos que $f(\theta) = \frac{1}{4\pi} \delta(\theta)$ e assim $s = 1$.

Quanto a representação no espaço do parâmetro de ordem da ordem nemática poderíamos ser levados a pensar que este espaço seria uma esfera como no caso da ordem ferromagnética, mas acontece que na ordem nemática as direções $\vec{n}$ e $-\vec{n}$ são equivalentes. Sendo assim o espaço do parâmetro de ordem para a fase nemática é o hemisfério superior da esfera. No equador deste hemisfério dois pontos diametralmente opostos são equivalentes pela condição $f(\theta) = f(\pi - \theta)$. Os matemáticos chamam este espaço de RP^2 (espaço projetivo real). A figura 1.4 ilustra o espaço do parâmetro de ordem RP^2 .

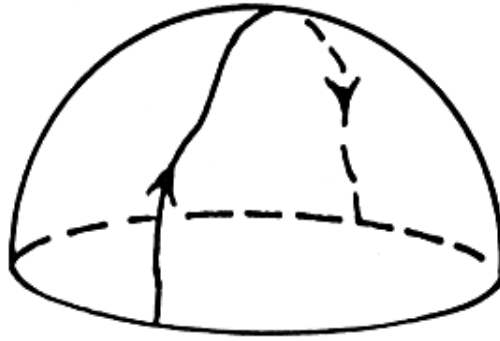


Figura 1.4: Fonte:SETHNA, *Order Parameters, Broken Symmetry, and Topology*, <http://www.lasp.cornell.edu/sethna>. Representação no espaço do parâmetro de ordem para um defeito num cristal líquido nemático.

1.2.3 Hélio Superfluido

Vamos considerar agora a fase superfluida do ^4He . Esta fase se caracteriza por um número macroscópico de partículas em um único estado quântico. Sendo assim podemos associar a este estado coletivo uma função de onda coletiva $\psi = |\psi_0|e^{i\theta}$, onde $|\psi_0| = |\psi_0(T, P)|$ mede a concentração de partículas de ^4He condensadas no estado superfluido. Na fase fluida normal temos que $|\psi_0(T, P)| = 0$, sendo assim um bom parâmetro de ordem para a fase superfluida é a função de onda coletiva ψ , pois esta é bem definida na fase superfluida e se anula na fase isotrópica.

Cada amostra superfluida é caracterizada pelo mesmo valor de θ . Isto significa que diferentes realizações de θ implicam em diferentes estados superfluidos. E também uma deformação na ordem superfluida significa uma variação contínua e suave em θ . Então o espaço do parâmetro de ordem neste caso é um círculo S^1 de raio $|\psi_0|$ cuja orientação angular é dada por θ . Uma fase superfluida perfeita corresponde a um ponto em S^1 enquanto que uma deformação na fase superfluida corresponde a um arco em S^1 .

Capítulo 2

Modelos XY e Defeitos Topológicos

Neste capítulo vamos introduzir os chamados modelos XY. Estudamos os modelos XY porque eles servem como fundamento para se compreender defeitos topológicos em sistemas bidimensionais, os quais são objetos do nosso estudo. A energia livre de modelos XY corresponde exatamente a energia de vórtices em filmes de Hélio superfluido e disclinações em filmes de cristal líquido na aproximação de uma constante elástica.

Modelos XY constitui num sistema de spins planares no qual as interações relevantes se dão entre pares vizinhos. A energia deste sistema é devido a interação entre os momentos angulares de spin e é dada por:

$$E = -J \sum_{\{ij\}} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (2.1)$$

Onde J é a constante de interação entre os momentos angulares de spin e θ_i é o ângulo que o i -ésimo spin do sistema forma com uma direção de referência.

Vamos então usar a hipótese de que a interação relevante ocorra entre os vizinhos próximos, assim o argumento $\theta_i - \theta_j$ é muito pequeno e podemos então aproximar o cosseno na energia por sua expansão em série e fazer uma aproximação para o contínuo. Então temos:

$$E = -J \sum_{\{ij\}} \left[1 - \frac{(\theta_i - \theta_j)^2}{2} \right] \quad (2.2)$$

Desprezando o termo constante que nada contribuirá para variações na energia e fazendo a aproximação para o contínuo da expressão acima obtemos que:

$$F = \frac{J}{2} \int dA (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 \quad (2.3)$$

Esta energia livre além de descrever os ferromagnetos XY propriamente dito, descreve também outros sistemas que apresentam *defeitos topológicos*. Na próxima seção apresentaremos dois destes sistemas.

Estamos interessados em configurações de equilíbrio e nesta configuração de equilíbrio a energia livre se minimiza. A energia livre (2.3) faz o papel de uma ação enquanto $(\nabla \theta)^2$ faz o papel de uma lagrangeana, sendo assim a minimização da energia livre (2.3) se dá pela equação de Euler Lagrange. Esta equação para (2.3) nos dá:

$$\nabla^2 \theta(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.4)$$

Isto é uma equação de Laplace, o que nos sugere que o campo $\theta(\mathbf{r})$ faça o papel de um potencial eletrostático.

2.1 Defeitos em Filmes Finos de Cristais Líquidos Nemáticos

Em filmes de cristais líquidos, e em particular, em fases nemáticas são observadas singularidades. Estas singularidades causam distorção na ordem orientacional do sistema e estas não são removidas por deformações do meio. São os chamados defeitos topológicos. Um dos defeitos mais comuns em nemáticos são as *desclinações*. Desclinações são defeitos pontuais(lineares em 3 dimensões) responsáveis pela distorção local da ordem orientacional levando conseqüentemente a uma quebra de simetria discreta de rotação.

A intensidade de uma disclinação é medida pelo parâmetro $q = \frac{\alpha}{2\pi}$, onde α é o ângulo o qual o vetor diretor percorre ao fazer um transporte paralelo por um circuito fechado contendo o defeito(também conhecido como circuito de Burgers). Este defeito pode ser construído usando o famoso processo de Volterra. Na figura 2.1 ilustramos os passos desta construção para um defeito de intensidade $q = -1/2$: em (a) fazemos um corte Σ numa linha L, em (b) abrimos as bordas de Σ por um ângulo π e introduzimos um setor extra de matéria, enquanto que em (c) o sistema fica em equilíbrio e em (d) mostra-se como medir a intensidade k do defeito pela medida do caminho angular Γ que o vetor diretor percorre ao se fazer um transporte paralelo via o circuito de Burgers γ . O sinal negativo se dá porque a orientação de Γ foi contrária a orientação de γ . É observado experimentalmente que desclinações em cristais líquidos são múltiplos inteiros de $\pm 1/2$

A estes defeitos estão associados uma energia de deformação. De Gennes mostra [4] que existem três deformações possíveis para um nemático. Estas três deformações

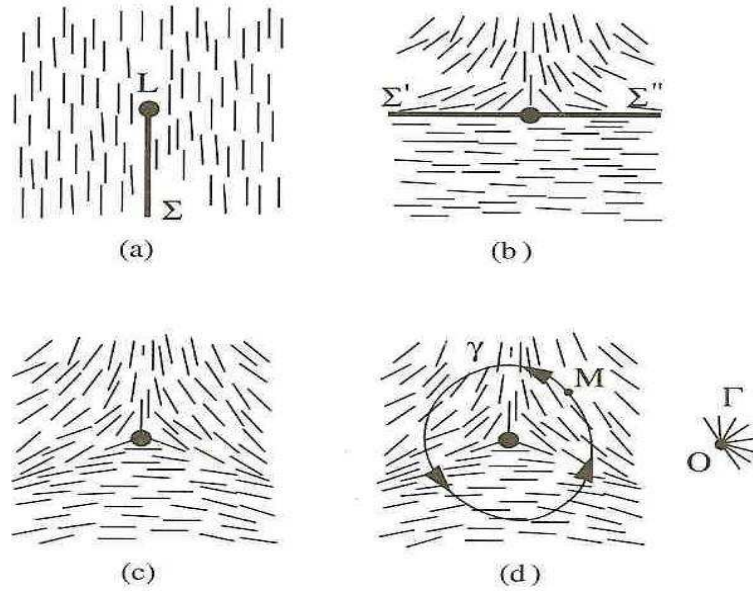


Figura 2.1: Fonte: KLEMAN and LAVRENTOVICH, *Soft Matter Physics: an Introduction*, Springer, 2001.

Construção de Volterra para uma disclinação num nemático e medida de q via circuito de Burgers. (a) Corte Σ na linha L . (b) Abertura das bordas de Σ por um ângulo π e inserção do setor extra de matéria. (c) Configuração de equilíbrio do sistema após a inserção do setor extra de matéria. (d) Circuito de Burgers γ e caminho angular Γ feito pelo vetor diretor no transporte paralelo pelo circuito de Burgers.

estão contidas na densidade de energia livre abaixo:

$$f = \frac{1}{2}K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_3(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \quad (2.5)$$

Onde K_1 , K_2 e K_3 são as constantes elásticas associadas com cada deformação e $\mathbf{n}$ é o vetor diretor do nemático. O primeiro termo da densidade de energia livre está relacionado com a deformação "splay"; esta deformação corresponde a uma compressão do sistema. O segundo termo está relacionado com a deformação "twist", que corresponde a uma torção do sistema. E o terceiro termo está relacionado com a deformação "bend" que corresponde a um encurvamento do

sistema.

Estamos tratando aqui de defeitos em filmes finos de cristais líquidos nemáticos. Estes defeitos não causam torção no sistema, sendo assim vamos usar o modelo planar de Frank para fazer este tratamento. Este modelo consiste em fazer $K_1 = K_3 = K, K_2 = 0$ e o vetor diretor é simplificado da seguinte forma:

$$n_x = \cos \theta, \quad n_y = \sin \theta, \quad n_z = 0 \quad (2.6)$$

Onde $\theta = \theta(x, y)$

Na aproximação de Frank a energia livre cuja densidade é dada por 2.5 tem uma forma mais simples:

$$E = K \int dA (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 \quad (2.7)$$

Esta energia livre é análoga a energia livre de um modelo XY. Nesta aproximação de Frank, o tratamento de disclinações torna-se mais simples. A condição de minimização de E resulta numa equação de Euler-Lagrange que em (2.7) resulta numa equação de Laplace e isso sugere uma analogia com a eletrostática. Em coordenadas polares temos então:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \phi^2} \right) = 0 \quad (2.8)$$

Associado ao defeito temos a seguinte condição de contorno:

$$\oint d\theta = 2\pi q \quad (2.9)$$

Estamos interessados em soluções singulares de (2.8). Temos duas soluções deste tipo:

$$\theta = A\phi + B, \quad \theta = C \ln r + D \quad (2.10)$$

Onde A , B , C e D são constantes.

A primeira solução é a que realmente nos interessa, pois esta solução descreve a distorção na ordem orientação provocada pela desclinação. A segunda solução não nos interessa aqui, pois esta é associada com distorção na ordem translacional. Soluções deste tipo aparecem em deslocamentos num cristal usual. Da condição (2.9) temos que $A \equiv q$, com q sendo um múltiplo inteiro de $\pm 1/2$. Substituindo então a solução $\theta = q\phi + B$ em (2.7) temos então:

$$E = \frac{1}{2} \int_{r_0}^R \int_0^{2\pi} dr d\phi k^2 \frac{1}{r} \quad (2.11)$$

Onde R é o raio do sistema e r_0 é o tamanho do defeito introduzido para a energia do sistema ser bem comportada, pois sendo assim evita-se divergências quando o tamanho característico do sistema é pequeno. Temos então para a energia:

$$E = \pi K q^2 \ln \frac{R}{r_0} \quad (2.12)$$

Observamos que o custo energético de uma disclinação é da ordem do logaritmo do tamanho do sistema, ou seja, como o sistema é macroscópico então este custo é muito alto. Sendo assim é mais favorável energeticamente os defeitos existirem aos pares de positivos e negativos.

2.2 Defeitos em Helio Superfluido

Na fase superfluida do ^4He também é observado defeito topológico. Vamos fazer uso aqui de um modelo simples para tratar deste sistema [6]. Neste modelo

consideramos o sistema como um contínuo e a energia puramente cinética:

$$E = \frac{1}{2}\rho_s \int dA |\mathbf{v}_s(\mathbf{r})|^2 \quad (2.13)$$

onde ρ_s é a densidade da fase superfluida e $\mathbf{v}_s$ é a velocidade associada às partículas do superfluido. Podemos mostrar através da invariância galileiana do sistema que $\mathbf{v}_s(\mathbf{r})$ está relacionado com a fase da função de onda coletiva do sistema [6, 7].

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

Onde m é a massa do átomo de Hélio. E assim a energia do sistema em unidades de $K_B T$ é:

$$\frac{E}{K_B T} = \frac{1}{2} K \int dA (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 \quad (2.15)$$

onde $K = \frac{\rho_s \hbar^2}{m^2 k_B T}$

Estamos interessados nas configurações de defeitos que o sistema apresenta. Em superfluidos os defeitos topológicos que existem são os *vórtices*. Vórtices em superfluidos são pontos os quais em torno deles o superfluido apresenta circulação. Os vórtices podem ser caracterizados por uma integral num circuito fechado contendo eles (análogo ao circuito de Burgers para disclinações em cristais líquidos). Usando a relação (2.14) encontramos então:

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = \frac{2\pi\hbar}{m} q, \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.16)$$

onde o contorno contém o vórtice de carga topológica q . Uma coisa importante a se observar aqui é que vórtices em superfluidos são quantizados em unidades de $\hbar/m$. Através do teorema de Stokes a condição de vorticidade também pode ser escrita

como:

$$\nabla \times \mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar}{m} n(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.17)$$

onde $n(\mathbf{r})$ é a densidade de carga topológica de modo que $\int dA n(\mathbf{r}) = q$.

Para se tratar dos efeitos dos vórtices podemos decompor a velocidade em uma parte potencial e numa parte devido a vorticidade [6, 8] de tal forma que a relação 2.17 seja obedecida:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{\mathbf{m}} \nabla \varphi + (2\pi\hbar/\mathbf{m})(\hat{\mathbf{z}} \times \nabla) \int d\mathbf{A}' n(\mathbf{r}') \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (2.18)$$

onde $\varphi(\mathbf{r})$ é uma função bem comportada e $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green que satisfaz

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.19)$$

As soluções para esta equação em duas dimensões são:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{r_0} \right) \quad (2.20)$$

onde r_0 é um parâmetro associado ao tamanho do defeito que faz com que a energia seja bem comportada próximo ao defeito, isto faz com que a energia não tenha divergência quando os vórtices estão próximos.

Substituindo esta velocidade na expressão da energia encontramos então:

$$\frac{E}{K_B T} = \frac{1}{2} K \int dA (\nabla \phi)^2 + 2\pi^2 K \int dA \int dA_1 \int dA_2 n(\mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_2) \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2). \quad (2.21)$$

Esta energia se minimiza quando o termo potencial se anula. Usando a relação vetorial $\nabla \cdot (f \mathbf{A}) = f \nabla \cdot \mathbf{A} + \nabla f \cdot \mathbf{A}$ e assumindo que $\nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ se anula na fronteira obtemos então:

$$\frac{E}{K_B T} = -\pi K \int \int_{|r-r'| > r_0} dr^2 dr'^2 n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') \ln \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{r_0} \right) \quad (2.22)$$

Esta energia é análoga à energia de um campo eletrostático. Concluimos então que vórtices interagem de maneira análoga a cargas eletrostáticas em duas dimensões. E outra coisa que é muito importante é que como a energia dos vórtices depende logarithmicamente das dimensões do tamanho do sistema então é favorável energeticamente que estes vórtices existam sempre aos pares positivo e negativo, isto é $\int dA n(\mathbf{r}) = 0$.

O que podemos concluir aqui ao fazermos o tratamento de defeitos em filmes de cristal líquido e filmes de Hélio superfluido é que estes defeitos podem ser mapeados em cargas elétricas, já que a energia destes defeitos depende logarithmicamente do tamanho do sistema. Ou seja, estes sistemas descritos aqui, que apresentam defeitos topológicos, podem ser mapeados num *gás de Coulomb* neutro [21].

Capítulo 3

Modelos XY em Espaços Curvos e Aplicações em Geometrias Usuais

3.1 Generalização da Energia Livre de Modelos XY para Espaços Curvos.

Neste capítulo vamos entender a contribuição da geometria na energia livre na configuração de defeitos topológicos para filmes de hélio superfluido e filmes do Cristal líquido nemático. O fato é que uma grande variedade de sistemas bidimensionais tomam a forma de uma superfície não euclidiana. Como vimos no capítulo anterior a energia de defeitos para superfluidos e nemáticos para a geometria euclidiana é análoga a energia eletrostática de cargas elétricas em duas dimensões. Então ao investigarmos a energia de defeitos em geometrias não euclidiana, uma generalização natural para a energia é análoga à solução do problema eletrostático de um conjunto de cargas elétricas. Na referência [9] é tratado com detalhes o problema de uma carga elétrica na presença da esfera e do hiperbolóide. Nestas

geometrias além da interação coulombiana entre as cargas surge uma energia de autointeração devido ao fato da geometria encurvar as linhas de campo de uma carga pontual.

No caso euclidiano as energias livres para superfluidos e para nemáticos na aproximação de uma constante elástica são equivalentes, mas para a generalização desta energia livre é crucial a distinção da natureza da ordem destes dois sistemas [10]. Em superfluidos a ordem é dada pela fase da função de onda coletiva a qual está definida num espaço diferente daquele em que o superfluido está confinado. No estado fundamental do Hélio superfluido, a fase continua sendo constante em todo o espaço que este está confinado e a energia do sistema se anula. Sendo assim a generalização para a energia livre nos filmes de superfluidos é dada por:

$$E = \frac{K}{2} \int d^2r \sqrt{g} g^{ij} \partial_i \theta(\mathbf{r}) \partial_j \theta(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

onde g^{ij} é o inverso do tensor métrico e $g = \det g_{ij}$ e K é uma constante que está relacionada com a densidade do sistema dada pela equação (2.15).

Já se tratando de filmes finos de Cristais líquidos nemáticos a ordem é dada pelo ângulo $\theta(\mathbf{r})$ que a orientação média dos "bastões" formam com a normal. Este ângulo está definido no mesmo espaço em que o cristal líquido está confinado, sendo assim no estado fundamental de filmes de cristal líquido nemático o ângulo de orientação não é constante e conseqüentemente em espaços curvos é impossível se ter uma configuração onde as moléculas estejam dispostas paralelamente. Então para se medir alguma variação real em θ no espaço curvo associado, devemos descontar o fato do vetor normal ser medido em relação a uma base móvel $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2\}$. Com isso a energia livre para filmes de cristais líquidos em espaços curvos é [11]:

$$E = \frac{K}{2} \int d^2r \sqrt{g} g^{ij} (\partial_i \theta(\mathbf{r}) - A_i) (\partial_j \theta(\mathbf{r}) - A_j), \quad (3.2)$$

onde $A_i = \hat{e}_1 \cdot \partial_i \hat{e}_2$ é a conexão de spin [12] e K é a constante elástica associada às deformações *splay* e *bend*.

Para se entender a interpretação das energias dadas por (3.1) e (3.2) vamos considerar um filme superfluido depositado numa superfície plana com um "morro" e no topo deste "morro" consideremos um vórtice, como mostra a figura. Com o auxílio da solução (2.10) na expressão da energia (3.1) chegamos a conclusão que o custo energético para se manter um vórtice no topo do "morro" é maior do que o custo energético para manter o vórtice numa região plana da superfície, ou seja, em filmes de superfluidos é mais favorável aos vórtices ficarem em regiões mais planas da superfície. A figura (3.1)

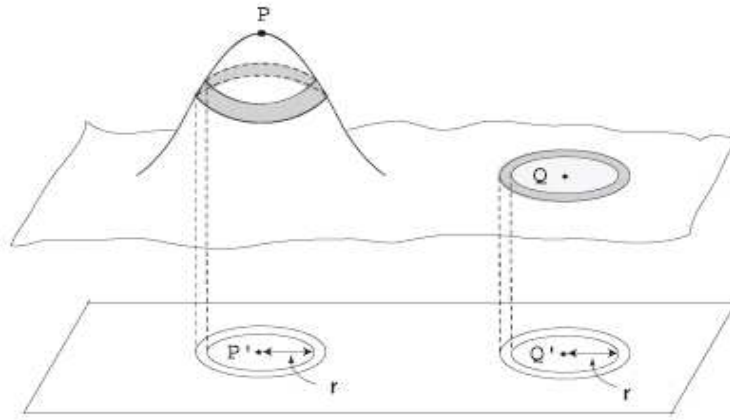


Figura 3.1: Fonte: VITELLI and TURNER, PRL **93**, p. 215301, 2004.

Em filmes de Hélio superfluido a energia de um vórtice é menor na região plana da superfície do que na no topo do "morro". Com isso é mais favorável ao vórtice se encontrar na região plana.

Já para filmes de Cristais Líquidos ao serem depositados nessa superfície há uma competição entre as deformações *bend* e *splay*. A partir da figura (3.2) vemos que o morro aumenta a energia de *bend*, mas ao mesmo tempo diminui a energia de *splay*.

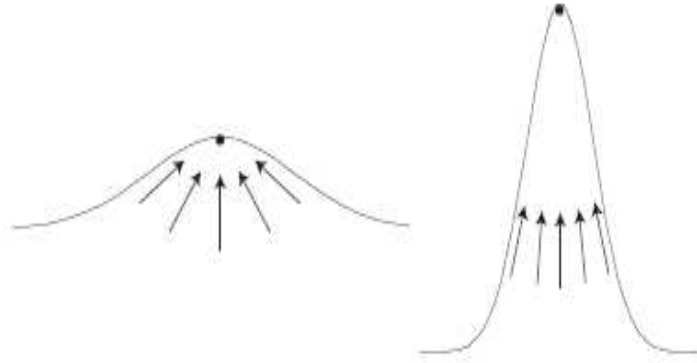


Figura 3.2: Fonte: Fonte: VITELLI and TURNER, PRL **93**, p. 215301, 2004.

Temos aqui uma disclinação em um filme de cristal líquido depositado em dois "morro". O primeiro morro é mais suave e assim a energia devido a curvatura é menor, mas em contra partida a energia de *splay* é maior. O contrário acontece no segundo morro; este é mais acentuado aumentando a energia de curvatura enquanto a energia de *splay* diminui.

3.2 Interação Geométrica de Defeitos

Vamos introduzir aqui o chamado *espaço conforme*. Um espaço conforme é um espaço cuja métrica pode ser escrita proporcionalmente a métrica do plano. Geometrias bidimensionais são em geral conformes. Transformações de coordenadas que levam a métrica a serem escritas proporcionalmente à métrica do plano são as chamadas *transformações conformes*. Estas transformações farão com que a métrica tenha a forma [11, 10]:

$$g(\mathbf{r}) = e^{\Omega(\mathbf{r})} g_{\text{plano}}, \quad (3.3)$$

onde esta métrica difere da métrica do plano pelo fator conforme e^{Ω} , sendo g_{plano} a métrica do chamado plano conforme. As transformações conformes possuem duas propriedades importantes:

1. levam ângulos do espaço físico em ângulos equivalentes no plano conforme.
2. Regiões pequenas no espaço físico são levados nas mesmas regiões no plano conforme.

Em coordenadas conformes a tarefa de se encontrar a função de Green do operador laplaciano torna-se muito simples. Nestas coordenadas a função de Green do operador laplaciano tem a forma da função de Green no plano. A função de Green obedece a equação:

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i (\sqrt{g} g^{ij} \partial_j) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.4)$$

Sendo $g_{ij} = e^\Omega (g_{ij})_{plano}$ então temos que $g^{ij} = e^{-\Omega} g_{plano}^{ij}$ e parametrizando o plano conforme por coordenadas polares R e Φ , temos então que:

$$\left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{R} \delta(R - R') \delta(\Phi - \Phi'), \quad (3.5)$$

e assim a função de Green em coordenadas conformes tem a forma da função de Green no plano, que é dada por:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln[R^2 + R'^2 - 2RR' \cos(\Phi - \Phi')] \quad (3.6)$$

Algo muito importante a respeito da física dos sistemas tratados aqui é a simetria conforme, isto é, a física destes sistemas não pode sofrer alterações por transformações conformes. De fato, como as energias (3.1) e (3.2) são grandezas escalares, estas não mudam seu valor por transformações conformes e vale a relação $\sqrt{g} g^{ij} = \sqrt{g_{plano}} g_{plano}^{ij}$. Precisamos introduzir na energia o tamanho finito para o defeito, para que esta não apresente divergência quando dois defeitos estão muito

próximos. Vamos denotar este tamanho por r_0 no espaço plano. No espaço conforme o tamanho do defeito passa a depender da posição e é dado por $r_{0i} = e^{-\Omega(R,\Phi)}r_0$. Ao introduzir o tamanho finito na energia, algo muito interessante acontece: há uma *quebra de simetria* ao se fazer transformações conformes. Uma consequência desta quebra de simetria é a chamada *interação geométrica* que os defeitos sofrem com a curvatura. Vejamos então como surge esta interação geométrica. Para superfícies com simetria azimutal, nas proximidades do defeito de carga q temos:

$$\theta \approx q\phi \quad (3.7)$$

No plano conforme pela propriedade 1, ângulos são mantidos por transformações conformes, sendo assim em coordenadas conformes temos que $\theta = q\Phi$ e assim para um superfluido usando a equação (3.1) temos que:

$$E = \frac{K}{2} \int_0^{2\pi} \int_{r_{0i}}^R d\Phi dR R q^2 \frac{1}{R^2} \quad (3.8)$$

onde $r_{0i} = e^{-\Omega}r_0$. E assim obtemos que:

$$E = \pi K q^2 \ln \frac{R}{r_0} + \pi K q^2 \Omega \quad (3.9)$$

Mas da geometria diferencial sabemos que $\nabla^2(-\Omega(\mathbf{r})/2) = K_G(\mathbf{r})$ onde $K_G(\mathbf{r})$ é a curvatura gaussiana da superfície [11, 12]. Vamos definir então o potencial geométrico como:

$$V(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{A}' \mathbf{K}_G(\mathbf{r}') \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (3.10)$$

Com isso temos que $V = -\Omega/2$ e assim o termo de interação geométrica é dado por:

$$E_{geom} = - \sum_{i=1}^N 2\pi K q_i^2 V(\mathbf{r}_i) \quad (3.11)$$

Onde N é o número de defeitos no sistema.

Já para a interação geométrica em filmes de cristal líquido além do termo quadrático com a carga surge um termo linear com esta carga que surge dos termos cruzados da energia (3.2). De fato temos que:

$$E = \frac{K}{2} \int d^2r \sqrt{g} g^{ij} (\partial_i \theta \partial_j \theta - A_i \partial_j \theta - \partial_i \theta A_j + A_i A_j) \quad (3.12)$$

No plano conforme temos que $A_R = 0$ e $A_\Phi = 1$ e então dos termos cruzados da energia do filme de cristal líquido obtemos a seguinte energia de interação geométrica:

$$E_{geom} = \sum_{i=1}^N 4\pi K q_i \left(1 - \frac{q_i}{2}\right) V(\mathbf{r}_i) \quad (3.13)$$

De uma forma geral para filmes de Hélio superfluido a energia é dada pelo termo usual de interação entre os defeitos e a nova interação geométrica que surge devido a quebra de simetria conforme:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \sum_{i=1}^N 2\pi K q_i^2 V(\mathbf{r}_i). \quad (3.14)$$

E para filmes de cristais líquidos temos então que:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i=1}^N 4\pi K q_i \left(1 - \frac{q_i}{2}\right) V(\mathbf{r}_i) \quad (3.15)$$

3.3 Interação Geométrica de Defeitos em Geometrias não-Euclidianas

Nesta seção veremos exemplos de como geometrias particulares influem na energia livre de sistema com defeitos.

3.3.1 Interação de Defeitos no Carço Gaussiano

Vamos começar então pelo exemplo dado na referência [11] de um carço gaussiano. Um carço gaussiano é a versão tridimensional da famosa superfície gaussiana e a equação desta superfície é:

$$\mathbf{R}(r, \phi) = \begin{pmatrix} r \cos \phi \\ r \sin \phi \\ h e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Onde h é a altura do carço gaussiano. Vamos definir aqui o parâmetro $\alpha = \frac{h}{r_0}$. Este parâmetro informa o quão acentuado o carço é. Se α é grande significa que o carço é bem acentuado, e se α é pequeno indica que o carço é suave. A métrica desta superfície é dada por:

$$ds^2 = l(r)dr^2 + r^2d\phi^2, \quad (3.17)$$

onde $l(r) \equiv 1 + \frac{\alpha^2 r^2}{r_0^2}$. Para $\alpha \gg r_0$, temos que $l(r) \approx 1$ o que significa que a métrica tende a métrica do plano para $\alpha \gg r_0$.

Vamos ver então como esta geometria influi na energia livre da distribuição de defeitos. Para isso vamos fazer uma transformação conforme de coordenadas $\{\mathcal{R}(r, \phi), \Phi(r, \phi)\}$, pois através desta transformação o problema de escrever a energia livre da distribuição de defeitos simplifica bastante. Na representação conforme a métrica tem a forma:

$$ds^2 = e^{\Omega(\vec{r})}(d\mathcal{R}^2 + \mathcal{R}^2 d\Phi^2) \quad (3.18)$$

Como ângulos são preservados por transformações conformes podemos identificar então $\Phi \equiv \phi$. Igualando (3.17) com (3.18) obtemos então que:

$$e^\Omega = \left(\frac{r}{\mathcal{R}}\right)^2 \quad (3.19)$$

e

$$\frac{d\mathcal{R}}{\mathcal{R}} = \frac{\sqrt{l(r)}}{r} dr \quad (3.20)$$

Como solução para esta equação temos então que:

$$\mathcal{R} = r e^{-\int_r^\infty \frac{dr'}{r'} (\sqrt{l(r')} - 1)} \quad (3.21)$$

De (3.19) e usando a relação $V = -\Omega/2$ obtemos então que:

$$V(r) = - \int_r^\infty dr' \frac{\sqrt{l(r')} - 1}{r'} \quad (3.22)$$

E a função de Green para o operador laplaceano nesta superfície é dado por:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln[\mathcal{R}^2 + \mathcal{R}'^2 - 2\mathcal{R}\mathcal{R}' \cos(\phi - \phi')] \quad (3.23)$$

E assim para filmes finos de superfluido nesta geometria temos então que:

$$E = \frac{K}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\left(\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R}_0}\right)^2 + \left(\frac{\mathcal{R}'}{\mathcal{R}_0}\right)^2 - 2\frac{\mathcal{R}\mathcal{R}'}{\mathcal{R}_0^2} \cos(\phi - \phi') \right] - \sum_{i=1}^N 2\pi K q_i^2 V(r_i) \quad (3.24)$$

Onde $V(r)$ é dado por (3.22). Fizemos aqui o chamado *processo de regularização* que consiste em extrair as divergências da energia. Fazemos isso introduzindo um tamanho finito no defeito de magnitude r_0 , sendo $\mathcal{R}_0 = \mathcal{R}(r_0)$.

Para filmes de cristal líquido obtemos então que:

$$E = \frac{K}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\left(\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R}_0} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{R}'}{\mathcal{R}_0} \right)^2 - 2 \frac{\mathcal{R}\mathcal{R}'}{\mathcal{R}_0^2} \cos(\phi - \phi') \right] - \sum_{i=1}^N 4\pi K q_i \left(1 - \frac{q_i}{2} \right) V(r_i) \quad (3.25)$$

3.3.2 Interação de Defeitos na Esfera

Vamos ver agora como a geometria da esfera influi na energia livre da distribuição de defeitos nos sistemas em questão. A esfera é uma superfície que apresenta duas peculiaridades: curvatura constante e positiva.

A métrica da esfera de raio R nas coordenadas esféricas usuais é dada por:

$$ds^2 = R^2 d\theta^2 + R^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \quad (3.26)$$

onde $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$. A representação conforme da esfera é a conhecida projeção estereográfica [13, 14]. Nesta projeção estereográfica temos as novas coordenadas $\rho = 2R \tan \frac{\theta}{2}$ e $\phi = \phi$. Sendo assim a métrica nesta representação é dada por:

$$ds^2 = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\rho}{2R} \right)^2 \right]^2} (d\rho^2 + \rho^2 d\phi^2) \quad (3.27)$$

E assim o fator conforme é dado por:

$$\Omega(\rho) = -4 \ln \left[1 + \left(\frac{\rho}{2R} \right)^2 \right] \quad (3.28)$$

Assim usando a relação $V = -\frac{\Omega}{2}$ e usando as coordenadas usuais temos então que:

$$V(\theta) = 2 \ln \left[1 + \tan^2 \frac{\theta}{2} \right]. \quad (3.29)$$

A figura (3.3) mostra como se comporta o a auto energia para um filme de superfluido na esfera, que é dada por $E = -2\pi qKV(\theta)$.

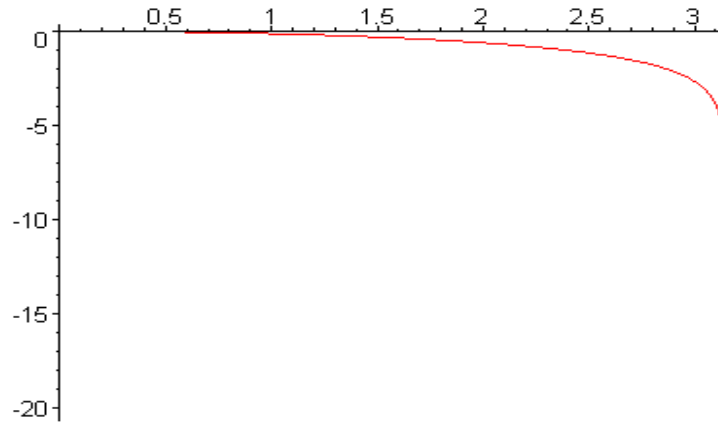


Figura 3.3: Autoenergia para um filme de superfluido na esfera experimentada pelo defeito.

Usando a equação (3.5) podemos encontrar a função de Green do operador laplaciano para a esfera que nas coordenadas R e ϕ tem a mesma forma da função de Green para o plano em coordenadas polares. Temos então que:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln \left[\tan^2 \frac{\theta}{2} + \tan^2 \frac{\theta'}{2} - 2 \tan \frac{\theta}{2} \tan \frac{\theta'}{2} \cos(\phi - \phi') \right]. \quad (3.30)$$

Finalmente podemos escrever as energias para superfluidos e cristais líquidos dispostos na esfera. Vamos escrever a energia em termo de coordenadas polares na esfera $r = \theta/2R$ e ϕ . Temos então que:

$$E = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\frac{\tan^2 \frac{r_i}{2R}}{\tan^2 \frac{r_0}{2R}} + \frac{\tan^2 \frac{r_j}{2R}}{\tan^2 \frac{r_0}{2R}} - 2 \frac{\tan \frac{r_i}{2R}}{\tan \frac{r_0}{2R}} \frac{\tan \frac{r_j}{2R}}{\tan \frac{r_0}{2R}} \cos(\phi_i - \phi_j) \right] - \sum_{i=1}^N 4\pi K q_i^2 \ln \left[1 + \tan^2 \frac{r_i}{2R} \right] \quad (3.31)$$

Onde novamente fizemos o *processo de regularização*.

E para filmes de cristal líquido temos:

$$E = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\frac{\tan^2 \frac{r_i}{2R}}{\tan^2 \frac{r_0}{2R}} + \frac{\tan^2 \frac{r_j}{2R}}{\tan^2 \frac{r_0}{2R}} - 2 \frac{\tan \frac{r_i}{2R}}{\tan \frac{r_0}{2R}} \frac{\tan \frac{r_j}{2R}}{\tan \frac{r_0}{2R}} \cos(\phi_i - \phi_j) \right] + \sum_{i=1}^N 8\pi K q_i \left(1 - \frac{q_i}{2} \right) \ln \left[1 + \tan^2 \frac{r_i}{2R} \right] \quad (3.32)$$

3.3.3 Interação de defeitos na Geometria do Hiperbolóide

Da mesma forma que a esfera o hiperbolóide apresenta curvatura constante, só que negativa. Então vamos ver agora quais os efeitos desta geometria na energia dos defeitos.

A métrica desta superfície é:

$$ds^2 = dr^2 + R^2 \sinh^2(r/R) d\phi^2, \quad (3.33)$$

onde $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$ e R é um raio característico. Vamos então escrever uma representação conforme para esta superfície. Nesta representação temos que

$$ds^2 = e^{\Omega(r)} (d\rho^2 + \rho^2 d\phi^2). \quad (3.34)$$

Igualando então (3.4) e (3.34) temos então que:

$$e^{\Omega} \rho^2 = R^2 \sinh^2 \frac{r}{R} \quad (3.35)$$

e

$$e^{\Omega} d\rho^2 = dr^2, \quad (3.36)$$

Substituindo (3.35) em (3.36) temos que:

$$\frac{d\rho}{\rho} = \frac{1}{\sinh \frac{r}{R}} d\left(\frac{r}{R}\right). \quad (3.37)$$

Integrando obtemos então que:

$$\rho = \frac{R}{\operatorname{csch} \frac{r}{R} + \coth \frac{r}{R}}. \quad (3.38)$$

que com um pouco de álgebra elementar mostramos que:

$$\rho = 2R \tanh \frac{r}{2R} \quad (3.39)$$

E assim encontramos que:

$$e^{\Omega} = \frac{\sinh^2 \frac{r}{R}}{4 \tanh^2 \frac{r}{2R}} \quad (3.40)$$

Sendo $\sinh x = 2 \sinh \frac{x}{2} \cosh \frac{x}{2}$ temos então que:

$$e^{\Omega} = \cosh^4 \frac{r}{2R} \quad (3.41)$$

Temos então que:

$$\Omega = 4 \ln \cosh \frac{r}{2R} \quad (3.42)$$

E assim o potencial geométrico, cuja expressão é $V = -\frac{\Omega}{2}$ é dado por:

$$V(r) = -2 \ln \cosh \frac{r}{2R} \quad (3.43)$$

E a função de Green é dada por:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln \left[\tanh^2 \frac{r}{2R} + \tanh^2 \frac{r'}{2R} - 2 \tanh \frac{r}{2R} \tanh \frac{r'}{2R} \cos(\phi - \phi') \right] \quad (3.44)$$

E assim temos a energia livre para filmes de Hélio superfluido:

$$E = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\frac{\tanh^2 \frac{r_i}{2R}}{\tanh^2 \frac{r_0}{2R}} + \frac{\tanh^2 \frac{r_j}{2R}}{\tanh^2 \frac{r_0}{2R}} - 2 \frac{\tanh \frac{r_i}{2R}}{\tanh \frac{r_0}{2R}} \frac{\tanh \frac{r_j}{2R}}{\tanh \frac{r_0}{2R}} \cos(\phi_i - \phi_j) \right] + \\ + \sum_{i=1}^N 2\pi K q_i^2 \ln \left(\frac{\cosh \frac{r}{2R}}{\cosh \frac{r_0}{2R}} \right) \quad (3.45)$$

O gráfico na figura 3.4 mostra a autoenergia para defeitos em filme fino de superfluido no hiperbolóide:

Para filmes de cristal líquido a energia é:

$$E = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\frac{\tanh^2 \frac{r_i}{2R}}{\tanh^2 \frac{r_0}{2R}} + \frac{\tanh^2 \frac{r_j}{2R}}{\tanh^2 \frac{r_0}{2R}} - 2 \frac{\tanh \frac{r_i}{2R}}{\tanh \frac{r_0}{2R}} \frac{\tanh \frac{r_j}{2R}}{\tanh \frac{r_0}{2R}} \cos(\phi_i - \phi_j) \right] + \\ + \sum_{i=1}^N 4\pi K q_i \left(1 - \frac{q_i}{2} \right) \left[-\ln \left(\frac{\sinh \frac{r_i}{R}}{\sinh \frac{r_0}{R}} \right) + \ln \left(\frac{\tanh \frac{r_j}{2R}}{\tanh \frac{r_0}{2R}} \right) \right] \quad (3.46)$$

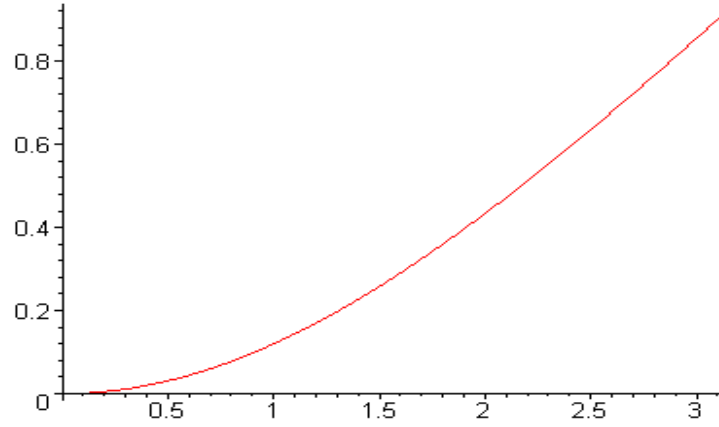


Figura 3.4: Autoenergia E que um defeito experimenta na geometria do hiperbolóide em função de r

3.4 Interação Geométrica de Defeitos na Geometria do Cone

O cone é uma superfície muito interessante pois sua curvatura gaussiana é nula com exceção da singularidade. Veremos aqui como esta singularidade afeta a energia livre dos sistemas em questão.

A métrica do cone em coordenadas polares na superfície é:

$$ds^2 = dr^2 + \frac{r^2}{p^2} d\phi^2 \quad (3.47)$$

onde $p > 1$ está relacionado com a abertura do cone.

A curvatura gaussiana do cone é dada por [15]:

$$K_G = (p - 1) \left(\frac{p}{r} \delta(r) \right) \quad (3.48)$$

e a função de Green para o operador laplaceano no cone é dado por [16]:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln[r^{2p} + r'^{2p} - 2(rr')^p \cos p(\phi - \phi')] \quad (3.49)$$

O potencial geométrico é então dado por $V = -\int dA' K_G(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Sendo assim substituindo-se a (3.48) e (3.49) na expressão do potencial geométrico obtemos então:

$$V(r) = -p(p-1) \ln r \quad (3.50)$$

Sendo assim a energia para filmes de Hélio superfluido contido no cone é:

$$E = \frac{K}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\left(\frac{r_i}{r_0} \right)^{2p} + \left(\frac{r_j}{r_0} \right)^{2p} - 2 \left(\frac{r_i r_j}{r_0^2} \right)^p \cos p(\phi_i - \phi_j) \right] \\ + \sum_i 2\pi K q_i^2 p(p-1) \ln \frac{r}{r_0} \quad (3.51)$$

E para filmes de cristal líquido obtemos:

$$E = \frac{K}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j \ln \left[\left(\frac{r_i}{r_0} \right)^{2p} + \left(\frac{r_j}{r_0} \right)^{2p} - 2 \left(\frac{r_i r_j}{r_0^2} \right)^p \cos p(\phi_i - \phi_j) \right] \\ - \sum_i 4\pi K q_i \left(1 - \frac{q_i}{2} \right) p(p-1) \ln \frac{r}{r_0} \quad (3.52)$$

3.4.1 Interação Geométrica de Defeitos na Geometria do Toro

Vamos considerar um sistema com defeitos na superfície de um toro, cuja parametrização está de acordo com a figura 3.5.

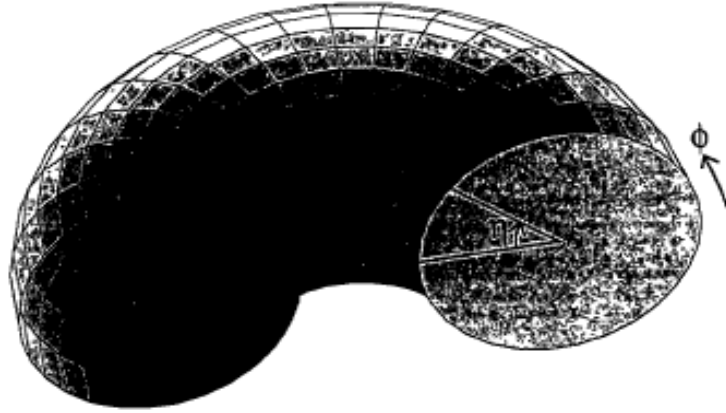


Figura 3.5: Parametrização do toro pelos ângulos ϕ e η

Nesta parametrização a métrica do toro é então:

$$ds^2 = \mathcal{R}_0^2 d\eta^2 + \mathcal{R}_0^2 (\alpha - \cos \eta)^2 d\phi^2 \quad (3.53)$$

onde $\mathcal{R}_0$ é uma constante que está relacionada com o raio interno do toro, e α é uma constante que está relacionada com o raio do genus. Vamos usar novamente o formalismo do espaço conforme para tratar do problema do toro. Na representação conforme temos então que a métrica (3.53) tem a forma:

$$ds^2 = e^\Omega (d\mathcal{R}^2 + \mathcal{R} d\phi^2) \quad (3.54)$$

Onde $\mathcal{R} = \mathcal{R}(\eta, \phi)$

Igualando (3.53) e (3.54) teremos:

$$e^\Omega \mathcal{R}^2 = \mathcal{R}_0^2 (\alpha - \cos \eta)^2 \quad (3.55)$$

e

$$\mathcal{R}_0 d\eta^2 = e^\Omega d\mathcal{R}^2 \quad (3.56)$$

Substituindo (3.55) em (3.56) temos:

$$\frac{d\eta}{\alpha - \cos \eta} = \frac{d\mathcal{R}}{\mathcal{R}} \quad (3.57)$$

E integrando obtemos então:

$$\frac{2 \arctan \left[\frac{(\alpha+1) \tan \frac{\eta}{2}}{\sqrt{\alpha^2-1}} \right]}{\sqrt{\alpha^2-1}} = \ln \mathcal{R} \quad (3.58)$$

Para simplificar a escrita vamos definir então:

$$l(\eta) \equiv \frac{2 \arctan \left[\frac{(\alpha+1) \tan \frac{\eta}{2}}{\sqrt{\alpha^2-1}} \right]}{\sqrt{\alpha^2-1}} \quad (3.59)$$

E assim temos que:

$$\mathcal{R} = e^{l(\eta)} \quad (3.60)$$

Substituindo então (3.60) em (3.18) teremos então que:

$$e^\Omega = \mathcal{R}_0^2 e^{-2l(\eta)} (\alpha - \cos \eta)^2 \quad (3.61)$$

e então

$$\Omega = \ln \mathcal{R}_0^2 - 2l(\eta) + 2 \ln(\alpha - \cos \eta) \quad (3.62)$$

Assim o potencial geométrico é dado por:

$$V = -\ln \mathcal{R}_0 + l(\eta) - 2 \ln(\alpha - \cos \eta) \quad (3.63)$$

E a função de Green tem a forma usual:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln[\mathcal{R}^2 + \mathcal{R}'^2 - 2\mathcal{R}^2 \mathcal{R}'^2 \cos(\phi - \phi')] \quad (3.64)$$

Assim para filmes a energia é dada por:

$$E = -\frac{K}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq N} q_i q_j \ln \left[\left(\frac{\mathcal{R}_i}{\mathcal{R}_0} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{R}_j}{\mathcal{R}_0} \right)^2 - 2 \frac{\mathcal{R}_i \mathcal{R}_j}{\mathcal{R}_0^2} \cos(\phi_i - \phi_j) \right] - \sum_{i=1}^N 2\pi q_i^2 V(\eta_i) \quad (3.65)$$

Na figura 3.6 temos então o gráfico que ilustra como se comporta a autointeração na extensão do toro. Observamos que a geometria do toro cria um poço de potencial para o defeito no superfluido. Mais detalhes da influência da geometria do toro na interação de defeitos será estudada no futuro.

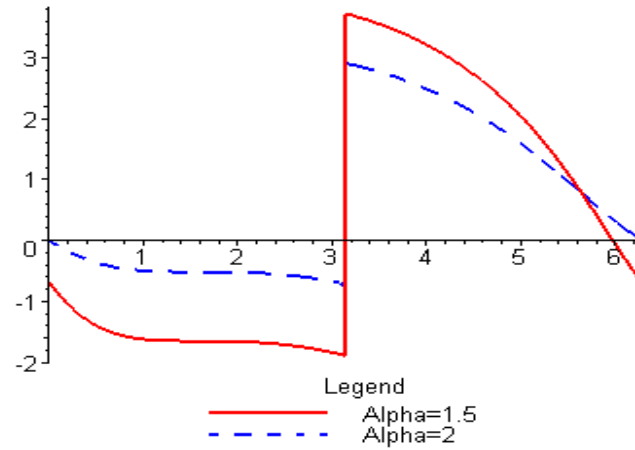


Figura 3.6: Energia de autointeração em função de η experimentada por um defeito no toro para um filme de superfluido

Para filmes de cristal líquido a energia é dada por:

$$E = -\frac{K}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq N} q_i q_j \ln \left[\left(\frac{\mathcal{R}_i}{\mathcal{R}_0} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{R}_j}{\mathcal{R}_0} \right)^2 - 2 \frac{\mathcal{R}_i \mathcal{R}_j}{\mathcal{R}_0^2} \cos(\phi_i - \phi_j) \right] - \sum_{i=1}^N 4\pi q_i \left(1 - \frac{q_i}{2} \right) V(\eta_i) \quad (3.66)$$

Capítulo 4

Transições de Fase em Duas Dimensões

4.1 Ausência de Ordem de Longo Alcance em Sistemas Bidimensionais

Sistemas com ordem de longo alcance em três dimensões são muito comuns na natureza, e transições de fase que levam a estados com esta ordem também são muito comuns. Como exemplo destes sistemas temos cristais, cristais líquidos, sistemas magnéticos, superfluidos, supercondutores, etc. Mas quando se tá em duas dimensões a coisa é diferente. Uma série de trabalhos publicados nos anos 60 argumentam que ordem de longo alcance não está presente em duas dimensões [17, 18]. Para exemplificar a ausência de ordem de longo alcance em sistema bidimensionais vamos considerar aqui dois casos: primeiro vamos apresentar o desvio quadrático médio da posição das partículas de um cristal linear e também planar [19] e depois vamos apresentar como se comporta a função de correlação para um

modelo XY.

Vamos ao primeiro caso. Temos aqui um cristal linear. Este sistema à temperatura $T = 0$, é essencialmente uma cadeia de átomos com período b . O desvio da distância entre o n -ésimo e o 0-ésimo átomo é dado por:

$$\delta_n \equiv (x_n - x_0) - nb \quad (4.1)$$

Usando a aproximação de Debye [19] obtemos os seguintes resultados para o desvio quadrático médio[1]:

$$\langle \delta_n^2 \rangle_{1D} = \frac{nb^2 k_B T}{2mc^2} \quad (4.2)$$

$$\langle \delta_n^2 \rangle_{2D} = \frac{nb^2 k_B T}{mc^2} (\ln n + C_1) \quad (4.3)$$

$$\langle \delta_n^2 \rangle_{3D} = C_2 \frac{b^2 k_B T}{mc^2} \quad (4.4)$$

Observamos então que em 1D e 2D o desvio quadrático médio depende do tamanho do sistema, enquanto que em 3D isto não acontece, o que impede que ordem de longo alcance ocorra a $T > 0$ em dimensão menor que 3. Em 2D como a dependência com o desvio quadrático médio é logaritmica, então é possível haver uma ordem local nesta dimensão. Daí a necessidade de **defeitos topológicos** para mediar esta ordem local.

Vamos considerar um exemplo explorado na referência [20] que mostra como se comporta a função de correlação para modelos XY d-dimensionais. A função de correlação é definida como:

$$f(\mathbf{r}) = \langle \psi(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{0}) \rangle \quad (4.5)$$

Onde $\psi(\mathbf{r})$ é o parâmetro de ordem do sistema. Para modelos XY no limite de $r \rightarrow \infty$ obtemos [20]:

$$f(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}), \mathbf{S}(\mathbf{0}) \rangle \approx e^{-const T} \quad (4.6)$$

para $d > 2$.

$$f(\mathbf{r}) \approx \left(\frac{r}{L} \right)^{-\eta(T)} \quad (4.7)$$

para $d = 2$, onde η é uma função regular que depende da temperatura e L dá o tamanho do sistema.

$$f(\mathbf{r}) \approx \exp \left(\frac{T}{2Ja} r \right) \quad (4.8)$$

para $d = 1$, onde a é o parâmetro de rede.

O que podemos observar é que a correlação em 3 dimensões não depende do tamanho do sistema, o que significa que a temperaturas suficientemente baixas, a correlação é de longo alcance, o que indica ordem de longo alcance no sistema. Já em 1 dimensão a correlação cai exponencialmente com o tamanho do sistema, o que significa desordem no sistema. Em 2 dimensões a correlação cai algebricamente com o tamanho do sistema, o que significa que no infinito a correlação cai a zero, o que impede a existência de ordem de longo alcance, mas localmente o sistema está correlacionado. Isto indica a possibilidade de ordem local no sistema.

4.2 Transição de Kosterlitz-Thouless

Vamos ver aqui uma teoria para explicar uma espécie de transição de fase que ocorre para alguns sistemas bidimensionais, como por exemplo: modelos XY, filmes superfluidos, filmes de cristal líquido, etc. Esta teoria foi desenvolvida por J.M. Kosterlitz e D.J. Thouless [21, 22]. Vimos que em 2D, transições de fase não ocorrem da forma usual, isto é, de uma fase simétrica para uma fase com quebra de simetria. O tipo de transição de fase que ocorre em 2D é uma transição mediada por defeitos topológicos. Defeitos pontuais tipo vórtices e disclinações apresentam um custo energético $E \propto \ln \frac{A}{A_0}$, onde A é a área do sistema e A_0 é a área do defeito. Com isso a existência de defeitos isolados não é favorável a baixas temperaturas, pois o sistema não possui energia suficiente mantê-lo. No entanto a baixas temperaturas é favorável energeticamente a existência de "dipolos" de defeitos.

A altas temperaturas no entanto, a existência de defeitos isolados é energeticamente favorável. Então a partir do regime de baixas temperaturas, onde os defeitos existem aos pares ao aumentarmos a temperatura, atingiremos uma temperatura T_c tal que os pares se "quebrarão" e então teremos um regime de defeitos livres, ou seja, há uma transição de fase. Essa transição, mediada por defeitos topológico que se caracteriza pela mudança de um estado onde os defeitos formam "dipolos" para um estado onde os defeitos estão livres, chama-se Transição de Kosterlitz-Thouless. Vamos considerar um par de vórtices num filme de superfluido contido no plano e ver com detalhes como ocorre esta transição de fase. A energia para um par de vórtices no plano é:

$$E = \frac{K}{8\pi} q^2 \ln \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \quad (4.9)$$

E a entropia é dada por $S = k_B \ln \frac{A}{A_0} = 2k_B \ln \frac{r}{r_0}$, onde r_0 é tal que $A_0 = \pi r_0^2$. Assim a energia livre do par de vórtices é dada por:

$$F = \frac{K}{8\pi} q^2 \ln \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 - 2k_B T \ln \frac{r}{r_0} \quad (4.10)$$

A partir de uma temperatura crítica $T_c = \frac{Kq^2}{16\pi k_B}$ a entropia passa a dominar a energia do sistema, sendo assim a temperaturas maiores que T_c é favorável ao regime de defeitos livres. Podemos entender isto melhor calculando a separação quadrática média entre as cargas:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_{r_0}^{\infty} dr r^3 \exp(-\beta K \frac{q^2}{4\pi} \ln \frac{r}{r_0})}{\int_0^{2\pi} d\phi \int_{r_0}^{\infty} dr r \exp(-\beta K \frac{q^2}{4\pi} \ln \frac{r}{r_0})} \quad (4.11)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$

Efetuada-se as integrações obtemos então:

$$\langle r^2 \rangle = r_0^2 \frac{\beta K \frac{q^2}{4\pi} - 1}{\beta K \frac{q^2}{4\pi} - 2} \quad (4.12)$$

Vamos e interpretar fisicamente este resultado: a baixas temperaturas tem-se que $\langle r^2 \rangle \approx r_0^2$. Sendo r_0 da ordem do tamanho dos constituintes do sistema, significa que a baixas temperaturas os pares estão ligados, mas quando se atinge a temperatura crítica T_c estes pares se separam e assim temos defeitos livres.

A polarizabilidade por par de defeitos é então obtida pela resposta linear ao "campo elétrico" aplicado [21]:

$$\mathcal{P}(r) = q \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \langle r \cos \phi \rangle \Big|_{\mathcal{E}=0} \quad (4.13)$$

Temos então que:

$$\mathcal{P}(r) = \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \frac{\int_{r_0}^{\infty} dr r \exp(-2\beta K q^2 \ln(r/r_0)) \exp(\beta \mathcal{E} q r \cos \phi)}{\int_{r_0}^{\infty} dr r \exp(-2\beta K q^2 \ln(r/r_0))} \quad (4.14)$$

Fazendo uso da equação (4.11) obtemos então:

$$\mathcal{P}(r) = \frac{1}{2} \beta K q^2 \langle r^2 \rangle \quad (4.15)$$

Sendo assim a polarizabilidade diverge na temperatura de transição.

4.3 Transição de Kosterlitz Thouless na Presença de Espaços Curvos

Vimos na seção anterior como ocorre a transição de fase para duas dimensões e que esta transição que se dá pelo rompimento do par "defeito-antidefeito", isto é, o rompimento do par de defeitos com cargas q e $-q$. Mas tudo isto foi feito na geometria trivial do plano. Nesta seção vamos introduzir sistemas com defeitos pontuais em geometrias não triviais. O fato de se ter sistemas com defeitos na presença dessas geometrias pode levar a efeitos interessantes como por exemplo: a mudança da temperatura de transição de fase ou mesmo cancelar a transição de fase.

4.3.1 Transição de Kosterlitz-Thouless na Geometria da Esfera

Vamos estudar agora como ocorre a transição de Kosterlitz-Thouless na esfera

para filmes de superfluido e filmes de cristal líquido. Vamos considerar um par defeito-antidefeito nesta geometria. Considerando simetria azimutal na energia obtida no capítulo anterior para um par de vórtices num filme superfluido, esta energia é então dada por:

$$E = \frac{K}{4\pi} q^2 \ln 4R^2 \left(\frac{\tan \frac{r}{2R}}{\tan \frac{r_0}{2R}} \right) - 2\pi K q^2 \ln \left(\frac{\sec^2 \frac{r}{2R}}{\sec^2 \frac{r_0}{2R}} \right) \quad (4.16)$$

Sendo assim, como a esfera é uma superfície fechada, para comportar um sistema físico de dimensões macroscópica, o raio deve ser muito grande, então uma boa aproximação para esse caso é fazer $R \rightarrow \infty$. Sendo assim a transição de Kosterlitz-Thouless para a esfera ocorre exatamente como no caso do plano, tanto para o caso de filmes superfluidos, como para filmes de cristal líquido. Esta transição ocorre a uma temperatura:

$$T_c = \frac{K q^2}{8\pi k_B} \quad (4.17)$$

E neste caso a transição ocorre a esta temperatura tanto para filmes de superfluido como para filmes de cristal líquido pois aqui o termo de autointeração não teve relevância.

4.3.2 Transição de Kosterlitz-Thouless na Geometria do Hiperbolóide

Vamos verificar agora como a geometria do do hiperbolóide influi na transição de Kosterlitz-Thouless. Vamos considerar um par defeito-antidefeito nesta superfície. Para um filme de superfluido, considerando-se simetria azimutal na energia dada

por (3.45) obtemos então a seguinte energia livre:

$$F = \frac{Kq^2}{8\pi} \ln \left(\frac{\tanh \frac{r}{2R}}{\tanh \frac{r_0}{2R}} \right) + 4\pi Kq^2 \ln \left(\frac{\cosh \frac{r}{2R}}{\cosh \frac{r_0}{2R}} \right) - 2k_B T \ln \left(\frac{\sinh \frac{r}{2R}}{\sinh \frac{r_0}{2R}} \right), \quad (4.18)$$

onde a entropia é dada por $S = k_B \ln \frac{\sinh^2 \frac{r}{2R}}{\sinh^2 \frac{r_0}{2R}}$.

Mas para $\frac{r}{2R}$ grande temos que $\cosh \frac{r}{2R} \approx \sinh \frac{r}{2R}$ e $\ln \sinh \frac{r}{2R} \gg \ln \tanh \frac{r}{2R}$. E sendo $A = 4\pi R^2 \sinh^2 \frac{r}{2R}$ a área do hiperbolóide, então a energia livre pode ser escrita como:

$$F(A, T) = 2\pi Kq^2 \ln \frac{A}{4\pi R^2 \cosh^2 \frac{r_0}{2R}} - k_B T \ln \frac{A}{4\pi R^2 \sinh^2 \frac{r_0}{2R}} \quad (4.19)$$

Para temperaturas muito baixas, o regime de energia interna impera sobre o regime entropico, assim o regime é de defeitos ligados, mas quando a temperatura é tal que $F = 0$, ocorre uma mudança de regime e a entropia passa a imperar, sendo assim, o regime que temos agora é o de defeitos livres. A transição de fase é obtida então pelo diagrama de fases dado pela equação:

$$\frac{T_c}{C_{SF}} = \frac{\ln \frac{A}{4\pi R^2 \cosh^2 \frac{r_0}{2R}}}{\ln \frac{A}{4\pi R^2 \sinh^2 \frac{r_0}{2R}}} \quad (4.20)$$

onde $C_{SF} = \frac{2\pi Kq^2}{k_B}$ para filmes de superfluidos. Definindo $\bar{A} = \frac{A}{4\pi R^2}$ temos então que:

$$\frac{T_c}{C_{SF}} = \frac{\ln \frac{\bar{A}}{\cosh^2 \frac{r_0}{2R}}}{\ln \frac{\bar{A}}{\sinh^2 \frac{r_0}{2R}}} \quad (4.21)$$

Na figura 4.2 traçamos o diagrama de fases para um uma membrana hiperbólica de Hélio Superfluido para diferentes raios de curvatura. Podemos observar da equação (4.21) que no diagrama de fases acima da curva temos um regime de defeitos livres,

enquanto que abaixo da curva temos um regime de pares de defeitos-antidefeitos ligados.

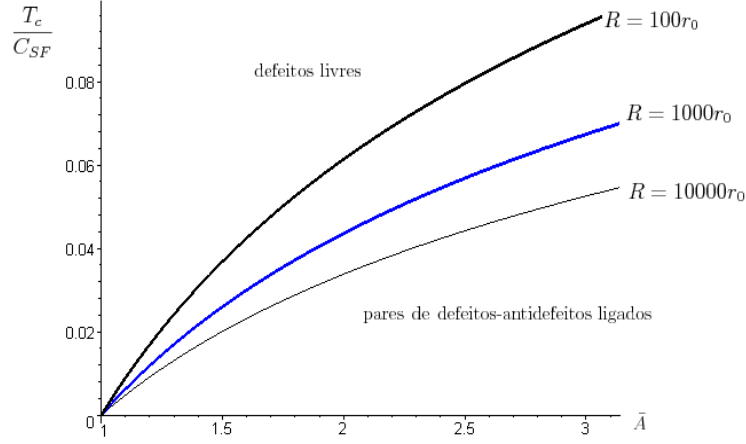


Figura 4.1: Diagrama de fases para uma membrana hiperbólica de um filme de superfluido para diferentes valores do raio de curvatura

Observamos aqui que com a introdução do termo de autointeração prevemos uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless a uma temperatura não nula, coisa que até então a literatura não havia previsto pelo fato de não se considerar esta autointeração [23].

Para filmes de cristal líquido a energia livre se escreve da forma:

$$F(A, T) = -4\pi Kq \left(1 - \frac{q}{2}\right) \ln \frac{A}{4\pi R^2 \cosh^2 \frac{r_0}{2R}} - k_B T \ln \frac{A}{4\pi R^2 \sinh^2 \frac{r_0}{2R}} \quad (4.22)$$

E assim a temperatura crítica de transição de fase é dada por:

$$\frac{T}{C_{CL}} = -q \left(1 - \frac{q}{2}\right) \frac{\ln \frac{\bar{A}}{\cosh^2 \frac{r_0}{2R}}}{\ln \frac{\bar{A}}{\sinh^2 \frac{r_0}{2R}}} \quad (4.23)$$

onde $C_{CL} = \frac{4\pi K}{k_B}$ Para cargas topológicas de no intervalo $q < -\frac{1}{2}$ ou $q > 2$, temos

um diagrama de fases semelhante ao traçado para a membrana hiperbólica de filme de superfluido. Isto é mostrado na figura 4.2

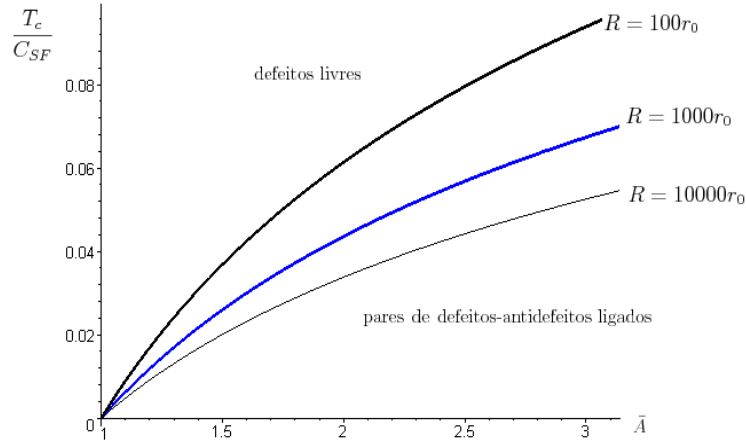


Figura 4.2: Diagrama de fases para uma membrana hiperbólica de um filme de cristal líquido para diferentes valores do raio de curvatura com cargas topológicas no intervalo $q < -\frac{1}{2}$ ou $q > 2$.

Algo diferente ocorre quando as cargas topológicas no filme de cristal líquido estão contidas no intervalo $1 < q < 2$. Na figura 4.3 mostramos o comportamento do diagrama de fases neste caso.

4.3.3 Transição de kosterlitz-Thouless na Geometria do Cone

Vamos começar então pela geometria do cone e ver como esta geometria influi na transição de fase do substrato. Para um par de vórtices numa membrana cônica de um filme de superfluido a energia é dada por:

$$E = \frac{K}{8\pi} p q^2 \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) - 2\pi K q^2 p (p-1) \ln \frac{r}{r_0} \quad (4.24)$$

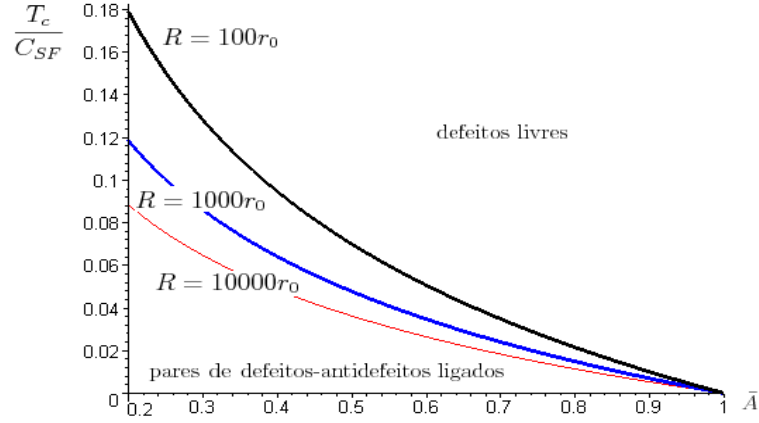


Figura 4.3: Diagrama de fases para uma membrana hiperbólica de um filme de cristal líquido para diferentes valores do raio de curvatura no caso de cargas topológicas no intervalo $1 < q < 2$

Podemos obter a entropia de maneira análoga a obtida no plano e esta é dada por $S = 2k_B \ln \frac{r}{r_0}$. Sendo assim a energia livre é obtida por:

$$F = \left(\frac{K}{8\pi} p q^2 - 2\pi K q^2 p(p-1) - 2k_B T \right) \ln \frac{r}{r_0} \quad (4.25)$$

E obtemos então a temperatura crítica $T_c = \frac{\frac{K}{8\pi} p q^2 - 2\pi K q^2 p(p-1)}{2k_B}$. Na figura 4.4 esboçamos a temperatura de transição com a conicidade. Observamos então que para filmes de superfluido no cone só temos transição para a conicidade p no intervalo $1 \leq p \leq 1.02$.

Calculando a distância média entre as cargas temos então que:

$$\langle r^2 \rangle = r_0^2 \frac{\beta \left(\frac{K}{8\pi} p q^2 + 2\pi K p(p-1) \right) - 1}{\beta \left(\frac{K}{8\pi} p q^2 + 2\pi K p(p-1) \right) - 2} \quad (4.26)$$

E assim observamos que o sistema sofre a transição do regime de defeitos ligados ao regime de defeitos livres a temperatura T_c . Observamos um fato interessante

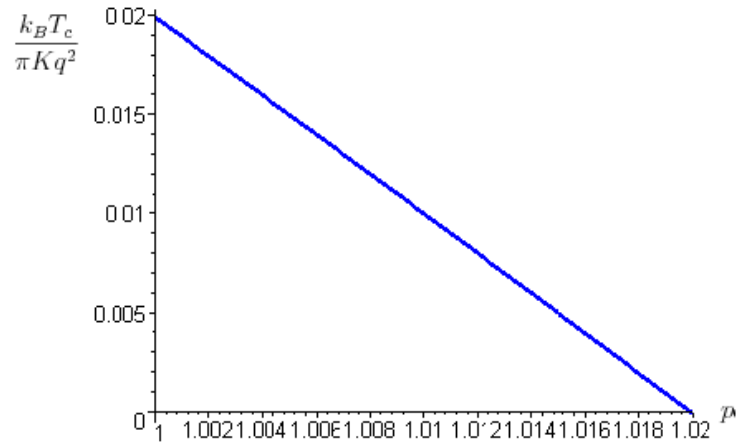


Figura 4.4: Temperatura de transição para uma membrana cônica de superfluido

que é a temperatura de transição aumentar pelo fator p . Usando o fato de que a polarizabilidade é dada por $\mathcal{P} = \frac{1}{2}\beta K q^2 \langle r^2 \rangle$ temos então que:

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2}\beta K q^2 r_0^2 \frac{\beta(K p q^2 + 2\pi K p(p-1)) - 1}{\beta(p q^2 + 2\pi K p(p-1)) - 2} \quad (4.27)$$

E observamos que esta polarizabilidade diverge na temperatura crítica T_c .

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas Futuras

Ao final deste trabalho apresentamos algumas conclusões importantes começando pelo primeiro capítulo o qual foi de muita importância introduzirmos conceitos fundamentais em matéria condensada como parâmetro de ordem, pois precisamos do conceito de parâmetro de ordem para entender como os defeitos topológicos distorcem a ordem do sistema físico em questão.

Também foi muito importante o capítulo dois desta dissertação, pois apresentamos uma revisão a respeito dos modelos XY e sistemas que se comportam como tais, por exemplo, filmes finos de Hélio superfluido e filmes finos de Cristal líquido nemático, visto que a compreensão de modelos XY é de fundamental importância para a obtenção de uma teoria que descreve defeitos topológicos em sistemas bidimensionais.

O conteúdo do capítulo três foi muito importante para caracterizarmos nossos sistemas nas geometrias trabalhadas, pois a partir das ferramentas introduzidas neste capítulo, que se refere a modelos XY em espaços curvos, fomos realmente capazes de escrever a energia livre dos sistemas em questão, o que dá uma descrição termodinâmica destes. E observamos que um aspecto muito importante para defeitos

em superfícies curvas é que estes defeitos além de experimentarem a interação usual coulombiana entre eles, experimentam uma autointeração de caráter geométrico devido a curvatura gaussiana da superfície. É uma coisa bastante importante observada é que existe uma diferença fundamental entre a autointeração em filmes de Hélio superfluido e a autointeração em filmes de Cristal líquido. Em filmes de Hélio superfluido a autointeração é quadrática na carga topológica enquanto que para filmes de cristal líquido a autointeração tem um termo quadrático e outro linear na carga topológica. Esta diferença no caráter da autointeração se dá pela natureza geométrica do parâmetro de ordem dos sistemas em questão, pois para filmes de Hélio superfluido o parâmetro de ordem é a fase da função de onda coletiva, grandeza tal que não está definida no mesmo espaço da superfície ao qual o filme está colocado, sendo assim a superfície não influencia no estado fundamental de filmes de Hélio superfluido, o que tem como consequência o termo quadrático na autointeração. Já em filmes de Cristal líquido o parâmetro de ordem está relacionado com o ângulo de orientação das moléculas, grandeza que está definida no mesmo espaço em que a superfície está definida e a consequência disso é que a superfície influi no estado fundamental de filmes de cristal líquido e com isso surge um termo de conexão na energia livre, resultando o acoplamento linear da autointeração com a carga topológica.

Finalmente vamos apresentar conclusões sobre os resultados obtidos nestre trabalho. Começando pelas autoenergias obtidas. Antes de entrar nos nossos resultados propriamente ditos fizemos uma revisão sobre o trabalho de Nelson et al sobre defeitos no carço gaussiano [11], ao qual se obtem de maneira simples a energia livre deste sistema pelo uso do formalismo de espaços conformes. Em [11] se obtém uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless variando apenas o parâmetro α do carço gaussiano. Pretendemos futuramente introduzir efeitos de temperatura e entender como ocorre a transição de Kosterlitz-Thouless para o carço gaussiano levando-

se em conta o parâmetro da superfície α e a temperatura. Quanto aos resultados propriamente ditos começamos primeiramente escrevendo as energias livres para a esfera, hiperbolóide, cone e toro, incluindo o termo de autointeração o qual foi obtido utilizando o formalismo do espaço conforme, para depois verificarmos efeitos de temperatura.

Verificamos que a geometria em que o sistema físico se encontra influi diretamente na transição de fase que este sofre. Na esfera observamos que a transição de um regime com defeitos ligados para um regime com defeitos livres ocorre exatamente como ocorre no plano, pois quando estamos tratando de transições de fase em sistemas físicos, em geral, estes sistemas apresentam dimensões termodinâmicas. Ou seja, o tratamento de transição de fase para sistemas contidos numa esfera se dá fazendo $R \rightarrow \infty$, o que torna a transição equivalente à que ocorre no plano.

No caso do cone vemos que existe uma temperatura fixa para a transição de fase. vimos que esta temperatura de transição aumenta pela conicidade p em relação ao plano e devido a autointeração é adicionado um termo cúbico em p subtraído com um termo quadrático, o que resulta numa temperatura ainda mais alta. Temperaturas altas podem ser mais facilmente obtidas experimentalmente, daí a importância para o aumento da temperatura de transição numa geometria cônica.

E outra conclusão importantíssima é que para sistemas contidos na geometria do hiperbolóide ocorre uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless, que não havia até então sido previsto, pois em trabalhos anteriores não se consideravam o termo de autointeração na energia livre. E o mais interessante é que a transição de fase não é dada apenas numa única temperatura, mas sim por um diagrama de fases envolvendo temperatura e a área do sistema.

E quanto as perspectivas futuras para a continuidade deste trabalho, pretendemos investigar como ocorrem transições de Kosterlitz-Thouless para o toro assim como foi feito para as geometrias já tratadas. Pretendemos também generalizar o que

foi feito sobre transições de fases incluindo o efeito dos demais defeitos contidos no sistema, coisa que não dá para se tratar analiticamente. Daí temos que partir para métodos numéricos ou métodos aproximativos tais como técnicas de Grupo de Renormalização.

Bibliografia

- [1] KLEMAN, M. and LAVRENTOVICH, O.D., *Soft Matter Physics: an Introduction*, Springer, 2001.
- [2] SETHNA, J. P., *OrderParameters, Broken Symetry and topology*
<http://www.lassp.cornell.edu/sethna/OrderParameters/Intro.html>, (2003).
- [3] CHAIKIN, P. M. and LUBENSKY, T. C. *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Pres, 1995.
- [4] DE GENNES, P. G. and PROST, J. *The Physisics of Liquid Crystals*, Oxford University Press, Oxford.
- [5] TSERKOV, V. N., Acta Psicochim. USSR **16**, 132 (1942), Brandenberger R., 1997, MNRAS, **291**, L1.
- [6] NELSON, D. *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2002).
- [7] HUANG, K., *Statistical Mechanics*, second edition, Wiley(1963).
- [8] NELSON, D. and KOSTERLITZ, J.M., Phys.Rev. Letters **39**, 1201, (1977).
- [9] FURTADO, C. and MORAES, F. , Class. Quant. Grav. **14**, 3425(1997).
- [10] VITELLI, V. and TURNER, A. M., Phys. Rev. Lett. **93**, 215301 (2004).

- [11] VITELLI, V. and NELSON D., Phys. Rev. E **70**, 051105 (2004).
- [12] KAMIEN, R. D., Rev. of Mod. Phys. **74**, (2002).
- [13] ONeil, *Elementary Differential Geometry* Academic Pres, 1966.
- [14] LUBENSKY, T. C. and PROST, J., J. Phys. II France **2**, 371 (1992).
- [15] FURTADO C. ,RIBEIRO, C. A. de Lima , AZEVEDO, S., Phys. Lett. A **296**, 171 (2002).
- [16] MELLO, E. R. Bezerra de, BEZERRA, V. B., FURTADO, C., MORAES F., Phys. Rev. D **51**, 7140 (1995).
- [17] MERMIN, N.D. and WAGNER,H., Phys. Rev. Lett. **22**, 1133 (1966).
- [18] HOHEMBERG,P.C. , Phys. Rev. **158**, 383(1967).
- [19] NAUMOVETS, A. G., Cont. Phys. **30**, number 3, 187 (1989).
- [20] JENSEN,H. J., *The Kosterlitz-Thouless Transition*,
<http://www.mit.edu/levitov/8.334/xynotes1.pdfsearch=%22the%20kosterlitz-thouless%20transition%20%22>.
- [21] KOSTERLITZ,J. M. and THOULESS, D. J., J.Phys C **6**, 1181 (1973).
- [22] KOSTERLITZ, J. M. and D. J. Thouless, J.Phys C: Solid St. Phys **5**, 124 (1972).
- [23] DASMAHAPATRA, S., Mod. Phys. Lett. B, **4**, No. 20, 1273, (1990).

Bibliografia