

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Aspectos Topológicos da Física de Polímeros.

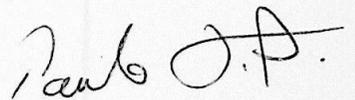
Andrey Gomes Martins

Dissertação de Mestrado submetida ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Paulo Teotônio Sobrinho

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Paulo Teotônio sobrinho - IFUSP
Prof. Dr. João Carlos Alves Barata - IFUSP
Prof. Dr. José Francisco Gomes - IFT/UNESP

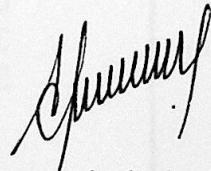


INSTITUTO DE FÍSICA

São Paulo
Junho de 2001

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3554



Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

Delega 06/06/2001

SBI-IFUSP



305M810T3554

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Martins, Andrey Gomes

Aspectos Topológicos da Física de Polímeros.
São Paulo, 2001.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Departamento de Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. Paulo Teotônio Sobrinho
Área de Concentração: Física de Partículas Elementares
e Campos

Unitermos: 1. Invariantes de Nó; 2. Emaranhados;
3. Álgebras de Hopf; 4. Funtor de Turaev;
5. Vórtices Topológicos.

USP/IF/SBI-042/2001

Abstract

We study the problem of calculating the probability distribution of a random chain consisting of N steps being a knot corresponding to a certain value of a given invariant. In the case of the abelian invariant known as winding number, we reproduce the solution presented in the reference [7]. In order to extend this calculation, we study two examples of nonabelian knot invariants: the Jones polynomial and the Turaev invariant. We show that this last example has a physical interpretation in terms of a quantum theory of topological vortices.

Resumo

Estudamos o problema que consiste em calcular a distribuição de probabilidade de uma cadeia aleatória de N passos ser um nó com um certo valor de um dado invariante. No caso do invariante abeliano conhecido como número de voltas, nós reproduzimos a solução contida na referência [7]. Com o objetivo de estender esse cálculo, estudamos dois exemplos de invariantes de nó não-abelianos: o polinômio de Jones e o invariante de Turaev. Mostramos que esse último exemplo possui uma interpretação física em termos de uma teoria quântica de vórtices topológicos.

Sumário

1	A topologia na física de polímeros	1
1.1	Generalidades sobre polímeros	1
1.2	Cadeias ideais	3
1.2.1	Distribuição de probabilidades para polímeros longos	5
1.2.2	Integral de trajetórias para $P_N(\vec{R})$	9
1.3	Cadeias reais	10
1.4	Entrelaçamento de polímeros	11
1.4.1	A partícula quântica no círculo	12
1.4.2	Integrais de trajetória em coordenadas polares	18
1.4.3	Dois polímeros entrelaçados	20
2	Teoria dos nós	23
2.1	Conceitos básicos	23
2.2	Invariantes de elo	31
2.2.1	Invariante de Jones	31
2.3	Tranças e nós	37
2.3.1	Grupo de tranças	38
2.3.2	Geradores e relações	39
2.3.3	Teorema de Alexander	41
2.3.4	Teorema de Markov-Birman	42
3	Invariante de Turaev	45
3.1	Categorias e funtores	45
3.2	Categoria dos emaranhados	49
3.3	Álgebras de Hopf e suas representações	56
3.4	Categoria das representações de uma álgebra de Hopf do tipo fita	60
3.5	Invariante de Turaev	61

4	Sistema de N vórtices	64
4.1	Teorias de calibre não-abelianas	64
4.2	Álgebra de observáveis de N vórtices ($\mathcal{A}^{(N)}$)	70
4.3	Quantização da álgebra de N vórtices	74
4.4	Regras de fusão e mudança de topologia	77

Introdução

Essa dissertação tem por objetivo delinear alguns aspectos básicos do cenário moderno da pesquisa em física de polímeros. Ao entrar nesse vasto campo multi-disciplinar descobrimos importantes relações entre topologia, mecânica quântica, teoria de campos e estatística de polímeros.

O primeiro capítulo faz um apanhado geral de alguns importantes resultados históricos da física de polímeros. Durante o processo de formação dos polímeros, as cadeias de moléculas podem enrolar-se umas nas outras, assumindo conformações estáveis conhecidas na linguagem matemática como elos. Neste capítulo consideramos o exemplo simplificado em que um polímero situa-se nas imediações de uma reta infinita, que corresponde a uma segunda cadeia muito maior do que a primeira. Um problema clássico associado a esse exemplo consiste em calcular a probabilidade de uma cadeia aleatória de N passos circundar uma reta infinita um número n de vezes. A solução desse problema é obtida na forma de uma integral de trajetórias no caso em que o número de passos da cadeia é muito grande, conforme pode-se ver na referência [7].

Consideremos agora o caso geral, em que um sistema formado por polímeros pode assumir uma conformação qualquer no espaço. Verifica-se que para cada conformação arbitrária, existe um conjunto de conformações que podem ser obtidas a partir daquela mediante deformações contínuas, isto é, sem que haja ruptura em nenhuma das ligações químicas do polímero. Desejaríamos ser capazes de decidir se uma conformação arbitrária de um sistema de polímeros pode ser deformada continuamente até tornar-se idêntica a uma conformação padrão escolhida previamente. Esse problema não possui solução conhecida até o momento. Observa-se, no entanto, que é possível classificar parcialmente as diversas conformações que o sistema pode assumir. Para tanto, necessitamos estudar o conceito de invariante de nó. Um invariante de nó é uma função que assume o mesmo valor em todas as conformações de uma cadeia fechada que estão conectadas entre si por deformações contínuas. Nosso objetivo final é, portanto, o cálculo da distribuição de probabilidade de uma cadeia aleatória de N passos ser um nó com um certo valor de um dado invariante. Nosso próximo passo consiste então em um estudo mais aprofundado acerca da obtenção de invariantes de nó.

O segundo capítulo contém uma exposição dos conceitos básicos da teoria dos nós. Após esta introdução tratamos do problema dos invariantes. Estudamos em particular um dos exemplos mais importantes das últimas décadas, o polinômio de Jones. Ainda neste capítulo verificamos a existência de uma conexão entre a teoria dos nós e o estudo do grupo de tranças.

No terceiro capítulo introduzimos uma abordagem para a obtenção de invariantes de nó que teve início em meados da década de 1980. Essa abordagem leva em conta as relações existentes entre grupos quânticos (álgebras de Hopf, em particular) e topologia em dimensão 2 e 3. Especificamente falando, após introduzir a categoria dos emaranhados (objetos que generalizam os conceitos de nó e elo) e a categoria das representações de uma certa álgebra de Hopf, obtemos o invariante de Turaev. Essa abordagem pode ser encontrada na referência [25], por exemplo.

No quarto e último capítulo desse trabalho, tentamos dar uma interpretação física para o invariante de Turaev. Partindo de uma teoria de calibre em duas (2+1) dimensões, estudamos seu limite em baixas energias, encontrando assim um sistema de N vórtices topológicos. A quantização desse sistema dá origem a processos que são interpretados como espalhamento, criação e aniquilação de vórtices e anti-vórtices. Essa interpretação é a chave para a obtenção de um invariante de nó que tem uma estrutura extremamente similar ao invariante de Turaev.

Concluimos essa dissertação com um apanhado geral dos resultados e com uma breve discussão a respeito de uma possível continuação deste projeto de pesquisa.

Capítulo 1

A topologia na física de polímeros

1.1 Generalidades sobre polímeros

Iniciamos esta dissertação apresentando algumas noções básicas a respeito de certos tipos de moléculas conhecidas como polímeros. Polímeros são objetos de estudo da Física, da Química e da Biologia. Como exemplo da importância prática do estudo de polímeros ressaltamos que a estrutura e as funções dos sistemas biológicos são determinadas pelas propriedades dos polímeros presentes nesses sistemas, conforme se vê na referência [4].

Nesse estudo, as únicas propriedades dos polímeros que nos interessam são as que têm origem na conformação das macromoléculas, isto é, na disposição espacial dos átomos que compoem o polímero. É bom que se diga que os fenômenos associados às conformações dos polímeros se dão em uma escala de tempo muito maior do que a escala dos fenômenos atômicos. Isso é uma garantia de que os métodos da física estatística clássica são apropriados para a descrição desses fenômenos. Desde a década de 1930 os físicos vêm tratando de questões relacionadas à estatística de macromoléculas. Após a descoberta da estrutura de dupla hélice das moléculas de DNA (J. Watson e F. Crick, 1953), esse campo de estudo recebeu um impulso adicional, mas o grande interesse por esses temas somente ocorreu a partir da década de 1960, quando os métodos modernos da física teórica passaram a ser empregados largamente no estudo dos polímeros (veja a referência [23], por exemplo).

Nosso ponto de vista é físico-matemático, e somente estaremos interessados em analisar certas questões de cunho topológico e estatístico, que serão estabelecidas mais adiante neste capítulo. Antes disso, no entanto, devemos detalhar um pouco mais nossa visão acerca dos aspectos gerais da física de polímeros.

Se analisarmos a estrutura dos polímeros mais detalhadamente, verificaremos que cada uma das macromoléculas é formada pela repetição de agrupamentos menores de átomos, chamados de monômeros. Os monômeros estão ligados quimicamente uns aos outros, de modo a formar o polímero.

O número de ligações químicas que um monômero pode formar é chamado de funcionalidade. No caso de monômeros de funcionalidade igual a dois, temos a formação de polímeros lineares, objetos de estudo do nosso trabalho. Como exemplo típico de cadeia linear podemos citar as moléculas de polietileno e de poliestireno, que podem ser representadas pelas fórmulas estruturais mostradas na figura (1.1).

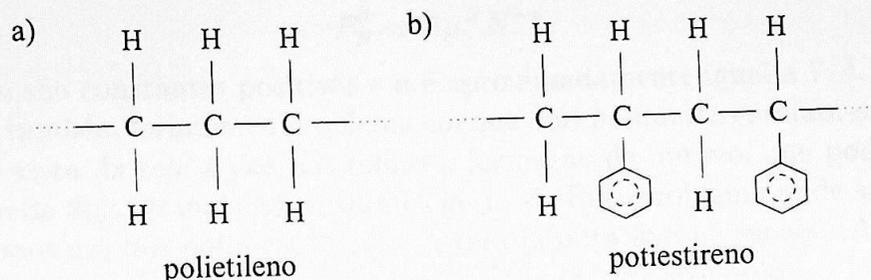


Figura 1.1: Exemplos de polímeros lineares.

O número de monômeros que formam um polímero é chamado de grau de polimerização. Polímeros sintéticos possuem grau de polimerização variando entre 10^2 e 10^5 . Esse fato nos permitirá utilizar a hipótese de que o número de monômeros que formam o polímero é tão grande quanto necessitarmos em cada um dos nossos eventuais cálculos aproximados. As macromoléculas mais longas conhecidas são as moléculas de DNA, que chegam a possuir grau de polimerização da ordem de 10^9 .

Um polímero linear pode ser uma cadeia aberta ou fechada. Cadeias fechadas podem apresentar-se enroladas em torno de si mesmas, caracterizando aquilo que chamamos de nó. Essa é a principal razão para o nosso interesse neste assunto. Se representarmos um polímero fechado através de uma curva contínua fechada que não intercepta a si própria, estaremos entrando no ramo da matemática conhecido como teoria dos nós. Veremos que é possível obter informações a respeito da termodinâmica de soluções de polímeros através do estudo da estatística de nós.

Da teoria dos nós sabemos que o conjunto de todos os nós está dividido em classes de equivalência, conhecidas como classes de isotopia. Uma pergunta que se faz é: dada uma curva fechada gerada aleatoriamente, qual a probabilidade de ela pertencer a uma certa classe de isotopia? Mais tarde veremos que essa questão deverá ser modificada, pois formulada assim ela não tem solução conhecida até o momento. Para tanto, necessitaremos introduzir o conceito de invariantes de nó, e em vez de falarmos em classes de equivalência, tentaremos responder a pergunta: qual a distribuição de probabilidade de uma cadeia fechada gerada aleatoriamente ser um nó com um dado invariante?

É interessante lembrar que o problema do polímero que se enrola em si mesmo foi formulado por Delbrück (1962) no contexto da Biologia Matemática, como pode ser visto na

referência [1]. Nesse artigo Delbrück conjecturou que a probabilidade de um polímero fechado formado por N monômeros ser equivalente a um círculo (P_N^0) decresce rapidamente com o aumento do grau de polimerização. Em 1976 McKenzie observou esse comportamento através de simulações numéricas, conforme se vê na referência [2]. Ele obteve a seguinte expressão para P_N^0 :

$$P_N^0 \simeq A\mu^N N^{-a}, \quad (1.1)$$

em que A e μ são constantes positivas e a é aproximadamente igual a $7/4$.

Delbrück também formulou o problema em que dois polímeros enrolam-se um no outro. Do ponto de vista da teoria dos nós temos a formação de um elo, que pode ser pensado como a união de dois ou mais nós disjuntos entre si. Esse problema pode ser simplificado se substituirmos um dos polímeros por uma reta infinita fixa no espaço. A solução dessa versão modificada pode ser encontrada em [3], [7] e [8], por exemplo.

É importante destacarmos que esse problema não é de interesse apenas para matemáticos e físicos teóricos, pois efeitos topológicos podem modificar de forma significativa as propriedades termodinâmicas das soluções de polímeros. Imaginemos, por exemplo, que um agente externo atue em uma solução de polímeros no sentido de mover ou esticar as macromoléculas. É claro que se as mesmas estiverem entrelaçadas umas nas outras, o agente externo deverá gastar mais energia do que seria necessário se os polímeros estivessem totalmente livres.

1.2 Cadeias ideais

Com o objetivo de compreender melhor as propriedades dos polímeros, costumamos representá-los através de modelos simplificados que levam em conta as propriedades macroscópicas básicas dos sistemas reais de macromoléculas, como por exemplo a sua flexibilidade. Vamos considerar inicialmente o caso simplificado que consiste em uma cadeia ideal de N passos.

Inicialmente devemos tornar claro o conceito de cadeia ideal. Tomemos um ponto fixo arbitrário no espaço D -dimensional. Denotemos esse ponto pelo símbolo \vec{r}_a . A partir desse ponto desenhemos um segmento de reta de comprimento igual a l em uma direção arbitrária \hat{l} . A partir do ponto $\vec{r}_a + l\hat{l}$ desenhemos outro segmento de mesmo comprimento e também em uma direção arbitrária. Procedendo dessa forma um número N de vezes temos aquilo que chamamos de cadeia ideal de N passos. O ponto final da cadeia será denotado pelo símbolo \vec{r}_b . Podemos imaginar que as junções entre os diferentes passos da cadeia exercem o papel das moléculas, enquanto que os passos, por sua vez, representam as ligações químicas que mantêm as moléculas unidas.

Podemos agora obter alguns resultados básicos a respeito de cadeias ideais. Primeiramente mostraremos que o valor médio (tomado sobre todas as conformações possíveis) do quadrado da distância entre as extremidades da cadeia é linear com relação ao número de passos. Abaixo obteremos esse resultado seguindo a abordagem contida em [5].

Sejam \vec{r}_{i-1} e \vec{r}_i os raios vetores das extremidades do i -ésimo passo da cadeia e seja $\langle f \rangle$ o símbolo para o valor médio da grandeza f tomado sobre todas as conformações possíveis da cadeia. Temos então que:

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}) \quad (1.2)$$

e

$$\langle \vec{R}^2 \rangle = \sum_{i=1}^N \langle (\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1})^2 \rangle + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} \langle (\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}) \rangle. \quad (1.3)$$

Usando a hipótese de que os os passos podem assumir qualquer direção no espaço com igual probabilidade, temos que o ângulo formado pelos vetores $\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}$ e $\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}$, denotado por $\theta_{i,j}$, pode assumir qualquer valor no intervalo $[0, 2\pi]$ com igual probabilidade. Como resultado disso temos:

$$\langle (\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1}) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}) \rangle = l^2 \langle \cos \theta_{i,j} \rangle = 0. \quad (1.4)$$

Usando também o fato de que $(\vec{r}_i - \vec{r}_{i-1})^2 = l^2$, obtemos finalmente:

$$\langle \vec{R}^2 \rangle = Nl^2. \quad (1.5)$$

Podemos estimar o quanto o polímero está espalhado no espaço definindo o seu "tamanho médio" (R_0), através de: $R_0 \equiv \sqrt{\langle \vec{R}^2 \rangle} = N^{1/2}l$.

O fato de R_0 crescer com a raiz quadrada de N indica que para grandes valores do grau de polimerização, as conformações correspondentes a polímeros esticados são menos prováveis do que as conformações mais enoveladas. Isso é uma consequência da 2ª lei da termodinâmica, segundo a qual sistemas estatísticos em equilíbrio minimizam a sua energia livre de Helmholtz. No nosso caso, equilíbrio significa maximização da entropia, pois a energia interna é a mesma para todas as conformações (cadeias sem interação).

Um outro resultado importante que podemos obter consiste no seguinte: a distribuição de probabilidade ($P_N(\vec{r}_b - \vec{r}_a)$) de uma cadeia ideal ter extremidades nos pontos genéricos \vec{r}_a e \vec{r}_b é uma função gaussiana do módulo do vetor diferença ($\vec{r}_b - \vec{r}_a$) para valores

suficientemente grandes de N , ou seja, tem o seguinte comportamento assintótico para $N \gg 1$:

$$P_N(\vec{R}) \simeq N^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{3R^2}{2NI^2}}, \quad (1.6)$$

em que $\vec{R} \equiv (\vec{r}_b - \vec{r}_a)$ e $R \equiv |\vec{R}|$.

O fator $N^{-\frac{3}{2}}$ está ligado à normalização de $P_N(\vec{R})$. Observemos que o argumento da distribuição de probabilidade é o módulo do vetor diferença, ou seja, essa distribuição é invariante por translações e por rotações. Esse resultado será explicitamente obtido, mas podemos argumentar que esse comportamento é esperado do ponto de vista intuitivo, pois não fizemos nenhuma hipótese a respeito de pontos ou direções preferenciais na formulação do problema. Esse resultado é conhecido como teorema central do limite.

1.2.1 Distribuição de probabilidades para polímeros longos

Vamos agora obter a expressão anterior para a distribuição de probabilidade em três dimensões, seguindo para isso a abordagem contida em [7]. Antes devemos introduzir a notação a ser utilizada. Adotando o ponto \vec{r}_a como marco zero para a contagem do número de segmentos constituintes da cadeia, definimos a variável vetorial $\Delta\vec{r}_n \equiv \vec{r}_n - \vec{r}_{n-1}$. O ponto \vec{r}_0 será identificado com o ponto \vec{r}_a , e assim como antes, a diferença entre o ponto final e o inicial da cadeia será denotada por \vec{R} .

Consideremos o n -ésimo passo da cadeia, que tem início no ponto \vec{r}_{n-1} . Chamamos de $P_1(\Delta\vec{r}_n)$ a distribuição de probabilidades da sua extremidade final estar localizada no ponto $\vec{r}_n = \vec{r}_{n-1} + \Delta\vec{r}_n$. Como $\Delta\vec{r}_n$ pode apontar em qualquer direção com igual probabilidade, $P_1(\Delta\vec{r}_n)$ deve depender apenas do módulo do vetor $\Delta\vec{r}_n$. Além disso, dado que a cadeia tem passo constante e fixo, essa distribuição de probabilidades só pode ser diferente de zero em uma esfera de raio igual ao passo da cadeia. Escrevemos então que :

$$P_1(\Delta\vec{r}_n) = \frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\Delta\vec{r}_n| - l), \quad (1.7)$$

em que o fator $\frac{1}{4\pi l^2}$ foi introduzido com a finalidade de garantir a normalização de $P_1(\Delta\vec{r}_n)$. Essa imposição corresponde ao fato de que a extremidade final da cadeia formada por um único segmento está necessariamente situada em algum ponto de uma esfera de raio l centrada na origem. A contribuição para a distribuição de probabilidades total de uma única cadeia de N passos que tem como extremidades os pontos \vec{r}_a e \vec{r}_b é igual a:

$$dP_N(\vec{R}) = \prod_{j=1}^N [d^3 \Delta r_j] \prod_{k=1}^N \left[\frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\Delta\vec{r}_k| - l) \right] \delta^{(3)}(\vec{R} - \sum_{n=1}^N \Delta\vec{r}_n), \quad (1.8)$$

de forma que a distribuição de probabilidades total escreve-se:

$$P_N(\vec{R}) = \prod_{j=1}^N \left[\int d^3 \Delta r_j \right] \prod_{k=1}^N \left[\frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\Delta \vec{r}_k| - l) \right] \delta^{(3)}(\vec{R} - \sum_{n=1}^N \Delta \vec{r}_n). \quad (1.9)$$

Na expressão acima a delta tridimensional garante que as únicas contribuições levadas em conta são aquelas que de fato têm extremidades nos pontos \vec{r}_a e \vec{r}_b . Vamos agora utilizar a representação integral da delta de Dirac tridimensional, o que nos permitirá escrever a distribuição de probabilidade na forma de uma transformada de Fourier:

$$P_N(\vec{R}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \prod_{n=1}^N \left[\int d^3 \Delta r_n \frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\Delta \vec{r}_n| - l) e^{-i\vec{k} \cdot \Delta \vec{r}_n} \right], \quad (1.10)$$

de onde concluímos que:

$$\tilde{P}_N(\vec{k}) = \prod_{n=1}^N \left[\int d^3 \Delta r_n \frac{1}{4\pi l^2} \delta(|\Delta \vec{r}_n| - l) e^{-i\vec{k} \cdot \Delta \vec{r}_n} \right]. \quad (1.11)$$

Vemos assim que $\tilde{P}_N(\vec{k})$ é de fato igual à enésima potência de $\tilde{P}_1(\vec{k})$, isto é,

$$\tilde{P}_N(\vec{k}) = \left[\tilde{P}_1(\vec{k}) \right]^N. \quad (1.12)$$

O cálculo de $\tilde{P}_1(\vec{k})$ não é difícil de ser feito. Escolhemos um sistema de coordenadas esféricas centrado na origem e tomamos o eixo axial na mesma direção do vetor \vec{k} . A integral na variável radial é facilitada pela presença da distribuição delta de Dirac. As integrais angulares são elementares, levando ao resultado abaixo:

$$\tilde{P}_1(\vec{k}) = \frac{\text{sen}(kl)}{kl}. \quad (1.13)$$

Substituindo o resultado (1.13) em (1.10) e realizando as integrais angulares na variável \vec{k} , que são do mesmo tipo das presentes no cálculo de $P_1(\vec{k})$, temos:

$$P_N(\vec{R}) = \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk k \text{sen}(kR) \left(\frac{\text{sen}(kl)}{kl} \right)^N. \quad (1.14)$$

Observemos que, assim como esperávamos, os vetores \vec{r}_b e \vec{r}_a comparecem na distribuição de probabilidade apenas através do módulo da sua diferença.

Uma estimativa para $P_N(\vec{R})$ pode ser obtida se fizermos algumas aproximações. Lembremos que a função $\text{sen}(x)$ possui uma expansão em série de Taylor em torno da origem dada por:

$$\text{sen}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{x^{2i+1}}{(2i+1)!}. \quad (1.15)$$

Para valores da variável de integração suficientemente próximos de zero, o integrando não contribui de forma significativa para a integral, pois nessa região a função $\frac{\text{sen}(kl)}{kl}$ aproxima-se da unidade, enquanto os outros fatores do integrando aproximam-se de zero. Escolhamos então uma região do intervalo de integração para a qual o integrando contribua de forma efetiva para a integral. Notemos que essa região é tanto menos extensa quanto maior o valor de N , pois o integrando é o produto entre uma função limitada e uma potência negativa da variável de integração, a saber, k^{1-N} . Concluimos então que essa região começa pouco depois do zero e não se estende muito além do mesmo. Vamos considerar que essa proximidade com o zero seja tal que os únicos termos da série de Taylor que contribuem significativamente para a função $\text{sen}(kl)$ sejam o termo linear e o termo cúbico. Temos assim:

$$\left(\frac{\text{sen}(kl)}{kl}\right)^N \simeq (1 - k^2 l^2 / 6)^N = (1 - k^2 N l^2 / (6N))^N. \quad (1.16)$$

O próximo passo da aproximação consiste em substituir o fator $(1 - k^2 N l^2 / (6N))^N$ pela função $e^{-k^2 N l^2 / 6}$ na região especial já descrita. Argumentamos agora que essa substituição pode ser estendida para todo o domínio de integração. Para valores de k maiores do que os da região especial, a diferença entre $\frac{\text{sen}(kl)}{kl}$ e $e^{-k^2 N l^2 / 6}$ é praticamente nula, pois nessa região ambas as funções não diferem significativamente de zero. Por sua vez, a função $e^{-k^2 N l^2 / 6}$ apresenta um comportamento similar à função $\frac{\text{sen}(kl)}{kl}$ na região muito próxima à origem, onde ambas as funções aproximam-se da unidade. Isso completa nossa argumentação.

A integral resultante pode ser realizada de forma fechada. Realizamos primeiramente uma integração por partes e em seguida estendemos o domínio de integração para toda a reta real, usando o fato de que o integrando é uma função par. Obtemos então a seguinte expressão aproximada para a função $P_N(\vec{R})$:

$$P_N(\vec{R}) \simeq \frac{3}{4\pi^2 N l^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-k^2 N l^2 / 6} \cos(kR). \quad (1.17)$$

Essa integral pode ser realizada, por exemplo, se utilizarmos a série de Taylor para a função $\cos(kR)$ e calcularmos o termo genérico da série resultante, que é uma típica "integral gaussiana". A série resultante é facilmente somável, dando o seguinte resultado para $P_N(\vec{R})$:

$$P_N(\vec{R}) \simeq \left(\frac{3}{2\pi Nl^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{3R^2}{2Nl^2}}. \quad (1.18)$$

Com a distribuição de probabilidades acima podemos calcular, por exemplo, a entropia e a energia livre da cadeia, através das quais podemos estudar o que acontece quando a cadeia está sujeita a uma tração externa. Para tracionar o polímero o agente externo deve modificar a energia livre do sistema. Em oposição ao esforço externo o polímero apresenta uma força de origem estatística. Podemos dizer que como a cadeia busca estar em equilíbrio termodinâmico (que no caso corresponde ao máximo da entropia), o sistema tende a restaurar esse estado sempre que um agente externo atua no sentido de diminuir o grau de desordem da solução, esticando as cadeias, por exemplo.

A entropia $S(\vec{R})$ por polímero e por unidade de temperatura é definida como sendo o produto da constante de Boltzman pelo logaritmo do número de conformações que correspondem à situação em que as extremidades da cadeia estão ligadas pelo vetor \vec{R} , denotado por $W_N(\vec{R})$. Por simplicidade, vamos escolher um sistema de unidades no qual a constante de Boltzman é igual a 1. Notemos que $W_N(\vec{R})$ é o produto de $P_N(\vec{R})$ pelo número total de conformações possíveis da cadeia. Usando a expressão (1.18) e o fato de que o número total de conformações é constante, temos que:

$$S(\vec{R}) \simeq \text{cte} - \frac{3R^2}{2Nl^2}, \quad (1.19)$$

Definindo a energia livre de Helmholtz como sendo $F(\vec{R}) = U - TS(\vec{R})$, temos que:

$$F(\vec{R}) = \text{cte}' + \frac{3TR^2}{2Nl^2}, \quad (1.20)$$

onde usamos novamente o fato de que na nossa aproximação de cadeia sem interação a energia interna (U) não depende da conformação da cadeia.

Observemos que a energia livre é análoga à expressão para a energia potencial de um oscilador harmônico. Podemos definir um objeto chamado de "constante da mola" do polímero. Como a ação externa é responsável pela mudança da energia livre, temos que a força externa \vec{f} é igual ao gradiente de $F(\vec{R})$. Disso resulta a "lei de Hook" para polímeros:

$$|\vec{f}| = \frac{3T}{Nl^2} |\vec{r}| \quad (1.21)$$

em que $|\vec{r}|$ está de certa forma associado a um conceito análogo ao da elongação de uma mola sujeita a uma tração externa. A constante da mola vale, portanto, $\frac{3T}{Nl^2}$.

Podemos nos perguntar em que condições a aproximação de cadeia ideal traduz o comportamento experimentalmente observado em soluções de polímeros. A resposta é

que polímeros aproximam-se do comportamento ideal quando diluídos em bons solventes e quando a solução está concentrada. Discussões a respeito dessa questão podem ser encontradas nas referências [4], [5] e [6].

1.2.2 Integral de trajetórias para $P_N(\vec{R})$

Agora que dispomos da expressão para a distribuição de probabilidades no caso em que $N \gg 1$, podemos escrevê-la em termos de uma integral de trajetórias. Para isso é suficiente que lembremos um resultado bem conhecido da mecânica quântica na formulação de Feynman, a saber, a expressão para o propagador da partícula livre. Encontramos em [9] que o propagador de uma partícula livre de massa M que sai do ponto \vec{r}_a no instante t_a e chega ao ponto \vec{r}_b no instante t_b é dado por:

$$G(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) = \frac{1}{(2\pi i \hbar (t_b - t_a) / M)^{D/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \frac{(\vec{r}_b - \vec{r}_a)^2}{t_b - t_a}}, \quad (1.22)$$

em que D é a dimensão do espaço. Se estendermos a expressão anterior para a região de tempos imaginários fazendo

$$t \rightarrow -i\tau, \quad (1.23)$$

(com $\tau \in \mathbb{R}$), e se realizarmos as seguintes substituições:

$$\vec{r}_b - \vec{r}_a \rightarrow \vec{R}, \quad \tau_b - \tau_a \rightarrow Nl, \quad M/\hbar \rightarrow D/l, \quad (1.24)$$

encontraremos exatamente a expressão da distribuição de probabilidades $P_N(\vec{R})$ em D dimensões, isto é:

$$P_N(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi l^2 N/D)^{D/2}} e^{-\frac{D\vec{R}^2}{2Nl^2}}. \quad (1.25)$$

Comparemos esse resultado com a equação (1.18), que mostra o caso em que $D=3$. O caso geral mostrado na expressão (1.25) pode ser encontrado na referência [7]. Da mecânica quântica no formalismo de Feynman sabemos que o propagador da partícula livre em D dimensões é dado por:

$$G(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi i \hbar \epsilon / M)^{D/2}} \prod_{n=1}^{j-1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 x_n}{(2\pi i \hbar \epsilon / M)^{D/2}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} S_j}, \quad (1.26)$$

em que S_j é dada por:

$$S_j = \epsilon \sum_{n=1}^j \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 \right], \quad (1.27)$$

$\epsilon = (t - t')/j$ e j é o número de sub-intervalos em que o intervalo de tempo $(t - t')$ foi dividido no processo da construção da integral de trajetórias.

Tomando agora a expressão (1.26) para o propagador e realizando a extensão (1.23) e as substituições (1.24), obtemos uma expressão para $P_N(\vec{R})$ em termos de uma integral de trajetórias no espaço euclidiano. Se identificarmos o número de subintervalos j com o número de passos da cadeia N , poderemos dispensar o processo de limite presente em (1.26), dado que N é um número suficientemente grande. A expressão final para a distribuição de probabilidades em termos de uma “integral de trajetórias” será escrita como:

$$P_N(\vec{R}) \simeq \frac{1}{(2\pi l^2/D)^{D/2}} \prod_{n=1}^{N-1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 x_n}{(2\pi l^2/D)^{D/2}} \right] e^{-S_N}, \quad (1.28)$$

com S_N dada por:

$$S_N = \frac{D}{2l^2} \sum_{n=1}^N (\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1})^2. \quad (1.29)$$

1.3 Cadeias reais

Após essa revisão sobre cadeias ideais faremos alguns comentários a respeito de tratamentos mais realistas do problema da estatística de polímeros. Falaremos agora não mais em cadeia ideais e sim em cadeias reais. A primeira diferença fundamental entre as cadeias reais e as cadeias ideais é o efeito de volume excluído, presente apenas nas primeiras. A física por trás desse efeito é a seguinte: duas porções da mesma cadeia não podem ocupar a mesma posição no espaço ao mesmo tempo, pois os átomos constituintes dos polímeros repelem-se uns aos outros através de forças eletromagnéticas. O mesmo é verificado para átomos de cadeia diferentes. Matematicamente formulamos esse problema através da utilização do conceito de SAW¹. SAW's diferem de cadeias ideais pelo fato de que cada ponto do caminho pode ser visitado no máximo uma vez. O fato de SAW's não poderem interceptar-se faz com que as cadeias reais ocupem em média um volume maior do que as cadeias ideais. Podemos verificar essa afirmação tomando a média (sobre todas as conformações) do quadrado da distância entre as extremidades da cadeia. Podemos entender esse comportamento se notarmos que como dois pontos da cadeia não podem ocupar a mesma posição ao mesmo tempo, quanto maior o grau de polimerização da cadeia, menor a probabilidade da sua extremidade final retornar às regiões mais próximas à origem, pois as chances de essa região estar ocupada são grandes.

¹Sigla para a expressão inglesa: “self avoiding walk”.

Esse problema foi abordado na literatura não apenas de forma analítica, mas também através de métodos de cálculo numérico. As referências [5] e [6] contém vários resultados relativos às cadeias reais. Tomando por base essas referências vamos agora apresentar uma lista de alguns resultados sobre SAW's, comparando com os resultados para o caso das cadeias ideais. Vamos inicialmente estabelecer que as cadeias estão definidas em uma rede periódica em dimensão D . Dado um sítio da rede, o número de primeiros vizinhos do mesmo será denotado pela letra z . Por exemplo, no caso em que $D = 2$ e a rede é quadrada, temos que $z = 4$.

O número total de conformações de uma cadeia ideal de N passos com início em um ponto fixo da rede é dado por $W_{total} = z^N$, enquanto que no caso de um SAW, o resultado obtido é $W_{total} = c\tilde{z}N^{\gamma-1}$. O valor de \tilde{z} é menor que z . Por exemplo, para o caso em que $D = 3$ e a rede é cúbica simples, $z = 6$ e $\tilde{z} = 4,68$. O γ presente no expoente de N depende somente da dimensão da rede. Para $D = 2$, temos que $\gamma \simeq 4/3$, enquanto que para $D = 3$, temos que $\gamma \simeq 7/6$.

Outro resultado que podemos comparar com o caso de cadeias ideais é o tamanho médio da cadeia, como já havíamos dito. No caso de um SAW, chamaremos essa grandeza de R_F , em homenagem ao químico Flory, que realizou importantes trabalhos na determinação do tamanho médio de polímeros. No caso de cadeias reais, temos uma modificação importante com relação ao caso ideal:

$$R_F = cN^\nu, \quad (1.30)$$

em que ν e c são constantes positivas e ν depende somente da dimensão do espaço. Acredita-se que ν seja um expoente universal, isto é, que ele assuma o mesmo valor para todos os polímeros lineares, bem como para o SAW.

Em 1949 Flory desenvolveu um método não rigoroso para o cálculo de ν que rendeu resultados excelentes para qualquer dimensão D . Em resumo, Flory obteve que para $D < 4$:

$$\nu = \frac{3}{D+2}, \quad (1.31)$$

enquanto que para $D \geq 4$:

$$\nu = \frac{1}{2}. \quad (1.32)$$

1.4 Entrelaçamento de polímeros

Nesta seção vamos examinar mais a fundo as conseqüências do fato de polímeros serem capazes de enrolar-se em torno de si mesmos e em torno de outros polímeros. Assim

como dissemos no início deste capítulo, o problema de dois polímeros entrelaçados pode ser simplificado se considerarmos o caso em que um dos polímeros pode ser efetivamente substituído por uma reta infinita, sendo que o segundo polímero não enlaça a si próprio. A projeção das curvas que representam os dois polímeros num plano perpendicular ao primeiro polímero nos leva ao problema bidimensional em que uma curva contínua pode circular um número arbitrário de vezes um ponto fixo no espaço, sem no entanto jamais poder tocá-lo.

Estamos considerando o caso em que os polímeros mantêm a sua estrutura, sem jamais romperem-se. Dessa forma, podemos afirmar que no conjunto de todas as curvas que representam possíveis conformações da macromolécula em torno de um ponto fixo (a origem, por simplicidade) existem curvas que não podem ser deformadas continuamente umas nas outras. Existem, no entanto, curvas que podem ser deformadas continuamente umas nas outras. Intuitivamente podemos dizer que essas últimas mantêm algum tipo de relação entre si. O conceito de homotopia nos permite formalizar essa noção, conforme veremos a seguir.

1.1-Definição: Homotopia

Sejam X e Y dois espaços topológicos e sejam f e g dois mapas contínuos de X em Y . Dizemos que f é homotópico a g , e escrevemos $f \sim g$, se existe um mapa contínuo $h : X \times I \rightarrow Y$ (em que $I = [0, 1]$), tal que para todo $x \in X$ tenhamos:

$$h(x, 0) = f(x), \quad h(x, 1) = g(x). \quad (1.33)$$

É possível mostrar que homotopia é uma relação de equivalência. Tomando $X = I$ e $Y = \mathbb{R}^2$, introduzimos uma relação de equivalência no conjunto das curvas do nosso problema. O conjunto de todas as curvas homotópicas a uma dada curva γ , denotado por $[\gamma]$, é chamado de classe de homotopia de γ .

O problema do entrelaçamento de polímeros formulado nessa seção é, do ponto de vista topológico, idêntico ao problema de uma partícula livre que se move em um círculo. Na próxima seção estudaremos detalhadamente esse problema, o que nos proporcionará alguma experiência com a formulação de integrais de trajetória em domínios com restrições topológicas. A partir daí seremos capazes de pensar em termos mais gerais a respeito das questões topológicas da física de polímeros.

1.4.1 A partícula quântica no círculo

Consideremos um sistema composto de uma partícula sujeita a um potencial independente do tempo em que o seu espaço de configurações se resume a um círculo, isto é, as

posições acessíveis à partícula podem ser parametrizadas por um número pertencente a um intervalo fechado da reta real cujas extremidades estão identificadas.

Vamos quantizar esse sistema utilizando o formalismo das integrais de trajetória. O conjunto de todas as trajetórias de Feynman que ligam dois pontos quaisquer ϕ_a e ϕ_b é uma união disjunta de classes de homotopia. Note que no caso em que as posições inicial e final da partícula coincidem, o número de vezes que uma dada trajetória γ circunda a origem é o mesmo para qualquer elemento da classe de homotopia $[\gamma]$. Esse é um dos exemplos mais simples do que costumamos chamar de invariante por homotopia. Esse invariante recebe o nome de número de voltas². No caso em que as posições inicial e final da partícula não coincidem, podemos sempre definir o número de voltas se adotarmos a seguinte prescrição: para cada trajetória aberta associamos a trajetória fechada obtida através da sua composição com uma curva fixa (a mesma para todas as trajetórias abertas) ligando as posições inicial e final da partícula. Definimos então o número de voltas das trajetórias abertas como sendo igual ao valor desse invariante nas curvas fechadas construídas segundo a prescrição dada.

As classes de homotopia das trajetórias de Feynman da partícula no círculo são inteiramente determinadas pelo valor do número de voltas assumido pelas mesmas. Em situações mais gerais, em que temos ou um polímero enrolado em si mesmo (nó) ou vários polímeros entrelaçados (elo), o número de voltas é insuficiente para determinar as classes de equivalência dessas curvas. A questão da classificação de nós e elos será tratada com mais detalhes no próximo capítulo.

Vamos agora calcular o propagador desse sistema, seguindo para isso a abordagem contida em [7].

O operador Hamiltoniano será denotado pela letra H . Supomos que H pode ser decomposto em uma soma de dois operadores, a saber, o operador energia cinética T e o operador energia potencial V , ou seja:

$$H = T + V. \quad (1.34)$$

Como as configurações acessíveis ao sistema se resumem a um círculo, a resolução da identidade toma a seguinte forma:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi |\varphi\rangle\langle\varphi| = I. \quad (1.35)$$

Além disso, temos a seguinte condição de normalização:

$$\langle\varphi_n | \varphi_{n-1}\rangle = \delta(\varphi_n - \varphi_{n-1}), \quad (1.36)$$

²Do inglês, "winding number".

em que a distribuição delta de Dirac nesse caso é uma delta no círculo, isto é, podemos encará-la como uma distribuição periódica na reta com período igual a 2π . Adotando o procedimento usual aplicado para o caso de funções periódicas, podemos calcular uma série de Fourier para a distribuição delta, cujo resultado é dado por:

$$\delta(\varphi_n - \varphi_{n-1}) = \sum_{m_n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{im_n(\varphi_n - \varphi_{n-1})}. \quad (1.37)$$

O propagador é definido como a amplitude de probabilidade de uma partícula localizada na posição angular φ_a no tempo t_a estar na posição φ_b no tempo t_b , isto é, $\langle \varphi_b | e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)(T+V)} | \varphi_a \rangle$ (na descrição de Schrödinger). De agora em diante utilizaremos a seguinte notação para o propagador:

$$G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) \equiv \langle \varphi_b | e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)(T+V)} | \varphi_a \rangle \quad (1.38)$$

Adotaremos agora o procedimento usual para obter uma expressão para o propagador em termos de uma integral de trajetórias. Para isso utilizaremos um resultado conhecido como fórmula de Trotter (veja a referência [11], por exemplo), que estabelece que se T e V são operadores auto-adjuntos em um espaço de Hilbert \mathcal{H} e se $T + V$ é auto-adjunto na interseção dos domínios de T e V , então é válida a seguinte afirmação:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (e^{\frac{iT}{N}} e^{\frac{iV}{N}})^N | \varphi \rangle = e^{i(T+V)} | \varphi \rangle, \quad (1.39)$$

para todo $| \varphi \rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert \mathcal{H} .

Supondo que os operadores T , V e H satisfazem as condições necessárias para a aplicação da expressão (1.39), temos que:

$$G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \varphi_b | \prod_{n=1}^{N+1} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V} | \varphi_a \rangle. \quad (1.40)$$

em que $\epsilon \equiv \frac{(t_b - t_a)}{N+1}$. Inserindo agora N resoluções da identidade entre os fatores exponenciais temos:

$$G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \cdots \int_0^{2\pi} d\varphi_N \langle \varphi_b | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V} | \varphi_N \rangle \cdot$$

$$\langle \varphi_N | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V} | \varphi_{N-1} \rangle \cdots \langle \varphi_2 | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V} | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_1 | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V} | \varphi_a \rangle. \quad (1.41)$$

Vamos agora usar o fato de que os vetores $| \varphi_n \rangle$ são autovetores do operador posição, o que nos leva a escrever:

$$\langle \varphi_n | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}V} | \varphi_{n-1} \rangle = e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(\varphi_{n-1})} \langle \varphi_n | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}T} | \varphi_{n-1} \rangle. \quad (1.42)$$

Adotaremos condições de contorno periódicas para as funções de onda do problema. Nesse caso o operador momento possui autovetores, que são as ondas planas da forma $\langle \varphi | k \rangle = (\frac{1}{2\pi})^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{p}{\hbar}\varphi}$, em que $p/\hbar = m \in \mathbb{N}$. A resolução da identidade no espaço dos momentos assume então a forma:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} |m\rangle \langle m| = I. \quad (1.43)$$

Inserindo (1.43) em (1.42), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}T} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}V} | \varphi_{n-1} \rangle &= e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(\varphi_{n-1})} \sum_{m_n=-\infty}^{\infty} \langle \varphi_n | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}T} | m_n \rangle \langle m_n | \varphi_{n-1} \rangle = \\ &= \sum_{m_n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i\epsilon}{2M}m_n^2} \langle \varphi_n | m_n \rangle \langle m_n | \varphi_{n-1} \rangle = \sum_{m_n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i[m_n(\varphi_n - \varphi_{n-1}) - \frac{\epsilon\hbar}{2M}m_n^2]}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

O propagador assume então a forma:

$$\begin{aligned} G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \cdots \int_0^{2\pi} d\varphi_N \prod_{i=0}^N \left[e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(\varphi_i)} \right] \times \\ &\times \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i[m_1(\varphi_1 - \varphi_a) - \frac{\epsilon\hbar}{2M}m_1^2]} \cdots \sum_{m_{N+1}=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i[m_{N+1}(\varphi_b - \varphi_N) - \frac{\epsilon\hbar}{2M}m_{N+1}^2]}, \end{aligned} \quad (1.45)$$

em que está implícito que identificamos φ_0 com φ_a e φ_{N+1} com φ_b .

Vamos agora introduzir um resultado que será de grande importância para o prosseguimento deste trabalho. Seja $f(k)$ a distribuição periódica de período unitário definida como segue:

$$f(k) \equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(k - m). \quad (1.46)$$

Assim como procedemos com relação à delta no círculo, podemos obter uma série de Fourier para a distribuição f definida acima. O resultado é:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(k - m) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{2\pi ikl}. \quad (1.47)$$

Essa igualdade recebe o nome de fórmula de soma de Poisson.

Voltando ao nosso problema, vamos agora introduzir um termo da forma $\delta(k_i - m_i)$ em cada um dos somatórios da expressão (1.45) e substituir as variáveis discretas m_i pelas variáveis contínuas k_i . Para que a expressão não se altere, realizamos a integração em cada uma das variáveis k_i . O objetivo desse procedimento é tornar possível a aplicação da fórmula de soma de Poisson em cada um dos somatórios, o que nos leva ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \cdots \int_0^{2\pi} d\varphi_N \prod_{j=0}^N \left[e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(\varphi_j)} \right] \\ &\int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dk_{N+1} \sum_{l_{N+1}=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i[k_{N+1}(\varphi_b - \varphi_N) - \frac{\epsilon\hbar}{2M} k_{N+1}^2 + 2\pi k_{N+1} l_{N+1}]} \dots \\ &\dots \sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i[k_1(\varphi_1 - \varphi_a) - \frac{\epsilon\hbar}{2M} k_1^2 + 2\pi k_1 l_1]}. \end{aligned} \quad (1.48)$$

Notemos agora que é possível absorver os N primeiros somatórios nas variáveis l_i , procedimento este cujo resultado é a extensão dos domínios de integração das variáveis angulares, que passam a ser integrais em toda a reta real. Chegamos a essa conclusão dispondo os somatórios e as integrais na expressão do propagador de uma forma conveniente, a saber,

$$\begin{aligned} G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_{N+1}}{2\pi} \prod_{i=1}^{N+1} e^{-\frac{i\epsilon\hbar}{2M} k_i^2} \times \\ &\times \sum_{l_{N+1}=-\infty}^{\infty} \sum_{l_N=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi_N e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(\varphi_N)} e^{i[k_{N+1}(\varphi_b - \varphi_N) + 2\pi k_{N+1} l_{N+1}]} \times \dots \\ &\dots \times \sum_{l_2=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(\varphi_2)} e^{i[k_3(\varphi_3 - \varphi_2) + 2\pi k_3 l_3]} \times \\ &\times \sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} (V(\varphi_1) + V(\varphi_a))} e^{i[k_2(\varphi_2 - \varphi_1) + 2\pi k_2 l_2]} e^{i[k_1(\varphi_1 - \varphi_a) + 2\pi k_1 l_1]}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Vamos nos concentrar no somatório em l_1 . Para cada valor assumido por l_1 existe uma integral angular com limites 0 e 2π . Em cada uma dessas integrais realizamos a seguinte transformação de variáveis: $\varphi'_1 = \varphi_1 + 2\pi l_1$. Nesse momento devemos atentar para o fato de que o potencial é uma função periódica de período igual a 2π , de modo que a mudança de variáveis não altera o valor de $V(\varphi_1)$.

O somatório em l_1 pode então ser escrito na forma:

$$\sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \int_{2\pi l_1}^{2\pi(l_1+1)} d\varphi'_1 e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}(V(\varphi'_1)+V(\varphi_a))} e^{ik_2[\varphi_2-\varphi'_1+2\pi(l_2+l_1)]} e^{ik_1(\varphi'_1-\varphi_0)} \quad (1.50)$$

Considere agora cada termo da soma em l_1 tomado separadamente. Como o índice l_2 está somado sobre todos os valores inteiros, para cada um dos termos da soma em l_1 podemos introduzir um novo índice de soma, dado por $l'_2 = l_2 + l_1$, sem que ocorra nenhuma modificação na soma sobre o índice l_2 . Como resultado desse procedimento, temos que o integrando de cada uma das integrais que compoem o somatório em l_1 é o mesmo, e que estas integrais só diferem entre si pelos limites de integração. Esses limites, por sua vez, são intervalos da reta real cuja união é igual a \mathbb{R} . Está mostrado assim que a integral na variável φ_1 pode ser estendida do intervalo $(0, 2\pi)$ para toda a reta real. Após realizarmos esse procedimento para as outras variáveis angulares teremos que apenas o somatório em l_{N+1} ficará intacto, de forma que podemos denotar esse índice simplesmente por l . O resultado final é, portanto:

$$\begin{aligned} G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi_N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_{N+1}}{2\pi} \\ &\prod_{n=1}^{N+1} e^{\frac{i}{\hbar}[hk_n(\varphi_n+2\pi l\delta_{n,N+1}-\varphi_{n-1})]} \prod_{j=0}^N e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}(\frac{\hbar^2 k_j^2}{2M} + V(\varphi_j))} \equiv \\ &\equiv \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int \mathcal{D}[\varphi(t)] \int \mathcal{D}\left[\frac{p(t)}{2\pi\hbar}\right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} (p\dot{\varphi} - H(p,\varphi)) dt}, \end{aligned} \quad (1.51)$$

Notemos que para cada valor assumido pelo índice l , a extremidade final da trajetória assume um valor diferente, a saber, $\varphi_b + 2\pi l$. Uma forma compacta de escrever esse resultado é:

$$G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi_b + 2\pi l, t_b \mid \varphi_a, t_a \rangle_{n.c.}, \quad (1.52)$$

em que o símbolo "n.c." significa "não-cíclico". O índice discreto l é exatamente o número de voltas, descrito no início desta seção.

Como exemplo, vejamos o caso da partícula livre no círculo, isto é, consideremos um potencial nulo. Nesse caso sabemos que o propagador não-cíclico é dado por:

$$\langle \varphi_b + 2\pi l, t_b | \varphi_a, t_a \rangle_{n.c.} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a) / M}} e^{\frac{iM}{2\hbar} \frac{(\varphi_b - \varphi_a)^2}{(t_b - t_a)}}. \quad (1.53)$$

O propagador da partícula livre no círculo é, portanto:

$$G(\varphi_b, t_b; \varphi_a, t_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar (t_b - t_a) / M}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{\frac{iM}{2\hbar} \frac{(\varphi_b + 2\pi l - \varphi_a)^2}{(t_b - t_a)}}. \quad (1.54)$$

Observemos que as amplitudes de probabilidade associadas a cada uma das trajetórias pertencentes a uma determinada classe de homotopia são levadas em conta de acordo com o processo usual, ou seja, são integradas. As contribuições provenientes de cada uma das classes de homotopia são simplesmente somadas umas às outras.

Antes de prosseguir na solução do nosso problema, vamos obter alguns resultados auxiliares, que serão utilizados adiante, no momento mais conveniente.

1.4.2 Integrais de trajetória em coordenadas polares

Conforme vemos na referência [9], o propagador de uma partícula quântica sujeita a um potencial $V(\vec{r})$ em duas dimensões espaciais é dado por:

$$G(\vec{r}_b, t; \vec{r}_a, t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i \epsilon \hbar / M} \prod_{i=1}^N \left[\int \frac{d\vec{r}_i}{2\pi i \epsilon \hbar / M} \right] \prod_{j=1}^{N+1} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(\vec{r}_{j-1}) \right]}, \quad (1.55)$$

em que utilizamos as seguintes identificações: $\vec{r}_0 \equiv \vec{r}_a$ e $\vec{r}_{N+1} \equiv \vec{r}_b$.

Vamos agora utilizar o procedimento usual que torna possível escrever uma integral funcional na região euclidiana a partir da expressão (1.55). Esse procedimento consiste na substituição da variável real t pela variável $-i\tau$, onde τ é uma variável real.

Com essa substituição, a expressão para o propagador assume a seguinte forma:

$$G(\vec{r}_b, \tau_b; \vec{r}_a, \tau_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi \epsilon \hbar / M} \prod_{i=1}^N \left[\int \frac{d\vec{r}_i}{2\pi \epsilon \hbar / M} \right] \prod_{j=1}^{N+1} e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\vec{r}_j - \vec{r}_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 + V(\vec{r}_{j-1}) \right]}. \quad (1.56)$$

De posse dessa expressão vamos proceder agora à passagem do sistema de coordenadas cartesianas para o sistema de coordenadas polares, aplicando as seguintes mudanças de variável:

$$x_i = r_i \cos(\varphi_i) \quad \text{e} \quad y_i = r_i \sin(\varphi_i).$$

O jacobiano da transformação genérica é $J_i = r_i$, o que nos leva a escrever que:

$$G(\vec{r}_b, \tau_b; \vec{r}_a, \tau_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\epsilon\hbar/M} \left[\prod_{n=1}^N \int_0^\infty dr_n r_n \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_n}{2\pi\epsilon\hbar/M} \right] \prod_{j=1}^{N+1} e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} V(\vec{r}_{j-1})} \times \\ \times \prod_{n=1}^{N+1} e^{-\frac{m}{2\epsilon\hbar} [r_n^2 + r_{n-1}^2 - 2r_n r_{n-1} \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1})]}. \quad (1.57)$$

Encontramos em [12] a seguinte identidade:

$$e^{a \cos \phi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(a) e^{im\phi}, \quad (1.58)$$

em que $I_m(z)$ é a função de Bessel modificada de primeira espécie de ordem m . Substituindo a expressão (1.58) na equação (1.57) verificamos que a parte do integrando que depende das variáveis angulares se reduz a funções exponenciais simples. Após realizarmos as integrais angulares temos como resultado um produto de funções delta de Kronecker, conforme vemos abaixo:

$$G(\vec{r}_b, \tau_b; \vec{r}_a, \tau_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\hbar\epsilon/M} \right) \left[\prod_{n=1}^N \int_0^\infty \frac{dr_n r_n}{\hbar\epsilon/M} \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[e^{-\frac{M}{2\epsilon\hbar} (r_n^2 + r_{n-1}^2)} e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} V(\vec{r}_{j-1})} \right] \times \\ \times \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \dots \sum_{m_{N+1}=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i(m_{N+1}\varphi_{N+1} - m_1\varphi_0)} \prod_{j=1}^{N+1} \left[I_{m_j} \left(\frac{M r_{n-1} r_n}{\hbar\epsilon} \right) \right] \delta_{m_1, m_2} \dots \delta_{m_N, m_{N+1}}. \quad (1.59)$$

Com o auxílio das funções delta de Kronecker, podemos eliminar N somatórios na expressão anterior, chegando ao seguinte resultado:

$$G(\vec{r}_b, \tau_b; \vec{r}_a, \tau_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\hbar\epsilon/M} \right) \left[\prod_{n=1}^N \int_0^\infty \frac{dr_n r_n}{\hbar\epsilon/M} \right] \\ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{im(\varphi_b - \varphi_a)} \prod_{n=1}^{N+1} \left[e^{-\frac{M}{2\epsilon\hbar} (r_n^2 + r_{n-1}^2)} e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} V(\vec{r}_{j-1})} I_m \left(\frac{M r_{n-1} r_n}{\hbar\epsilon} \right) \right]. \quad (1.60)$$

Definiremos agora um objeto que será chamado de amplitude radial e que será denotado pelo símbolo $G(r_b, \tau_b; r_a, \tau_a)_m$. A amplitude radial é definida de tal modo que o propagador possa ser escrito na forma:

$$G(\vec{r}_b, \tau_b; \vec{r}_a, \tau_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} G(r_b, \tau_b; r_a, \tau_a)_m \frac{1}{2\pi} e^{im(\varphi_b - \varphi_a)}. \quad (1.61)$$

Um caso particular de interesse para nossa discussão é a partícula livre, isto é, $V(r) = 0$. Nesse caso a amplitude radial assume a forma:

$$G(r_b, \tau_b; r_a, \tau_a)_m = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{r_a r_b}}{\hbar \epsilon / M} \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_0^{\infty} \frac{dr_n r_n}{\hbar \epsilon / M} e^{-\frac{M}{2\hbar \epsilon} (r_n^2 + r_{n-1}^2)} I_m \left(\frac{M r_{n-1} r_n}{\hbar \epsilon} \right) \right]. \quad (1.62)$$

Com o auxílio da seguinte identidade:

$$\int_0^{\infty} dr r e^{-\frac{r^2}{a}} I_m(br) I_m(cr) = \frac{a}{2} e^{\frac{(b^2 + c^2)a}{4}} I_m \left(\frac{abc}{2} \right), \quad (1.63)$$

encontrada em [13], realizamos as integrais radiais recursivamente, pois como pode-se ver, o resultado de cada integral é uma função que após substituída na expressão para a amplitude radial gera um novo integrando (em outra variável radial) que tem a mesma forma do integrando original. Após realizarmos as integrais, obtemos finalmente:

$$G(r_b, \tau_b; r_a, \tau_a)_m = \frac{M}{\hbar} \frac{\sqrt{r_b r_a}}{\tau_b - \tau_a} e^{-\frac{M}{2\hbar} \frac{r_b^2 + r_a^2}{\tau_b - \tau_a}} I_m \left(\frac{M}{\hbar} \frac{r_b r_a}{\tau_b - \tau_a} \right). \quad (1.64)$$

1.4.3 Dois polímeros entrelaçados

Conforme dissemos anteriormente, nosso problema agora consiste em uma curva bidimensional contínua e fechada contida em uma região do plano da qual foi retirado um ponto (a origem, por simplicidade).

A distribuição de probabilidades $P_N(\vec{R})$ obedece à seguinte lei de composição:

$$P_N(\vec{r}_3 - \vec{r}_1) = \int d^2 r_2 P_{N-M}(\vec{r}_3 - \vec{r}_2) P_M(\vec{r}_2 - \vec{r}_1). \quad (1.65)$$

Sabemos que o resultado da integração acima não se altera se um número finito de pontos for excluído do domínio de integração. Por essa razão, afirmamos que a distribuição de probabilidades $P_N(\vec{R})$ é dada pela expressão (1.25), com $D = 2$, ou seja:

$$P_N(\vec{R}) = \frac{1}{\pi N l^2} e^{-\frac{R^2}{N l^2}}. \quad (1.66)$$

Diferentemente da distribuição de probabilidades total, a distribuição de probabilidades de uma cadeia de N passos circundar a origem um número n de vezes ($P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$) não é invariante por translação. De fato, como a cadeia tem comprimento finito (L), $P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$ deve ser nulo no caso em que, por exemplo, os pontos \vec{r}_a e \vec{r}_b estão localizados a uma distância maior do que $L/2$ da origem. No prosseguimento vamos escrever a distribuição de probabilidades total como a soma das distribuições parciais $P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$, o que nos permitirá identificar a expressão para $P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$.

Tomemos as expressões (1.64) e (1.61) e façamos as substituições indicadas em (1.24). No caso de (1.64) obtemos:

$$G(r_b, \tau_b; r_a, \tau_a)_m = 2 \frac{\sqrt{r_b r_a}}{Nl^2} I_m \left(2 \frac{r_b r_a}{Nl^2} \right) e^{-\frac{(r_b^2 + r_a^2)}{Nl^2}}. \quad (1.67)$$

No caso de (1.61), devemos lembrar que, de acordo com a discussão contida na seção (1.2.2), se tomarmos a expressão para o propagador quântico e realizarmos a mudança de variável mostrada em (1.23) e as substituições indicadas em (1.24), obteremos uma expressão para a distribuição de probabilidades $P_N(\vec{R})$. A mudança de variável (1.23) já foi realizada no início da seção (1.4.2), de modo que ao realizarmos agora as substituições (1.24) em (1.61) obteremos:

$$P_N(\vec{R}) = \frac{2}{Nl^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m \left(2 \frac{r_b r_a}{Nl^2} \right) e^{-\frac{(r_b^2 + r_a^2)}{Nl^2}} \frac{1}{2\pi} e^{im(\varphi_b - \varphi_a)}, \quad (1.68)$$

em que utilizamos o resultado (1.67) obtido anteriormente.

Na expressão (1.68) vamos substituir o índice m por uma variável real, com o auxílio da distribuição delta de Dirac:

$$P_N(\vec{R}) = \frac{2}{Nl^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk I_k \left(2 \frac{r_b r_a}{Nl^2} \right) e^{-\frac{(r_b^2 + r_a^2)}{Nl^2}} \frac{1}{2\pi} e^{ik(\varphi_b - \varphi_a)} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(k - m). \quad (1.69)$$

Utilizando agora a fórmula de soma de Poisson (1.47), temos:

$$P_N(\vec{R}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{2}{Nl^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk I_k \left(2 \frac{r_b r_a}{Nl^2} \right) e^{-\frac{(r_b^2 + r_a^2)}{Nl^2}} \frac{1}{2\pi} e^{ik(\varphi_b + 2\pi n - \varphi_a)}. \quad (1.70)$$

A expressão (1.70) para a distribuição de probabilidades total é a soma das distribuições de probabilidade parciais $P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$. A expressão correta para a distribuição de probabilidades parcial é exatamente o termo genérico da soma acima, isto é:

$$P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a) = \frac{2}{Nl^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk I_k \left(2 \frac{r_b r_a}{Nl^2} \right) e^{-\frac{(r_b^2 + r_a^2)}{Nl^2}} \frac{1}{2\pi} e^{ik(\varphi_b + 2\pi n - \varphi_a)}. \quad (1.71)$$

Rigorosamente falando, no entanto, não podemos chegar à essa conclusão diretamente a partir de (1.70). Na referência [23] é apresentada uma outra abordagem para o cálculo de $P_N^n(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$. O resultado mostrado nessa referência é idêntico à equação (1.71).

Observação:

Neste capítulo vimos que polímeros podem apresentar-se entrelaçados, assumindo conformações espaciais conhecidas como nós e elos. No exemplo simplificado em que temos um polímero nas imediações de uma reta infinita, o invariante denominado número de voltas fornece uma classificação completa das conformações da cadeia ideal. Em situações mais gerais, no entanto, esse invariante não é suficiente para classificar as conformações das macromoléculas. No próximo capítulo vamos estudar mais detalhadamente alguns conceitos básicos da teoria dos nós, dando especial ênfase à importante questão dos invariantes de nó. Estudaremos um exemplo de invariante não-abeliano (polinômio de Jones), capaz de distinguir um número bem maior de curvas que os invariantes abelianos, como o número de voltas, por exemplo.

Capítulo 2

Teoria dos nós

2.1 Conceitos básicos

Essa seção tem por objetivo apresentar uma breve revisão acerca dos conceitos básicos da teoria dos nós. As referências básicas para esse capítulo são os livros [18], [19] e [28]. Antes de introduzir o conceito de nó, vamos delinear algumas de suas características de uma maneira intuitiva, usando para isso a noção cotidiana que temos dessa palavra. Adotando esse ponto de vista, podemos pensar em um nó como sendo uma corda fina (C) enrolada em si mesma, cujas extremidades foram coladas uma na outra. Uma das características mais importantes de C é o fato de que ela não intercepta a si mesma. Eventualmente talvez desejemos que a corda C esteja disposta no espaço de uma forma suave, ou seja, sem pontas.

Abaixo mostramos alguns exemplos que ajudam a visualizar nossa descrição intuitiva.

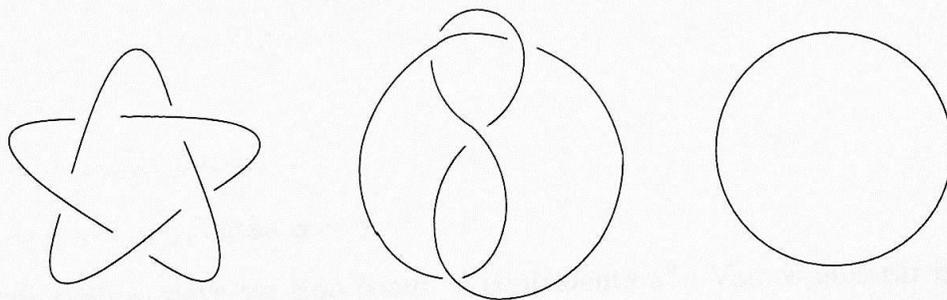


Figura 2.1: Exemplos simples de nó

Devemos agora traduzir nossa noção intuitiva para a linguagem rigorosa da matemática.

2.1-Definição: Nó

Um nó é um mapa $K : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$, tal que $K : S^1 \rightarrow K(S^1)$ é um homeomorfismo.

O fato de exigirmos que o mapa $K : S^1 \rightarrow K(S^1)$ seja um homeomorfismo é a expressão rigorosa da noção intuitiva de que a corda C não intercepta a si própria.

Voltemos por alguns momentos à nossa noção intuitiva de nó. Imaginemos que estamos implementando deformações suaves na corda C , de forma que durante esse processo a corda se mantém inteira, sem rupturas. Ao final da deformação teremos uma curva que ainda respeita todas as condições que caracterizam a noção intuitiva de nó. Além disso, podemos dizer que em um certo sentido a curva final não é essencialmente diferente da inicial, dado que podemos ir de uma a outra de uma forma suave, sem que haja necessidade de rupturas em nenhuma das partes da corda. O análogo rigoroso dessa noção é fornecido pela definição de isotopia.

2.2-Definição: Isotopia

Sejam α e β dois nós. Dizemos que α é isotópico a β se existir uma família a um parâmetro $f_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, $t \in [0, 1]$ de homeomorfismos tal que f_0 seja o mapa identidade, $f_1(\alpha) = \beta$ e tal que o mapa $F : \mathbb{R}^3 \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$, que a cada par (\vec{r}, t) associa o ponto $f_t(\vec{r})$, seja contínuo. Dizemos que f_t é uma isotopia que conecta α e β .

Intuitivamente podemos interpretar a isotopia como sendo o deslocamento de um fluido compressível que deforma e transporta a curva α no espaço, até que ela se torne a curva β . O ponto importante que nos levou a discutir isotopia é o fato de que esse conceito induz uma relação de equivalência no conjunto de todos os nós. Para que uma relação de equivalência entre nós esteja bem definida, precisamos mostrar que se α , β e γ são nós, então as seguintes afirmativas se verificam:

- a) $\alpha \sim \alpha$,
- b) se $\alpha \sim \beta$, então $\beta \sim \alpha$,
- c) se $\alpha \sim \beta$ e $\beta \sim \gamma$, então $\alpha \sim \gamma$,

em que o símbolo \sim deve ser lido como "é equivalente a". Vamos mostrar que isotopia entre nós é uma relação de equivalência.

Seja α um nó arbitrário. A família $id_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, definida por $id_t(\vec{r}) \equiv (\vec{r})$, com $t \in [0, 1]$ e $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ é uma isotopia que conecta α a α . Mostramos então que $\alpha \sim \alpha$.

Suponhamos agora que $h_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ seja uma isotopia que conecta α e β . A família $\tilde{h}_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definida por $\tilde{h}_t(\vec{r}) \equiv h_t^{-1}(\vec{r})$ é uma isotopia que conecta β e α . Mostramos assim que se $\alpha \sim \beta$, então $\beta \sim \alpha$.

Suponhamos finalmente que f_t seja uma isotopia que conecta α e β e que g_t seja uma isotopia que conecta β e γ . Consideremos a família $h_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, definida por:

$$h_t(\vec{r}) \equiv \begin{cases} f_{2t}(\vec{r}) & \text{se } t \in [0, 1/2] \\ g_{2t-1}[f_1(\vec{r})] & \text{se } t \in (1/2, 1]. \end{cases}$$

Notemos que $h_0(\vec{r}) = f_0(\vec{r}) = \vec{r}$, ou seja, h_0 é o mapa identidade. Por sua vez, $h_1(\vec{r}) = g_1[f_1(\vec{r})] \Rightarrow h_1(\alpha) = g_1[f_1(\alpha)] = g_1(\beta) = \gamma$. Além disso, pela definição de f_t vemos que o mapa $H : \mathbb{R}^3 \times [0, 1]$, dado por $(\vec{r}, t) \mapsto h_t(\vec{r})$, é contínuo. Podemos então afirmar que a família h_t , com $t \in [0, 1]$ é uma isotopia que conecta α e γ . \square

Dado um nó α , o conjunto de todos os nós que lhe são isotópicos é chamado de classe de isotopia de α , e denotado pelo símbolo $[\alpha]$. O conjunto de todos os nós está dividido em classes de isotopia.

Em vez de definir nós como sendo homeomorfismos, podemos exigir que eles sejam difeomorfismos, o que corresponde a impor que a corda C mencionada no primeiro parágrafo dessa seção seja suave, isto é, não apresente pontas. Uma terceira abordagem consiste em definir nós poligonais, conforme vemos abaixo.

2.3-Definição: Nós poligonais

Um nó poligonal é um mapa $K : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$, linear por pedaços, tal que a restrição $K : S^1 \rightarrow K(S^1)$ é um homeomorfismo.

Também no caso poligonal podemos introduzir uma relação de equivalência entre nós. É importante destacar que existe uma correspondência bi-unívoca entre o conjunto das classes de equivalência de nós poligonais e o conjunto das classes de isotopia de nós suaves (definidos em termos de difeomorfismos), conforme podemos ver na referência [19]. No caso de nós poligonais o papel da isotopia é exercido pelo conceito de movimento elementar, que será descrito a seguir.

2.4-Definição: Movimentos elementares

Seja K um nó poligonal e \overline{AB} um lado de K , que junto com os segmentos \overline{AC} e \overline{CB} forma o triângulo ABC da figura (2.2.a).

Suponhamos que o nó K não intercepta o triângulo ABC e nem o seu interior (denotado por $\text{int}(ABC)$), em nenhum ponto além dos pertencentes ao lado \overline{AB} . A operação chamada de movimento elementar consiste na substituição de \overline{AB} por $\overline{AC} \cup \overline{CB}$. Através dela obtemos um outro nó, o qual será denominado de K' . A figura (2.2.b) mostra um exemplo de movimento elementar.

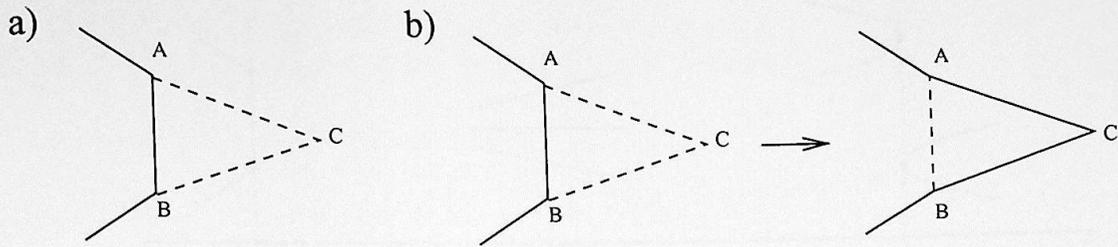


Figura 2.2: Exemplo de movimento elementar.

2.5-Definição: Equivalência entre nós poligonais

Dois nós poligonais são ditos equivalentes se existir uma seqüência (possivelmente vazia) de nós K, K_1, \dots, K_n, K' , na qual cada elemento é obtido do anterior através de um movimento elementar ou seu inverso.

Notemos que os movimentos elementares definem de fato uma relação de equivalência, pois:

- a) a seqüência vazia conecta cada nó a si mesmo,
- b) se a seqüência K, K_1, \dots, K_n, K' conecta K e K' , então a seqüência inversa, isto é, K', K_n, \dots, K_1, K , conecta K' e K ,
- b) se a seqüência K, K_1, \dots, K_l, K' conecta K e K' e a seqüência K', K_m, \dots, K_n, K'' conecta K' e K'' , então a seqüência $K, K_1, \dots, K_l, K', K_m, \dots, K_n, K''$ conecta K e K'' .

Uma maneira conveniente de representar nós (poligonais ou não) é através de suas projeções regulares, descritas a seguir.

2.6-Definição: Projeções regulares de nó.

Uma projeção de um nó em um plano Π é dita ser regular se satisfizer as seguintes condições:

- a) a projeção de uma linha qualquer do nó jamais se reduz a um ponto,
- b) o número máximo de pontos do nó que podem ser projetados em um mesmo ponto de Π é igual a 2. Esses pontos são chamados de pontos duplos,
- c) o número de pontos duplos da projeção é finito, e em cada ponto desse tipo as projeções das tangentes aos pontos correspondentes do nó não coincidem.

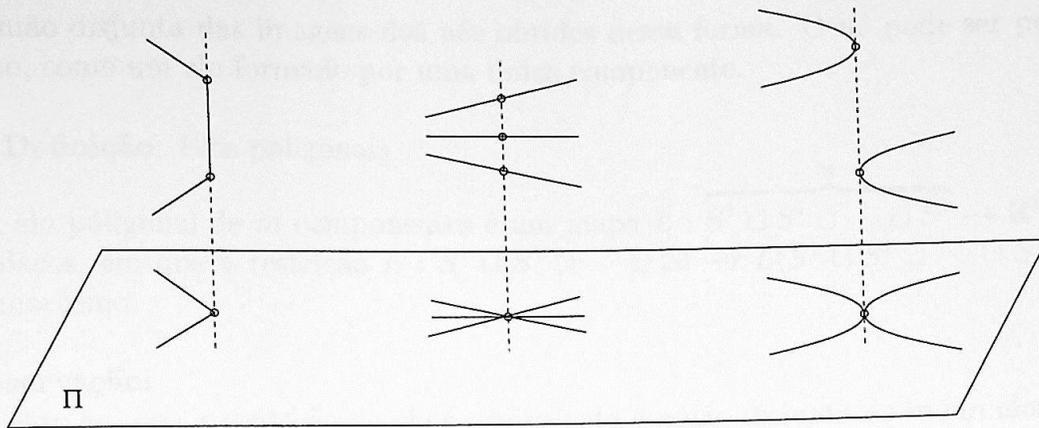


Figura 2.3: Situações proibidas em uma projeção regular.

Essa definição de regularidade proíbe situações como as mostradas na figura (2.3).

Observações:

1) Existem nós contínuos que não podem ser descritos em termos de projeções regulares. Eles são chamados de nós selvagens (veja a referência [19]). No caso poligonal eles estão excuídos, de forma que não há uma correspondência bi-unívoca entre classes de equivalência de nós poligonais e classes de isotopia de homeomorfismos $K : S^1 \rightarrow K(S^1)$, com $K(S^1) \subset \mathbb{R}^3$.

2) Agora que já sabemos como transformar um dado nó poligonal em outro equivalente, podemos argumentar que dado um nó qualquer, sempre é possível através de uma certa seqüência finita de movimentos elementares obter um nó cuja projeção em um certo plano é regular.

3) Tudo que foi dito até o momento pode ser estendido para o conceito de elo¹, que vem a ser uma generalização do conceito de nó.

2.7-Definição: Elos

Um elo de m componentes é um mapa $L : \overbrace{S^1 \sqcup S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1}^m \rightarrow \mathbb{R}^3$, em que a restrição $L : S^1 \sqcup S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1 \rightarrow L(S^1 \sqcup S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1)$ é um homeomorfismo.

Observação: Na definição acima o símbolo \sqcup denota a união disjunta de conjuntos.

Se por um momento ignorarmos a presença de todas as cópias de S^1 com exceção de uma delas (qualquer uma), estaremos em posse de um nó. A imagem do elo L vem a

¹Do inglês, "link".

ser a união disjunta das imagens dos nós obtidos dessa forma. O nó pode ser pensado, portanto, como um elo formado por uma única componente.

2.8-Definição: Elos poligonais

Um elo poligonal de m componentes é um mapa $L : \overbrace{S^1 \sqcup S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1}^m \rightarrow \mathbb{R}^3$, linear por pedaços, em que a restrição $L : S^1 \sqcup S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1 \rightarrow L(S^1 \sqcup S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1)$ é um homeomorfismo.

Observação:

No caso em que a projeção do elo é equivalente à união disjunta de m círculos, temos um elo trivial de m componentes.

Vamos agora introduzir algumas preliminares necessárias para que possamos enunciar um dos teoremas mais importantes dentro da teoria dos nós, conhecido como teorema de Reidemeister. Inicialmente vamos definir equivalência de projeções regulares (isotopia planar).

2.9-Definição: Isotopia planar

Dizemos que duas projeções regulares de elo são plano-isotópicas se uma for conectada à outra por uma seqüência finita de movimentos como os mostrados a seguir.

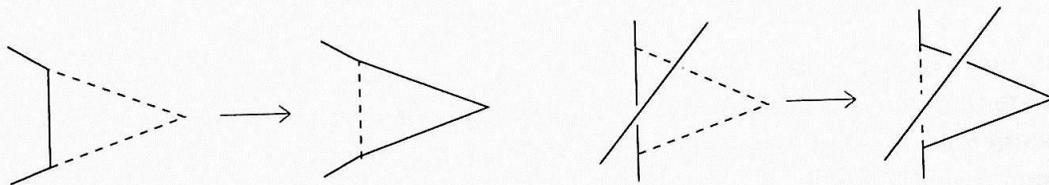


Figura 2.4: Exemplos de isotopia planar.

Observemos que durante a isotopia planar estão proibidas as seguintes situações:

- surgem ou desaparecem pontos de cruzamento,
- as projeções de dois trechos do nó tangenciam-se,
- as projeções de três pontos do nó coincidem.

Embora proibidas na isotopia planar, essas situações ocorrem durante o processo de realização dos chamados movimentos de Reidemeister, que podem ser de três diferentes tipos: Ω_1 , Ω_2 e Ω_3 . Eles podem ser vistos na figura (2.5).

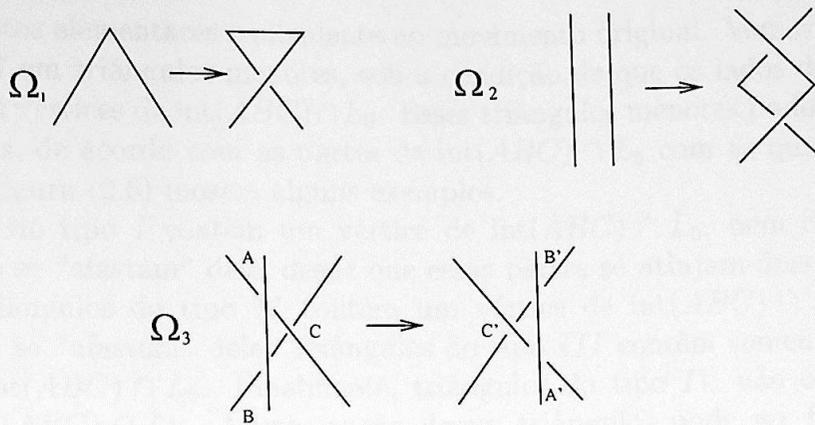


Figura 2.5: Movimentos de Reidemeister.

Na referência [16] Reidemeister estabeleceu um resultado de grande importância para a teoria dos nós, conhecido hoje como teorema de Reidemeister. Esse resultado nos permite abordar o problema da equivalência entre nós, que originalmente é tri-dimensional, do ponto de vista das suas projeções regulares.

2.10-Teorema: Dois nós são isotópicos se e somente se um pode ser obtido a partir do outro através de uma seqüência finita de movimentos de Reidemeister e isotopias planares.

Prova:

1) Para provar a primeira afirmação do teorema é suficiente observar que cada um dos movimentos de Reidemeister bem como cada um dos movimentos que definem isotopia planar pode ser obtido através de projeções de uma seqüência finita de movimentos elementares. Concluímos então que se as projeções regulares de dois nós forem conectadas entre si por uma seqüência finita de movimentos de Reidemeister e isotopias planares, então esses nós são isotópicos entre si.

2) Para provar o restante do teorema tomemos dois nós isotópicos L e L' e suas projeções regulares L_0 e L'_0 em algum plano de projeção Π . Pela definição de isotopia, é suficiente considerar um único movimento elementar (ver figura 2.2). Observemos que as componentes da interseção de $\text{int}(ABC)$ com L_0 podem ser de dois tipos: se a componente está associada a um trecho do nó situado acima do plano Π , falamos em projeção superior, e em caso contrário, falamos em projeção inferior. A existência de dois tipos de componente deve ser sempre lembrada durante a realização dos movimentos elementares.

Como a interseção de $\text{int}(ABC)$ com L_0 é em geral composta de vários trechos diferentes, é muito mais simples considerar que em vez de realizar diretamente o movimento elementar $\overline{AB} \rightarrow \overline{AC} \cup \overline{CB}$, nós o realizamos por partes, percorrendo uma seqüência fini-

ta de movimentos elementares equivalente ao movimento original. Vamos então dividir o triângulo ABC em triângulos menores, sob a condição de que os lados desses triângulos não contenham vértices de $\text{int}(ABC) \cap L_0$. Esses triângulos menores podem ser de quatro diferentes tipos, de acordo com as partes de $\text{int}(ABC) \cap L_0$ com as quais eles possuem interseção. A figura (2.6) mostra alguns exemplos.

Triângulos do tipo *I* contêm um vértice de $\text{int}(ABC) \cap L_0$, bem como partes dos segmentos que se “afastam” dele, desde que essas partes só atinjam dois lados diferentes de ABC . Triângulos do tipo *II* contêm um vértice de $\text{int}(ABC) \cap L_0$ e partes dos dois lados que se “afastam” dele. Triângulos do tipo *III* contêm somente uma parte de um lado de $\text{int}(ABC) \cap L_0$. Finalmente, triângulos do tipo *IV* não contêm nenhuma porção de $\text{int}(ABC) \cap L_0$. A construção desses triângulos pode ser feita por etapas: primeiramente utilizamos os tipos *I* e *II* para dar conta de todos os pontos de cruzamento e vértices, posteriormente englobamos todos os trechos de lados de $\text{int}(ABC) \cap L_0$ que porventura estejam sobrando, usando para isso os triângulos do tipo *III*. Como último passo preenchemos os espaços vazios restantes com triângulos do tipo *IV*.

Notemos que cada um dos movimentos elementares realizados através dos triângulos *I*, *II*, *III* e *IV* gera ou um dos movimentos de Reidemeister ou uma isotopia planar. No caso dos triângulos do tipo *I*, temos em correspondência um movimento de Reidemeister do terceiro tipo (Ω_3). No caso dos triângulos do tipo *II*, temos ou Ω_2 , como visto na figura (2.6.II.a) ou uma isotopia planar, como visto na figura (2.6.II.b). No caso dos triângulos do tipo *III*, temos ou Ω_2 , conforme se vê na figura (2.6.III.a) ou uma isotopia planar, conforme se vê na figura (2.6.III.b). No caso dos triângulos do tipo *IV*, temos uma isotopia planar. \square

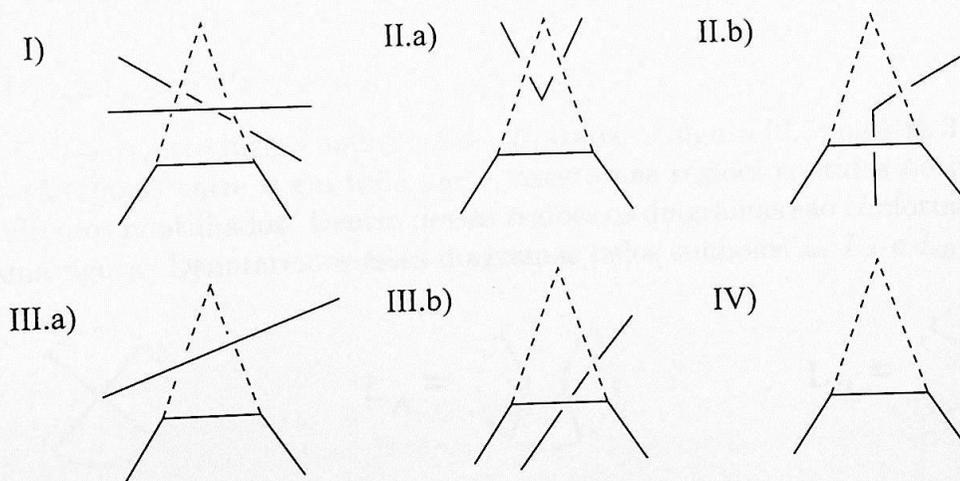


Figura 2.6: Triângulos do tipo I, II, III e IV.

Devemos observar que o resultado acima tem a importância prática de reduzir um

problema tri-dimensional a um problema bi-dimensional.

2.2 Invariantes de elo

Um dos problemas abertos mais importantes da teoria dos nós consiste em encontrar um algoritmo geral que permita decidir se dois nós dados são isotópicos. O fato de esse problema não ter solução conhecida até o momento é a razão pela qual dissemos no primeiro capítulo que não sabemos determinar a probabilidade de uma curva gerada aleatoriamente pertencer a uma determinada classe de isotopia.

O que usualmente se faz é associar aos elos uma função que depende apenas das classes de isotopia. Essa função é chamada de invariante de elo. Dois elos que possuem a mesma imagem por um certo invariante não são necessariamente isotópicos, mas se dois elos possuem imagens diferentes pelo invariante, então podemos afirmar que esses elos não são isotópicos. O conhecimento do valor assumido pelo invariante em uma certa curva γ nos permite restringir o número de classes de equivalência às quais γ pode pertencer. Quanto mais nós diferentes o invariante consegue distinguir, mais refinado é o nosso conhecimento topológico acerca das curvas em estudo, de modo que grande parte do que se faz em estatística dos nós é tentar calcular a probabilidade de uma curva qualquer ser um nó com um dado valor de um certo invariante.

Atualmente os invariantes descobertos por Jones (veja a referência [21]) e Vassiliev (veja a referência [18]) têm se mostrado de grande importância. Nessa seção descreveremos em detalhe uma das possíveis construções do invariante de Jones, seguindo a abordagem contida em [18] e [22].

2.2.1 Invariante de Jones

Inicialmente vamos introduzir a notação a ser utilizada. A figura (2.7) mostra 3 diagramas de elo que são iguais entre si em toda parte, exceto nas regiões contidas no interior dos pequenos círculos pontilhados. Dentro dessas regiões os diagramas são conforme mostrado nessa mesma figura. Denotaremos esses diagramas pelos símbolos L , L_A e L_B .

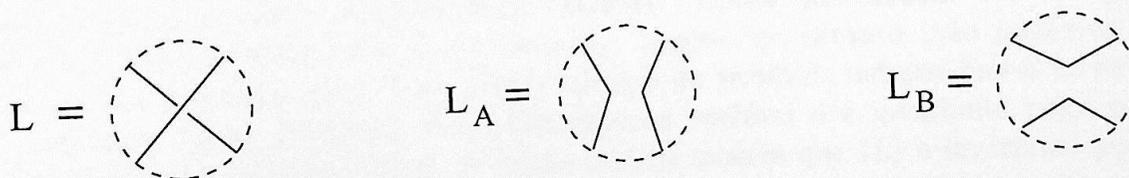


Figura 2.7: L , L_A e L_B .

Seja L um diagrama de elo qualquer e seja K_0 o diagrama do nó trivial. Vamos associar

a cada diagrama de elo um polinômio nas variáveis a , b e c , denotado por $\langle L \rangle$ no caso do diagrama genérico L , satisfazendo as seguintes relações, chamadas de relações definidoras:

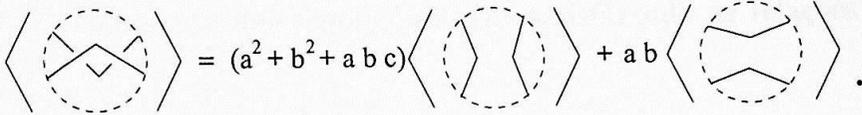
$$\langle L \rangle = a\langle L_A \rangle + b\langle L_B \rangle, \quad (2.1)$$

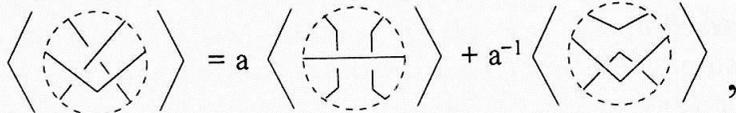
$$\langle L \cup K_0 \rangle = c\langle L \rangle, \quad (2.2)$$

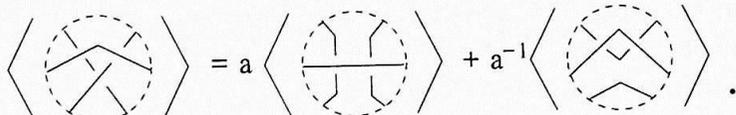
$$\langle K_0 \rangle = 1. \quad (2.3)$$

Por fim, vamos assumir também que esse polinômio é invariante por isotopia planar.

Vamos agora estudar o comportamento de $\langle L \rangle$ quando da realização dos movimentos de Reidemeister. A figura (2.8) mostra as situações relevantes para a discussão.

a) 

b) 



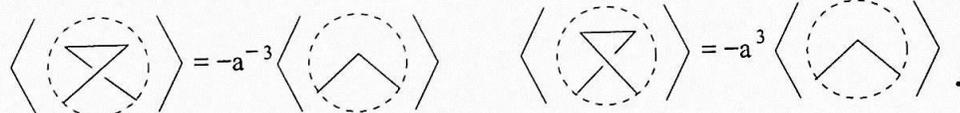
c) 

Figura 2.8: Comportamento de $\langle L \rangle$ sob os movimentos de Reidemeister.

Na equação mostrada na figura (2.8.a), a relação (2.1) foi aplicada aos dois cruzamentos do diagrama do primeiro membro dessa equação. Vemos que fazendo $b = a^{-1}$ e $c = -(a^2 + a^{-2})$ temos invariância de $\langle L \rangle$ por Ω_2 . Agora, no entanto, não podemos mais impor nenhuma relação desse tipo, pois o número de variáveis independentes se reduziu a 1. Devemos então averiguar se o polinômio na variável a é invariante pelos outros dois movimentos de Reidemeister. A figura (2.8.b) mostra que $\langle L \rangle$ é invariante por Ω_3 . Observemos que para chegar a essa conclusão aplicamos a relação (2.1) e utilizamos a invariância de $\langle L \rangle$ por Ω_2 e por isotopia planar. A figura (2.8.c), por sua vez, nos mostra que $\langle L \rangle$ não é invariante por Ω_1 . Um mapa invariante por Ω_2 e Ω_3 , como $\langle L \rangle$, é dito ser um invariante por isotopia regular.

O resultado da aplicação da relação (2.1) é o surgimento de dois novos diagramas (L_A e L_B). Dizemos que L_A surgiu devido à realização de uma transformação do tipo A , isto é: $L \rightarrow L_A$, enquanto L_B surgiu devido à realização de uma transformação do tipo B , isto é, $L \rightarrow L_B$. O número de diagramas obtidos após todos os pontos de cruzamento serem destruídos é igual a 2^n , onde n é o número de cruzamentos de L . Um outro fato importante que deve ser notado é que dado um diagrama L e um outro diagrama obtido a partir de L através de um número finito de transformações do tipo A ou do tipo B , sabemos sempre dizer que tipo de transformações ocorreram em cada cruzamento de L , o que por sua vez significa que sabemos sempre dizer qual monômio na variável a está associado a cada diagrama obtido pela destruição dos cruzamentos de L , independentemente da ordem em que tais destruições são realizadas. Essas observações nos permitem enunciar o resultado abaixo, que pode ser encontrado em [18], por exemplo.

2.11-Teorema: Existe um único polinômio $\langle L \rangle$ satisfazendo as relações definidoras (2.1), (2.2) e (2.3).

Prova: Dado o diagrama L , numeramos seus cruzamentos e associamos a cada um deles uma variável de estado (s_i , para o i -ésimo cruzamento), que pode assumir os valores abstratos A ou B , de acordo com o tipo de transformação efetuada no cruzamento quando da aplicação da relação (2.1). Uma escolha dos estados de todos os cruzamentos de L é dita ser um estado de L . O número de estados de um diagrama qualquer com n cruzamentos é igual a 2^n . A cada estado s do diagrama corresponde um conjunto de círculos disjuntos dois a dois, obtidos após a destruição de todos os cruzamentos de acordo com a prescrição ditada por s . Denotando por $\alpha(s)$ e $\beta(s)$ os números de cruzamentos nos estado A e B e por $\gamma(s)$ o número de círculos disjuntos associados a s , obtemos:

$$\langle L \rangle = \sum_s a^{\alpha(s)} b^{\beta(s)} c^{\gamma(s)-1} = \sum_s a^{\alpha(s)-\beta(s)} (-a^2 - a^{-2})^{\gamma(s)-1}. \quad (2.4)$$

Vemos assim que o polinômio $\langle L \rangle$ está univocamente definido. Se tomarmos a equação (2.4) como a definição de $\langle L \rangle$, garantimos a existência desse polinômio. Usando essa expressão para $\langle L \rangle$ é possível verificar as relações definidoras. A relação (2.1) pode ser obtida se escolhermos um cruzamento arbitrário e realizarmos explicitamente a soma no índice correspondente. A relação (2.2) pode ser obtida se notarmos que a única diferença entre o diagrama L e o diagrama formado pela união de L com um círculo é que o segundo possui um círculo a mais que L . A relação (2.3) é trivialmente satisfeita, pois nesse caso existe um único estado s associado ao diagrama, sendo que $\alpha(s) = \beta(s) = 0$ e $\gamma(s) = 1$.

□

De posse do polinômio estudado acima, podemos definir um invariante por isotopia. Para tanto necessitamos definir uma função auxiliar denominada número de torções².

2.12-Definição: Número de torções ($W(L)$)

Seja L um diagrama de elo. Vamos atribuir a cada componente de L uma orientação arbitrária. Para cada cruzamento associamos um número (ϵ_i , para o i -ésimo cruzamento), de acordo com a figura (2.9).

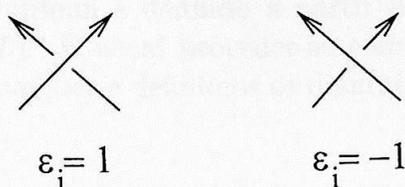


Figura 2.9: Valores possíveis da variável ϵ_i .

A função $W(L)$ é dada por:

$$W(L) \equiv \sum_i \epsilon_i, \quad (2.5)$$

em que a soma é tomada sobre todos os cruzamentos de L .

Podemos mostrar que $W(L)$ é invariante pelos movimentos Ω_2 e Ω_3 , pois no caso do segundo movimento de Reidemeister os sinais dos dois cruzamentos que somem (ou surgem) são opostos, enquanto que no caso do terceiro movimento de Reidemeister os sinais dos cruzamentos A , B e C são iguais aos sinais de A' , B' e C' , respectivamente, conforme se vê a partir de uma análise da figura (2.5). Com relação a Ω_1 , no entanto, $W(L)$ varia de uma unidade, pois nesse caso temos ou o surgimento ou o desaparecimento de um cruzamento.

Tanto o polinômio $\langle L \rangle$ quanto a função $W(L)$ são invariantes por Ω_2 e Ω_3 . Podemos então tentar combinar suas variações associadas a Ω_1 de forma que elas se cancelem mutuamente. Isso é obtido se definirmos o chamado polinômio de Kauffman:

$$X(L) \equiv (-a)^{-3W(L)} \langle |L| \rangle, \quad (2.6)$$

em que o diagrama $|L|$ é o diagrama L sem orientação.

²Do inglês, "writhe number"

Utilizando a definição acima podemos verificar que $X(L)$ é invariante por Ω_1 . Vejamos:

$$X \left(\text{Diagrama 1} \right) = (-a)^{-3} (-a)^3 X \left(\text{Diagrama 2} \right) = X \left(\text{Diagrama 3} \right).$$

Figura 2.10: Invariância de $X(L)$ por Ω_1 .

Como o polinômio de Kauffman é definido a partir de $\langle L \rangle$, podemos encontrar as relações definidoras para $X(L)$. É usual proceder-se como segue: dado o diagrama L , escolhemos um cruzamento qualquer e definimos os diagramas L^+ , L^- e L^0 mostrados na figura (2.11).

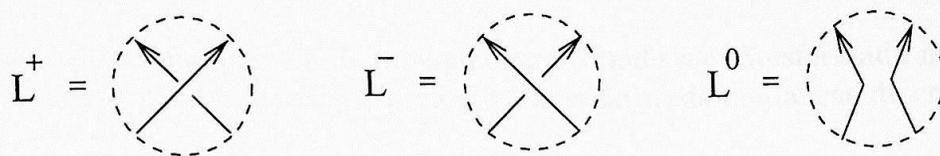


Figura 2.11: Diagramas associados ao polinômio de Kauffman.

Aplicando a relação (1) para L^+ e L^- obtemos:

$$a \langle L^+ \rangle - a^{-1} \langle L^- \rangle = (a^2 - a^{-2}) \langle L^0 \rangle. \quad (2.7)$$

Usando agora o fato de que $W(L^\pm) = W(L^0) \pm 1$, chegamos a:

$$a^4 X(L^+) - a^{-4} X(L^-) = (a^2 - a^{-2}) X(L^0). \quad (2.8)$$

As outras duas relações satisfeitas por $X(L)$ também podem ser obtidas a partir das relações satisfeitas por $\langle L \rangle$. Obtemos assim que o polinômio de Kauffman assume o valor 1 no nó trivial e que a relação (2.2) é válida com $\langle L \rangle$ substituído por $X(L)$. Se na definição de $X(L)$ substituirmos a variável a por $q^{-1/4}$ obteremos uma expressão para o polinômio de Jones $V(L)$. Escrevendo as relações satisfeitas por $X(L)$ em termos da nova variável q , chegamos finalmente às relações definidoras para o polinômio de Jones:

$$q^{-1} V(L^+) - q V(L^-) = (q^{-1/2} - q^{1/2}) V(L^0), \quad (2.9)$$

$$V(L \cup K_0) = -(q^{-1/2} + q^{1/2}) V(L), \quad (2.10)$$

$$V(K_0) = 1, \quad (2.11)$$

em que K_0 é novamente o símbolo para o diagrama do nó trivial. A equação (2.9) nos informa que diferentemente do caso em que lidamos com o polinômio de Kauffman, no caso do polinômio de Jones não temos a destruição de um ponto de cruzamento, e sim a transformação de um cruzamento no seu oposto, além da presença de um nó com um cruzamento a menos (L^0). Podemos então aplicar (2.9) recursivamente, até que em algum momento existam apenas elos triviais, cada um com um número m de componentes. O polinômio de Jones pode ser facilmente determinado para o elo trivial de m componentes ($L_0^{(m)}$), sendo dado por $V(L_0^{(m)}) = (-q^{1/2} - q^{-1/2})^{m-1}$, de acordo com as relações (2.10) e (2.11).

A rigor, para termos certeza de que esse procedimento realmente leva à determinação de $V(L)$, devemos provar que existe uma seqüência finita de elos ligando L ao elo trivial. Para tanto enunciamos o resultado abaixo, que pode ser encontrado em [18].

2.13-Teorema: Qualquer elo de m componentes pode ser transformado no elo trivial de m componentes pela aplicação de uma seqüência finita de mudanças de cruzamento.

Prova: Tomemos inicialmente o caso de um nó K . Consideremos a projeção de K sem distinção entre pontos superiores e inferiores em cada cruzamento, ou seja, a “sombra” desse nó. A figura (2.12) mostra um exemplo específico.

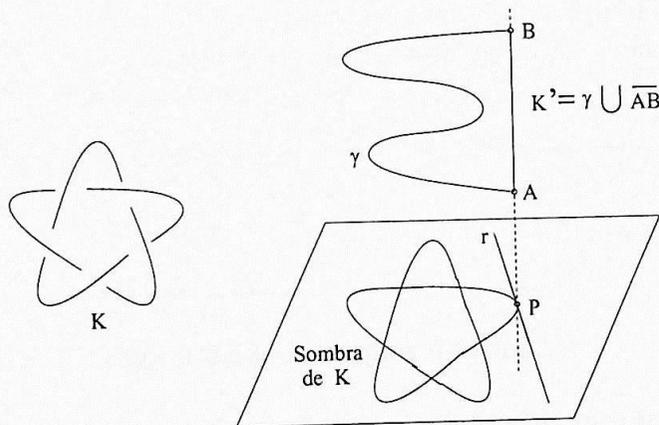


Figura 2.12: Um nó trivial obtido através de mudanças de cruzamento.

Tomemos uma reta r contida no plano de projeção tal que a interseção entre a sombra de K e r seja vazia. Imaginemos agora que r aproxima-se dessa sombra, até que ocorra uma interseção em algum ponto P . A partir desse ponto tomemos uma reta perpendicular ao plano de projeção e sobre essa reta escolhamos dois pontos distintos A e B . Consideremos agora o movimento de um ponto imaginário que viaja em uma trajetória ascendente γ , desde A até B , de forma que a sombra dessa trajetória coincida com a sombra de K .

Unindo a trajetória γ ao segmento de reta que liga A e B obtemos o nó trivial K' , que pode ser obtido a partir de K mediante a aplicação de um número finito de mudanças de cruzamento. No caso geral de um elo com m componentes, devemos proceder da mesma forma para cada componente, além de aplicar as mudanças de cruzamento necessárias para separar as vários componentes que formam o elo. \square

2.3 Tranças e nós

Nesta seção vamos mostrar que existe uma estreita relação entre os objetos conhecidos como tranças e os nós. Vamos mostrar que é possível obter invariantes de nó a partir de funções definidas no conjunto das tranças. Inicialmente vamos definir tranças adotando um ponto de vista geométrico.

2.14-Definição: Tranças

Consideremos um sistema de eixos cartesianos no espaço. Tomemos dois segmentos de reta opostos um ao outro, paralelos ao eixo das abcissas e contidos no plano XZ . Em cada um desses segmentos tomemos n pontos equidistantes uns dos outros, P_1, \dots, P_n no segmento inferior e Q_1, \dots, Q_n no segmento superior, digamos. Chamamos de trança de n cordas a um conjunto de linhas ascendentes que une os pontos P_1, \dots, P_n aos pontos Q_1, \dots, Q_n em qualquer ordem. Por linhas ascendentes queremos dizer que um plano paralelo ao plano XY intercepta cada uma das linhas em no máximo um ponto. Na figura (2.13) são mostrados alguns exemplos.

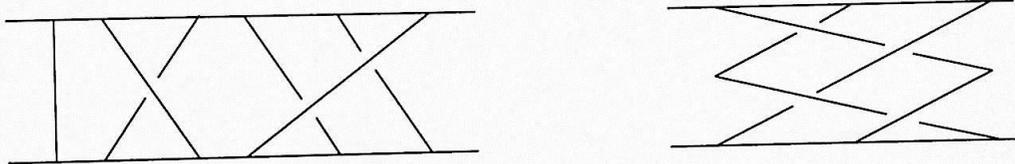


Figura 2.13: Exemplos de tranças.

Cabem agora algumas observações a respeito da definição anterior. Em primeiro lugar, poderíamos ter definido tranças como sendo mapas, mas acreditamos ser mais prático pensar em termos de linhas no espaço.

Outra observação importante é que assim como no caso dos nós, podemos introduzir uma relação de equivalência entre tranças, usando para isso a definição (2.4) de movimento elementar. Devemos apenas estar atentos ao fato de que tranças são linhas ascendentes, de forma que estão proibidos os movimentos elementares que, se realizados, levariam a uma situação final na qual algum plano paralelo ao plano XY interceptaria alguma linha em mais de um ponto.

2.3.1 Grupo de tranças

Mostraremos agora que o conjunto das classes de equivalência das tranças de n cordas, denotado por B_n , possui uma estrutura de grupo.

O produto entre duas tranças de n cordas é definido como sendo a concatenação das duas tranças, isto é, devemos simplesmente colar os pontos P_1, \dots, P_n de uma trança aos pontos Q_1, \dots, Q_n da outra. Na nossa convenção o produto $b_2 b_1$ é formado dispondo-se a trança b_2 sobre a trança b_1 .

Sejam $[a]$ e $[b]$ duas classes de equivalência de tranças. Definimos o produto $[a][b]$ como sendo a classe de equivalência do produto entre um representante da classe $[a]$ e um da classe $[b]$.

A figura (2.14.a) mostra um exemplo de uma trança (denotada por e) que é equivalente à trança trivial. O elemento identidade do grupo de tranças é definido como sendo a classe de equivalência de e . A figura (2.14.b) mostra que o produto entre classes de equivalência de tranças é associativo. A figura (2.14.c), por sua vez, mostra um exemplo de uma trança (b^{-1}), cuja composição com a trança b , também mostrada na figura, é equivalente a e . Note que b^{-1} é obtida mediante a reflexão de b com relação a um espelho hipotético paralelo ao plano XY e tocando as extremidades P_1, \dots, P_n (ou Q_1, \dots, Q_n) de b .

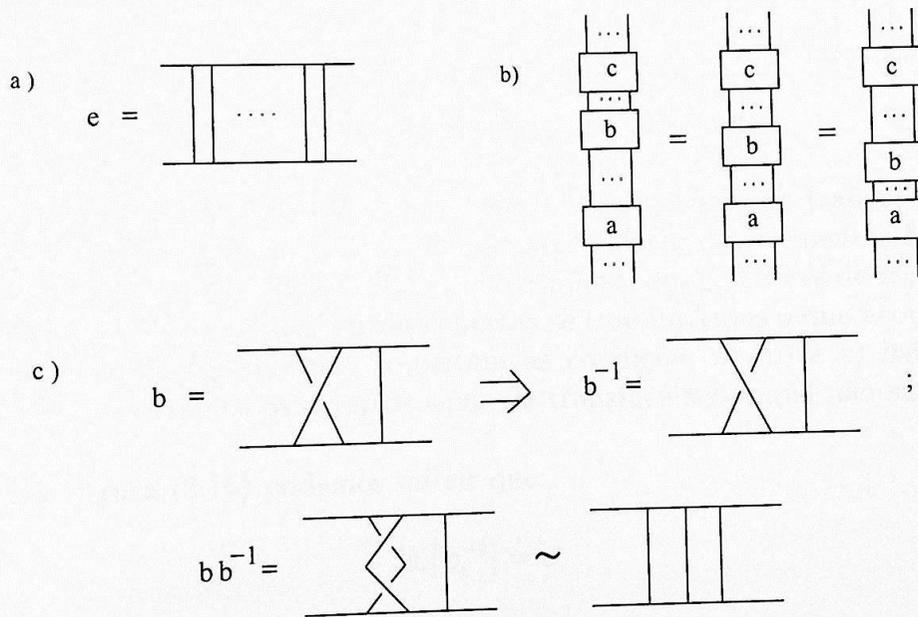


Figura 2.14: Elementos do grupo de tranças.

2.3.2 Geradores e relações

Podemos apresentar um grupo listando um conjunto de elementos capaz de gerar todos os outros elementos do grupo e estabelecendo as relações satisfeitas por esses geradores. Antes de listar os geradores do grupo B_n , notemos que em cada classe de equivalência podemos escolher um elemento que possui as seguintes características:

- as projeções das linhas ascendentes não se tangenciam,
- nenhum ponto do plano XZ é a projeção de três ou mais pontos da trança,
- todos os pontos de cruzamento ocorrem em altitudes diferentes (medidas na direção do eixo axial).

Na figura (2.15.a) vemos um exemplo de uma trança satisfazendo essas condições. Observemos que ela pode ser escrita como um produto de elementos do tipo b_1, \dots, b_{n-1} , mostrados na figura (2.15.b).

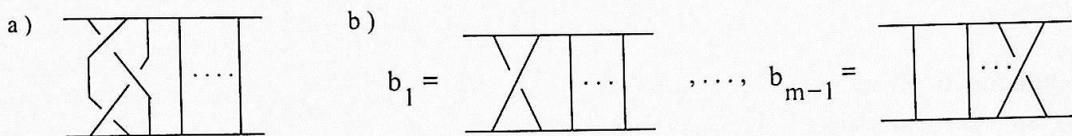


Figura 2.15: Geradores do grupo de tranças.

Como conseqüência, temos que toda classe de equivalência de tranças $[b]$ pode ser escrita como um produto das $n - 1$ classes de equivalência dos elementos b_1, \dots, b_{n-1} da figura (2.15.b). Dizemos que $\{[b_1], \dots, [b_{n-1}]\}$ é o conjunto dos geradores de B_n . As relações satisfeitas pelos geradores podem ser descobertas se examinarmos o que acontece quando realizamos transformações que não respeitam as condições a), b) e c) listadas acima. Na figura (2.16) mostramos os diversos tipos de transformações que não satisfazem tais condições.

A partir da figura (2.16) podemos inferir que:

$$[b_i][b_i^{-1}] = e, \quad (2.12)$$

$$[b_i][b_{i+1}][b_i] = [b_{i+1}][b_i][b_{i+1}], \quad (2.13)$$

e também

$$[b_i][b_j] = [b_j][b_i], \quad \text{sempre que } |i - j| \geq 2. \quad (2.14)$$

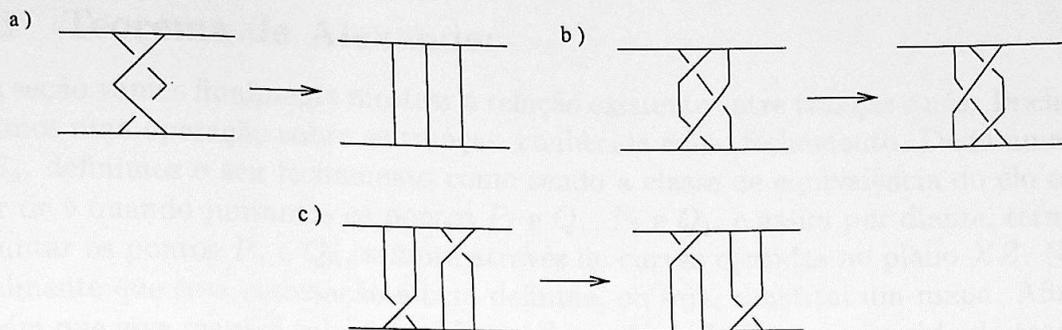


Figura 2.16: Relações entre os geradores do grupo de tranças.

A relação (2.12) é satisfeita por qualquer grupo. A relação (2.13) é conhecida como relação de tranças³ e a relação (2.14) é chamada de comutatividade à distância⁴. De posse dos geradores de B_n e de suas relações, podemos nos perguntar se qualquer relação entre tranças pode ser obtida pela aplicação das relações (2.13) e (2.14), além das relações usuais de grupo. A resposta para essa pergunta é dada pelo teorema de Artin, enunciado abaixo.

2.15-Teorema: O grupo das classes de equivalência de tranças de n cordas (B_n) é isomorfo ao grupo abstrato gerado pelos elementos b_1, \dots, b_{n-1} satisfazendo as relações (2.13) e (2.14).

Prova: Já vimos que os elementos b_1, \dots, b_{n-1} , satisfazendo as relações (2.13) e (2.14), geram B_n . Para mostrar que toda relação entre tranças encontra uma expressão em termos das relações entre os geradores, é suficiente mostrar que qualquer movimento elementar realizado em uma trança é equivalente à aplicação de tais relações.

Utilizamos para isso o artifício de realizar o movimento elementar por etapas, assim como foi feito no caso do Teorema de Reidemeister. No caso de tranças, temos que, por definição, não ocorrem situações envolvendo o primeiro movimento de Reidemeister, pois as linhas poligonais são ascendentes. A realização de um movimento do tipo Ω_2 corresponde à aplicação da relação usual de grupos (2.12). A realização de Ω_3 corresponde à aplicação da relação (2.13). A realização de isotopias planares que modificam a altitude dos pontos de cruzamento, por sua vez, está associada à aplicação da comutatividade à distância (2.14). \square

³Do inglês, "braid relation"

⁴Do inglês, "far commutativity"

2.3.3 Teorema de Alexander

Nesta seção vamos finalmente mostrar a relação existente entre tranças e nós. Inicialmente definimos uma operação sobre as tranças, conhecida como fechamento. Dada uma trança $b \in B_n$, definimos o seu fechamento como sendo a classe de equivalência do elo obtido a partir de b quando juntamos os pontos P_1 e Q_1 , P_2 e Q_2 , e assim por diante, terminando por juntar os pontos P_n e Q_n , sempre através de curvas contidas no plano XZ . Notemos inicialmente que essa associação é bem definida, ou seja, constitui um mapa. Afirmamos também que esse mapa é sobrejetor. Essa afirmação é, de fato, o conteúdo do teorema de Alexander, enunciado abaixo.

2.16-Teorema: O fechamento é um mapa sobrejetor, ou seja, toda classe de equivalência de elo é o fechamento de alguma trança.

Prova: Vamos apresentar uma prova para o caso particular de um elo com 1 componente. Seja K um diagrama de nó poligonal e seja O um ponto qualquer. Se um observador situado em O vê todos os lados de K orientados positivamente, isto é, da direita para a esquerda, dizemos que K circula em torno de O . Nesse caso a demonstração do teorema é simples, pois é suficiente cortar o diagrama K segundo uma linha radial e esticá-lo na direção vertical, conforme vemos na figura (2.17), onde a linha radial citada acima aparece pontilhada. O resultado dessa operação é uma trança cuja imagem pelo fechamento é o nó K .

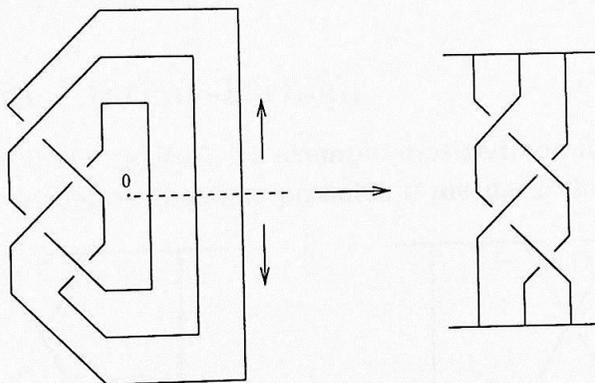


Figura 2.17: Um nó obtido a partir do fechamento de uma trança.

Para que a demonstração esteja completa, devemos mostrar que mediante a realização de uma seqüência finita de movimentos elementares é possível transformar qualquer nó em um outro nó cujo diagrama circula em torno de algum ponto O . Para tanto necessitamos aplicar o procedimento descrito a seguir.

Seja \overline{AB} um lado negativamente orientado (com relação a O) de K . Realizamos um movimento elementar que substitua o lado \overline{AB} pela união dos outros dois lados de um triângulo cujo vértice C está situado atrás do ponto O . A figura (2.18) mostra um exemplo de tal operação.

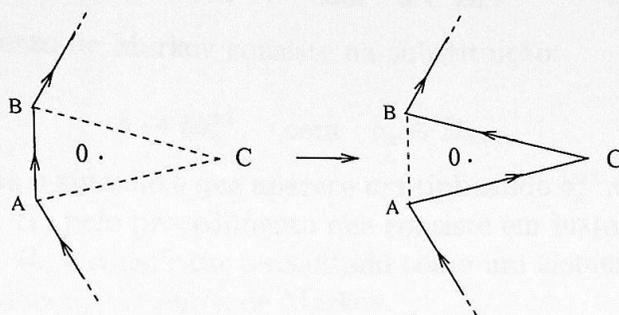


Figura 2.18: Movimento associado à demonstração do teorema de Alexander.

Os dois novos lados estão positivamente orientados com relação a O . No caso do lado \overline{AB} possuir um ponto de cruzamento, há a possibilidade de alguma porção de K invadir o interior do triângulo ABC . Nesse caso podemos mover o ponto C de uma forma conveniente, até que a interseção do interior de ABC com K seja vazia. No caso mais geral em que o lado AB possui mais de um ponto de cruzamento, podemos dividi-lo em segmentos menores, cada um contendo apenas um cruzamento, e realizar as operações descritas em cada um desses segmentos. \square

2.3.4 Teorema de Markov-Birman

O fechamento não é um mapa injetor. No exemplo mostrado na figura (2.19) vemos duas tranças que não são equivalentes mas que possuem o mesmo fechamento.

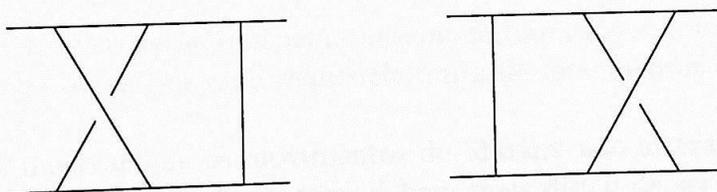


Figura 2.19: Duas tranças não-equivalentes que possuem o mesmo fechamento.

A questão que se coloca então é: quando duas tranças possuem o mesmo fechamento? A resposta a essa pergunta é dada pelo teorema de Markov-Birman. Antes de enunciá-lo necessitamos introduzir a definição de movimentos de Markov.

2.17-Definição: Movimentos de Markov

Seja b um elemento do grupo B_n . O primeiro movimento de Markov consiste na substituição:

$$b \rightarrow aba^{-1}, \quad \text{com } a \in B_n. \quad (2.15)$$

O segundo movimento de Markov consiste na substituição:

$$b \rightarrow bb_n^{\pm 1}, \quad \text{com } b_n \in B_{n+1}. \quad (2.16)$$

Na expressão acima o símbolo b que aparece multiplicando $b_n^{\pm 1}$ é um elemento de B_{n+1} obtido a partir de $b \in B_n$ pelo procedimento que consiste em justapor uma $(n+1)$ -ésima corda à direita de $b \in B_n$ e considerar o resultado como um elemento de B_{n+1} . Na figura (2.20) mostramos os dois movimentos de Markov.

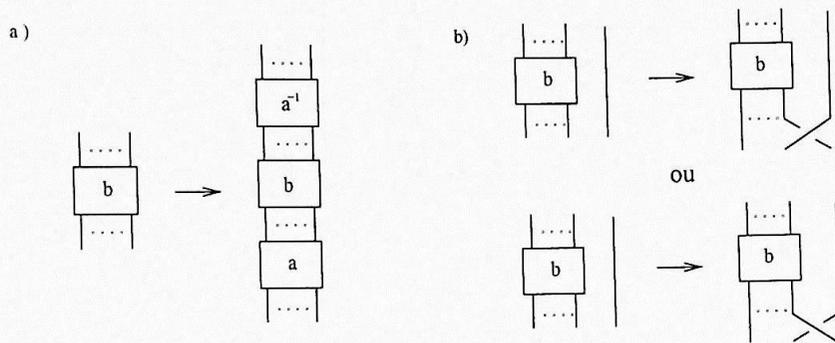


Figura 2.20: Movimentos de Markov.

Podemos agora enunciar o teorema de Markov-Birman, que estabelece quando duas tranças estão associadas à mesma imagem pela operação fechamento.

2.18-Teorema: Duas tranças possuem o mesmo fechamento se e somente se uma pode ser obtida a partir da outra por uma seqüência finita de movimentos de Markov.

Prova: Vamos mostrar que os movimentos de Markov não alteram o fechamento de uma trança. A outra afirmação do teorema é bem mais difícil de ser provada e por essa razão remetemos o leitor ao livro de Birman [20] para uma leitura mais aprofundada. A figura (2.21) é um argumento suficiente para demonstrar a primeira parte do teorema.

Capítulo 3

Invariante de Turaev

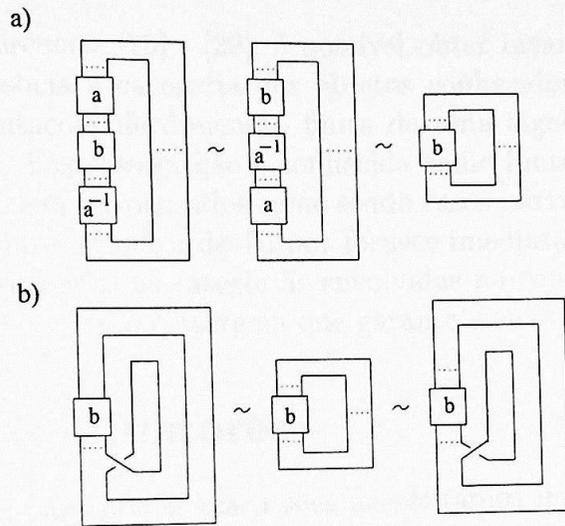


Figura 2.21: Teorema de Markov-Birman.

Capítulo 3

Invariante de Turaev

Conforme se vê nas referências [25] - [29], é possível obter invariantes de nó através de uma abordagem que associa a categoria dos objetos conhecidos como emaranhados¹ e a categoria das representações de dimensão finita de uma álgebra de Hopf com certas características especiais. Essa associação é conhecida como funtor de Turaev. Conforme veremos adiante, eles podem ser pensados como sendo casos particulares de emaranhados. Para esses casos particulares o funtor de Turaev fornece imediatamente invariantes de nó.

Inicialmente apresentaremos as categorias envolvidas na construção do invariante de Turaev, após o que enunciaremos o teorema que garante a sua existência.

3.1 Categorias e funtores

Como ponto de partida para nossas discussões necessitamos introduzir alguns conceitos básicos da teoria das categorias.

3.1-Definição: Categorias

Uma categoria \mathcal{C} consiste em:

- a) uma classe $\text{Ob}(\mathcal{C})$ de objetos A, B, \dots
- b) para cada par ordenado (A, B) de objetos de \mathcal{C} , um conjunto $\text{Mor}(A, B)_{\mathcal{C}}$, chamado de conjunto dos morfismos de A em B ,
- c) para cada tripla ordenada (A, B, C) de objetos de \mathcal{C} , um mapa de $\text{Mor}(B, C)_{\mathcal{C}} \times \text{Mor}(A, B)_{\mathcal{C}}$ em $\text{Mor}(A, C)_{\mathcal{C}}$, chamado de composição de morfismos, que associa o par (g, h) ao morfismo $gh = g \circ h$,

¹Do inglês, "tangles"

satisfazendo os seguintes axiomas:

- a) os conjuntos $\text{Mor}(A, B)_C$ são disjuntos dois a dois,
- b) se hg e gf estão definidos, então $(hg)f = h(gf)$,
- c) para cada objeto A existe um morfismo pertencente a $\text{Mor}(A, A)_C$, chamado de identidade de A e denotado por id_A , para o qual vale: $id_A \circ f = f$ e $g \circ id_A = g$, sempre que o lado esquerdo dessas equações estiver definido.

Observação: Utilizaremos frequentemente a notação $f : A \rightarrow B$ para indicar que $f \in \text{Mor}(A, B)_C$.

3.2-Definição: Isomorfismos

Um morfismo $f : A \rightarrow B$ é dito ser um isomorfismo se existir um morfismo $g : B \rightarrow A$ tal que $gf = id_A$ e $fg = id_B$. Dizemos que o morfismo g é o inverso de f , e escrevemos: $g = f^{-1}$.

3.3-Definição: Funtores covariantes

Sejam \mathcal{C} e \mathcal{D} categorias. Um functor covariante \mathcal{F} de \mathcal{C} em \mathcal{D} , denotado por $\mathcal{F} : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$, consiste em uma família de mapas que:

- a) a cada objeto A de \mathcal{C} associa o objeto $\mathcal{F}(A)$ de \mathcal{D} ,
- b) a cada morfismo $f : A \rightarrow B$ de \mathcal{C} associa o morfismo $\mathcal{F}(f) : \mathcal{F}(A) \rightarrow \mathcal{F}(B)$ de \mathcal{D} ,

de tal forma que:

- a) $\mathcal{F}(id_A) = id_{\mathcal{F}(A)}$,
- b) $\mathcal{F}(gf) = \mathcal{F}(g)\mathcal{F}(f)$, sempre que gf estiver definido.

Funtores contravariantes são definidos de forma inteiramente análoga ao caso covariante, a única diferença sendo com relação à propriedade b), onde no caso contravariante temos que $\mathcal{F}(gf) = \mathcal{F}(f)\mathcal{F}(g)$.

3.4-Definição: Transformações naturais

Sejam \mathcal{F} e \mathcal{G} funtores (do mesmo tipo) de \mathcal{C} em \mathcal{D} . Uma transformação natural $\alpha : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{G}$ é uma mapa que associa a todo objeto A de \mathcal{C} um morfismo em \mathcal{D} , a saber, $\alpha_A : \mathcal{F}(A) \rightarrow \mathcal{G}(A)$, sendo que para todo morfismo $f : A \rightarrow B$ de \mathcal{C} temos: $\mathcal{G}(f)\alpha_A = \alpha_B\mathcal{F}(f)$. Uma transformação natural que é um isomorfismo é chamada de isomorfismo natural.

3.5-Definição: Bi-funtores

Dadas duas categorias \mathcal{C} e \mathcal{D} , definimos o produto $\mathcal{C} \times \mathcal{D}$ como sendo a categoria cujos objetos são pares ordenados (A, B) , com A objeto de \mathcal{C} e B objeto de \mathcal{D} e cujos morfismos são pares ordenados (f, g) , com f morfismo de \mathcal{C} e g morfismo de \mathcal{D} . Sejam \mathcal{C} , \mathcal{D} e \mathcal{E} categorias. Um bi-functor \mathcal{F} de $\mathcal{C} \times \mathcal{D}$ em \mathcal{E} é uma família de mapas tal que sejam válidas as seguintes afirmações:

- para cada identidade id_A , $\mathcal{F}(id_A, \cdot)$ é um funtor,
- para cada identidade id_B , $\mathcal{F}(\cdot, id_B)$ é um funtor,
- para cada $f : A \rightarrow A'$ em \mathcal{C} e $g : B \rightarrow B'$ em \mathcal{D} , temos que:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f, g)[\mathcal{F}(A, B)] &= \mathcal{F}(id_{A'}, g) \circ \mathcal{F}(f, id_B)[\mathcal{F}(A, B)] \\ &= \mathcal{F}(f, id_{B'}) \circ \mathcal{F}(id_A, g)[\mathcal{F}(A, B)]. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Se os funtores $\mathcal{F}(id_A, \cdot)$ e $\mathcal{F}(\cdot, id_B)$ forem ambos covariantes, dizemos que o bi-functor \mathcal{F} é covariante.

3.6-Definição: Categorias monoidais

Uma categoria monoidal $(\mathcal{C}, \otimes, I, a, r, l)$ é constituída de uma categoria \mathcal{C} , um bi-functor covariante $\otimes : \mathcal{C} \times \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}$, um objeto I de \mathcal{C} , chamado de identidade e três famílias de isomorfismos naturais

$$a_{ABC} : (A \otimes B) \otimes C \rightarrow A \otimes (B \otimes C), \quad r_A : A \otimes I \rightarrow A, \quad l_A : I \otimes A \rightarrow A \quad (3.2)$$

(em que A, B e C são objetos de \mathcal{C}), tais que os seguintes diagramas comutem:

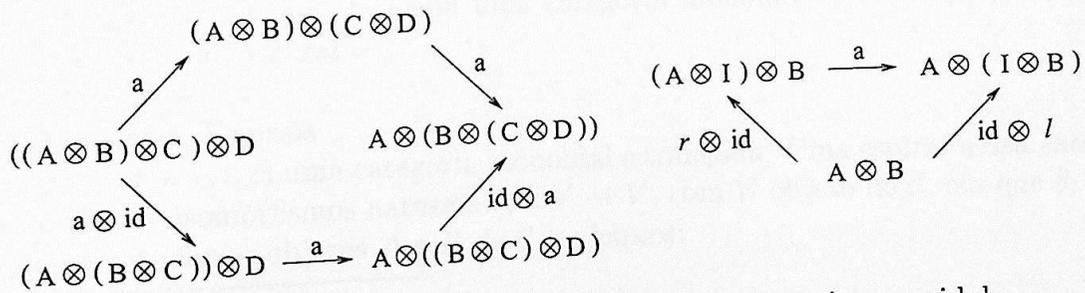


Figura 3.1: Diagramas comutativos de uma categoria monoidal.

Uma categoria monoidal é dita ser estrita se todos os isomorfismos a_{ABC} , r_A e l_A da figura (3.1) forem morfismos identidade.

3.7-Definição: Trançados²

Um trançado em uma categoria monoidal $(\mathcal{C}, \otimes, I, a, r, l)$ consiste em uma família de isomorfismos naturais $c_{U,V} : U \otimes V \rightarrow V \otimes U$, tal que para quaisquer objetos A, B e C de \mathcal{C} os seguintes diagramas comutem:

$$\begin{array}{ccc}
 A \otimes (B \otimes C) & \xrightarrow{c} & (B \otimes C) \otimes A \\
 \nearrow a & & \searrow a \\
 (A \otimes B) \otimes C & & B \otimes (C \otimes A) \\
 \searrow c \otimes \text{id} & & \nearrow \text{id} \otimes c \\
 (B \otimes A) \otimes C & \xrightarrow{a} & B \otimes (A \otimes C)
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{ccc}
 (A \otimes B) \otimes C & \xrightarrow{c} & C \otimes (A \otimes B) \\
 \nearrow \bar{a}^{-1} & & \searrow \bar{a}^{-1} \\
 A \otimes (B \otimes C) & & (C \otimes A) \otimes B \\
 \searrow \text{id} \otimes c & & \nearrow c \otimes \text{id} \\
 A \otimes (C \otimes B) & \xrightarrow{\bar{a}^{-1}} & (A \otimes C) \otimes B
 \end{array}$$

Figura 3.2: Diagramas comutativos dos trançados.

A naturalidade dos trançados significa que para todo par de morfismos $f : A \rightarrow A'$ e $g : B \rightarrow B'$ temos:

$$(g \otimes f)_{C_{A,B}} = c_{A',B'}(f \otimes g). \quad (3.3)$$

Pode-se mostrar (ver referência [28]) que trançados em uma categoria monoidal satisfazem a equação de Yang-Baxter, isto é:

$$(id_C \otimes c_{A,B})(c_{A,C} \otimes id_B)(id_A \otimes c_{B,C}) = (c_{B,C} \otimes id_A)(id_B \otimes c_{A,C})(c_{A,B} \otimes id_C). \quad (3.4)$$

Uma categoria monoidal com trançados é dita ser uma categoria monoidal e trançada, denotada por $(\mathcal{C}, \otimes, I, a, r, l, c)$. Dada uma categoria monoidal e trançada, podemos introduzir o conceito de espiral³.

3.8-Definição: Espirais

Seja $(\mathcal{C}, \otimes, I, a, r, l, c)$ uma categoria monoidal e trançada. Uma espiral nessa categoria é uma família de isomorfismos naturais $\theta_V : V \rightarrow V$, com V objeto de \mathcal{C} , em que $\theta_I = id_I$ e tal que para todos os objetos A e B de \mathcal{C} tenhamos:

²Do inglês, "braiding".

³Do inglês, "twist".

$$\theta_{A \otimes B} = c_{B, A} c_{A, B} (\theta_A \otimes \theta_B). \quad (3.5)$$

3.9-Definição: Dualidade

Uma dualidade em uma categorial monoidal $(\mathcal{C}, \otimes, I, a, r, l)$ consiste em:

- a) um mapa de \mathcal{C} em \mathcal{C} que a cada objeto A associa um outro objeto, denotado por A^* e chamado de objeto dual de A ,
- b) duas famílias de morfismos,

$$b_A : I \rightarrow A \otimes A^* \quad \text{e} \quad d_A : A^* \otimes A \rightarrow I, \quad (3.6)$$

satisfazendo as seguintes relações:

$$id_A = (id_A \otimes d_A)(b_A \otimes id_A) \quad \text{e} \quad id_{A^*} = (d_A \otimes id_{A^*})(id_{A^*} \otimes b_A). \quad (3.7)$$

O conceito de dualidade nos permite definir o morfismo dual. Dado um $f : A \rightarrow B$, definimos o seu dual $f^* : B^* \rightarrow A^*$ através de:

$$f^* \equiv (d_B \otimes id_{A^*})(id_{B^*} \otimes f \otimes id_{A^*})(id_{B^*} \otimes b_A). \quad (3.8)$$

Podemos verificar que $(fg)^* = g^*f^*$ e $(id_A)^* = id_{A^*}$. Vemos então que as associações $A \mapsto A^*$ e $f \mapsto f^*$ definem um funtor contravariante, chamado de funtor dualidade e denotado por $*$: $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}$.

Dizemos que a dualidade é compatível com a estrutura de trançados e espirais se a seguinte igualdade for satisfeita.

$$\theta_{A^*} = (\theta_A)^*. \quad (3.9)$$

Categorias monoidais e trançadas com dualidade satisfazendo a condição de compatibilidade (3.9) são chamadas de categorias compactas.

3.2 Categoria dos emaranhados

Vamos agora definir os objetos conhecidos como emaranhados. A definição mais interessante do ponto de vista prático é a de emaranhados poligonais. Apresentaremos inicialmente, no entanto, uma definição em termos de mapas, assim como procedemos no caso dos elos.

3.10-Definição: Emaranhados

Consideremos um sistema de coordenadas cartesianas em \mathbb{R}^3 . Tomemos nesse espaço um quadrado Q com dois lados paralelos ao eixo horizontal ("direção X") e dois lados paralelos ao eixo vertical ("direção Z"). O lado horizontal inferior de Q será denotado por r , enquanto que o seu lado horizontal superior será denotado por s . Seja D uma união disjunta de círculos e intervalos fechados do tipo $I = [0, 1]$.

Um emaranhado é um mapa $T : D \rightarrow \mathbb{R}^3$, em que a restrição $T : D \rightarrow T(D)$ é um homeomorfismo. Requeremos ainda que:

- a) a fronteira (da imagem) de T , denotada por ∂T , seja composta de duas seqüências finitas de pontos, uma delas contida em r e a outra contida em s ,
- b) as retas tangentes à imagem de T que passam por um ponto qualquer de ∂T não sejam paralelas a r e nem a s .

Se o domínio de T for orientado, falamos em emaranhados orientados. A figura (3.3.a) mostra um exemplo de emaranhado.

3.11-Definição: Emaranhados poligonais

Sejam r e s os segmentos de reta da definição (3.10). Um emaranhado poligonal (orientado) é a união de um número finito de arcos poligonais (orientados), disjuntos dois a dois, em que a sua fronteira é composta de duas seqüências finitas de pontos, uma delas contida em r e a outra contida em s .

A figura (3.3.b) mostra um exemplo de emaranhado poligonal, enquanto que a figura (3.3.c) mostra um exemplo de emaranhado poligonal orientado.

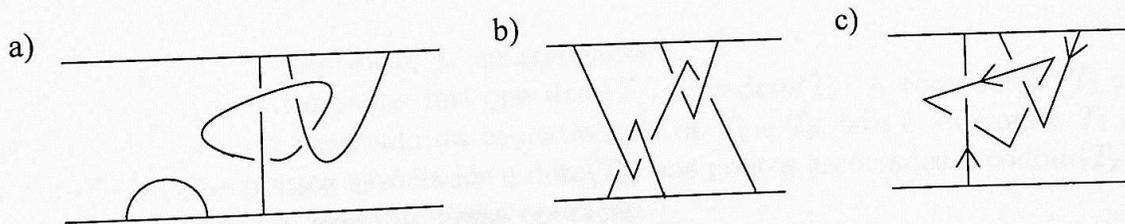
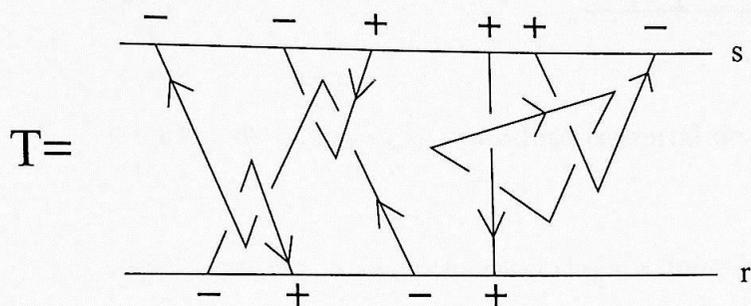


Figura 3.3: Exemplos de emaranhados.

Seja T um emaranhado qualquer. Chamemos de k o número de pontos pertencentes a $\partial T \cap r$ e de l o número de pontos pertencentes a $\partial T \cap s$. Dizemos que T é um emaranhado do tipo (k, l) . Caso T seja orientado, cada um dos pontos pertencentes à sua fronteira pode ser a origem ou o término de uma linha de T . Vamos associar a cada um dos

conjuntos $\partial T \cap r$ e $\partial T \cap s$ uma seqüência de sinais positivos e negativos de acordo com a seguinte regra: se um ponto pertencente a $\partial T \cap r$ for a origem de alguma linha de T , linha de T , associamos a esse ponto um sinal negativo. No caso de esse ponto ser o término de uma pontos de $\partial T \cap r$, construímos uma seqüência de sinais formada por k elementos. No caso de $\partial T \cap s$ a abordagem é semelhante, sendo que agora associamos um sinal negativo a cada ponto que é o término de alguma linha de T , enquanto que a cada ponto que é origem de uma linha de T associamos um sinal positivo. Procedendo dessa forma para todos os pontos de $\partial T \cap s$ construímos uma seqüência de sinais composta de l elementos. A figura (3.4) mostra um exemplo que ajuda a visualizar essa regra.



$$\text{dom}(T) = (-, +, -, +) \quad \text{codom}(T) = (-, -, +, +, +, -)$$

Figura 3.4: Seqüências de sinais associados a um emaranhado orientado.

A seqüência de sinais associada a $\partial T \cap r$, chamada de domínio de T , é denotada por $\text{dom}(T)$, enquanto que a seqüência de sinais associada a $\partial T \cap s$, chamada de co-domínio de T , é denotada por $\text{codom}(T)$.

3.12-Definição: Composição de emaranhados

Sejam T_1 e T_2 emaranhados tais que $\text{dom}(T_1) = \text{codom}(T_2)$. A composição $T_1 \circ T_2$ é definida como sendo o resultado da concatenação de T_1 e T_2 , isto é, dispomos T_1 sobre T_2 e conectamos os pontos associados a $\text{dom}(T_1)$ aos pontos associados a $\text{codom}(T_2)$. Na figura (3.5.a) vemos um exemplo dessa operação.

3.13-Definição: Produto tensorial

Sejam T_1 e T_2 emaranhados. O produto tensorial de T_1 por T_2 , denotado por $T_1 \otimes T_2$, é obtido através do procedimento que consiste em dispor T_1 e T_2 lado a lado (T_1 à esquerda) e considerar o resultado como sendo um novo emaranhado. Na figura (3.5.b) vemos um exemplo dessa operação.

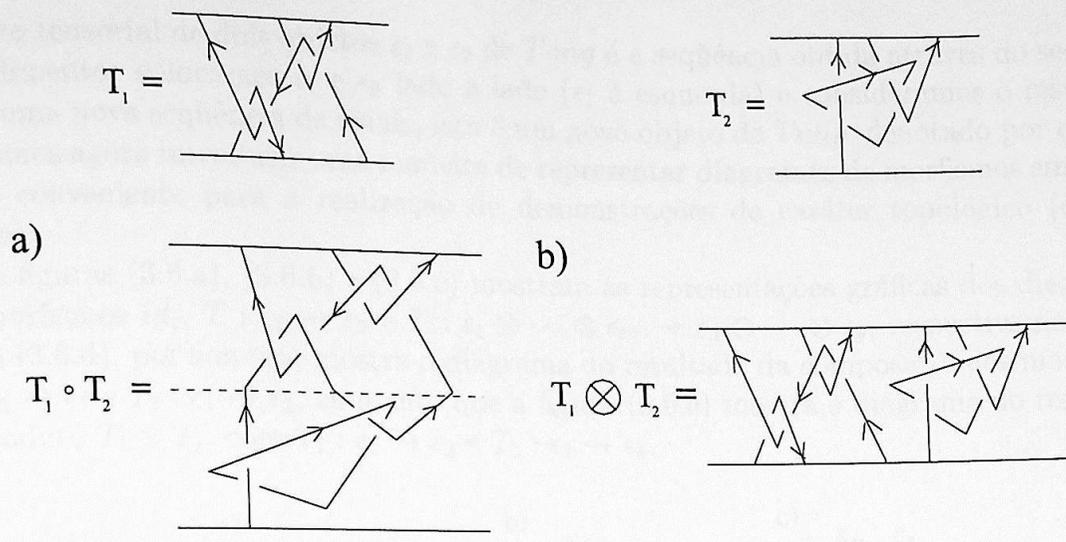


Figura 3.5: Exemplos de composição e produto tensorial de emaranhados.

Observações:

1) Tanto a composição quanto o produto tensorial de emaranhados são operações associativas.

2) Da mesma forma como fizemos no caso de elos e tranças, introduzimos uma relação de equivalência no conjunto de todos os emaranhados. Para emaranhados poligonais a definição (2.4) de movimento elementar induz essa relação de equivalência, enquanto que no caso de emaranhados definidos em termo de mapas é o conceito de isotopia que induz essa relação. No caso de emaranhados existe um análogo do teorema de Reidemeister, ou seja, podemos afirmar que dois emaranhados poligonais são equivalentes se e somente se suas projeções regulares estiverem conectadas por uma seqüência finita de movimentos de Reidemeister e isotopias planares.

Passaremos agora a utilizar a linguagem da teoria das categorias. Contruiremos a categoria dos emaranhados e verificaremos que ela é monoidal, estrita, trançada e compacta.

3.14-Definição: Categoria dos emaranhados (*Tang*)

A categoria *Tang* tem por objetos seqüências finitas de sinais positivos e negativos e tem por morfismos as classes de equivalência de emaranhados orientados. Sejam T_1 e T_2 morfismos dessa categoria. Definimos a composição $T_1 \circ T_2$ como sendo a classe de equivalência da composição de um elemento de T_1 com um elemento de T_2 , segundo a definição (3.12). O produto tensorial dos morfismos T_1 e T_2 é definido de forma análoga, isto é, escolhemos um representante de T_1 e um de T_2 , obtemos o seu produto tensorial e tomamos a classe de equivalência desse resultado como a definição de $T_1 \otimes T_2$. O

produto tensorial de dois objetos ϵ_1 e ϵ_2 de $Tang$ é a seqüência obtida através do seguinte procedimento: colocamos ϵ_1 e ϵ_2 lado a lado (ϵ_1 à esquerda) e consideramos o resultado como uma nova seqüência de sinais, isto é um novo objeto de $Tang$, denotado por $\epsilon_1 \otimes \epsilon_2$.

Vamos agora introduzir uma maneira de representar diagramas de morfismos em $Tang$ que é conveniente para a realização de demonstrações de caráter topológico (cálculo gráfico).

As figuras (3.6.a), (3.6.b) e (3.6.c) mostram as representações gráficas dos diagramas dos morfismos id_ϵ , $T : \epsilon_1 \rightarrow \epsilon_2$ e $T : \epsilon_1 \otimes \dots \otimes \epsilon_m \rightarrow \epsilon_n \otimes \dots \otimes \epsilon_p$, respectivamente. A figura (3.6.d), por sua vez, mostra o diagrama do resultado da composição dos morfismos $T_1 : \epsilon_2 \rightarrow \epsilon_3$ e $T_2 : \epsilon_1 \rightarrow \epsilon_2$, enquanto que a figura (3.6.e) mostra o diagrama do resultado do produto $T_1 \otimes T_2$, com $T_1 : \epsilon_1 \rightarrow \epsilon_2$ e $T_2 : \epsilon_3 \rightarrow \epsilon_4$.

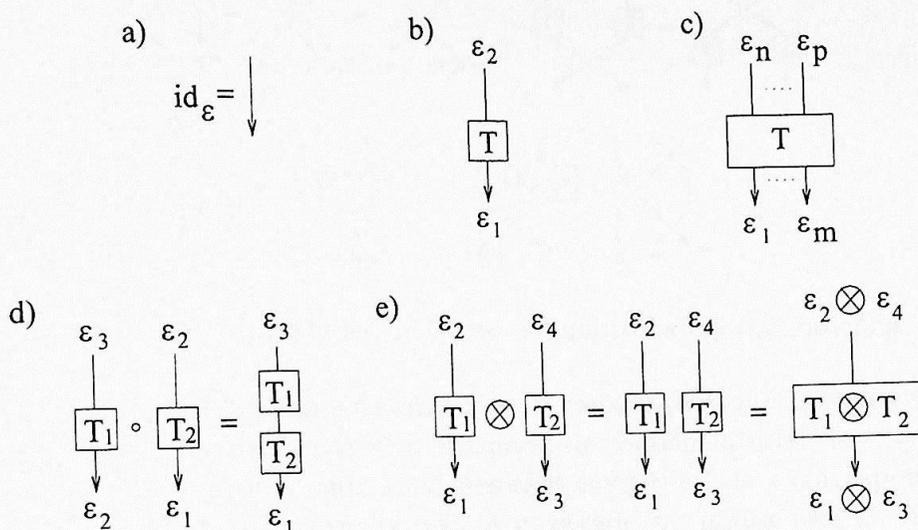


Figura 3.6: Representação gráfica dos morfismos de $Tang$.

Utilizando o cálculo gráfico vamos demonstrar que $Tang$ é uma categoria monoidal, estrita, trançada e compacta. O objeto identidade é a seqüência vazia, denotada por \emptyset . Notemos que o produto tensorial em $Tang$ define um bi-funtor covariante de $Tang \times Tang$ em $Tang$. Para toda seqüência ϵ não-vazia temos que $\epsilon \otimes \emptyset = \emptyset \otimes \epsilon = \epsilon$. Além disso, para três objetos quaisquer de $Tang$ ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 temos que $(\epsilon_1 \epsilon_2) \epsilon_3 = \epsilon_1 (\epsilon_2 \epsilon_3)$, o que significa que os isomorfismos da equação (3.2) são identidades. Está mostrado assim que $Tang$ é monoidal e estrita.

Vamos agora verificar que $Tang$ é trançada. Consideremos um exemplo simples em que $\epsilon = (+, -)$ e $\epsilon' = (-, +)$. O diagrama do trançado $c_{\epsilon, \epsilon'}$ pode ser visto na figura (3.7.a). Em termos da notação do cálculo gráfico esse diagrama é como mostrado na figura (3.7.b). Essa notação será usada para o caso geral em que temos duas seqüências

ϵ e ϵ' arbitrárias. As relações associadas ao diagrama comutativo da figura (3.2) são representadas graficamente nas figuras (3.7.c) e (3.7.d), enquanto que a relação (3.3), chamada de naturalidade dos trançados, é mostrada na figura (3.7.e). Todas essas relações conhecida como equação de Yang-Baxter. A relação (3.4), relação decorre da naturalidade dos trançados.

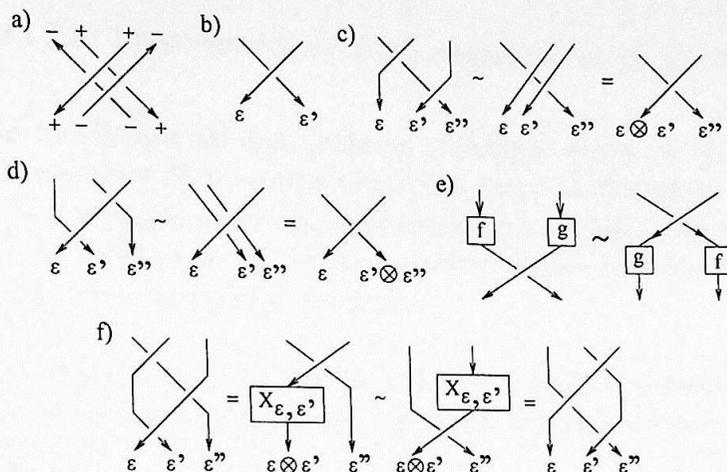


Figura 3.7: Propriedades de *Tang* enquanto categoria trançada.

Vamos agora verificar que *Tang* é compacta. A cada seqüência ϵ fazemos corresponder uma outra seqüência, denotada por ϵ^* e chamada de seqüência dual de ϵ , construída de acordo com a seguinte regra: a cada sinal positivo (negativo) de ϵ corresponde um sinal negativo (positivo) de ϵ^* . O morfismo id_{ϵ^*} é mostrado na figura (3.8.a), de modo que temos a identidade mostrada na figura (3.8.b). Os morfismos definidos na equação (3.6) são mostrados nas figuras (3.8.c) e (3.8.d), enquanto que nas figuras (3.8.e) e (3.8.f) pode-se ver as representações gráficas das relações da equação (3.7). Observemos que essas relações decorrem da aplicação do teorema de Reidemeister, sendo que nesse caso estão envolvidas apenas isotopias planares de diagramas. Recordemos agora a definição de morfismo dual: dado um morfismo $T : \epsilon \rightarrow \epsilon'$, podemos contruir o morfismo $T^* : \epsilon'^* \rightarrow \epsilon^*$, de acordo com a equação (3.8). A representação gráfica do diagrama desse morfismo é mostrada na figura (3.8.g). Temos finalmente que no caso de *Tang* as espirais são idênticas ao morfismo identidade, de forma que a condição de compatibilidade da expressão (3.9) é trivialmente satisfeita, sendo expressa graficamente pela figura (3.8.f). \square

De modo análogo ao que fizemos para o caso do grupo de tranças, vamos apresentar a categoria dos emaranhados através de seus geradores e de um conjunto completo de relações entre esses geradores. Para ser mais preciso, chamamos de geradores de *Tang*

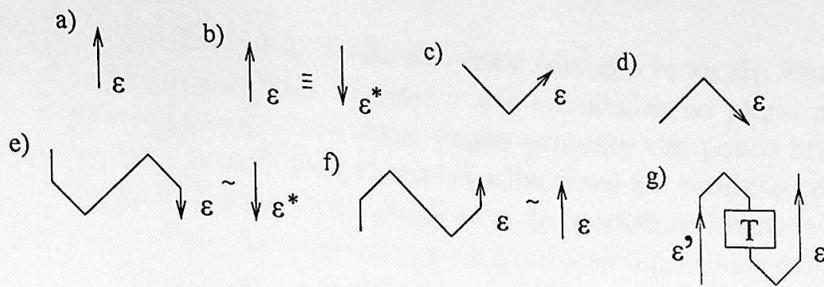


Figura 3.8: Propriedades de $Tang$ enquanto categoria compacta.

a um conjunto de morfismos tal que qualquer morfismo dessa categoria possa ser escrito em termos de composições de produtos tensoriais entre os elementos desse conjunto. Por conjunto completo de relações entre os geradores queremos dizer, por sua vez, que qualquer relação entre os geradores pode ser obtida a partir desse conjunto mediante a aplicação das propriedades de $Tang$ enquanto categoria.

3.15-Teorema: A categoria dos emaranhados é gerada pelos morfismos cujas projeções regulares (diagramas) estão mostradas na figura (3.9.a) satisfazendo as relações da figura (3.9.b).

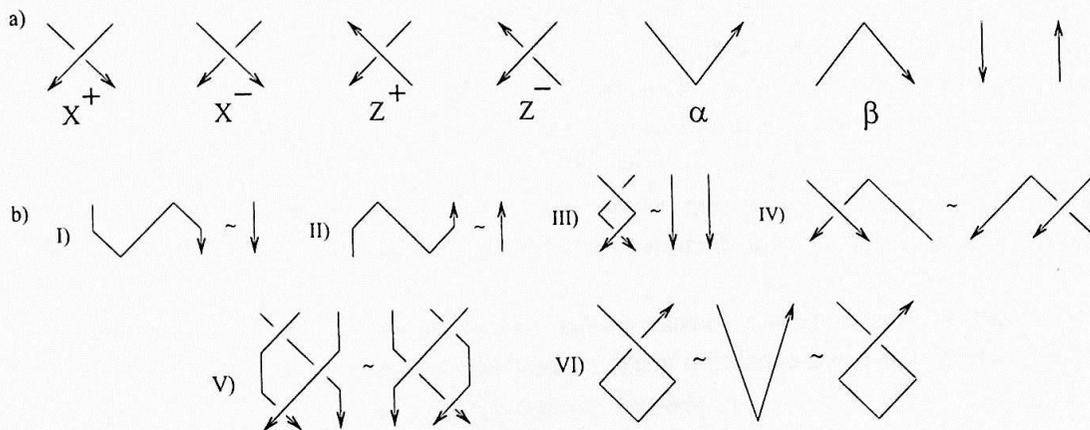


Figura 3.9: Geradores e relações de $Tang$.

Vamos agora esboçar uma demonstração do teorema enunciado acima.

Prova: Utilizaremos a expressão ponto crítico para designar todos os cruzamentos e todos os máximos e mínimos locais de um certo diagrama de emaranhado. Seja T um morfismo de $Tang$. Tomemos um elemento representativo dessa classe que satisfaça a seguinte condição: todos os pontos críticos do diagrama desse elemento estão situados a

diferentes altitudes medidas na direção do eixo axial (direção vertical). Para esse diagrama é possível desenhar linhas paralelas às retas r e s e contidas no plano do diagrama, tal que entre duas linhas adjacentes quaisquer exista somente um ponto crítico. Cada uma das regiões contidas entre duas linhas paralelas adjacentes é o produto tensorial entre um dos elementos da figura (3.9.a) e vários diagramas de morfismos identidade, de forma que T pode ser escrito em termos de composições de produtos tensoriais envolvendo as classes de equivalência dos morfismos cujos diagramas estão mostrados na figura (3.9.a). Um diagrama de emaranhado satisfazendo essa condição é dito ser um diagrama genérico de emaranhado.

Para verificar que as relações listadas na figura (3.9.b) são satisfeitas, é suficiente aplicar o teorema de Reidemeister, enquanto que para verificar que esse conjunto de relações é completo, é suficiente mostrar que qualquer um dos movimentos de Reidemeister bem como qualquer um dos movimentos que definem isotopia planar pode ser obtido a partir das relações listadas e da aplicação das propriedades de $Tang$ enquanto categoria. \square

Vamos agora anexar um conteúdo algébrico à nossa definição de categoria dos emaranhados, definindo a categoria dos emaranhados coloridos.

3.16-Definição: Categoria dos emaranhados coloridos

Seja X um conjunto qualquer não-vazio. A categoria dos emaranhados coloridos por elementos de X , denotada por $Tang(X)$, é contruída da seguinte maneira: os morfismos de $Tang(X)$ coincidem com os morfismos de $Tang$, enquanto que os objetos de $Tang(X)$ são seqüências da forma $((V_1, \epsilon_1), \dots, (V_k, \epsilon_k))$, sendo que para todo $i \in \{1, \dots, k\}$ temos que $\epsilon_i \in \{+, -\}$ e $V_i \in X$. Além disso, requeremos que os elementos de X associados às duas extremidades de uma mesma linha de um emaranhado T sejam iguais entre si.

Interromperemos momentaneamente o nosso estudo a respeito da categoria dos emaranhados, passando agora a apresentar alguns fatos relacionados à categoria que, digamos assim, será a imagem de $Tang$ pelo funtor de Turaev.

3.3 Álgebras de Hopf e suas representações

Nesta seção vamos estudar as estruturas conhecidas como álgebras de Hopf e suas representações, terminando por apresentar a categoria cujos objetos são representações de dimensão finita de uma álgebra de Hopf do tipo fita e cujos morfismos são mapas definidos nessas representações que comutam com a ação dessa álgebra. Ressaltamos que embora o conjunto dos números complexos tenha sido utilizado explicitamente em todas

as construções dessa seção, ele pode ser substituído por qualquer corpo F . Relembramos inicialmente algumas definições.

3.17-Definição: Álgebras

Uma álgebra (\mathcal{A}, m, I) constitui-se de um espaço vetorial \mathcal{A} sobre \mathbb{C} , de um mapa linear $m : \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$, que associa o elemento $a \otimes b$ ao elemento $ab \in \mathcal{A}$ e de um elemento $I \in \mathcal{A}$ tal que para todos os elementos a, b e $c \in \mathcal{A}$ as seguintes relações se verificarem:

$$(ab)c = a(bc) \quad \text{e} \quad Ia = aI = a. \quad (3.10)$$

3.18-Definição: Homomorfismos de álgebra

Um homomorfismo de álgebra $f : (\mathcal{A}, m_{\mathcal{A}}, I_{\mathcal{A}}) \rightarrow (\mathcal{B}, m_{\mathcal{B}}, I_{\mathcal{B}})$ é um mapa linear $f : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}$ tal que:

$$f(ab) = f(a)f(b) \quad \text{e} \quad f(I_{\mathcal{A}}) = I_{\mathcal{B}}, \quad \text{com} \quad a, b \in \mathcal{A}. \quad (3.11)$$

Definiremos agora um homomorfismo de álgebra que aparecerá diversas vezes neste trabalho. Sejam $(\mathcal{A}, m_{\mathcal{A}}, I_{\mathcal{A}}) \equiv \mathcal{A}'$ e $(\mathcal{B}, m_{\mathcal{B}}, I_{\mathcal{B}}) \equiv \mathcal{B}'$ álgebras. A permutação de elementos de \mathcal{A}' e \mathcal{B}' é o homomorfismo de álgebra $\sigma : \mathcal{A}' \otimes \mathcal{B}' \rightarrow \mathcal{B}' \otimes \mathcal{A}'$ dado por:

$$\sigma(a \otimes b) = b \otimes a. \quad (3.12)$$

3.19-Definição: Representações de álgebras

Seja (\mathcal{A}, m, I) uma álgebra. Uma representação (V, ρ_V) dessa álgebra é constituída de um espaço vetorial V e de um homomorfismo de álgebras $\rho_V : \mathcal{A} \rightarrow \text{End}(V)$, em que o símbolo $\text{End}(V)$ denota o conjunto dos endomorfismos de V .

Seja (V, ρ_V) uma representação de (\mathcal{A}, m, I) . Um sub-espaço invariante V' de (V, ρ_V) é um subconjunto de V tal que para todos os elementos $a \in \mathcal{A}$ e $v \in V'$ tenhamos: $\rho_V(a)(v) \in V'$. Dizemos que uma representação é irredutível se os seus únicos sub-espaços invariantes forem os conjuntos $\{0\}$ e V .

Uma representação é dita ser completamente redutível se puder ser escrita como a soma direta de representações irredutíveis. Lembremos que se U e V são representações, a ação da álgebra em $U \oplus V$ é dada por: $\rho_{U \oplus V}(a)(u \oplus v) = \rho_U(a)(u) \oplus \rho_V(a)(v)$, para todos os elementos $u \in U$, $v \in V$ e $a \in \mathcal{A}$.

3.20-Definição: Co-álgebras

Uma co-álgebra $(\mathcal{A}, \Delta, \epsilon)$ é constituída de um espaço vetorial \mathcal{A} sobre \mathbb{C} , de um mapa linear $\Delta : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A} \otimes \mathcal{A}$, chamado de co-multiplicação, e de um mapa linear $\epsilon : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$, chamado de co-unidade, tal que as seguintes relações sejam satisfeitas:

$$(\Delta \otimes id) \circ \Delta = (id \otimes \Delta) \circ \Delta \quad e \quad (3.13)$$

$$(\epsilon \otimes id) \circ \Delta = (id \otimes \epsilon) \circ \Delta = id. \quad (3.14)$$

3.21-Definição: Bi-álgebras

Uma bi-álgebra $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon)$ constitui-se de uma álgebra (\mathcal{A}, m, I) e de uma co-álgebra $(\mathcal{A}, \Delta, \epsilon)$ compatíveis no seguinte sentido:

$$\Delta(ab) = \Delta(a)\Delta(b), \quad \Delta(I) = I \otimes I, \quad \epsilon(ab) = \epsilon(a)\epsilon(b) \quad e \quad \epsilon(I) = 1. \quad (3.15)$$

Notemos que as relações acima implicam que o co-produto e a co-unidade são homomorfismos de álgebra.

3.22-Definição: Álgebras de Hopf

Uma álgebra de Hopf $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$ é constituída de uma bi-álgebra $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon)$ e de um mapa linear $S : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$, chamado de antípoda, para o qual vale:

$$m \circ (S \otimes id) \circ \Delta(a) = m \circ (id \otimes S) \circ \Delta(a) = \epsilon(a)I, \quad \text{com } a \in \mathcal{A}. \quad (3.16)$$

Pode-se mostrar que S é um anti-homomorfismo de álgebras, isto é, $S(ab) = S(b)S(a)$.

Dizemos que uma álgebra de Hopf é co-comutativa se tivermos: $\sigma \circ \Delta = \Delta$. Há casos em que uma condição mais fraca do que a co-comutatividade se verifica. Essa condição é formulada com o auxílio da definição de álgebras de Hopf quase-triangulares.

3.23-Definição: Álgebras de Hopf quase-triangulares

Um álgebra de Hopf quase-triangular $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R)$ é constituída de uma álgebra de Hopf $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$ e de um elemento $R \in \mathcal{A} \otimes \mathcal{A}$, inversível, satisfazendo as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \sigma \circ \Delta(a) &= R\Delta(a)R^{-1}, \\ (\Delta \otimes id)(R) &= R_{13}R_{23} \quad e \\ (id \otimes \Delta)(R) &= R_{13}R_{12}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

em que $R_{12} \equiv R \otimes I$, $R_{23} \equiv I \otimes R$ e $R_{13} \equiv (id \otimes \sigma)(R_{12})$. O elemento R é conhecido como matriz R universal⁴.

Para toda álgebra de Hopf quase-triangular $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R)$ definimos o elemento $u \equiv \sum_i S(\beta_i)\alpha_i$, em que $R = \sum_i \alpha_i \otimes \beta_i$. Seja a um elemento qualquer de \mathcal{A} . Pode-se mostrar que o elemento u definido acima satisfaz as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned} S^2(a) &= uau^{-1}, \quad uS(u) \in \text{centro de } \mathcal{A} \text{ e} \\ \Delta(u) &= (R_{21}R)^{-1}(u \otimes u) = (u \otimes u)(R_{21}R)^{-1} \end{aligned} \quad (3.18)$$

em que $R_{21} \equiv \sigma \circ R$.

3.24-Definição: Álgebras de Hopf do tipo fita⁵

Uma álgebra de Hopf do tipo fita $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, v)$ é constituída de uma álgebra de Hopf quase-triangular $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R)$ e de um elemento central $v \in \mathcal{A}$ satisfazendo as seguintes igualdades:

$$\Delta(v) = (R_{21}R)^{-1}(v \otimes v), \quad S(v) = v, \quad \epsilon(v) = 1 \quad e \quad v^2 = uS(u). \quad (3.19)$$

3.25-Definição: Representações de uma álgebra de Hopf

Uma representação de uma álgebra de Hopf $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$ é uma representação da álgebra (\mathcal{A}, m, I) , conforme a definição (3.19).

A definição acima leva em conta apenas a estrutura de álgebra de $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$. Podemos lançar mão da sua estrutura de álgebra de Hopf e introduzir diversos conceitos úteis. A existência do co-produto, da co-unidade e do antípoda nos permitem introduzir as definições de representação produto, representação trivial e representação dual, conforme veremos a seguir.

3.26-Definição: Representação produto

Sejam (U, ρ_U) e (V, ρ_V) representações da álgebra de Hopf $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$. A representação produto $(U \otimes V, \rho_U \otimes \rho_V)$ é o espaço vetorial $U \otimes V$ equipado com o homomorfismo de álgebra $\rho_{U \otimes V} : \mathcal{A} \rightarrow \text{End}(U) \otimes \text{End}(V)$ dado por:

$$\rho_{U \otimes V}(a)(u \otimes v) \equiv (\rho_U \otimes \rho_V)(\Delta(a))(u \otimes v), \quad (3.20)$$

em que $a \in \mathcal{A}$ e $u \otimes v \in U \otimes V$.

⁴Do inglês, "universal R-matrix"

⁵Do inglês, "ribbon Hopf algebras"

3.27-Definição: Representação trivial

A representação trivial de $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$ é o corpo \mathbb{C} munido do homomorfismo de álgebra $\rho_0 : \mathcal{A} \rightarrow \text{End}(\mathbb{C})$ dado por:

$$\rho_0(a)(\lambda) \equiv \epsilon(a)\lambda, \quad (3.21)$$

em que $a \in \mathcal{A}$ e $\lambda \in \mathbb{C}$.

3.28-Definição: Representação dual

Seja (V, ρ_V) uma representação de $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S)$. A representação dual (V^*, ρ_{V^*}) é contida do espaço vetorial dual V^* e do homomorfismo de álgebra $\rho_{V^*} : \mathcal{A} \rightarrow \text{End}(V^*)$ cuja ação em um elemento f arbitrário de V^* é dada por:

$$\rho_{V^*}(a)(f) \equiv (\rho_V(S(a)))^*(f). \quad (3.22)$$

em que no segundo membro temos o morfismo dual de $\rho_V(S(a))$, construído de acordo com a equação (3.8) e com as definições abaixo:

$$b_V(1) \equiv \sum_i e_i \otimes e^i \quad \text{e} \quad d_V(f \otimes v) = f(v), \quad (3.23)$$

com $\{e_i\}$ base de V , $\{e^i\}$ base de V^* e $e^i(e_j) = \delta_{i,j}$.

3.4 Categoria das representações de uma álgebra de Hopf do tipo fita

Nessa seção introduziremos a linguagem das categorias no estudo das representações de dimensão finita da álgebra de Hopf do tipo fita $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, v)$. Essas representações nos permitirão construir uma categoria monoidal, trançada e compacta, denotada por $\text{Rep}_{\mathcal{A}}$, que é, de um certo ponto de vista, a versão algébrica da categoria dos emaranhados, estudada na seção (3.2). Essa afirmação será esclarecida quando estudarmos mais adiante o funtor de Turaev, e verificarmos que de fato as categorias Tang e $\text{Rep}_{\mathcal{A}}$ mantêm uma forte relação uma com a outra.

3.29-Definição: Categoria $\text{Rep}_{\mathcal{A}}$

Seja $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, v)$ uma álgebra de Hopf do tipo fita. A categoria $\text{Rep}_{\mathcal{A}}$ tem por objetos as representações de dimensão finita de $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, v)$ e tem por morfismos

os mapas lineares $f : V \rightarrow W$, com (V, ρ_V) e (W, ρ_W) objetos de Rep_A , tais que $f \circ \rho_V(a) = \rho_W \circ f$. Dizemos que esses mapas comutam com a ação da álgebra⁶.

Vamos inicialmente mostrar que Rep_A é monoidal. O objeto identidade é a representação trivial da definição (3.27). A representação produto da definição (3.26) induz a existência de um bi-functor covariante de $Rep_A \times Rep_A$ em Rep_A . Temos finalmente que os isomorfismos da equação (3.2) são dados por:

$$(u \otimes v) \otimes w \mapsto u \otimes (v \otimes w), \quad u \otimes \lambda \mapsto \lambda u \quad \text{e} \quad \lambda \otimes u \mapsto \lambda u. \quad (3.24)$$

A matriz R universal (R) permite definir trançados, conforme vemos abaixo:

3.30-Definição: O trançado em Rep_A é dado pela família de mapas $c_{U,V} : U \otimes V \rightarrow V \otimes U$ definida por:

$$c_{U,V} = \sigma \circ (\rho_U \otimes \rho_V)(R). \quad (3.25)$$

A demonstração de que os trançados definidos acima são morfismos em Rep_A pode ser encontrada em [28] e [29]. As demonstrações da comutatividade do diagrama mostrado na figura (3.2) e da naturalidade dos trançados para o caso de Rep_A podem ser encontradas nessa mesma referência.

3.31-Definição: A dualidade em Rep_A é dada pelos morfismos $\alpha_V : \mathbb{C} \rightarrow V \otimes V^*$ e $\beta_V : V^* \otimes V \rightarrow \mathbb{C}$ definidos por:

$$\alpha_V(1) \equiv \sum_i e_i \otimes e^i \quad \text{e} \quad \beta_V(e^i \otimes e_j) \equiv e^i(e_j) = \delta_{i,j}, \quad (3.26)$$

em que $\{e_i\}$ é uma base para o espaço V e $\{e^i\}$ a base de V^* definida por: $e^i(e_j) \equiv \delta_{i,j}$.

A demonstração de que os mapas definidos acima são morfismos de Rep_A pode ser encontrada em [28]. As relações (3.7) seguem imediatamente das definições. Temos então que Rep_A é compacta.

3.5 Invariante de Turaev

Nesta seção vamos finalmente mostrar a conexão existente entre emaranhados e representações de álgebras de Hopf. Antes disso devemos introduzir a notação a ser utilizada nessa seção. Consideremos a categoria dos emaranhados coloridos por representações de dimensão finita de uma certa álgebra de Hopf do tipo fita $(A, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, \nu)$. Cada

⁶Em inglês esses mapas recebem a denominação de "intertwiners"

um dos morfismos da figura (3.9.a) será agora denotado pelo símbolo original ($X^+, X^-,$ etc...) acrescido de um conjunto de índices que identificam os objetos de Rep_A associados a esses morfismos, de forma que escreveremos por exemplo $X_{U,V}^+, X_{U',V'}^-, \cap_V$, e assim por diante.

3.32-Teorema: Para toda álgebra de Hopf do tipo fita $(A, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, v)$ existe um único funtor covariante da categoria dos emaranhados coloridos por objetos de Rep_A ($Tang(Rep_A)$) na categoria Rep_A que preserva o produto tensorial e satisfaz as seguintes condições:

$$\mathcal{F}((V_1, \epsilon_1), \dots, (V_k, \epsilon_k)) = V_1^{\epsilon_1} \otimes \dots \otimes V_k^{\epsilon_1}, \quad (3.27)$$

em que $\epsilon_i \in \{+, -\}$ para $i \in \{1, \dots, k\}$, $V^+ \equiv V$ e $V^- \equiv V^*$ e

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\downarrow_V) &= id_V, & \mathcal{F}(\uparrow_V) &= id_{V^*}, & \mathcal{F}(\cup_V) &= \alpha_V, & \mathcal{F}(\cap_V) &= \beta_V, \\ \mathcal{F}(X_{V,W}^+) &= c_{V,W}, & \mathcal{F}(X_{V,W}^-) &= c_{W,V}^{-1}, & \mathcal{F}(Z_{V,W}^+) &= c_{W^*,V}^{-1}, & \mathcal{F}(Z_{V,W}^-) &= c_{V,W^*}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Prova:

a) Unicidade: A equação (3.27) define completamente o funtor \mathcal{F} nos objetos de $Tang(Rep_A)$. Somando-se a isso o fato de \mathcal{F} estar definido nos geradores de $Tang$, segue que o funtor está univocamente definido.

b) Existência: Os valores assumidos por \mathcal{F} no conjunto dos geradores de $Tang$ são morfismos de Rep_A , conforme comentamos na seção (3.4). Para que o funtor seja covariante e compatível com o produto tensorial, é necessário que cada uma das relações mostradas na figura (3.9.b) seja válida também em Rep_A . A validade das relações (I) e (II) mostradas nessa mesma figura já foi discutida quando estudamos a dualidade em Rep_A . As relações (III) e (IV) da figura (3.9.b) seguem diretamente da definição de \mathcal{F} . A relação (V) dessa figura, por sua vez, é a própria equação de Yang-Baxter, que já sabemos ser válida em Rep_A , dado que essa categoria é trançada. A relação (VI) também pode ser verificada diretamente a partir da definição de \mathcal{F} . \square

Recordemos que um emaranhado do tipo (k, l) tem uma fronteira composta de duas seqüências de pontos, uma delas com k elementos e a outra com l elementos. Seja L uma classe de equivalência de emaranhados do tipo $(0, 0)$. Podemos dizer que L é uma classe de equivalência de elo. Seja L_0 um diagrama (projeção regular) de L . Em virtude das relações satisfeitas pelo funtor de Turaev, temos que $\mathcal{F}(L_0)$ é um número que não tem seu valor modificado sob a ação dos movimentos de isotopia planar, que decorrem dos movimentos mostrados nas figuras (3.9.b.I), (3.9.b.II) e (3.9.b.IV), e nem sob a ação dos movimentos

de Reidemeister, que estão representados pelas figuras (3.9.b.III), (3.9.b.V) e (3.9.b.VI). Aplicando agora o teorema de Reidemeister concluimos que o valor de $\mathcal{F}(L_0)$ é invariante por movimentos elementares (no caso poligonal) realizados na classe de equivalência de L , ou em outras palavras, o funtor de Turaev induz a existência de um invariante de elo. Para que possamos lidar com um exemplo específico de invariante, devemos escolher a álgebra $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, \nu)$ de uma forma conveniente. Nas referências [28] e [29] podemos encontrar alguns exemplos, entre eles o próprio invariante de Jones.

Sistema de N vórtices

Seja $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, \nu)$ uma álgebra de Hopf com um elemento invertível ν . Seja \mathcal{L} um sistema de N vórtices. Um movimento elementar de Reidemeister de tipo III é realizado por um movimento de N vórtices. Um movimento elementar de Reidemeister de tipo V é realizado por um movimento de N vórtices. Um movimento elementar de Reidemeister de tipo VI é realizado por um movimento de N vórtices.

Um exemplo de álgebra não-abeliana

Seja $(\mathcal{A}, m, I, \Delta, \epsilon, S, R, \nu)$ uma álgebra de Hopf com um elemento invertível ν . Seja \mathcal{L} um sistema de N vórtices. Um movimento elementar de Reidemeister de tipo III é realizado por um movimento de N vórtices. Um movimento elementar de Reidemeister de tipo V é realizado por um movimento de N vórtices. Um movimento elementar de Reidemeister de tipo VI é realizado por um movimento de N vórtices.

Capítulo 4

Sistema de N vórtices

O objetivo deste capítulo é mostrar que é possível dar uma interpretação física para o invariante estudado no capítulo anterior. Consideraremos uma teoria de campos em $(2+1)$ dimensões descrita por uma densidade de Lagrangiana invariante de calibre que apresenta quebra espontânea de simetria. Ao estudar o regime de baixas energias dessa teoria, obteremos equações de campo que admitem as chamadas soluções de vórtice, que estão associadas ao grupo fundamental de um plano com N pontos retirados.

Posteriormente estudaremos a álgebra de observáveis do sistema de N vórtices, obtendo as suas representações irredutíveis, processo este conhecido como quantização. O estudo dos processos de espalhamento, criação e aniquilação de vórtices fornece as prescrições necessárias para que possamos escrever o funtor de Turaev para esse caso, bem como o invariante de nó associado.

4.1 Teorias de calibre não-abelianas

Nesta seção vamos estudar uma teoria clássica de campos em um espaço tempo $(2+1)$ -dimensional. Consideremos um sistema descrito por uma densidade de Lagrangiana invariante de calibre, que apresenta quebra espontânea de simetria. Assumimos que o grupo de calibre G é um grupo de Lie não-abeliano e compacto. A escolha de um grupo de calibre compacto possibilita a presença de vórtices nessa teoria (ver referência [34]), enquanto que o fato de G ser não abeliano leva à existência de uma interação do tipo Aharonov-Bohm entre esses vórtices, diferentemente do caso abeliano, em que tal interação não está presente (ver referência [38]). A álgebra de Lie associada a G , denotada por \mathcal{G} , tem como geradores os elementos do conjunto $\{T^a\}$, sendo que $a \in \{1, \dots, k\}$, com $k = \text{dimensão de } \mathcal{G}$. O campo básico da teoria, denotado por Φ , transforma-se de acordo com a representação adjunta de \mathcal{G} , podendo ser escrito em termos dos elementos da base dessa álgebra. O campo de calibre A_μ , também chamado de conexão, pode igualmente ser

escrito nessa base, isto é, $A_\mu = \sum_{a=1}^k A_\mu^a T^a$. A densidade de Lagrangiana desse sistema tem a seguinte forma:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} \sum_{\mu, \nu, a} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} + \sum_{\mu} (D_\mu \Phi)^\dagger (D^\mu \Phi) - V(\Phi), \quad (4.1)$$

em que as componentes $F_{\mu\nu}^a$ do tensor intensidade de campo são tais que o objeto $F_{\mu\nu} \equiv \sum_{a=1}^k F_{\mu\nu}^a T^a$ é dado por: $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig[A_\mu, A_\nu]$, D_μ é o símbolo para a μ -ésima acoplamento da teoria e $V(\Phi)$ é um potencial invariante pela ação de G que após a quebra espontânea de simetria dá origem a um conjunto degenerado de configurações de vácuo. Além disso adotamos uma normalização conveniente na qual $V(\Phi) \geq 0$. O conjunto das configurações de vácuo é chamado de variedade do vácuo¹ e é invariante pela ação de um subgrupo finito de G .

Vamos estudar \mathcal{L} no regime de baixas energias (grandes distâncias), adotando o calibre temporal, isto é, $A_0 = 0$. Identificando a densidade de energia do campo com a densidade de Hamiltoniana, definida por:

$$\mathcal{H} = \partial_0 \Phi \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \Phi} \right) - \mathcal{L}, \quad (4.2)$$

e escrevendo cada um de seus termos de forma conveniente, verificamos que \mathcal{H} é igual a uma soma de termos positivos, conforme vemos abaixo:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4} \sum_{\mu, \nu, a} (F_{\mu\nu}^a)^2 + \sum_{\mu} (D_\mu \Phi)^\dagger D_\mu \Phi + V(\Phi). \quad (4.3)$$

Se desejarmos que a energia total seja finita, devemos impor que \mathcal{H} seja nula para grandes distâncias, o que nos leva a escrever que nesse caso:

$$V(\Phi) = 0, \quad F_{\mu\nu}^a = 0 \quad \text{e} \quad D_\mu \Phi = 0. \quad (4.4)$$

No calibre temporal, essas equações reduzem-se a:

$$V(\Phi) = 0, \quad F_{ij}^a = 0, \quad D_j \Phi = 0, \quad \partial_0 A_j = 0 \quad \text{e} \quad \partial_0 \Phi = 0, \quad (4.5)$$

com $i, j \in \{1, 2\}$. As equações de campo da teoria no regime de baixas energias nos informam que suas soluções são estáticas. Além disso, a equação $V(\Phi) = 0$ implica que o campo Φ está restrito às suas configurações de vácuo. Vamos proceder heurísticamente no sentido de resolver as equações de campo. Escrevendo explicitamente a equação $D_j \Phi = 0$, temos:

¹Do inglês, "vacuum manifold"

$$\partial_j \Phi(\vec{x}) = ig A_j(\vec{x}) \Phi(\vec{x}). \quad (4.6)$$

Tomemos $\Phi(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x})$, com $|\Delta\vec{x}| \ll 1$, e façamos uma expansão em série de Taylor desse campo em torno do ponto fixo \vec{x}_0 situado a uma grande distância da origem das componentes do vetor $\Delta\vec{x}$, podemos escrever:

$$\Phi(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x}) \simeq \Phi(\vec{x}_0) + \nabla\Phi(\vec{x}) \cdot \Delta\vec{x}. \quad (4.7)$$

Substituindo a equação (4.6) na equação (4.7), temos:

$$\Phi(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x}) \simeq (I + ig \vec{A}(\vec{x}) \cdot \Delta\vec{x}) \Phi(\vec{x}_0), \quad (4.8)$$

em que I denota o mapa identidade no espaço dos Φ 's e $\vec{A}(\vec{x}) \cdot \Delta\vec{x}$ é uma notação abreviada para $\sum_j A_j^a T^a \Delta x^j$. Seja γ uma curva ligando o ponto fixo \vec{x}_0 a um ponto \vec{x} também situado a uma grande distância da origem, de tal forma que essa curva está inteiramente contida na região em que $D_j \Phi = 0$. Aplicando a expressão (4.8) iterativamente ao longo de γ podemos determinar o valor de $\Phi(\vec{x})$:

$$\Phi(\vec{x}) = P \exp \left\{ \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A} \cdot d\vec{x} \right\} \Phi(\vec{x}_0). \quad (4.9)$$

Na expressão acima o símbolo P representa o ordenamento de caminhos. A exponencial ordenada é chamada de transporte paralelo da conexão ao longo de γ . No caso de γ ser uma curva fechada, definimos $\tau(\gamma)$, chamada de holonomia da conexão ao longo de γ , através de:

$$\tau(\gamma) \equiv P \exp \left\{ \oint_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{x} \right\}. \quad (4.10)$$

Se exigirmos que o campo Φ seja bem definido em \vec{x}_0 , teremos que as holonomias tomam valores no subgrupo de G que deixa o vácuo em \vec{x}_0 invariante, denotado por H . Esse conjunto é, de fato, um subgrupo do grupo de simetria da variedade do vácuo. Na realidade, as holonomias são representantes dos elementos de H no conjunto dos endomorfismos do espaço vetorial dos campos Φ , mas por simplicidade assumiremos que $\tau(\gamma) \in H$.

Veremos que como consequência da equação $F_{ij}^a = 0$, a holonomia $\tau(\gamma)$ depende apenas da classe de homotopia $[\gamma]$. Antes de demonstrar esse fato, vamos considerar o seguinte exemplo fornecido pelo eletromagnetismo clássico: seja Σ um plano atravessado por N solenóides ideais, cujos campos magnéticos estão confinados às linhas perpendiculares a Σ que lhes servem de suporte. Vamos aplicar o teorema de Stokes, isto é:

$$\oint_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int \int_{\sigma} d\vec{\sigma} \cdot \nabla \times \vec{A}, \quad (4.11)$$

em que $\sigma \in \Sigma$ é uma região conexa por pedaços que tem como fronteira a curva fechada Γ . No caso em questão o rotacional de \vec{A} é igual ao vetor indução magnética \vec{B} , que é diferente de zero somente nas retas suporte dos N solenóides ideais, de forma que se a curva Γ da expressão (4.11) for a fronteira de uma região σ que não é interceptada por nenhum solenóide, então a integral de linha do teorema de Stokes é igual a zero para essa curva. Se realizarmos deformações contínuas em Γ de forma que essa curva nunca intercepte os solenóides, o valor da integral de linha do potencial vetor continuará sendo nulo. Vamos agora aplicar o teorema de Stokes à situação mostrada na figura (4.1). Observe que $\Gamma = \gamma \cup C_1 \cup \dots \cup C_N$, e que a integral de linha de \vec{A} na curva total pode ser escrita como a soma:

$$\oint_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{r} - \int_{C_1} \vec{A} \cdot d\vec{r} - \dots - \int_{C_N} \vec{A} \cdot d\vec{r}. \quad (4.12)$$

Nesse caso a expressão (4.11) pode ser escrita como:

$$\oint_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{r} = \sum_{i=1}^N \oint_{C_i} \vec{A} \cdot d\vec{r} = \sum_{i=1}^N \int \int_{\sigma_i} d\vec{\sigma} \cdot \nabla \times \vec{A} = \sum_{i=1}^N \int \int_{\sigma_i} d\vec{\sigma} \cdot \vec{B}. \quad (4.13)$$

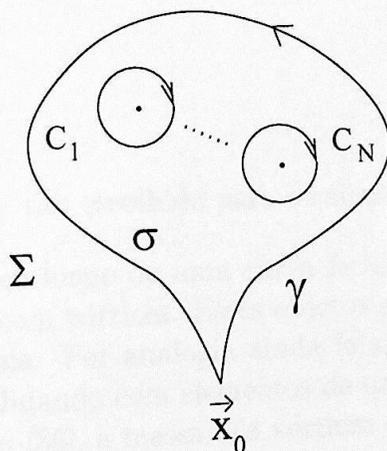


Figura 4.1: Curvas e superfícies associadas ao teorema e Stokes.

Cada pequeno círculo C_i envolve somente um solenóide. No final do cálculo das integrais devemos tomar o limite em que o raio de cada um desses círculos tende a zero. A

expressão (4.13) informa que a integral de \vec{A} ao longo da curva γ da figura (4.1) é igual à soma dos fluxos magnéticos que atravessam a região conexa por pedaços delimitada por essa curva. Já vimos anteriormente que deformações contínuas da curva total Γ não interferem na validade da expressão (4.13). Esses argumentos nos permitem afirmar que o valor da integral de linha do potencial vetor ao longo de γ depende apenas de $[\gamma]$.

A fim de demonstrar esse resultado para o caso não-abeliano consideremos um circuito de dimensões tais que possamos aproximar o transporte paralelo ao longo do segmento $\Delta\vec{x}$ por: $I + ig\vec{A} \cdot \Delta\vec{x}$. Aplicando essa expressão para o circuito $ABCD$ da figura (4.2.a) e mantendo somente os termos de ordem menor ou igual a 1 em Δx_1 e em Δx_2 , podemos escrever que o transporte paralelo ao longo de $ABCD$ é dado por $I + igF_{12}\Delta x^1\Delta x^2$. Dessa forma vemos que se $F_{ij}^a = 0$ no ponto A , o transporte paralelo assume o mesmo valor ao longo dos trechos ABC e ADC . Analisando a figura (4.2.b), vemos que se γ está inteiramente localizada em uma região em que o tensor intensidade de campo é nulo, podemos realizar pequenas deformações em cada um dos pontos dessa curva sem que haja qualquer mudança no valor da sua holonomia. \square

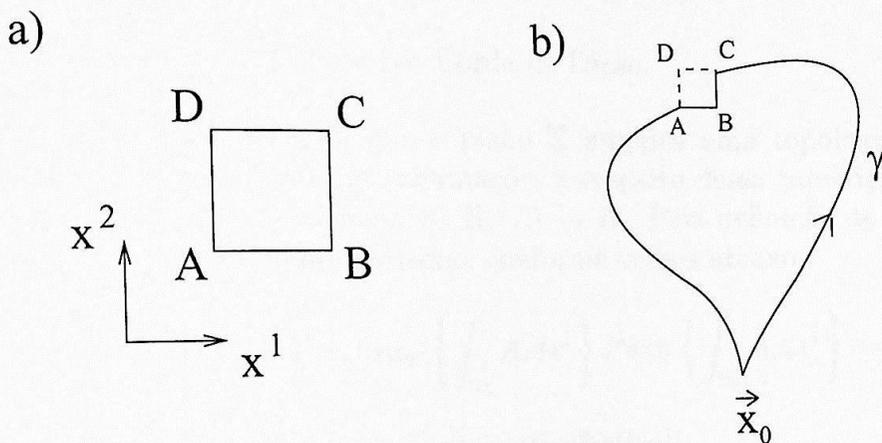


Figura 4.2: Circuito escolhido para o cálculo da holonomia.

Sempre que a holonomia ao longo de uma curva fechada for diferente da identidade diremos que estamos lidando com vórtices. Esses objetos assumem o papel anteriormente exercido pelos solenóides ideais. Por analogia ainda falaremos em fluxo de um vórtice, embora nesse caso estejamos lidando com elementos de um grupo não-abeliano.

Conforme podemos ver em [36], a massa dos vórtices é inversamente proporcional ao seu "raio", isto é, ao comprimento que determina a área ocupada por esses objetos no plano. Por essa razão, no regime de baixas energias podemos desprezar a extensão espacial dos vórtices, considerando-os como objetos pontuais. Esse argumento nos permitem estender o domínio de validade das equações de campo para todo o plano, com exceção de N pontos, nos quais o tensor intensidade de campo é diferente de zero. Além disso,

conforme vemos em [34]), podemos escolher um calibre espacial em que A_j é diferente de zero em todo o plano, com exceção de N linhas que saem nos N vórtices e dirigem-se ao infinito. Tais linhas são chamadas de cordas de Dirac. Veja a figura (4.3).

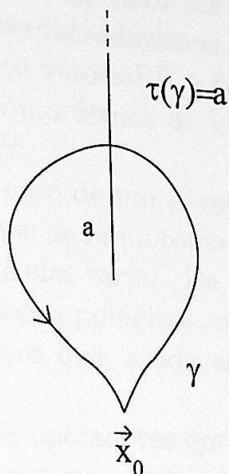


Figura 4.3: Corda de Dirac.

A presença de vórtices faz com que o plano Σ adquira uma topologia não-trivial, sendo que as holonomias carregam as informações a respeito dessa topologia. Para toda solução do tipo vórtice existe um mapa $\tau : \Pi_1(\Sigma) \rightarrow H$. Pela definição de ordenamento de caminhos esse mapa é um homomorfismo, conforme vemos abaixo:

$$\begin{aligned}
 P\exp \left\{ \int_{\gamma_1 \circ \gamma_2} A_i dx^i \right\} &= P\exp \left\{ \int_{\gamma_1} A_i dx^i \right\} P\exp \left\{ \int_{\gamma_2} A_i dx^i \right\} \implies \\
 \implies \tau([\gamma_1] \circ [\gamma_2]) &= \tau([\gamma_1])\tau([\gamma_2]).
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

Dizemos que cada um dos homomorfismos τ definidos acima é uma configuração de vórtice. O conjunto de todos os homomorfismos τ é o espaço de configurações do sistema de N vórtices. Esse espaço de configurações é isomorfo a H^N . Vejamos: seja γ_i uma curva fechada que circula uma única vez o i -ésimo vórtice. Dado um homomorfismo τ , calculamos o seu valor em cada uma das curvas γ_i , obtendo como resultado que $\tau(\gamma_i) = h_i \in H$. Como essas curvas estão definidas em um plano, elas não satisfazem nenhuma relação entre si, de modo que as holonomias dessas curvas também são independentes umas das outras. Por outro lado, dado um elemento arbitrário de H^N , podemos construir um homomorfismo que associa a o sua i -ésima componente h_i à curva γ_i , para todo $i \in \{1, \dots, N\}$. \square

4.2 Álgebra de observáveis de N vórtices ($\mathcal{A}^{(N)}$)

Vamos inicialmente estudar o caso mais simples, que consiste em um único vórtice no plano. O seu fluxo pode assumir qualquer valor em H . Obteremos agora a álgebra dos observáveis desse sistema. Para tanto introduzimos a chamada representação definidora de observáveis no conjunto dos endomorfismos de V e por um homomorfismo ρ_V da álgebra V será denotado por $|a\rangle$, com $a \in H$.

Vimos na seção anterior que no caso de um plano Σ com N vórtices, a holonomia de uma curva γ depende apenas da classe de homotopia $[\gamma]$. Os fluxos das partículas não são alterados se a distância relativa entre elas variar. De fato, não apenas os fluxos, mas todos os graus de liberdade dessa teoria são topológicos, ou seja, não dependem das distâncias relativas entre as partículas. Veremos que, ainda assim, os vórtices exibem um tipo de interação cuja origem é topológica.

Queremos definir uma álgebra de operadores que nos permita obter essas informações topológicas. Daqui em diante, apenas por simplicidade, todo elemento de $\text{End}(V)$ que for a imagem de algum observável da teoria em estudo pelo mapa ρ_V será chamado genericamente de operador.

Vamos inicialmente definir um operador Q_c , com $c \in H$, capaz de medir o valor do fluxo do vórtice, isto é, Q_c satisfaz a equação:

$$Q_c |a\rangle = \delta_{a,c} |a\rangle. \quad (4.15)$$

Aplicando a relação anterior duas vezes concluímos que:

$$Q_d Q_c = \delta_{c,d} Q_d. \quad (4.16)$$

Vemos assim que os operadores de fluxo são projetores, formando, portanto, um conjunto linearmente independente. Vamos tomar o conjunto $\{Q_c \mid c \in H\}$ como a base da álgebra dos operadores de fluxo, estendendo a equação (4.16) por linearidade. Um elemento qualquer dessa álgebra é dado por: $A = \sum_g \alpha(g) Q_g$, em que α é uma função de H em \mathbb{C} . Notemos que o espaço vetorial formado pelos operadores de fluxo é isomorfo ao espaço vetorial das funções de H em \mathbb{C} . Consideremos agora dois elementos arbitrários da álgebra dos operadores de fluxo, $A = \sum_g \alpha(g) Q_g$ e $B = \sum_h \beta(h) Q_h$, por exemplo, e tomemos o seu produto, denotado por $C = \sum_i \gamma(i) Q_i$. Aplicando a equação (4.16) temos:

$$\sum_i \gamma(i) Q_i = \sum_{g,h} \alpha(g) \beta(h) \delta_{g,h} Q_g = \sum_h \alpha(h) \beta(h) Q_h. \quad (4.17)$$

Como os operadores de fluxo são linearmente independentes, concluímos que $\gamma(h) = \alpha(h)\beta(h)$. Tomemos essa expressão como a definição do produto entre as funções de H

em \mathbb{C} . Temos então um isomorfismo entre a álgebra dos operadores de fluxo e a álgebra das funções de H em \mathbb{C} com produto ponto a ponto, denotada por $\mathcal{F}(H)$.

A álgebra de um vórtice não é composta apenas de operadores de fluxo. Podemos ainda realizar uma transformação de calibre global nos campos da teoria. Sob uma tal transformação os campos transformam-se da seguinte forma:

$$\Phi \rightarrow \Phi' = g\Phi \quad \text{e} \quad A_j \rightarrow A'_j = gA_jg^{-1}, \quad (4.18)$$

em que g é um elemento qualquer de H . Note que estamos denotando a ação de g nos campos através da simples justaposição, sem fazer menção explícita a nenhuma representação de H . Isso não deve causar estranhamento, pois conforme vimos na seção anterior, as holonomias, que tomam valores em H , atuam diretamente sobre o campo Φ . Como a transformação é global, tanto $\Phi(\vec{x}_0)$ quanto $\Phi(\vec{x}) = \tau(\gamma)\Phi(\vec{x}_0)$ transformam-se da mesma forma, o que nos leva a concluir que as holonomias transformam-se covariantemente, ou seja:

$$\tau(\gamma) \rightarrow g\tau(\gamma)g^{-1}. \quad (4.19)$$

Vemos assim que uma transformação global de calibre corresponde a uma conjugação dos fluxos. A conjugação de fluxos induz um endomorfismo na representação definidora, denotado por $\hat{\delta}_g$, com $g \in H$. A sua ação em V é dada por:

$$\hat{\delta}_g | a \rangle = | gag^{-1} \rangle. \quad (4.20)$$

Aplicando a relação anterior duas vezes, temos que:

$$\hat{\delta}_g \hat{\delta}_h = \hat{\delta}_{gh}. \quad (4.21)$$

A álgebra gerada pelos operadores de conjugação é isomorfa à álgebra das funções de H em \mathbb{C} com produto do tipo convolução, denotada por $\mathbb{C}(H)$. Para verificar essa afirmação, consideremos dois elementos arbitrários da álgebra gerada pelo conjunto $\{\hat{\delta}_g\}$, $A = \sum_g \alpha(g)\hat{\delta}_g$ e $B = \sum_h \beta(h)\hat{\delta}_h$, em que $\alpha(g)$ e $\beta(h)$ são funções de H em \mathbb{C} . O produto AB desses dois elementos é o elemento $C = \sum_i \gamma(i)\hat{\delta}_i$ da álgebra. Realizando o produto e aplicando (4.21) temos:

$$\sum_i \gamma(i)\hat{\delta}_i = \sum_{g,h} \alpha(g)\beta(h)\hat{\delta}_{gh} = \sum_{g,i} \alpha(g)\beta(g^{-1}i)\hat{\delta}_i = \sum_i \left(\sum_g \alpha(g)\beta(g^{-1}i) \right) \hat{\delta}_i. \quad (4.22)$$

Vemos assim que $\gamma_i = \sum_g \alpha(g)\beta(g^{-1}i)$. Tomando essa expressão como a definição de produto na álgebra de funções de H em \mathbb{C} , temos o isomorfismo entre a álgebra dos operadores de conjugação e $\mathbb{C}(H)$.

A conjugação de fluxos não comuta com a medida dos mesmos. De fato, aplicando as relações (4.16) e (4.21), temos:

$$\hat{\delta}_h Q_c \hat{\delta}_h^{-1} = Q_{hch^{-1}}. \quad (4.23)$$

A expressão acima informa que a álgebra $\mathbb{C}(H)$ atua na álgebra $\mathcal{F}(H)$, caracterizando operadores de fluxo e de conjugação, é conhecida como duplo quântico², sendo denotada por $D(H)$. Temos assim que:

$$A^{(1)} = D(H) = \mathbb{C}(H) \ltimes \mathcal{F}(H). \quad (4.24)$$

Tomemos como base para $D(H)$ os operadores $Q_c \hat{\delta}_g$, onde Q_c e $\hat{\delta}_g$ satisfazem as relações (4.16), (4.21) e (4.23). O duplo quântico é uma Álgebra de Hopf do tipo fita. O co-produto (Δ), a co-unidade (ϵ) e o antípoda (S) são definidos na base $\{Q_c \hat{\delta}_g\}$ e estendidos por linearidade. Abaixo listamos as definições relevantes:

$$\Delta(Q_c \hat{\delta}_g) \equiv \sum_h (Q_h \hat{\delta}_g) \otimes (Q_{h^{-1}c} \hat{\delta}_g), \quad (4.25)$$

$$\epsilon(Q_c \hat{\delta}_g) \equiv \delta_{c,e}, \quad (4.26)$$

$$S(Q_c \hat{\delta}_g) \equiv Q_{g^{-1}c^{-1}g} \hat{\delta}_{g^{-1}}, \quad (4.27)$$

$$R \equiv \sum_g Q_g \otimes \hat{\delta}_g \quad e \quad (4.28)$$

$$u = v \equiv \sum_g \hat{\delta}_{g^{-1}} Q_g, \quad (4.29)$$

em que e é a identidade em H . É um exercício de manipulação algébrica aplicar as relações (4.16), (4.21) e (4.23) para demonstrar que as definições acima listadas satisfazem todos os axiomas de uma álgebra de Hopf do tipo fita.

Agora que temos alguma familiaridade com a álgebra de 1 vórtice, devemos avançar no sentido de obter a álgebra para um número N qualquer de partículas. Vamos inicialmente tratar o caso em que $N = 2$. O caminho natural é tomar como espaço vetorial da representação definidora o produto tensorial entre duas cópias do espaço V da representação de 1 vórtice. O espaço de configurações é isomorfo a $H^2 \equiv H \times H$.

²Do inglês, "quantum double"

Podemos escrever diretamente alguns dos observáveis de $\mathcal{A}^{(2)}$, a saber, os elementos de $\mathcal{A}^{(1)} \otimes \mathcal{A}^{(1)}$. Imaginemos agora que o próprio plano Σ sofre um difeomorfismo tal que o resultado sobre os vórtices seja como mostrado na figura (4.4), onde vemos uma seqüência análoga ao “filme” do difeomorfismo.

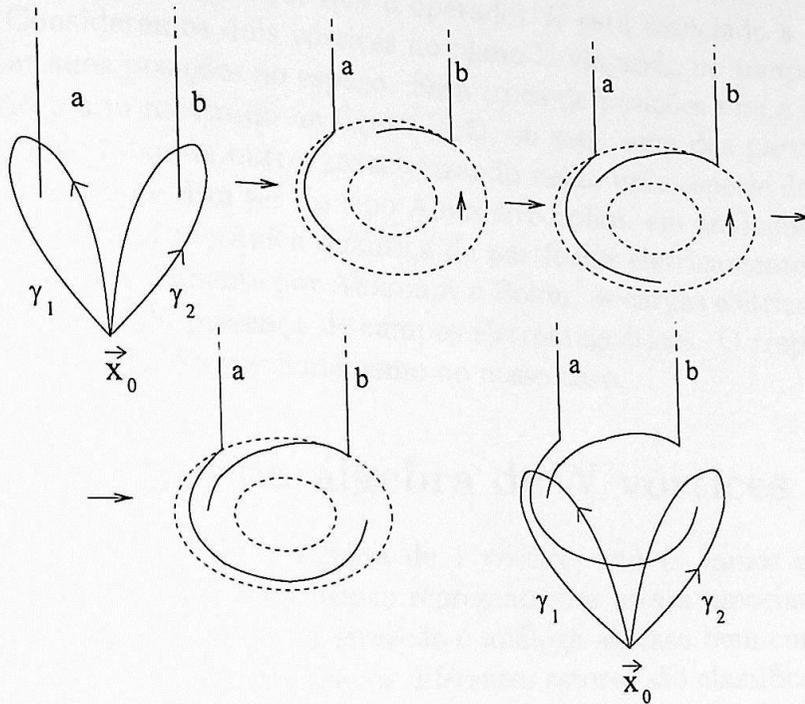


Figura 4.4: Difeomorfismo associado ao operador \mathcal{R} .

Após essa operação as curvas γ_1 e γ_2 medem novos fluxos: aba^{-1} para o vórtice situado à esquerda e a para o outro vórtice. Esse difeomorfismo induz um operador \mathcal{R} na representação definidora dado por:

$$\mathcal{R} | a \rangle \otimes | b \rangle = | aba^{-1} \rangle \otimes | a \rangle \Rightarrow \mathcal{R} = \sigma \circ R. \quad (4.30)$$

Temos agora a lista completa dos observáveis de um sistema de dois vórtices. Para o caso de três partículas, os observáveis são dados pela união de $\mathcal{A}^{(1)} \otimes \mathcal{A}^{(1)} \otimes \mathcal{A}^{(1)}$ com o conjunto:

$$\{id \otimes \mathcal{R}, \mathcal{R} \otimes id, (id \otimes \sigma) \circ (\mathcal{R} \otimes id) \circ (id \otimes \sigma)\}. \quad (4.31)$$

Observemos que o efeito do operador $\mathcal{R}_{1,3} \equiv (id \otimes \sigma) \circ (\mathcal{R} \otimes id) \circ (id \otimes \sigma)$ no vetor $| a \rangle | b \rangle | c \rangle \in V \otimes V \otimes V$ é dado por:

$$\mathcal{R}_{1,3} | a \rangle | b \rangle | c \rangle = | aca^{-1} \rangle | b \rangle | a \rangle \quad (4.32)$$

No caso geral de N vórtices, temos que $\mathcal{A}^{(N)}$ é formada pelos elementos de $\mathcal{A}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathcal{A}^{(1)}$ e também pelos operadores $\mathcal{R}_{i,j}$, análogos ao operador $\mathcal{R}_{1,3}$ definido acima, sendo que $\mathcal{R}_{i,j}$ são as representações associadas à i -ésima e à j -ésima partícula.

Fisicamente podemos considerar que o operador \mathcal{R} está associado a um processo de espalhamento. Consideremos dois vórtices no plano Σ viajando no tempo lentamente de modo a permutar suas posições no espaço. Essa troca de posições tem o mesmo efeito do difeomorfismo do plano mostrado na figura (4.4), ou seja, uma das partículas tem o seu fluxo conjugado pelo fluxo da outra, caracterizando assim uma espécie de interação entre vórtices. Essa interação é dita ser do tipo Aharonov-Bohm, em analogia com o efeito de mesmo nome presente na mecânica quântica de partículas eletricamente carregadas. No exemplo estudado pioneiramente por Aharonov e Bohm, as cargas elétricas interagem sem que haja a necessidade da presença de campos eletromagnéticos. O responsável por essa interação é a conexão A_μ , exatamente como no nosso caso.

4.3 Quantização da álgebra de N vórtices

Vamos inicialmente quantizar a álgebra de 1 vórtice, isto é, vamos obter suas representações irredutíveis. Cada uma dessas representações estará associada a um possível setor de uma partícula da teoria. A situação é análoga ao caso bem conhecido da teoria quântica do momento angular, em que os diferentes setores são classificados pelo número quântico azimutal. As representações irredutíveis do duplo quântico podem ser encontradas em [33] e [37]. Seguindo a abordagem contida nessas referências, vamos introduzir algumas notações e definições, terminando por enunciar um teorema que nos fornece as representações procuradas.

Lembremos que a álgebra de 1 vórtice é isomorfa à álgebra $\mathbb{C}(H) \rtimes \mathcal{F}(H)$. Enquanto espaço vetorial, $\mathcal{A}^{(1)}$ coincide com $\mathcal{F}(H) \otimes \mathbb{C}(H)$. Vimos anteriormente que a álgebra $\mathcal{F}(H)$ pode ser identificada com a álgebra de funções de H em \mathbb{C} com produto pontual. Tomaremos como base dessa álgebra o conjunto das funções características com suporte em algum elemento de H , e denotaremos o elemento genérico desse conjunto pelo símbolo Q_c , com $c \in H$. Quanto à álgebra $\mathbb{C}(H)$, sabemos que é isomorfa à álgebra dos operadores de conjugação de fluxo, que por sua vez, de acordo com a extensão linear da equação (4.21), pode ser obtida se tomarmos o grupo multiplicativo H e assumirmos que seus elementos formam um espaço vetorial e que a estrutura linear é compatível com a estrutura de grupo multiplicativo no seguinte sentido:

$$f(g+h) = fg + fh, \quad (f+g)h = fh + gh, \quad \text{e} \quad \lambda(gh) = (\lambda g)h = g(\lambda h), \quad (4.33)$$

com $f, g, h \in H$ e $\lambda \in \mathbb{C}$. Tomaremos como base dessa álgebra os próprios elementos de H , de forma que o elemento genérico dessa base será denotado por g , com $g \in H$. Um elemento qualquer da base de $\mathcal{A}^{(1)}$ será escrito como $Q_c g$. O produto nessa álgebra é dado na sua base por:

$$Q_c g Q_d h = Q_c Q_{gdg^{-1}} gh. \quad (4.34)$$

Dado um elemento $h \in H$, definimos o grupo de estabilidade com relação a h , denotado por K_h , como sendo o conjunto:

$$K_h = \{g \in H \mid ghg^{-1} = h\}. \quad (4.35)$$

O grupo K_h induz uma relação de equivalência em H da seguinte forma: se h_1 e h_2 são elementos de H , dizemos que $h_1 \sim h_2$ se $h_1^{-1}h_2 \in K_h$. Seja $\xi_i \in H$ o elemento representativo da i -ésima classe de equivalência, com $\xi_1 = e$. O grupo H pode ser escrito então da seguinte forma:

$$H = \xi_1 K_h \cup \xi_2 K_h \cup \dots \cup \xi_n K_h. \quad (4.36)$$

Observemos agora que a álgebra $\mathcal{F}(H)$ pode ser vista como um espaço vetorial de uma representação de si própria, caso em que a ação das funções é dada pelo próprio produto pontual. Além disso, de acordo com (4.34) podemos dizer que o grupo H atua em $\mathcal{F}(H)$ através de:

$$g Q_c \equiv Q_{ghg^{-1}}. \quad (4.37)$$

Temos assim que $\mathcal{F}(H)$ cumpre três papéis diferentes, a saber, o de álgebra, o de espaço vetorial de uma representação de si mesma (enquanto álgebra) e o de espaço vetorial de uma representação de H . Uma situação análoga ocorre no caso da álgebra $\mathbb{C}(H)$, que pode ser vista também como o espaço vetorial de uma representação de H , sendo que nesse caso a ação é dada pelo produto entre elementos de H . Por essa razão, é conveniente introduzir uma notação que torne clara essa diferença de papéis. Manteremos a notação original para elementos de $\mathcal{F}(H)$ e $\mathbb{C}(H)$ enquanto álgebras. No seu papel passivo, isto é, enquanto espaço vetorial de alguma representação, os elementos da base de $\mathcal{F}(H)$ serão denotados por $|a\rangle$, com $a \in H$. No caso de $\mathbb{C}(H)$ teremos uma notação semelhante, conforme vemos no enunciado do teorema a seguir:

3.32-Teorema: Seja $\{|j\rangle_\rho\}$, com $j \in \{1, \dots, m\}$, uma base de um sub-espaço de $\mathbb{C}(H)$ que é ao mesmo tempo uma representação irredutível (indexada pelo símbolo ρ) de K_h , com h fixo. Seja $\{\xi_i\}$, com $i \in \{1, \dots, n\}$, um conjunto de elementos representativos dos elementos de H/K_h , assim como em (4.36).

Então, os vetores dados por:

$$\xi_i | a \rangle \otimes | j \rangle_\rho \equiv | \xi_i a \xi_i^{-1} \rangle \otimes | j \rangle_\rho \quad (4.38)$$

formam uma base para uma representação irredutível de $\mathcal{A}^{(1)}$, através da ação definida abaixo:

$$Q_c g | \xi_i a \xi_i^{-1} \rangle \otimes | j \rangle_\rho \equiv \delta_{c, \xi_{i'} a \xi_{i'}^{-1}} | \xi_{i'} a \xi_{i'}^{-1} \rangle \otimes \sum_{k=1}^m \Gamma_{jk}^{(\rho)}(\beta) | k \rangle_\rho, \quad (4.39)$$

em que $g \xi_i = \xi_{i'} \beta$, $\beta \in K_h$ e $\Gamma^{(\rho)}$ é a matriz para a representação ρ .

Notemos que $g \xi_i$ pertence a alguma das classes de equivalência de (4.36), a qual resolvemos identificar pelo índice i' . Podemos sempre escrever esse elemento como o produto entre o elemento representativo da sua classe, ou seja, $\xi_{i'}$ e um elemento do grupo de estabilidade de h , que, por sua vez, está então totalmente determinado. Observemos que $\xi_{i'}$ atua somente em $| a \rangle$, enquanto que β atua somente em $| j \rangle_\rho$.

Vamos agora escrever os vetores das representações irredutíveis de $\mathcal{A}^{(1)}$ usando uma notação mais compacta. Observemos inicialmente que para a fixo, a ação de H em $| a \rangle$ gera uma órbita em H . A órbita contendo a , também chamada de classe de conjugação de a , será denotada por $[a]$. Uma representação irredutível r de $\mathcal{A}^{(1)}$ é caracterizada pelo par $([a], \rho)$. Dado uma representação $r = ([a], \rho)$ e um elemento fixo da órbita $[a]$ (o próprio a , digamos), um elemento da base dessa representação necessita ainda de dois índices para estar totalmente determinado, conforme vemos abaixo:

$$| i, j \rangle_r \equiv \xi_i | a \rangle \otimes | j \rangle_\rho. \quad (4.40)$$

A ação (4.39) assume nesse caso a forma:

$$Q_c | i, j \rangle_r = \delta_{c, \xi_i a \xi_i^{-1}} | i, j \rangle_r \quad (4.41)$$

e

$$g | i, j \rangle_r = g \xi_i | a \rangle \otimes | j \rangle_\rho = \xi_{i'} | a \rangle \otimes \beta | j \rangle_\rho = \sum_{k=1}^m \Gamma_{kj}^{(\rho)} | i', k \rangle_r. \quad (4.42)$$

Como todas as representações r têm dimensão finita, podemos introduzir em cada uma delas uma estrutura de espaço de Hilbert através do produto escalar dado por:

$${}_r \langle i', j' | i, j \rangle_r = \delta_{i, i'} \delta_{j, j'}. \quad (4.43)$$

No caso de um sistema formado por dois vórtices carregando as representações r_1 e r_2 , o espaço vetorial das representações irreduzíveis é dado por: $\mathcal{H}_{r_1, r_2} = \mathcal{H}_{r_1} \otimes \mathcal{H}_{r_2}$. Os operadores da álgebra de dois vórtices pertencentes ao sub-conjunto $\mathcal{A}^{(1)} \otimes \mathcal{A}^{(1)}$ agem em $\mathcal{H}^{(12)}$ de acordo com o produto de duas representações quaisquer de uma álgebra, enquanto que o operador \mathcal{R} age de acordo com:

$$\mathcal{R} |i, j\rangle_{r_1} \otimes |k, l\rangle_{r_2} = \sum_h \hat{\delta}_h |k, l\rangle_{r_2} \otimes Q_h |i, j\rangle_{r_1}, \quad (4.44)$$

em concordância com a definição de \mathcal{R} .

Podemos agora generalizar essa discussão para o caso de N vórtices. Suponhamos que cada um dos vórtices carregue uma representação r_i , com $i \in \{1, \dots, N\}$. Nesse caso o espaço vetorial da representação do sistema como um todo é o produto tensorial $\mathcal{H}_{r_1, \dots, r_N} = \mathcal{H}_{r_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{r_N}$. Os operadores correspondentes são ou elementos de $\mathcal{A}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathcal{A}^{(1)}$ ou operadores do tipo mostrado na expressão (4.31).

4.4 Regras de fusão e mudança de topologia

Conforme vimos anteriormente, os graus de liberdade da teoria de campos descrita pela Lagrangiana (4.1) no regime de baixas energias são puramente topológicos. Para fixar idéias, consideremos o caso de um sistema formado por dois vórtices. As holonomias não dependem das distâncias relativas entre os vórtices. Na realidade, podemos sempre aplicar uma mudança de escala sem alterar o valor dos observáveis da teoria. Isso se deve ao fato de que em baixas energias os vórtices são pontuais.

No caso em que os vórtices possuem um extensão espacial, podemos dizer que existe uma distância de aproximação a partir da qual a descrição em termos da álgebra total $\mathcal{A}^{(2)}$ não é mais válida. A partir dessa distância o observador não tem mais acesso às informações individuais de cada partícula. Essa situação corresponde a uma superposição entre os perfis dos dois vórtices. Como nossa teoria não tem essa característica, introduziremos uma escala de distâncias arbitrária. A partir dessa distância de aproximação entre as partículas consideraremos que o sistema é descrito por uma sub-álgebra de $\mathcal{A}^{(2)}$. Os operadores de fluxo dessa sub-álgebra medem somente o fluxo total do sistema de dois vórtices. Além disso, dada uma transformação global de calibre, o fluxo total do sistema transforma-se como o fluxo de uma partícula. O operador que mede o fluxo total é dado por :

$$Q_c^{(2)} = \sum_h Q_h \otimes Q_{h^{-1}c}, \quad (4.45)$$

enquanto que o operador que implementa uma transformação global de calibre no sistema de dois vórtices é dado por:

$$\hat{\delta}_g^{(2)} = \hat{\delta}_g \otimes \hat{\delta}_g. \quad (4.46)$$

É bom ressaltar que essa sub-álgebra não acomoda mais o operador \mathcal{R} , pois nesse grau de aproximação das partículas não há sentido na afirmação de que as mesmas trocadas (distâncias), é um subconjunto de $\mathcal{A}^{(1)} \otimes \mathcal{A}^{(1)}$. Além disso, pode-se verificar que as associações $Q_c \mapsto Q_c^{(2)}$ e $\hat{\delta}_g \mapsto \hat{\delta}_g^{(2)}$, dadas por (4.45) e (4.46), definem um homomorfismo entre $\mathcal{A}^{(1)}$ e $\mathcal{A}_L^{(2)}$. Conforme vimos na seção (4.2), a álgebra de um vórtice é isomorfa ao duplo quântico $D(H)$, de modo que as equações (4.45) e (4.46) são de fato idênticas à definição do co-produto dada na equação (4.25), ou seja:

$$Q_c^{(2)} = \Delta(Q_c) \quad \text{e} \quad \hat{\delta}_g^{(2)} = \Delta(\hat{\delta}_g). \quad (4.47)$$

Como $\mathcal{A}_L^{(2)}$ é homomorfa a $\mathcal{A}^{(1)}$, os operadores $Q_c^{(2)}$ e $\hat{\delta}_g^{(2)}$ satisfazem relações análogas a (4.16), (4.21) e (4.23).

Sejam agora \mathcal{H}_r e $\mathcal{H}_{r'}$ os espaços de Hilbert de duas representações irredutíveis de $\mathcal{A}^{(2)}$. Como consequência de a álgebra de longas distâncias ser uma sub-álgebra de $\mathcal{A}^{(2)}$, o espaço produto $\mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_{r'}$ é em geral escrito como a soma direta mostrada abaixo:

$$\mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_{r'} = \bigoplus_{\eta} N_{\eta}^{r,r'} V_{\eta}, \quad (4.48)$$

em que V_{η} é o espaço vetorial de uma representação irredutível de $\mathcal{A}_L^{(2)}$ e o número inteiro positivo $N_{\eta}^{r,r'}$, conhecido como número de Clebch-Gordon, é a multiplicidade de V_{η} na decomposição (4.48).

Dizemos que cada uma das representações V_{η} é um possível setor para o qual o sistema de dois vórtices pode decair quando as partículas estão suficientemente próximas. Esses setores são independentes entre si, cada um deles sendo caracterizado por seu próprio número quântico, a saber, o índice de representação η . Em particular podemos querer determinar a probabilidade de um sistema de dois vórtices decair para um dos estados de vácuo da teoria. Para entender melhor essa questão devemos especificar o que queremos dizer por estado de vácuo.

Um estado de vácuo é um vetor que satisfaz as seguintes condições:

$$Q_c | 0 \rangle = \delta_{c,e} | 0 \rangle, \quad (4.49)$$

$$\hat{\delta}_g | 0 \rangle = | 0 \rangle. \quad (4.50)$$

A equação (4.49) significa que o fluxo de $| 0 \rangle$ é o elemento identidade de H . Como consequência da equação (4.50), podemos dizer que a carga do vácuo é trivial, em analogia

com o eletromagnetismo clássico, embora no caso de um vórtice na representação $([a], \rho)$, por exemplo, as cargas possíveis sejam as representações ρ do grupo de estabilidade de a . A probabilidade de um estado inicial $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_{r'}$ decair para o estado de vácuo é nula no caso em que $N_0^{r,r'} = 0$. Se $N_0^{r,r'} \neq 0$, essa probabilidade é dada por:

$$P_\psi(0) = |\langle 0 | \psi \rangle|^2. \quad (4.51)$$

No caso de um sistema de N vórtices, cada um deles carregando uma representação r_i , o espaço vetorial da representação do sistema como um todo será $\mathcal{H}_{r_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{r_N}$, sendo que em geral esse espaço pode ser decomposto como uma soma direta do mesmo tipo mostrado na equação (4.48). Por sua vez, a álgebra de longa distância $\mathcal{A}_L^{(N)} \subset \mathcal{A}^{(N)}$ é obtida através da aplicação iterativa do co-produto (lembramos que $\mathcal{A}_L^{(2)}$ foi obtida mediante uma única aplicação de Δ). Temos (simbolicamente), por exemplo, que: $\mathcal{A}^{(3)} = (Id \otimes \Delta) \otimes \Delta(\mathcal{A}^{(1)})$.

Estamos agora de posse do mecanismo que possibilita a mudança de topologia do plano Σ com N vórtices. A lista dos diferentes setores da decomposição (4.48), bem como de suas respectivas multiplicidades constitui o que chamamos de regras de fusão. Essas regras nos dizem, por exemplo, em que circunstâncias um sistema de dois vórtices pode decair para um estado de vácuo. Em analogia ao que ocorre na teoria quântica de campos, falaremos nesse caso em aniquilação de um vórtice e um anti-vórtice.

Se \mathcal{H}_r é o espaço de Hilbert de um determinado setor de 1 partícula, queremos determinar o espaço de Hilbert associado à anti-partícula, cuja representação será denotada por \bar{r} . Podemos resolver esse problema impondo que a representação trivial esteja presente na decomposição (4.48) e calculando a multiplicidade $N_0^{r,r'}$. O resultado desse cálculo, que pode ser encontrado em [37], está mostrado na equação abaixo:

$$N_0^{r,r'} = \delta_{[a^{-1}], [a']} \delta_{\rho^*, \rho'}, \quad (4.52)$$

em que ρ^* é a representação dual de ρ , definida nas equações (3.8) e (3.22). Da equação (4.52) vemos que a representação do anti-vórtice \bar{r} é dada por:

$$\bar{r} = ([a^{-1}], \rho^*). \quad (4.53)$$

A equação (4.53) indica que a representação \bar{r} está ligada ao conceito de representação dual. De fato, consideremos uma representação $r = ([c], \rho)$ cujo espaço vetorial é V . Seja f um elemento qualquer de V^* , $\{e_i\}$ uma base de V e $\{e^i\}$ a base de V^* tal que $e^i(e_j) \equiv \delta_{i,j}$. Tomando a equação (3.8) com $b_V : \mathbb{C} \rightarrow V \otimes V^*$ dado por $b_V(1) = \sum_i e_i \otimes e^i$ e $d : V^* \otimes V \rightarrow \mathbb{C}$ dado por $d_V(f \otimes v) = f(v)$, temos que:

$$\begin{aligned}
\rho_{V^*}(a)(f) &= \rho_V(S(a))^*(f) = \\
(d_V \otimes id_{V^*}) \circ (id_{V^*} \otimes \rho_V(S(a)) \otimes id_{V^*}) \circ (id_{V^*} \otimes b_V)(f) &= \\
(d_V \otimes id_{V^*}) \circ (id_{V^*} \otimes \rho_V(S(a)) \otimes id_{V^*})(f \otimes \sum_i e_i \otimes e^i) &= \\
(d_V \otimes id_{V^*})(\sum_i f \otimes \rho_V(S(a))e_i \otimes e^i) &= \\
= \sum_i f(\rho_V(S(a))e_i)e^i, &
\end{aligned} \tag{4.54}$$

ou utilizando uma notação mais simples,

$$af = \sum_i f(S(a)e_i)e^i. \tag{4.55}$$

Aplicando esse funcional a um elemento e_k qualquer da base de V , obtemos:

$$(af)(e_k) = \sum_i f(S(a)e_i)e^i(e_k) = f(S(a)e_k). \tag{4.56}$$

A expressão acima nos permite calcular o funcional af em um elemento qualquer de V . Tomemos $a = \tilde{Q} \equiv \sum_{h \in [c^{-1}]} Q_h$. Esse operador é o projetor na classe de conjugação de c^{-1} . Aplicando (4.56) verifica-se que:

$$\tilde{Q}_{c^{-1}}(f)(v) = f(v) \Rightarrow \tilde{Q}_{c^{-1}}(f) = f. \tag{4.57}$$

Vemos assim que os fluxos dos elementos de V^* pertencem à classe de conjugação $[c^{-1}]$.

Outro fato que podemos verificar é que dada uma representação (V, ρ_V) e a sua representação dual (V^*, ρ_{V^*}) , se definirmos o mapa $\mathcal{P} : V^* \otimes V \rightarrow \mathbb{C}$, dado por $\mathcal{P}(f \otimes v) = f(v)$ e aplicarmos as equações (3.16) e (4.56) podemos mostrar que:

$$\mathcal{P} \circ \Delta(a)(f \otimes v) = \epsilon(a)\mathcal{P}(f \otimes v). \tag{4.58}$$

De fato, temos que:

$$\mathcal{P} \circ \Delta(Q_c)(f \otimes v) = \sum_h f(S(Q_h)Q_{h^{-1}c}v) = f(m \circ (S \otimes id) \circ \Delta(Q_c)v) = \tag{4.59}$$

$$\begin{aligned}
& f(\epsilon(Q_c)v) = \epsilon(Q_c)\mathcal{P}(f \otimes v) \quad \text{e} \\
\mathcal{P} \circ \Delta(g)(f \otimes v) &= f(S(g)gv) = f(m \circ (S \otimes id) \circ \Delta(g)v) \\
&= f(\epsilon(g)v) = \epsilon(g)\mathcal{P}(f \otimes v)
\end{aligned} \tag{4.60}$$

Vemos assim que \mathcal{P} é um operador linear que comuta com a ação da álgebra $\mathcal{A}^{(1)}$. Se analisarmos mais detalhadamente a estrutura das equações (4.52), (4.53), (4.57) e (4.58), seremos levados a concluir que \mathcal{P} é uma espécie de filtro que nos permite obter a representação trivial em meio a outras informações contidas no produto $V^* \otimes V$. Acreditamos ser correto afirmar que esse mapa está diretamente associado a um projetor na representação trivial. O processo de aproximação das duas partículas está relacionado com várias possíveis ocorrências, de acordo com a equação (4.48), mas se estivermos interessados apenas nas informações relativas ao vácuo, devemos recorrer ao operador \mathcal{P} .

Assim como consideramos a existência de um processo de aniquilação, vamos assumir que a teoria também aceita um processo de criação de pares (um vórtice e um anti-vórtice).

Antes de obtermos explicitamente o operador associado à criação de partículas, vamos introduzir uma maneira gráfica de representar os processos de espalhamento, criação e aniquilação. As figuras (4.5.a) e (4.5.b) representam o espalhamento de dois vórtices. Uma imagem semi-clássica pode auxiliar na compreensão da figura: consideremos que as partículas estão descrevendo uma trajetória no plano Σ de modo a permutar suas posições. Suponhamos que esse processo ocorre adiabaticamente e que dura um certo intervalo de tempo.

Os diferentes planos horizontais cortando a figura podem ser pensados como fotografias instantâneas do sistema. As figuras (4.5.a) e (4.5.b) seriam, portanto, análogas a um filme que registra o espalhamento. A passagem do tempo corresponde a percorrer as diferentes seções retas determinadas pelos planos horizontais desde o plano inferior até o plano superior. As linhas cruzadas indicam a troca de posições. É importante notar que a troca de posições pode ocorrer de duas formas inequivalentes, uma correspondendo a uma rotação anti-horária do sistema, representada na figura (4.5.a) e a outra correspondendo a uma rotação horária, representada na figura (4.5.b). Para compreender a origem dessa inequivalência é suficiente lembrar a figura (4.4), onde se vê que a disposição das cordas de Dirac determina a ação do operador de espalhamento. A orientação das setas é importante, pois diferencia vórtices (setas orientadas para baixo) e anti-vórtices (setas orientadas para cima).

Com o auxílio dessa imagem, vamos agora abstrair o argumento e considerar simplesmente que as linhas cruzadas indicam a troca de posições em um espalhamento, que as diferentes orientações das setas têm a função de distinguir vórtices de anti-vórtices e que as figuras (4.5.a) e (4.5.b) correspondem às duas possibilidades inequivalentes de ocorrência do espalhamento.

Os processos de criação e aniquilação serão associados às figuras (4.5.c) e (4.5.d). A interpretação dada a essas figuras é similar ao caso das figuras (4.5.a) e (4.5.b).

Para obter o operador associado à criação de pares vamos considerar o processo mostrado na figura (4.6.a), cuja interpretação é a seguinte: um anti-vórtice carregando a representação r viaja isoladamente no plano Σ , até que em um dado momento uma flu-

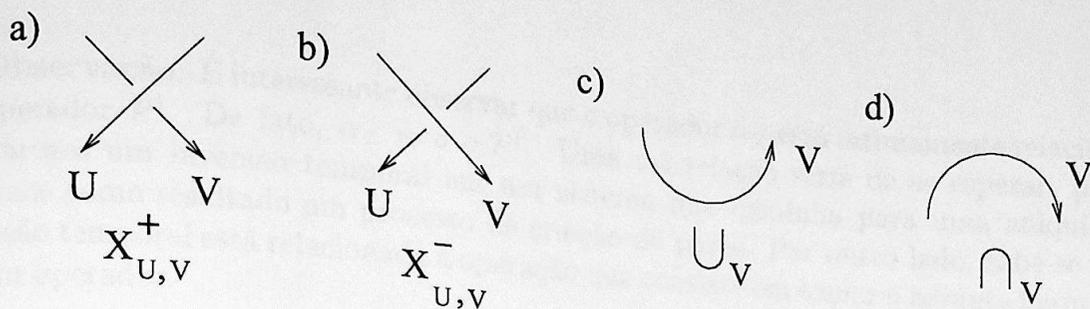


Figura 4.5: Diagramas associados aos operadores \mathcal{R} , \mathcal{P} e α_V .

tuação do vácuo dá origem a um vórtice e a um anti-vórtice. O vórtice surgido a partir do vácuo aproxima-se então do anti-vórtice r , de forma que a distância entre as duas partículas torna-se pequena o suficiente para que ocorra uma aniquilação de pares. Como resultado final temos a propagação de um anti-vórtice carregando a representação r , que vem a ser precisamente a anti-partícula do vórtice aniquilado durante o processo. A figura (4.6.b) mostra o mesmo processo, sendo que agora a região contida no retângulo tracejado sofreu uma redução de escala. Se essa região for cada vez mais comprimida, chegaremos a uma situação em que o observador não tem mais acesso à estrutura do diagrama dentro da região pontilhada, ou seja, estaremos entrando no regime descrito pela álgebra de longas distâncias. Essa situação é sugerida na figura (4.6.c). Nessas circunstâncias o processo efetivamente observado é a propagação de uma única anti-partícula carregando a representação r , conforme vemos na figura (4.6.d). Temos então que o operador associado à figura (4.6.a) é igual ao operador associado à figura (4.6.d).

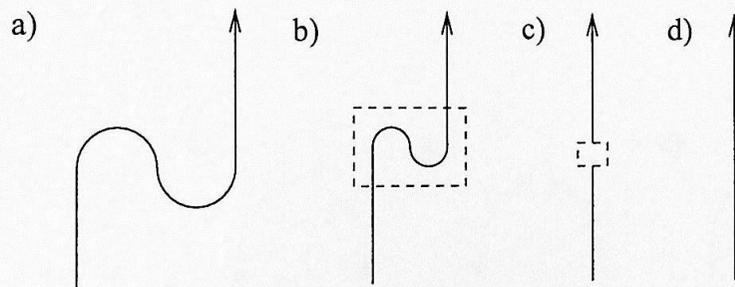


Figura 4.6: Diagrama de um processo envolvendo criação e aniquilação de pares.

Denotemos o operador de criação pelo símbolo α_V . Escrevendo α_V na base $\{e_i \otimes e^i\}$, isto é, fazendo $\alpha_V = \sum_{i,j} \alpha_{i,j} e_i \otimes e^j$ e aplicando os argumentos associados à figura (4.6), encontramos que $\alpha_{i,j} = \delta_{i,j}$, de forma que:

$$\alpha_V = \sum_i e_i \otimes e^i. \quad (4.61)$$

Observação: É interessante observar que o operador α_V está intimamente relacionado ao operador \mathcal{P}^\dagger . De fato, $\alpha_V = \sigma \circ \mathcal{P}^\dagger$. Uma tal relação seria de se esperar, pois se aplicarmos um inversão temporal em um sistema que caminha para uma aniquilação, obtemos como resultado um processo de criação de pares. Por outro lado, sabe-se que a inversão temporal está relacionada à operação que consiste em tomar o adjunto hermitiano de um operador.

Notemos que na construção do mapa \mathcal{P} está implícita uma convenção, pois esse operador está associado à aniquilação de um vórtice situado à direita e de um anti-vórtice situado à esquerda do observador. No caso em que um vórtice e um anti-vórtice aproximam-se um do outro de forma que o vórtice está situado à esquerda do observador, teremos igualmente uma aniquilação. A fim de determinar o operador associado a esse processo, o qual será denotado por β , consideremos a figura (4.7.a). Não há dificuldade em associar um mapa ao diagrama dessa figura, pois temos um espalhamento de um vórtice e um anti-vórtice seguido de uma aniquilação do tipo já estudado.

A linha de raciocínio aplicada a esse exemplo é a mesma que utilizamos para construir o operador de criação α_V . A figura (4.7.b) representa a mesma situação da figura (4.7.a), sendo que agora a região contida no retângulo pontilhado teve a sua escala reduzida. Essa redução de escala nos permitirá em algum momento entrar na região descrita pela álgebra $\mathcal{A}_L^{(2)}$. Essa situação é sugerida na figura (4.7.c). Nessas circunstâncias o processo efetivamente observado é a aniquilação mostrada na figura (4.7.d), de forma que o operador associado a esse último diagrama é igual ao operador associado à figura (4.7.a).

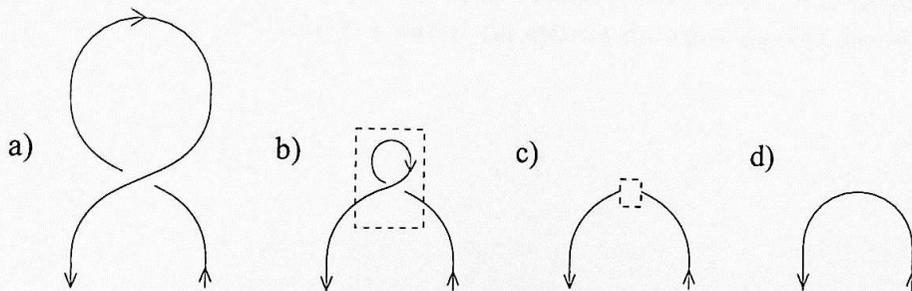


Figura 4.7: Comportamento do vácuo sob permutações de partículas.

O resultado obtido para β é:

$$\beta(v \otimes f) = f\left(\sum_h Q_h \hat{\delta}_h v\right) \quad (4.62)$$

Aplicando esse mesmo raciocínio podemos construir o operador associado à criação de um anti-vórtice situado à esquerda e um vórtice situado à direita do observador.

Os operadores \mathcal{P} e α_V , juntamente com o operador de espalhamento \mathcal{R} estudado na seção (4.2), nos permitirão realizar a conexão entre a álgebra de N vórtices e a teoria dos nós. Para indicar que o operador de espalhamento age no produto genérico $V \otimes W$, escreveremos: $\mathcal{R}_{V,W} \equiv (\rho_V \otimes \rho_W)\mathcal{R}$.

Reunindo os argumentos que nos permitiram construir os operadores $\mathcal{R}_{V,W}$, α_V e \mathcal{P} e os diagramas $X_{V,W}^+$, \cup_V e \cap_V , podemos afirmar que estão definidas as seguintes associações:

$$X_{V,W}^+ \mapsto \mathcal{R}_{V,W}, \quad \cup_V \mapsto \alpha_V \quad \text{e} \quad \cap_V \mapsto \mathcal{P}. \quad (4.63)$$

Pela análise da figura (4.5.b) vemos que o operador associado ao diagrama $X_{V,W}^-$ é $\mathcal{R}_{W,V}^{-1}$, pois o processo correspondente é interpretado como sendo o inverso do processo associado ao diagrama $X_{W,V}^+$. Na visão semi-clássica isso corresponderia a realizar uma rotação no sentido anti-horário seguida de uma rotação no sentido horário.

No caso dos diagramas que diferem de $X_{V,W}^+$ e $X_{V,W}^-$ por mudanças de orientação, os operadores correspondentes são obtidos a partir de $\mathcal{R}_{V,W}$ e $\mathcal{R}_{W,V}^{-1}$, desde que consideremos a definição (3.28) de representação dual sempre que o sentido de uma das setas mudar, indicando tratar-se de V^* , em vez de V .

Através de cálculo direto podemos mostrar que os operadores associados aos diagramas da figura (4.5) satisfazem todas as relações da figura (3.9.b), no que são acompanhados pelos próprios diagramas. Se repetirmos agora os mesmos argumentos dos dois últimos parágrafos do terceiro capítulo, veremos que acabamos de obter um invariante de nó semelhante ao invariante de Turaev a partir do estudo de uma álgebra de N vórtices.

Conclusão

Nesse trabalho verificamos que o estudo da estatística de polímeros pode ser formulado em termos do seguinte problema protótipo: qual a distribuição de probabilidade de uma cadeia gerada aleatoriamente ser um nó com um dado invariante? Com o objetivo de lidar com essa questão, estudamos o problema da obtenção de invariantes de nó, que consistiu em uma parte substancial desse trabalho. Além do exemplo fornecido pelo polinômio de Jones, estudamos com um bom nível de detalhamento o funtor de Turaev. Vimos que a relação existentes entre a categoria das representações de uma álgebra de Hopf do tipo fita (Rep_A) e a categoria dos emaranhados coloridos por elementos de Rep_A possibilita a obtenção de invariantes numéricos. A escolha de um álgebra de Hopf particular fornece exemplos específicos, conforme pode-se ver na referência [25].

Nosso ponto de vista é que podemos dar uma interpretação física aos invariantes do tipo Turaev. Analisando um sistema de N vórtices topológicos fomos capazes de obter um invariante de nó cuja estrutura é similar ao do invariante de Turaev, de forma que acreditamos ter dado um passo à frente no sentido da sua interpretação física. Acreditamos que a metodologia apresentada no último capítulo dessa dissertação pode ser generalizada para outras situações, nas quais temos um sistema de objetos topológicos descrito por uma teoria quântica. Podemos tentar extrair informações topológicas desses sistemas a partir da estrutura quântica das álgebras dos observáveis da teoria em estudo. Consideramos que uma possível vantagem dessa abordagem consiste em que podemos utilizar a linguagem da física para estudar problemas matemáticos de grande complexidade técnica.

Uma das possíveis continuações desse trabalho consistiria no prosseguimento do processo de quantização, no sentido de levar em conta as amplitudes de probabilidade associadas a todos os diagramas imagináveis envolvendo espalhamento, criação e aniquilação de vórtices. Acreditamos que esse procedimento daria origem a um objeto análogo ao funcional gerador da teoria quântica de campos, que conteria todas as informações topológicas associadas ao invariante de nó em estudo. Em posse desse objeto poderíamos tentar calcular a distribuição de probabilidade na qual estamos interessados. Esse plano de pesquisa mostrou-se, no entanto, de uma complexidade que tornou impossível a sua completa execução durante o período correspondente ao mestrado.

Referências Bibliográficas

- [1] Delbruck M., *Knotting Problems in Biology*, Proc. Symp. Pure Appl. Math. **14** (1962).
- [2] McKenzie D.S., *Polymers and Scaling*, Phys. Rep. **27**, 2, 35-88 (1976).
- [3] Edwards S.F. , Proc. Phys. Soc. **91**, 513-519 (1976).
- [4] Grosberg A.Yu e Khokhlov A.R., *Statistical Physics of Macromolecules*, American Institute of Physics (1994).
- [5] de Gennes P.G., *Scaling Concepts in Polymer Physics*, Cornell University Press (1991).
- [6] Madras N. e Slade G., *The Self-Avoiding Walk*, Birkhäuser (1996).
- [7] Kleinert H., *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistical and Polymer Physics*, World Scientific (1990).
- [8] Wiegell F., *Introduction to Path-Integrals Methods in Physics and Polymer Science*, World Scientific (1985).
- [9] Feynman R.F., *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Book Company (1965).
- [10] Schulman L.S., *Techniques and Applications of Path Integral*, Wiley-Interscience Publication (1981).
- [11] Simon B. e Reed M., *Functional Analysis*, Academic Press (1980).
- [12] Butkov E., *Física matemática*, Guanabara Koogan (1988).
- [13] Watson G.N., *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Cambridge university press (1966).

- [14] Shutz B., *Geometrical Methods of Mathematical Physics*, Cambridge University Press (1980).
- [15] Nash C. e Sen S., *Topology and Geometry for Physicists*, Academic Press (1983).
- [16] Reidemeister K., *Knotentheorie*, Chelsea Publishing Company (1948).
- [17] Kauffman L. e Baadhio A., *Quantum Topology*, World Scientific (1993).
- [18] Prasolov V.V. e Sossinsky A.B., *Knots, Links, Braids and 3-Manifolds*, American Mathematical Society (1991).
- [19] Burde G. e Zieschang H., *Knots*, Walter de Gruyter (1985).
- [20] Birman J., *Braids, Links, and Mapping Class Groups*, Princeton University Press (1974).
- [21] Jones V.F.R., *Subfactors and Knots*, American Mathematical Society.
- [22] Nechaev S., *Statistics of Knots and Entangled Random Walks*, cond-mat/9812205.
- [23] Kholodenko A.L. e Vilgis T.A., *Some Geometrical and Topological Problems in Polymer Physics*, Phys. Rep. **298**: (5-6), 251-370, (1998).
- [24] Schubert H., *Categories*, Springer-Verlag (1972).
- [25] Reshetikhin N. Yu. e Turaev V.G., *Ribbon Graphs and Their Invariants Derived from Quantum Groups*, Commun. Math. Phys. **127**, 1-26 (1990).
 Turaev V.G., *Quantum Invariants of 3-Manifolds*, Institut de Recherche Mathématique Avancée (1991).
 Turaev V.G., *Modular Categories and 3-Manifold Invariants*, International Journal of Modern Physics **B**, Vol. 6, Nos. 11 e 12 (1992).
- [26] Kauffman L. e Radford D.E., *Oriented Quantum Algebras, Categories and Invariants of Knots and Links*, math/0006019.
- [27] Freyd P. e Yetter D., *Braided Compact Closed Categories with Applications to Low Dimensional Topology*, Advances in Mathematics **77**, 165-182 (1989).
- [28] Kassel C., *Quantum Groups*, Springer-Verlag (1991).
- [29] Chari V. e Pressley A., *A Guide to Quantum Groups*, Cambridge University Press (1994).

- [30] Vilenkin N. e Klimyk A. *Representations of Lie Groups and Special Functions - Volume 3*, Kluwer Academic Publishers (1992).
- [31] Majid S., *Foundations of Quantum Group Theory*, Cambridge University Press (1995).
- [32] Gomes M.O.C, *Notas de aula do curso: Introdução à Teoria Quântica de Campos I e II* (1999).
- [33] Balachandran A.P., Batista E., Costa e Silva L.P. and Teotonio-Sobrinho P., *Quantum Topology Change in $(2+1)d$* , hep-th/9905136.
Balachandran A.P., Batista E., Costa e Silva L.P. and Teotonio-Sobrinho P., *Spin-Statistics Connection in Quantum Gravity*, hep-th/9906174.
- [34] Tsum T.S. e Mo H., *Some Elementary Gauge Theory Concepts*, World Scientific (1993).
- [35] Göckeler M., *Differential Geometry, Gauge Theories and Gravity*, Cambridge University Press (1987).
- [36] Propitius M. de W, *Topological Interactions in Broken Gauge Theories*, hep-th/9511195.
- [37] Szlachányi K. e Vecsernyés P., *Quantum Symmetry and Braid Group Statistics in G -Spin Models*, Commun. Math. Phys., **156**, 127-168, (1993).
- [38] Preskill J. e Krauss L., *Local Discrete Symmetry and Quantum-Mechanical Hair*, Nucl. Phys. **B341**, 50-100 (1990).
- [39] Lee K.M., *Vortices on Higher Genus Surfaces*, Phys. Rev. **B49**, number 4 (1994).
- [40] Lo H.K. e Preskill J., *Non-Abelian Vortices and Non-Abelian Statistics*, Phys. Rev. **D49**, number 10 (1993).