

Sistemas de cuadros rígidos: Aspectos topológico-algebraicos en fases y sus transiciones*

Omar Alvarado-Garduño Jesús González

Clasificación de acuerdo al formato 2020 de la AMS: 00-01.

1. Topología y transiciones de fase

En el formalismo de la mecánica estadística, las partículas de la materia (digamos a nivel atómico o molecular) se organizan en estados estructurales o energéticos específicos llamados *fases*, como sólido, líquido, gas o plasma. Cada fase se caracteriza por un equilibrio que depende de las condiciones circundantes entre la energía cinética de las partículas y la energía potencial proveniente de los enlaces de interacción entre las partículas. En términos generales, la materia “prefiere” existir en la fase más estable, es decir, aquella con la menor cantidad posible de energía libre. En tal contexto, las transiciones de fase ocurren cuando los cambios en la energía del entorno circundante alteran el equilibrio energético de la fase actual, forzando a la materia a adoptar una nueva fase estable. Parte de la motivación detrás de este trabajo de revisión proviene de la idea de que las fases y sus transiciones están profundamente ligadas a (y deben entenderse en términos de) cuestiones topológicas.

La topología entra en el ámbito de la mecánica estadística en términos de la familia de subvariedades equipotenciales asociadas a un sistema energético. éstas últimas están dadas por la totalidad de las configuraciones de las partículas del sistema con un valor fijo (típicamente regular) de la función de energía. La *Hipótesis Topológica* (HT), una conjetura cualitativa y heurística fundamental en la frontera entre la mecánica estadística y la topología diferencial, postula un vínculo profundo entre, por un lado, las transiciones de fase en un sistema de partículas

* Artículo en la sección *Divulgación de las Ciencias Matemáticas*.

y, por otro, los cambios topológicos en las correspondientes subvariedades equipotenciales. De hecho, la *Teoría Topológica de Transiciones de Fase* integra hipótesis matemáticas precisas que garantizan que, en una amplia clase de sistemas hamiltonianos clásicos, un cambio de topología es una condición necesaria para que ocurra una transición de fase. Recíprocamente, bajo condiciones de regularidad adecuadas, el cambio de topología es una condición suficiente para una transición de fase ([19]). Es de notarse sin embargo que, en general, las condiciones de regularidad en la afirmación anterior no pueden obviarse. En efecto, algunos cambios topológicos típicamente “pequeños” no se acompañan de una transición de fase ([24, 30]). Uno de los objetivos centrales en este trabajo es el de ejemplificar, en el contexto de sistemas de cuadros rígidos (revisados más adelante), tales cambios topológicos sin transición de fase asociada.

Las transiciones de fase y sus correspondientes cambios topológicos se presentan en diferentes formas, dependiendo del orden de diferenciabilidad de la correspondiente función de energía en el punto de transición. Las transiciones de fase de primer orden se caracterizan por un cambio abrupto en las propiedades macroscópicas del sistema, generalmente con energía absorbida o liberada, pero siempre a una temperatura fija, como por ejemplo en el caso de agua hirviendo a 100 °C. En este contexto, las primeras derivadas de la energía libre, como el volumen o la entropía, cambian de forma discontinua en el punto de transición. Por otro lado, las transiciones de fase de segundo orden (también conocidas como continuas), como en los estados superconductores, evolucionan suavemente, sin discontinuidades en el volumen ni la entropía, pero ciertamente experimentando cambios físicos macroscópicos drásticos.

2. Transición de fase en sistemas de discos rígidos

Durante más de medio siglo, los físicos han estudiado las transiciones de fase en la materia mediante diversos modelos matemáticos y bajo múltiples marcos teóricos. En particular, los espacios de configuración de discos bidimensionales *rígidos*, es decir sin traslape, de un radio dado y que están restringidos a estar contenidos en una región acotada del plano, han sido uno de los modelos predilectos en el estudio de las transiciones de fase en sistemas bidimensionales, tarea relevante en el estudio de películas delgadas y en interfases. Los espacios de configuración de

discos rígidos se consideran un modelo *atérmico* porque carecen de escalas de energía intrínsecas. En cambio, poseen un potencial de energía discreto con sólo dos valores, a saber, infinito cuando algún par de discos se traslapan, pero que se anula en caso contrario. En particular, bajo la óptica de las subvariedades equipotenciales en la HT, el interés se centra en la topología de los espacios de configuración de discos rígidos. Si se toma en cuenta la simplicidad de la función potencial, así como el hecho de que las partículas (digamos átomos o moléculas) están representados por discos todos del mismo radio y que no interactúan mediante fuerzas de atracción o repulsión, es absolutamente notable la presencia de transiciones de fase y sus correspondientes cambios topológicos bajo variaciones del parámetro del radio. Es en este sentido que, con el número de discos fijo, el radio de los mismos juega un papel de tipo térmico, en donde un espacio de configuración con discos rígidos de radio pequeño modela un sistema de partículas con alta energía cinética y, por tanto, con mayor movilidad.

Como resultado de la falta de fuerzas de cohesión en sistemas de discos rígidos,

- (1) *no hay diferencia entre la fase líquida y la gaseosa,*

véase [9, 27]. Sin embargo, el derretimiento bidimensional (proveniente del decremento paulatino del radio común de los discos rígidos), observado por primera vez por Alder y Wainwright en 1962 ([1]), es particularmente interesante. La correspondiente transición de fase fue aclarada por Bernard y Krauth ([13]) y confirmada por Engel et al ([18]) mediante simulaciones computacionales masivas basadas en procesos de Monte Carlo. El derretimiento en espacios de discos rígidos involucra de hecho tres fases, con una fase *hexática* que separa la fase sólida, caracterizada por una estructura cristalina hexagonal, de la fase líquida isótropa carente de coherencia orientacional y periodicidad espacial. En la fase hexática intermedia los discos pueden desplazarse, pero los ángulos de enlace entre un disco y sus vecinos mantienen un patrón hexagonal que se desintegra lentamente (esto es, algebraicamente, mas no exponencialmente) con la distancia. El derretimiento comienza con una transición continua (de segundo orden) de sólido a hexático que se desencadena al alcanzarse una fracción de empaquetamiento de aproximadamente 0.72 (es decir, cuando el 72 por ciento del área disponible está ocupada por los discos), mientras que una transición discontinua (de primer orden) de hexático a gas se desencadena al alcanzarse una fracción de empa-

quetamiento de aproximadamente 0.69. Para nuestros objetivos, es de notarse que el rango de existencia de la fase hexática es relativamente breve.

Hemos observado que la función potencial que caracteriza los sistemas de discos rígidos implica que la única subvariedad equipotencial relevante viene dada por el propio espacio de configuraciones de discos rígidos (es decir sin traslapes). La tarea de detectar y clasificar los cambios en la topología de dichos espacios a medida que varía el radio de los discos fue abordada desde un punto de vista topológico-algebraico por vez primera en [10, 14, 23]. Si bien la parte de detección ha sido abordada con relativo éxito en [10] y se ha explorado con más detalle en [14], la clasificación topológica es un tema complejo, sutil y mayormente abierto. Por ejemplo, poco se sabe incluso sobre la pregunta elemental (pero fundamental en mecánica estadística) sobre las propiedades de conectividad de los espacios de configuración de discos rígidos. Como se explica en [14, Sección 4], la respuesta es compleja incluso con cinco discos contenidos en la caja unitaria, situación donde se registra un fenómeno más bien contraintuitivo, a saber, el hecho de que el número de componentes conexas no tiene por qué depender monótonamente de los radios de los discos. En efecto, estos espacios son vacíos a bajas temperaturas, es decir, cuando el radio de los discos es tan grande que no hay posibilidad de que los discos quepan en la caja unitaria. Pero al incrementar la temperatura, es decir al decrementar el radio, eventualmente aparecen configuraciones de discos trabados, momento en que el espacio consiste de una cantidad finita de puntos. Posteriormente, ligeros incrementos de temperatura se traducirán en espacios con componentes contráctiles. Eventualmente el incremento de temperatura dará lugar a la fusión de algunas de estas componentes, dando paso a estructuras topológicas interesantes. La observación a resaltar aquí es que, para ciertos valores de temperaturas aun mayores, nuevas componentes conexas “nacerán” contribuyendo en las propiedades topológicas a temperaturas mayores. El proceso de nacimiento de nuevas componentes conexas se puede repetir en múltiples ocasiones, incluso en el sistema con cinco discos rígidos.

3. Sistemas de cuadros rígidos

Junto con los espacios de configuración de discos rígidos, los físicos han estudiado espacios de configuración más generales, donde los discos son reemplazados por otras formas planas confinadas a regiones

acotadas en el plano, siempre manteniendo la condición de rigidez que descarta traslapes ([11, 12, 16, 20, 32]). Por ejemplo, el proceso de derretimiento en tres etapas para los espacios de configuración de cuadros rígidos, sugerido en [35] mediante simulaciones de Monte Carlo, fue confirmado experimentalmente en [26]. En tal proceso de derretimiento, una fase *tetrática* intermedia y relativamente breve con simetría cuádruple desempeña el papel que la fase hexática juega para los espacios de configuración de discos rígidos. Por otra parte, el estudio de las fases en sistemas de cuadros rígidos tiene relevancia en aspectos tecnológicos, donde ideas en la producción y el análisis de plaquetas cuadradas cuasi bidimensionales han encontrado aplicaciones en procesos de auto ensamblaje determinado por la entropía así como en el estudio de materiales coloidales ([15, 33, 36, 37, 38]).

El interés puramente matemático en espacios de configuración de objetos rígidos ha surgido sólo en años recientes ([2, 3, 4, 5, 6, 17, 25, 29]). El modelo matemático usado en este trabajo fue considerado por primera vez en [2], donde Alpert introduce dos modificaciones en los espacios de configuración de discos rígidos. Primero, la métrica euclidiana que da lugar a discos se reemplaza por la métrica L^∞ (del máximo) que da lugar a cuadros con lados paralelos a los ejes cartesianos. Además, la condición de radios variables para discos se reemplaza por el requisito de que los cuadros tengan área unitaria pero estén confinados dentro de un rectángulo de base p y altura q variables. La intención de este último ajuste es la de reemplazar el parámetro tipo térmico del radio en el caso de los discos, por el par de parámetros p y q de tipo *presión* en el caso de los cuadros. Cabe señalar que ambas modificaciones se vuelven irrelevantes en el límite termodinámico, es decir, cuando el número de cuadros y el tamaño del contenedor tienden a infinito de tal modo que la fracción de empaquetamiento converja ([31]). Como se revisa a continuación, el modelo resultante tiene propiedades de conectividad accesibles conservando la riqueza topológica de los modelos para discos rígidos.

Definición 3.1 (Sección 2 of [2]). *Para enteros positivos n, p, q con $n \leq pq$, $C(n, p \times q)$ denota al espacio de configuración de n cuadros etiquetados (también referidos como ordenados) contenidos en el rectángulo $R_{p,q} := [0, p] \times [0, q]$. Los lados de cada cuadro deben tener longitud unitaria y deben ser paralelos a los ejes canónicos. Se permite que los cuadros se toquen en sus bordes, o toquen el borde de $R_{p,q}$, pero no que tengan traslapes entre sí (son cuadros rígidos). El n -ésimo grupo simétrico actúa sin puntos fijos en $C(n, p \times q)$ por permutación de los*



Figura 1: Rompecabezas deslizante 4×4 .

cuadros etiquetados, y el espacio de órbitas correspondiente, denotado por $UC(n, p \times q)$, se conoce como el espacio de configuraciones no etiquetadas (también referidas como desordenadas) de n cuadros unitarios rígidos en $R_{p,q}$.

A diferencia de los espacios de configuración de discos rígidos, los espacios $C(n, p \times q)$ y $UC(n, p \times q)$ son conexos con la única excepción de $C(pq-1, p \times q)$ que tiene dos componentes homeomorfas de topología bien conocida ([29, Proposition 21], [34, Theorem 1] y [8, Theorem 1.4]). Es de notarse que la falta de conectividad de $C(pq-1, p \times q)$ es responsable (en el caso $p = q = 4$) de la imposibilidad de resolver, desde ciertas configuraciones, el rompecabezas consistente de 15 piezas cuadrículas que se deslizan sobre una rejilla de tamaño 4×4 (ver Figura 1).

Las transiciones de fase en $C(n, p \times q)$ y $UC(n, p \times q)$ surgen al variar (uno o dos de) los parámetros p y q . La fase sólida corresponde al caso de $C(pq, p \times q)$ y $UC(pq, p \times q)$, espacios que son discretos, siendo este último un punto. Asimismo, $C(n, p \times 1)$ consta de $n!$ componentes contráctiles, mientras que $UC(n, p \times 1)$ y $C(1, p \times q) = UC(1, p \times q)$ son contráctiles. Así pues, de ahora en adelante consideraremos únicamente fases con

$$(2) \quad 2 \leq q \leq p \quad \text{y} \quad 2 \leq n \leq pq - 1,$$

donde la última desigualdad se impone fin de evitar la fase sólida irrelevante.

Hasta antes de los resultados revisados en este trabajo, la mayor parte de la investigación matemática sobre la topología de los espacios

de configuración de cuadros rígidos se había centrado en aspectos homológicos. Por ejemplo, el Teorema 1.1 en [3] implica que la homología de $C(n, p \times q)$ y $UC(n, p \times q)$ se concentra en dimensiones a lo más

$$(3) \quad \text{mín} \left(pq - n, n, \frac{pq}{3} \right).$$

En efecto, mientras que la dimensión homotópica de estos espacios está acotada por (3), Alpert et al. muestran homológicamente que una mejora relativamente menor de (3) determina la dimensión homotópica “a gran escala”. En esta línea de ideas, es interesante remarcar el hecho de que los métodos homológicos detectan una transición líquido-gaseosa para el modelo *ordenado* $C(n, p \times q)$ ([5, Theorem 1.2]), característica que, sin embargo, estaría ausente en el modelo no ordenado $UC(n, p \times q)$, en vista de (1), de [4, Proposition 3.7] y de los hechos revisados en la Sección 6 de este trabajo.

Las consideraciones finales en el párrafo anterior indican la necesidad de estudiar el modelo *no etiquetado* $UC(n, p \times q)$ preferentemente mediante métodos no homológicos. En el resto del trabajo revisamos un enfoque relativamente reciente basado en el grupo fundamental de estos espacios. Dicho enfoque retoma una de las ideas en la teoría de Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young para el derretimiento bidimensional, donde los orígenes del grupo fundamental son usados para la clasificación de defectos topológicos.

4. Transiciones de fase para un valor fijo de q

Al considerar baricentros de cuadros, obtenemos la inclusión topológica

$$(4) \quad UC(n, p \times q) \hookrightarrow \text{UConf}(\mathbb{R}^2, n)$$

dentro del espacio de configuración clásico de n partículas infinitesimales no etiquetadas en el plano. Esta inclusión es una equivalencia homotópica cuando

$$(5) \quad n \leq \text{mín}(p, q)$$

([29, Theorem 18]). Como se sugiere en [4], la desigualdad anterior se interpreta como la indicación de una fase gaseosa para $UC(n, p \times q)$, es decir, aquella donde los cuadrados se comportan, salvo homotopía, como

partículas puntuales ideales. En este trabajo nos interesa una estabilización de la topología de $UC(n, p \times q)$ preliminar a la indicada por (5). En las fases a las que nos referimos, los cuadros se empiezan a comportar, salvo homotopía, como partículas verticalmente alargadas que se mueven sin rotación en una franja horizontal de altura q . Concretamente, la inclusión (4) se factoriza a través del espacio intermedio $UC(n, q)$, introducido en [4], que consiste de todas las configuraciones de n discos rígidos sin etiquetar y de diámetro unitario que se mueven dentro de una franja horizontal infinita de altura q . La inclusión $UC(n, p \times q) \hookrightarrow UC(n, q)$ se obtiene tomando discos inscritos en cuadros, mientras que la inclusión $UC(n, q) \hookrightarrow UConf(\mathbb{R}^2, n)$ se obtiene tomando centros de los discos. En tal contexto $UC(n, q)$ es homotópicamente equivalente a la unión de los subespacios

$$(6) \quad \cdots \hookrightarrow UC(n, (p-1) \times q) \hookrightarrow UC(n, p \times q) \hookrightarrow UC(n, (p+1) \times q) \hookrightarrow \cdots .$$

En efecto, como se indica en [3, página 2596], la inclusión $UC(n, p \times q) \hookrightarrow UC(n, q)$ es una equivalencia homotópica para

$$(7) \quad n \leq p.$$

En particular, en un contexto donde q se mantenga fijo, (7) puede ser tomada como indicación (suficiente, más no necesaria) de una fase q -gaseosa, es decir, aquella en la que el incremento del parámetro p no conlleve alteraciones adicionales en la topología de $UC(n, p \times q)$.

Definición 4.1. *Decimos que $UC(n, p \times q)$ tiene topología q -gaseosa, o que está en la fase q -gaseosa, siempre que todas las inclusiones $UC(n, p \times q) \hookrightarrow UC(n, (p+1) \times q) \hookrightarrow \cdots$ sean equivalencias homotópicas. Por ejemplo, $UC(p, p \times q)$ tiene topología q -gaseosa.*

Con miras al entendimiento de la dinámica de las transiciones de fase resultantes al mantener el parámetro q fijo, un objetivo central es el de medir y, en el mejor de los casos, caracterizar las diversas topologías que $UC(n, p \times q)$ pueda tener fuera de los regímenes q -gaseoso y q -sólido. Si bien un tal régimen podría ser llamado q -líquido, quedará claro de la discusión en las siguientes secciones que el nombre q -tetrático es mucho más adecuado en vista del paralelismo con la situación discutida al inicio de la Sección 3.

5. *Detour*: Grupo fundamental

Al igual que $\text{UConf}(\mathbb{R}^2, n)$, algunos de los espacios de configuración de cuadros rígidos fuera del rango (5) son *aesféricos*, es decir, tienen topología caracterizada completamente por su grupo fundamental. Tal es el caso tanto para $\text{UC}(n, 2)$, es decir, para $\text{UC}(n, p \times 2)$ con $n \leq p$, como para los dos primeros casos

$$(8) \quad \text{UC}(pq - 1, p \times q) \quad \text{y} \quad \text{UC}(pq - 2, p \times q)$$

fuera del régimen sólido (see [4, Theorem 3.6] y [8, Theorems 1.4 and 1.5]). Por otro lado, la posibilidad de que un espacio $\text{UC}(n, p \times q)$ con $\min(p, q) < n < pq - 2$ o, en particular, de que el modelo para q -gas, $\text{UC}(n, q)$ para $q \geq 3$, sea aesférico es un problema abierto y aparentemente con solución negativa en general ([28, Theorem 3.2]).

En vista de las consideraciones en torno a (5) y (7), el grupo fundamental $B_n(p \times q) := \pi_1(\text{UC}(n, p \times q))$ es una p -aproximación de $B_n(q) := \pi_1(\text{UC}(n, q))$. A su vez, éste último es una q -aproximación del grupo clásico de Artin $B_n := \pi_1(\text{UConf}(\mathbb{R}^2, n))$ de trenzas en n hebras. De hecho, para $q \geq 3$, la inclusión $\text{UC}(n, q) \hookrightarrow \text{UConf}(\mathbb{R}^2, n)$ es una equivalencia homotópica hasta dimensión dos ([8, Remark 1.3]), por lo que $B_n(q) \cong B_n$. Sin embargo, como se explica en la siguiente sección, el epimorfismo $B_n(2) \rightarrow B_n$ inducido por la 1-equivalencia homotópica $\text{UC}(n, 2) \hookrightarrow \text{UConf}(\mathbb{R}^2, n)$ es notablemente especial.

6. π_1 -Derretimiento en $\text{UC}(n, p \times 2)$

En esta sección analizamos el caso $q = 2$ escribiendo simplemente “sólido” y “gaseoso” como sustitutos de “2-sólido” y “2-gaseoso”, respectivamente.

La topología aesférica $\text{UC}(n, 2)$ utilizada para caracterizar la fase gaseosa es particularmente atractiva ya que captura la esencia de tipo *angulo recto* en la presentación estándar del grupo de Artin B_n . Recordemos que B_n está presentado con $n - 1$ generadores x_1, \dots, x_{n-1} sujetos a dos tipos de relaciones:

- Relaciones de tipo ángulo recto: $x_i x_j = x_j x_i$, siempre que $|i - j| > 1$.
- Relaciones de Artin-Tits de tipo trenza: $x_i x_{i+1} x_i = x_{i+1} x_i x_{i+1}$.

Teorema 6.1 ([8, Theorem 1.1]). $B_n(2)$ es el grupo de Artin de ángulo recto (RAAG, por sus siglas en inglés) presentado por $n - 1$ generadores x_i sujetos únicamente a las relaciones de conmutatividad anteriores (“de ángulo recto”).

Explícitamente $B_n(2) = \text{RAAG}(K'_{n-1})$, el RAAG determinado por el grafo K'_{n-1} obtenida del grafo completo K_{n-1} en $n - 1$ vértices al borrar las aristas de un árbol maximal lineal en K_{n-1} . Justamente, el borrado de estas aristas toma en cuenta que los generadores x_i y x_j conmutan sólo cuando $i - j \neq \pm 1$. Más aún:

Teorema 6.2 ([21]). *Todas las inclusiones*

$$(9) \quad \text{UC}(n, p \times 2) \hookrightarrow \text{UC}(n, (p + 1) \times 2) \hookrightarrow \text{UC}(n, (p + 2) \times 2) \hookrightarrow \dots$$

determinan isomorfismos de conjugación a nivel de grupo fundamental cuando

$$(10) \quad n \leq 2p - 5.$$

Consecuentemente, la fase gaseosa para $\text{UC}(n, p \times 2)$ marcada por (7) está contenida en una *fase gaseosa* π_1 -indistinguible mayor delimitada por (10). El hecho de que sólo haya cuatro fases no sólidas fuera de este rango, a saber, aquellas con

$$(11) \quad 2p - 4 \leq n \leq 2p - 1,$$

encaja de manera natural con (1), así como con la brevedad de la fase tetrática mencionada el inicio de la Sección 3. En particular, las cuatro fases en (11) se denominarán *tetráticas* π_1 -indistinguibles (o bien *2-tetráticas* π_1 -indistinguibles, fuera del contexto de esta sección). En aras de la brevedad, en el resto de esta sección el adjetivo “ π_1 -indistinguible” será omitido y usado de forma implícita al referirse a estas dos fases y sus transiciones.

Es de notarse que, en el estudio de q -transiciones de fase (π_1 -indistinguibles), es decir basado en (6), las consideraciones anteriores identifican de hecho sólo dos —no cuatro— topologías tetráticas. Explícitamente, en un sistema con $2m - 1$ cuadros rígidos, la primer topología tetrática ocurre a presión $R_{m,2}$ y corresponde al caso $n = 2p - 1$ en (11), mientras que la segunda topología tetrática ocurre a presión $R_{m+1,2}$ y corresponde al caso $n = 2p - 3$ en (11). De igual manera, en un sistema con $2m$ cuadros rígidos, la primer topología tetrática ocurre a presión $R_{m+1,2}$ y

corresponde al caso $n = 2p - 2$ en (11), mientras que la segunda topología tetrática ocurre a presión $R_{m+2,2}$ y corresponde al caso $p = 2p - 4$ en (11). En conjunto, para el sistema de n cuadros rígidos, la primer topología tetrática sucede con $p = \lfloor n/2 \rfloor + 1$, mientras que la segunda topología tetrática ocurre para $p = \lfloor n/2 \rfloor + 2$. Cualquier situación de presión menor (es decir a presión $R_{\lfloor n/2 \rfloor + i, 2}$ con $i \geq 3$) se ubica dentro del régimen gaseoso.

Ejemplo 6.3 ([8, Theorem 1.4]). El caso $n = 2p - 1$ en (11) corresponde a la topología tetrática caracterizada por una estructura de grupo libre no abeliano de rango $p - 1$ en $B_{2p-1}(p \times 2)$. De hecho, cuando se da $\min(p, q) \geq 2$, el espacio esférico $UC(pq - 1, p \times q)$ tiene el tipo de homotopía de una cuña de $(p - 1)(q - 1)$ círculos.

Ejemplo 6.4 ([8, Theorem 1.5]). El caso $n = 2p - 2$ en (11) corresponde a la topología tetrática caracterizada por la estructura de RAAG

$$B_{2p-2}(p \times 2) = \text{RAAG} \left(E'(p - 3) \right)$$

determinada por el grafo $E'(p - 3)$ obtenido al agregar $\min(3, 2p - 3)$ vértices aislados al grafo bipartito $E(p - 3)$ definido en la Figura 2. De hecho, el espacio esférico $UC(2p - 2, p \times 2)$ es homotópicamente equivalente a la potencia poliédrica

$$(S^1)^{E'(p-3)}$$

cuyo modelo estándar es el complejo de Salvetti construido a partir de la cuña de tantos círculos como vértices tenga $E'(p - 3)$, pegando un toro $S^1 \times S^1$ sobre cada sumando $S^1 \vee S^1$ asociado a cada par de vértices de $E'(p - 3)$ unidos por una arista. Por ejemplo, $UC(2, 2 \times 2) \simeq S^1$, $UC(4, 3 \times 2) \simeq S^1 \vee S^1 \vee S^1$ y $UC(6, 4 \times 2) \simeq (S^1 \times S^1) \vee UC(4, 3 \times 2)$.

En los Ejemplos 6.5 a continuación se describe el estado del arte al respecto de las características de la segunda topología tetrática

$$(12) \quad UC_n(\lfloor n/2 \rfloor + 2) \times 2,$$

es decir, para los dos casos restantes $n = 2p - 3$ y $n = 2p - 4$ en (11). El correspondiente proceso de π_1 -derretimiento se resume en la Figura 3, mismo que está organizado por bloques, cada uno dedicado a un valor de n . La primer columna de cada bloque corresponde a la primer topología tetrática (Ejemplos 6.4 y 6.3), mientras que la ultima de las columnas

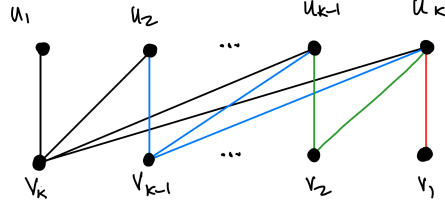


Figura 2: Para un entero positivo k , el grafo bipartito $E(k)$ del Ejemplo 6.4 tiene vértices u_i y v_i para $1 \leq i \leq k$, y una arista entre u_i y v_j siempre que $i + j > k$. Para $k \leq 0$, ponemos $E(k) = \emptyset$, el grafo vacío.

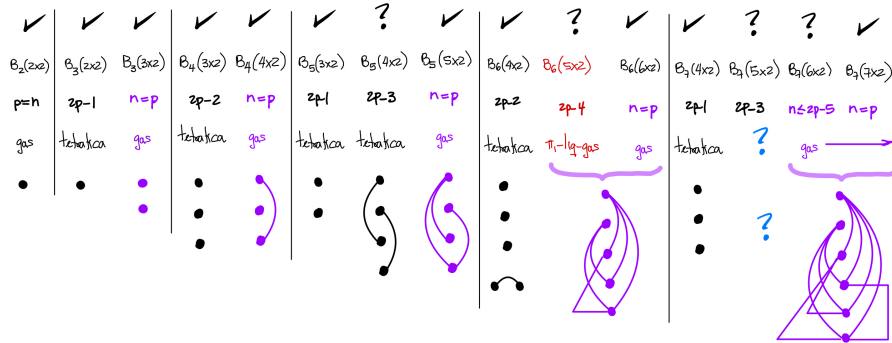


Figura 3: Con la posible excepción de $B_7(5 \times 2)$, todos los grupos mostrados son RAAG determinados por el grafo indicado. Las descripciones de $B_5(4 \times 2)$ y $B_6(5 \times 2)$ se tomaron de [8, Examples 1.7].

corresponde a la topología 2-gaseosa $UC(n, n \times 2) \simeq UC(n, 2)$ cuyo grupo fundamental está descrito al inicio de esta sección. Por otra parte, en el primer renglón de la Figura 3 se indican los casos esféricos, mientras que los grafos en el último renglón determinan el correspondiente grupo fundamental como RAAG —cuando tal resulta ser el caso.

Ejemplos 6.5. El caso $n = 1$ (con $p = 2$) es irrelevante en vista de (2), por lo que no se incluye en la Figura 3. Para $n = 2$, el 2-derretimiento de $UC(2, p \times 2)$ es, de hecho, un proceso de sublimación sin fase tetrática en vista de (7). Los casos con $n = 3$ y $n = 4$ son especiales pues (12) tiene la forma $UC_n(n \times 2)$, que tiene topología 2-gaseosa, por lo que $UC_n(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \times 2$ es la única topología tetrática —descrita en los Ejemplos 6.3 y 6.4. El caso $n = 5$ es el primero con dos topologías tetráticas, la segunda de las cuales es notablemente π_1 -cercana a la to-

pología gaseosa en la última columna del bloque $n = 5$ de la Figura 3. Es de notarse que esta última similitud es total en el caso $n = 6$, lo que podría tomarse como indicación de una transición tetrática-gaseosa continua (de segundo orden). Sin embargo cálculos parciales sugieren que este último fenómeno no se daría para valores mayores de n . Lamentablemente, al momento de escribir este trabajo, no contamos con la suficiente evidencia computacional que pueda llevar a inferir el orden de transición tetrático-gaseoso en general.

7. Tauromaquia: $UC(pq - 2, p \times q)$ para $q \geq 3$

Como se resalta en el Ejemplo 6.3, el primer espacio en el proceso de q -derretimiento, es decir $UC(pq - 1, p \times q)$, tiene una topología tetrática aesférica caracterizada por una estructura de grupo libre no abeliano de rango $(p - 1)(q - 1)$ en $B_{pq-1}(p \times q)$. Esta sección se dedica a la segunda topología tetrática aesférica $UC(pq - 2, p \times q)$, donde la presencia de celdas 2-dimensionales (adicionales a las del caso $q = 2$) enriquecen la situación reportada en el Ejemplo 6.4.

Hemos indicado en (8) que $UC(pq - 2, p \times q)$ es aesférico, por lo que su topología queda caracterizada por su grupo fundamental $B_{pq-2}(p \times q)$. Mientras que la respuesta para $q = 2$ se da en términos de RAAG's (Ejemplo 6.4), el caso para $q \geq 3$ requiere el uso de grupos presentados por conmutadores (Teorema 7.1 a continuación), es decir, grupos que admiten una presentación finita cuyos generadores están sujetos únicamente a relaciones dadas por conmutadores $[a, b]$ de elementos a y b que *no necesariamente* son generadores. Nótese que tales grupos generalizan a los RAAGs, pues éstos últimos tienen presentación donde las relaciones están dadas por conmutadores *de generadores* en la presentación. La descripción de $B_{pq-2}(p \times q)$ se puede precisar considerablemente en el caso $q = 3$ (Teorema 7.4 más abajo) mediante el uso de extensiones de Higman-Neumann-Neumann (HNN).

Teorema 7.1 ([7]). *Para $p, q \geq 2$, la homología de $UC(pq - 2, p \times q)$ es libre de torsion y está concentrada en dimensiones a lo más 2. Además $B_{pq-2}(p \times q)$ admite una presentación con β_1 generadores y β_2 relaciones, éstas últimas todas dadas por conmutadores. Aquí β_i denota al i -ésimo número de Betti de $UC(pq - 2, p \times q)$.*

Aunque técnica, la presentación en el Teorema 7.1 es explícita y, más importante aún, eficiente:

Corolario 7.2. *La presentación de $B_{pq-2}(p \times q)$ en el Teorema 7.1 tiene el mínimo número posible de generadores y de relaciones.*

Aplicando transformaciones de Tietze a un grupo relacionado por conmutadores se puede intentar identificar un nuevo conjunto de generadores en términos de los cuales surja una estructura RAAG. Esto es lo que sucede en el caso $q = 2$ del Teorema 7.1, lo que permite recuperar la descripción en el Ejemplo 6.4, así como en algunos casos adicionales con $q = 3$ (ver los Ejemplos 7.3 a continuación). Aunque la idea no logra identificar una estructura RAAG en $B_{pq-2}(p \times q)$ para $q \geq 3$ general, sí nos permite obtener una descripción (en el Teorema 7.4 a continuación) de $B_{3p-2}(p \times 3)$ como una extensión HNN del RAAG asociado a una versión (literalmente) cuadrada del grafo bipartito $E(p-3)$ en la Figura 2. Antes de explicar los detalles, es conveniente ilustrar la situación en algunos casos excepcionales, usando la notación $\Gamma + k$ para el grafo resultante de añadir k vértices aislados a un grafo Γ dado (posiblemente vacío), y la notación F_k para el grupo libre de rango k , así como la notación $F(x_1, \dots, x_k)$ cuando querramos indicar un conjunto específico de generadores para F_k .

Ejemplos 7.3. Las siguientes comparaciones utilizan la descripción en el Ejemplo 6.4:

1. Para $p = 3$ se tiene $B_7(3 \times 3) \cong \text{RAAG}(5) = F_5$, mientras que $B_4(3 \times 2) \cong \text{RAAG}(3) = F_3$.
2. Para $p = 4$ se tiene $B_{10}(4 \times 3) \cong \text{RAAG}(\text{□} + 3)$, mientras que $B_6(4 \times 2) = \text{RAAG}(\text{!} + 3)$.
3. Para $p = 5$ se tiene $B_{13}(5 \times 3) \cong \text{RAAG}(\text{□} + 1)$, mientras que $B_8(5 \times 2) = \text{RAAG}(\text{!} + 3)$.

A poco de ser general, las dos últimas instancias en los Ejemplo 7.3.3 comienzan a sugerir un patrón claro. Si bien en general $B_{pq-2}(p \times q)$ tiene un generador “distinguido” (correspondiente a la copia de F_1 que se escinde libremente de $B_{13}(5 \times 3)$), para valores mayores de p este generador está relacionado no trivialmente con el resto de los generadores. En este sentido resulta más ilustrativo escribir el Ejemplo 7.3.3 en términos

de un producto libre

$$B_{13}(5 \times 3) \cong \text{RAAG} \left(\begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \end{array} \right) \star F(v),$$

el cual puede interpretarse como la extensión HNN que resulta de añadir la letra estable v y que conjugue el subgrupo trivial consigo mismo. Los casos $p = 6$ en la Figura 4 y $p = 7$ en la Figura 5 conservan esta forma, excepto que los subgrupos a conjugar ahora son libres. El caso $p = 8$ en la Figura 6 tiene todas las características generales.

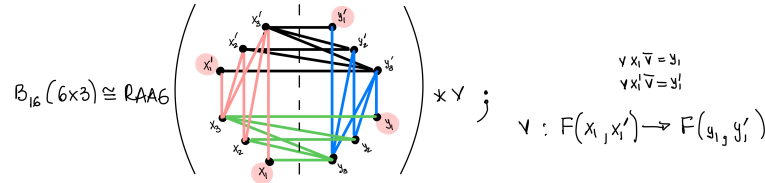


Figura 4: El subgrafo generado por x_1 y x_1' , y el subgrafo generado por y_1 y y_1' no tienen aristas, por lo cual los grupos conjugados por la letra estable v son libres.

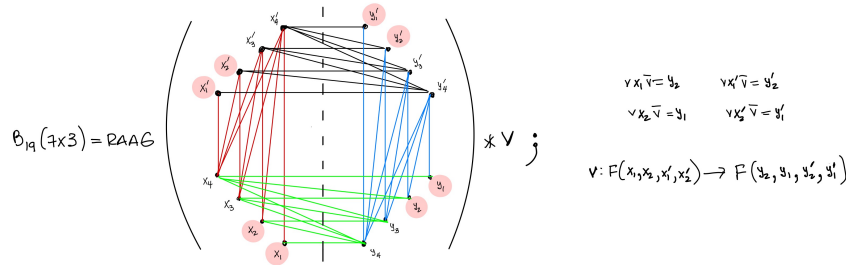


Figura 5: El subgrafo generado por x_1, x_2, x_1' y x_2' , así como el subgrafo generado por y_1, y_2, y_1' y y_2' aún no tienen aristas, así que los grupos conjugados por la letra estable v siguen siendo libres.

Teorema 7.4 (Alvarado-Garduño, G. 2025). *Para $p > q = 3$, se tiene un isomorfismo*

$$B_{3p-2}(p \times 3) \cong \text{RAAG}(S(p-3)) \star v_{p-3}$$

que expresa a $B_{3p-2}(p \times 3)$ como la extensión HNN del RAAG asociado al grafo $S(p-3)$ con respecto al isomorfismo $v_{p-3} : \text{RAAG}(X(p-3)) \rightarrow \text{RAAG}(Y(p-3))$ donde:

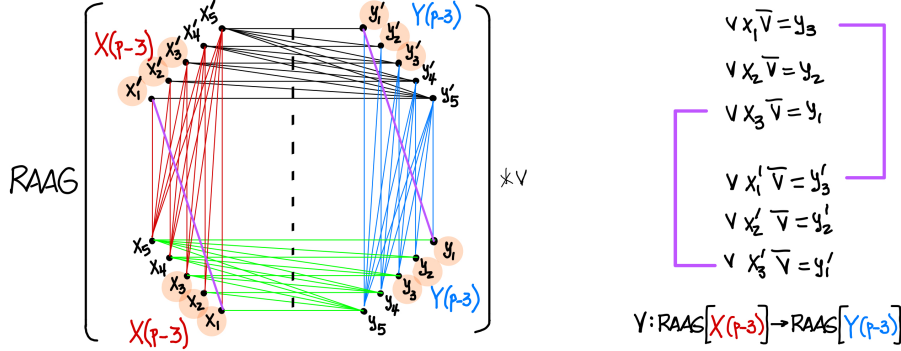


Figura 6: Esta vez las relaciones de conmutación “en diagonal” quedan forzadas por el isomorfismo de conjugación v .

1. $S(p-3)$ está dado por el grafo bipartito con vértices x_i, x'_i, y'_i, y_i para $1 \leq i \leq p-3$, y los dos tipos de aristas siguientes:
 - Para cada $i + j > p-3$ hay una arista
entre x_i y x'_j ; entre x'_i y y'_j ; entre y'_i y y_j ; entre y_i y x_j .
 - Para cada $i + j < p-5$ hay una arista
entre x_i y x'_j ; entre y'_i y y_j .
2. $X(p-3)$ y $Y(p-3)$ son los subgrafos completos de $S(p-3)$ generados por los vértices x_i y x'_i , en el caso de $X(p-3)$, y por los vértices y_i e y'_i , en el caso de $Y(p-3)$, con $1 \leq i \leq p-5$.
3. El isomorfismo $v_{p-3}: \text{RAAG}(X(p-3)) \rightarrow \text{RAAG}(Y(p-3))$ está determinado por

$$v_{p-3}(x_i) = y_{p-i-4} \quad \text{y} \quad v_{p-3}(x'_i) = y'_{p-i-4} \quad \text{para } 1 \leq i \leq p-5.$$

La descripción explícita del tipo de homotopía de un espacio que clasifique los haces fibrados cuyo grupo estructural esté dado por una extensión HNN de un RAAG puede encontrarse, por ejemplo, en [22, Section 1.B]. Para nuestros fines, el punto es que $\text{UC}(3p-2, p \times 3)$, al ser a esférico y por tanto clasificante para su grupo fundamental, está dado salvo homotopía por una construcción de tipo *mapping torus*. Concretamente, formemos el cilindro $[0, 1] \times (S^1)^{X(p-3)}$ con base el complejo

de Salvetti determinado por $X(p-3)$, y peguemos, via la inclusión obvia, uno de los extremos de este cilindro con el correspondiente complejo de Salvetti $(S^1)^{S(p-3)}$. Si bien esta primera parte de la construcción utiliza diversos “pequeños” toros $S^1 \times S^1$ (Ejemplo 6.4), en la segunda y última parte de la construcción formamos un toro “dominante” identificando el otro extremo del cilindro con el subcomplejo $(S^1)^{Y(p-3)}$ de $(S^1)^{S(p-3)}$. Ésta última identificación se realiza via el homeomorfismo que realiza al isomorfismo v_{p-3} .

Referencias

- [1] B. J. Alder and T. E. Wainwright. Phase transition in elastic disks. *Phys. Rev.*, 127:359–361, Jul 1962.
- [2] Hannah Alpert. Discrete configuration spaces of squares and hexagons. *J. Appl. Comput. Topol.*, 4(2):263–280, 2020.
- [3] Hannah Alpert, Ulrich Bauer, Matthew Kahle, Robert MacPherson, and Kelly Spendlove. Homology of configuration spaces of hard squares in a rectangle. *Algebr. Geom. Topol.*, 23(6):2593–2626, 2023.
- [4] Hannah Alpert, Matthew Kahle, and Robert MacPherson. Configuration spaces of disks in an infinite strip. *J. Appl. Comput. Topol.*, 5(3):357–390, 2021.
- [5] Hannah Alpert, Matthew Kahle, and Robert MacPherson. Asymptotic Betti numbers for hard squares in the homological liquid regime. *Int. Math. Res. Not. IMRN*, (10):8240–8263, 2024.
- [6] Hannah Alpert and Fedor Manin. Configuration spaces of disks in a strip, twisted algebras, persistence, and other stories. *Geom. Topol.*, 28(2):641–699, 2024.
- [7] Omar Alvarado-Garduño and Jesús González. Trabajo en progreso.
- [8] Omar Alvarado-Garduño, Jesús González, and Matthew Kahle. A combinatorial genesis of the right-angled relations in Artin’s classical braid groups. *Manuscrito disponible en <https://doi.org/10.48550/arXiv.2504.12201>*.
- [9] J. A. Barker and D. Henderson. What is “liquid”? Understanding the states of matter. *Rev. Mod. Phys.*, 48:587–671, Octubre 1976.

- [10] Yuliy Baryshnikov, Peter Bubenik, and Matthew Kahle. Min-type Morse theory for configuration spaces of hard spheres. *Int. Math. Res. Not. IMRN*, (9):2577–2592, 2014.
- [11] Gustavo Bautista-Carbajal and Gerardo Odriozola. Phase diagram of two-dimensional hard ellipses. *Journal of Chemical Physics*, 140:204502, 2014.
- [12] R. J. Baxter. Hard hexagons: exact solution. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 13:L61, 1980.
- [13] Etienne P. Bernard and Werner Krauth. Two-step melting in two dimensions: First-order liquid-hexatic transition. *Phys. Rev. Lett.*, 107:155704, Oct 2011.
- [14] Gunnar Carlsson, Jackson Gorham, Matthew Kahle, and Jeremy Mason. Computational topology for configuration spaces of hard disks. *Phys. Rev. E*, 85:011303, Jan 2012.
- [15] Debojit Chanda, Thomas G. Mason, and Manas Khan. Orientational dynamics governs the pathways of entropic crystallization of brownian squares. *Manuscrito disponible en <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.07352>*.
- [16] J. A. Cuesta and D. Frenkel. Monte Carlo simulation of two-dimensional hard ellipses. *Physical Review A*, 42:2126–2136, 1990.
- [17] Kenneth Deeley. Configuration spaces of thick particles on a metric graph. *Algebr. Geom. Topol.*, 11(4):1861–1892, 2011.
- [18] Michael Engel, Joshua A. Anderson, Sharon C. Glotzer, Masaharu Isobe, Etienne P. Bernard, and Werner Krauth. Hard-disk equation of state: First-order liquid-hexatic transition in two dimensions with three simulation methods. *Phys. Rev. E*, 87:042134, Apr 2013.
- [19] Roberto Franzosi and Marco Pettini. Theorem on the origin of phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 92:060601, Feb 2004.
- [20] D. Frenkel and B. M. Mulder. The hard ellipsoid-of-revolution fluid: I. Monte Carlo simulations. *Molecular Physics*, 55:1171–1192, 1985.
- [21] Jesús González, Matthew Kahle, and Nicholas Wawrykow. Trabajo en progreso.

- [22] Allen Hatcher. *Algebraic topology*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [23] Matthew Kahle. Sparse locally-jammed disk packings. *Ann. Comb.*, 16(4):773–780, 2012.
- [24] Michael Kastner. Unattainability of a purely topological criterion for the existence of a phase transition for nonconfining potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 93:150601, Oct 2004.
- [25] Rob Kusner, Wöden Kusner, Jeffrey C. Lagarias, and Senya Shlosman. Configuration spaces of equal spheres touching a given sphere: the twelve spheres problem. In *New trends in intuitive geometry*, volume 27 of *Bolyai Soc. Math. Stud.*, pages 219–277. János Bolyai Math. Soc., Budapest, 2018.
- [26] Robert Löffler, Lukas Sientop, and Peter Keim. Tetratic phase in 2D crystals of squares. *Soft Matter*, 21:2026–2032, 2025.
- [27] D. R. Nelson. *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2002.
- [28] Leonid Plachta. Geometric aspects of configuration spaces of thick particles in a rectangle. *Unpublished*.
- [29] Leonid Plachta. Configuration spaces of squares in a rectangle. *Algebr. Geom. Topol.*, 21(3):1445–1478, 2021.
- [30] Ana C. Ribeiro Teixeira and Daniel A. Stariolo. Topological hypothesis on phase transitions: The simplest case. *Phys. Rev. E*, 70:016113, Jul 2004.
- [31] A.I. Shnirelman. On the geometry of the group of diffeomorphisms and the dynamics of an ideal incompressible fluid. *Math. USSR-Sb*, 56(1):79–105, 1987.
- [32] J. Vieillard-Baron. Phase transitions of the classical hard-ellipse system. *Journal of Chemical Physics*, 56:4729–4744, 1972.
- [33] Po-Yuan Wang and Thomas G Mason. A brownian quasi-crystal of pre-assembled colloidal penrose tiles. *Nature*, 561:94–99, 2018.
- [34] Richard M. Wilson. Graph puzzles, homotopy, and the alternating group. *J. Combinatorial Theory Ser. B*, 16:86–96, 1974.

- [35] Krzysztof W. Wojciechowski and D. Frenkel. Tetratic phase in the planar hard square system? *Computational methods in science and technology*, 10(2):235–255, 2004.
- [36] Kun Zhao, Robijn Bruinsma, and Thomas G. Mason. Entropic crystal-crystal transitions of brownian squares. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 108(7):2684–2687, 2011.
- [37] Kun Zhao and Thomas G. Mason. Twinning of rhombic colloidal crystals. *Journal of the American Chemical Society*, 134(43):18125–18131, 2012.
- [38] Kun Zhao and Thomas G. Mason. Self-organized chiral colloidal crystals of brownian square crosses. *J. Phys.: Condens. Matter*, 26:152101 (8pp), 2014.

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS DEL I.P.N.
AV. I.P.N NÚMERO 2508, SAN PEDRO ZACATENCO, MÉXICO CITY
07000, MÉXICO.
oalvarado@math.cinvestav.mx
jesus.glz-espino@cinvestav.mx and jesus@math.cinvestav.mx