UNIVERSIDADE DO PORTO

ANÁLISE COMBINATÓRIA NO ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE DOS SISTEMAS DE SPIN VECTORIAL

FRANCISCO JOSÉ LAGE CAMPELO CALHEIROS

PUBLICAÇÃO SUBSIDIADA PELO INIC

ANÁLISE COMBINATÓRIA
NO ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE
DOS SISTEMAS DE SPIN VECTORIAL

POR

FRANCISCO JOSÉ LAGE CAMPELO CALHEIROS

Dissertação de Doutoramento em Matemática Aplicada

apresentada à Universidade do Porto

1985

C A P Í T U L O I

UMA INTRODUÇÃO AO ESTUDO DE MODELOS DE SPIN SOBRE REDE

"Provided it yelds physically relevant statements, no mathematical technique is to be judged too sophisticated or too trivial"

D. Ruelle "Statistical Mechanics", pag. VII

Neste primeiro capítulo, essencialmente descritivo, tentamos recensear alguns dos problemas que nos interessaram na formulação matemática da mecânica estatística. São indicados sob a forma de teoremas os resultados sobre os quais foram construídas as nossas contribuições descritas nos outros capítulos.

I.1 RESULTADOS RIGOROSOS(*) EM FÍSICA

Os cientistas experimentais e os técnicos, geralmente olham com maus olhos os resultados rigorosos. Argumentam, com alguma razão, que as questões fisicamente interessantes e tecnologicamente úteis há muito tempo que estavam percebidas e resolvidas quando as demonstrações formais foram obtidas, e que a única coisa que resta desse formalismo matemático é a de tornar rigorosos e obscuros argumentos cuja validade era intuitivamente clara.

Estas objecções aplicam-se em parte ao estudo das transições de fase ; porém, não podemos deixar de lembrar que um certo número de resultados rigorosos se encontra muito próximo da primeira linha de investigação.

Argumentamos no que se segue sobre a necessidade do uso do método da matemática no estudo das transições de fase. Uma transição de fase ocorre num ponto de descontinuidade, ou mais precisamente num ponto do espaço das fases em que algumas funções termodinâmicas não são analíticas ; Além disso, nos modelos matemáticos habitualmente utilizados, o comportamento não analítico apenas aparece no limite, isto é, num sistema infinito. As transições de fase ocorrem precisamente em situações nas quais um descuido na troca de limites ou em que uma hipótese não justificada de que uma série de perturbações converge não só é má "matemática" mas também pode levar a conclusões físicas incorrectas.

Não pretendemos negar a importância das teorias aproximadas e dos argumentos intuitivos no estudo das transições de fase, como em qualquer outra disciplina científica ou técnica. O lugar dos resultados rigorosos não é o de substituir as outras técnicas mas o de servir de auxílio aos métodos

---

(*) O autor tem formação matemática ; por isso usa o termo rigoroso no sentido habitual das ciências exactas, sem pretender manifestar qualquer juízo de valor sobre outras aproximações à realidade.

intuitivos, fornecendo um conjunto de verificações simples e de padrões de comparação para os argumentos aproximados. E, da mesma forma que argumentos intuitivos podem motivar demonstrações matemáticas também argumentos rigorosos podem ocasionalmente fornecer novas maneiras de ver um problema físico.

1.2 GENERALIDADES SOBRE MECÂNICA ESTATÍSTICA; AS TRANSIÇÕES DE FASE

Desde os primórdios com GIBBS [11] a mecânica estatística desenvolveu-se em várias direcções e esquemàticamente (seguindo T.T.Wu & B.Mc Coy [2] , por exemplo) podemos distinguir três aproximações diferentes ao assunto :

1 - FUNDAMENTAL , que se interessa pelo estabelecimento de propriedades gerais dos sistemas de mecânica estatística e da demonstração de teoremas de existência por métodos matemáticos (i.e., rigorosos).

2 - FENOMENOLÓGICA , em que se tenta correlacionar e explicar quantitativamente os resultados experimentais por qualquer método razoável (*).

3 - CONSTRUÇÃO DE MODELOS : em que se tenta compreender os fenómenos estudando modelos simples nos quais pelo menos algumas quantidades fìsicamente importantes podem ser calculadas de forma exacta.

Qualquer destas aproximações deu contribuições importantes para a compreensão da mecânica estatística, e não se pode, nem é desejável que se separem completamente.

O conjunto de modelos exactamente solúveis numa disciplina física depende essencialmente da complexidade do seu objectivo ; há inúmeros modelos exactamente solúveis em Mecânica Clássica e no outro extremo há poucos problemas em Teoria dos Campos Quânticos e Relativistas (TCQR) que tenham sido resolvidos de forma exacta. O pequeno número de modelos resolvidos em TCQR como em mecânica estatística é devido principalmente a duas

---

(*) Evidentemente que a nossa antinomia entre razoável e rigoroso pode ser entendida como no provérbio : "O óptimo é inimigo do bom".

caracteristicas destes sistemas(*) :

1 - Em geral têm um grande número de partículas (sendo representadas no modelo, por uma infinidade, usualmente numerável).

2 - Apesar de muitas vezes a interacção fundamental entre as partículas ser a curta distância e a dois corpos (potencial "par"), cada partícula pode interagir indirectamente com um grande número de outras partículas, existindo assim, tanto no sistema como no modelo "fenómenos colectivos" com interacções entre partículas muito distantes.

O propósito da mecânica estatística é o estudo de sistemas com grande número de partículas e os fenómenos de maior interesse são precisamente aqueles que não aparecem em Mecânica Clássica ou Quântica. Daqui obtemos um critério de utilidade para os modelos de Mecânica Estatística :

A capacidade de descrever fenómenos típicos de sistemas com um grande número de partículas.

O aspecto mais característico dos sistemas da mecânica estatística é a EXISTÊNCIA DE TRANSIÇÕES DE FASE. Provàvelmente as transições de fase mais familiares são as relativas à água : à condensação do vapor e à fusão do gelo (fig. I.1) .

(*) Para nós sistema é um "objecto" físico e modelo um "objecto" matemático ; Dualidade idêntica a frequência - probabilidade ; usamos indiferentemente os dois termos quando daí não resultar ambiguidade.

Apenas um pouco menos familiar é a transição de fase ferro-paramagnética que por exemplo para o ferro acontece a 1043ºK (temperatura de Curie) (fig. I.2).

Dos modelos que exibem uma transição de fase, o mais famoso, mais antigo e mais simples é o modelo de Ising [3] , que usaremos como termo de comparação para todos os resultados noutros modelos. Deste modelo dizem B.Mc Coy e T.T.Wu [2] : "É uma das mais belas descobertas da Física do século XX ; o modelo de Ising tem não só uma transição ferro-paramagnética mas também muitas outras propriedades físicas que podem ser exactamente calculadas. Na realidade mesmo sobre uma rede bidimensional exibe "todos" os fenómenos característicos dos sistemas ferromagnéticos na proximidade da temperatura de Curie".

J. BELLISARD [50] , citando WILSON , KOGUT [54] junta que "apesar da simplicidade parece ter as propriedades necessárias e suficientes que são observadas em teoria quântica dos campos na vizinhança do ponto crítico" (sublinhado nosso).

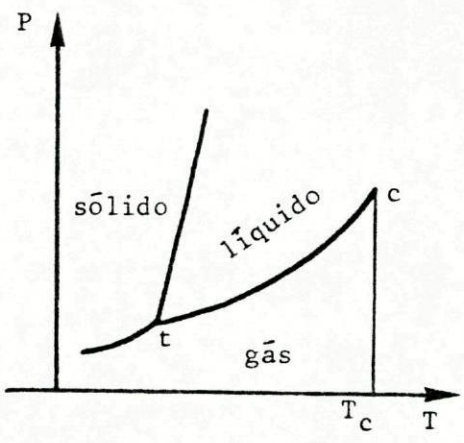


fig. I.1

Diagrama das fases da água :
P - pressão ; T - temperatura
t - ponto triplo ; c - ponto crítico

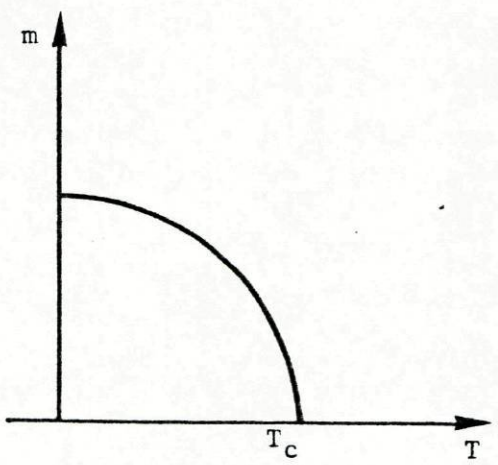


fig. I.2

Magnetização espontânea (m) de cristais ferromagnéticos em função da temperatura T
(campo magnético exterior H = 0)

I.3 SISTEMAS TERMODINÂMICOS

Neste ponto inspiramo-nos em RUELLE [4] § 1.1

A mecânica estatística (rigorosa) tem como OBJECTIVO a compreensão (matemática) duma classe de sistemas físicos caracterizados por :

1 - serem constituidos por subsistemas (que no modelo são usualmente definidos de forma a serem idênticos) ;

2 - O número de subsistemas ser grande ;

3 - As interacções entre os subsistemas serem tais que o sistema tem comportamento termodinâmico .

Caracterizaremos de forma rigorosa o que deve entender-se por comportamento termodinâmico ; por agora deve entender-se por descrição fenomenológica macroscópica do sistema, tipicamente :

1' - Os estados de equilíbrio podem ser definidos operacionalmente. O estado dum sistema isolado tende para o equilíbrio quando o tempo tende para $+\infty$ ("aproximação do equilíbrio").

2' - Um estado de equilíbrio do sistema é formado por uma ou várias regiões macroscópicamente homogéneas (chamadas FASES).

3' - Os estados de equilíbrio podem ser descritos pela teoria, em particular os estados podem ser parametrizados por um conjunto finito de parâmetros os quais determinam todas as funções termodinâmicas. (por exemplo : pressão, energia, temperatura, entropia ...). Acredita-se que as funções termodinâmicas são analíticas por bocados(*) nos parâmetros, correspondendo as singularidades a mudanças na estrutura das fases do sistema (TRANSIÇÕES DE FASE).

4' - Podem definir-se "coeficientes de transporte" a partir da resposta de 1^a ordem do sistema a pequenas perturbações do equilíbrio .

(*) "piecewise analytic"

É razoável esperar que a fundamentação matemática dos pontos 1' a 4', pelo menos para sistemas idealizados envolva o limite do sistema infinito ou limite termodinâmico (como consequência do facto de termos um "grande" número de "pequenos" subsistemas) ver I.5.7.

Vamos concentrar o nosso estudo nos pontos 2' e mais particularmente em 3' .

I.4 OS MODELOS: GENERALIDADES

Um modelo em mecânica estatística é determinado pelo espaço das configurações e pela energia, quer dizer pelo Hamiltoneano.

As técnicas usadas para o estudo de modelos clássicos ou quânticos são semelhantes(*). Além disso, muitas vezes os resultados são qualitativamente próximos, ver a figura I.3

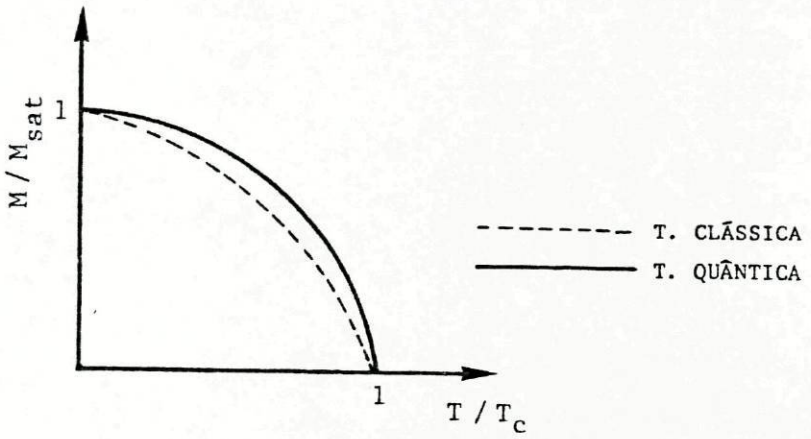


Fig. I.3 Magnetização espontânea de cristais ferromagnéticos em função da temperatura (campo exterior h = 0)

A dificuldade do estudo, ou por outras palavras o conjunto de resultados rigorosos conhecidos está essencialmente ligado ao espaço das configurações(**) considerado. Indicamos por ordem de dificuldade crescente os seguintes tipos(***):

- modelos sobre rede
- modelos de partículas com núcleo rígido
- modelo de partículas pontuais.

(*) Entre outros esta opinião é partilhada por Landau e Lipschitz [132] pag. 9.

(**) Generalizaremos o conceito de espaço das configurações.

(***) ver formulação precisa em RUELLE [4] .

Recentemente aplicaram-se os métodos da mecânica estatística aos modelos de teoria quântica dos campos (aqui o espaço das configurações é um conjunto de destribuições temperadas(*)) e a modelos de teoria de Jauge sobre rede.

A escolha de modelos clássicos sobre rede é deliberada : por um lado a ferramenta matemática para o estudo destes modelos é mais simples que a necessária para o estudo dos modelos quânticos(**) e (ou) contínuos. A principal diferença entre os modelos sobre rede e os modelos contínuos é que nos primeiros temos funções densidade de probabilidade e nos segundos funcionais densidade. A matemática de base para a mecânica estatística contínua é a análise funcional "que não está suficientemente desenvolvida" (KRÖNER [9]). A diferença entre os modelos clássicos e os modelos quânticos é que as quantidades observáveis nos modelos clássicos podem ser descritas por funções reais do espaço das configurações, enquanto que nos modelos quânticos são operadores auto-adjuntos sobre o espaço de Hilbert do sistema.

Restringimo-nos por isso a modelos clássicos sobre rede, que como veremos podem ser interpretados como modelos de magnetismo nos sólidos, ou como modelos de ligas metálicas ou ainda como uma versão discreta de sistemas de partículas pontuais, que em vez de se moverem livremente no espaço, ocupam necessàriamente nós da rede (modelo de gás sobre rede).

(*) Sendo S o conjunto das funções (teste) indefinidamente deriváveis decrescendo quando $|x| \to \infty$ mais rapidamente que $|x|^{-n}\ \forall_n$, chama-se distribuição temperada a toda a funcional contínua sobre S . Ver, por exemplo, RODDIER [7] , VLADIMIROV [8] .

(**) Indicamos o único autor que sabemos estar em desacordo com esta (nossa) opinião BALIAN [6] .

I.5 MODELOS SOBRE REDE: SEUS ESTADOS DE EQUILÍBRIO

"On parle d'équilibre quand tout ce qui peut se produire se produit"

Hubert Reeves in
"La Matiére Aujourd'hui" Ed Seuil , pag. 110.

I.5.1 INTRODUÇÃO

Neste ponto vamos referir a construção "geral" dos estados de Gibbs nos modelos sobre rede clássicos.

Começamos por definir o espaço das configurações. Definimos em seguida estados de Gibbs e indicamos as suas propriedades matemáticas.

Concluimos com a indicação de condições suficientes para que o conjunto dos estados de Gibbs seja não vazio, elementar (isto é,um só estado) etc..

Seguimos muito de perto CH.PRESTON [19] . Descrições alternativas podem ser encontradas em D.RUELLE [4] , YA.G.SINAI [56] , R.ISRAEL [22] , S.MIRACLE- SOLE [55] .

I.5.2 MODELO SOBRE REDE. ESPAÇO DAS CONFIGURAÇÕES

A caracterização dos estados de equilíbrio que vamos descrever pode ser feita para um conjunto T qualquer com uma ordem parcial. Para simplificar as notações vamos considerar T numerável (PRESTON [20]) e mais particularmente contido em $\mathfrak{T}(\mathbb{Z}^d)$ (*) em que $\mathbb{Z}$ é o conjunto dos números inteiros relativos e d um número natural.

Um nó t da rede $\mathbb{Z}^d$ é então caracterizado por uma sequência de d números inteiros, $t^{(i)} \in \mathbb{Z}$

$$t = (t^{(1)}, t^{(2)}, \ldots, t^{(d)})$$

que são as coordenadas de t em unidades de malha.

Nos subconjuntos de $\mathbb{Z}^d$ está definida uma ordem parcial natural dada pela inclusão usual de subconjuntos de $\mathbb{Z}^d$, $\subset$.

Designamos por $\mathcal{C}$ o conjunto dos subconjuntos finitos de nós da rede $\mathbb{Z}^d$.

Sendo $\Lambda \in \mathcal{C}$ escrevemos $|\Lambda|$ para indicar o número de elementos de Λ:

$$\Lambda = \{t_1, t_2, \ldots, t_{|\Lambda|}\}$$

em que cada $t_i \in \mathbb{Z}^d$.

Um modelo sobre rede é um modelo em que os subsistemas são indexados pelos nós da rede.

Suponhamos que em cada nó $t \in \mathbb{Z}^d$ o conjunto dos estados do subsistema em t é S_t . Chamamos espaço das configurações do modelo ao conjunto

$$X = \prod_{t \in \mathbb{Z}^d} S_t$$

em que $\prod$ indica o produto cartesiano usual.

Sendo $A \subset \mathbb{Z}^d$ podemos definir o espaço das configurações sobre A

(*) $\mathfrak{T}(A)$ - conjunto dos subconjuntos de A

$$X(A) = \prod_{t \in A} S_t$$

Cada conjunto S_t será munido duma medida μ_t , e para cada $\Lambda \subset T$ designamos por μ_Λ a medida produto definida em $X(\Lambda)$

Vamos caracterizar os estados de equilíbrio no caso em que X é um espaço compacto(*) Hausdorf(**). No ponto I.6.3.2 tratamos sucintamente uma situação mais geral.

As propriedades de X são usualmente consequência das propriedades dos S_t , via teoremas gerais, considerando em X a topologia produto :

TEOREMA DE TYCHONOV

O produto $X = \prod_{t \in T} S_t$ de espaços S_t compactos é compacto, qualquer que seja o conjunto T (ver KURATOWSKI [16])

TEOREMA

O produto de espaços Hausdorf é Hausdorf

(ver KURATOWSKI [16])

(*) X é compacto sse cada cobertura de X por abertos contém uma subcobertura finita de X .

X é sequencialmente compacto sse toda a sucessão $\{x_n\} \subset X$ tem uma subsucessão convergente (em X)

(**) Hausdorf por exemplo no sentido de $\forall_{x,y \neq x \in X}$ existe uma vizinhança de x , v_x e uma vizinhança de y , v_y tal que $\overline{v_x} \cap v_y = \emptyset$ ($\overline{v_x}$ indica o fecho de v_x).

No que se segue designamos por $\mathcal{T}$ a σ-álgebra de Borel(***) sobre X .

(***) $\mathcal{E}$ é uma σ-álgebra sobre X sse

0 - $\emptyset \neq \mathcal{E} \subset \mathcal{P}(X)$

1 - $A \in \mathcal{E} \Rightarrow \overline{A} = X - A \in \mathcal{E}$

2 - $A_i \in \mathcal{E}$,$\forall i \in \mathbb{N} \Rightarrow \bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in \mathcal{E}$

A σ-álgebra de Borel dum espaço topológico é a mais pequena σ-álgebra que contem os abertos.

I.5.3 OS ESTADOS DE EQUILÍBRIO / EQUAÇÕES D.L.R.

Suponhamos um sistema com a evolução governada por um hamiltoneano e que X é o espaço das fases desse sistema.

Um dos primeiros objectivos da mecânica estatística é determinar quais as medidas de probabilidade sobre $(X, \mathcal{F})$ que são ("representações" de) estados de equilíbrio do sistema, e determiná-las sem construir explicitamente a dinâmica do sistema.

Como vamos ver os ESTADOS DE EQUILÍBRIO são as medidas de probabilidade que têm as probabilidades condicionais convenientes (q.v.) nos conjuntos finitos. Estas probabilidades condicionais são dadas por fórmulas envolvendo o hamiltoneano. Para detalhar precisamos de introduzir notação :

Para todo o subconjunto $A \subset \mathbb{Z}^d$ seja $\mathcal{F}_o(A)$ a σ-álgebra de Borel em $X(A)$ e seja p_A a projecção de X em $X(A)$.

Seja $\mathcal{F}(A) = p_A^{-1}(\mathcal{F}_o(A))$.

É fácil ver que $\mathcal{F}(A)$ é uma σ-álgebra, e que representa os acontecimentos mensuráveis em A, cilindros em X cuja base está contida em A.

Se $A \subset B \subset \mathbb{Z}^d$ então $\mathcal{F}(A) \subset \mathcal{F}(B)$, como é fácil verificar.

Se $\Lambda \in \mathcal{C}$ escrevemos $\mathcal{F}_\Lambda = \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d - \Lambda)$, o conjunto dos observáveis no exterior de Λ.

A hipótese de DOBRUSHIN-LANFORD-RUELLE ([21] , [23] , [24] , [25] , [26] , [52] , [27]) é que $\forall \Lambda \in \mathcal{C} \quad \forall_y \in \mathbb{Z}^d - \Lambda$ o hamiltoneano define uma probabilidade σ_Λ^y no espaço $(X(\Lambda), \mathcal{F}_o(\Lambda))$ e os estados de equilíbrio são as medidas de probabilidade que têm $\{\sigma_\Lambda^y : \Lambda \in \mathcal{C} \wedge y \in \mathbb{Z}^d - \Lambda\}$ como probabilidades condicionais dadas pelo hamiltoneano.

Como para cada $F \in \mathcal{F}_o(\Lambda)$, $\sigma_\Lambda^y(F)$ será uma função de $y (\in \mathbb{Z}^d - \Lambda)$ $\mathcal{F}_o(\mathbb{Z}^d - \Lambda)$-mensurável, uma medida de probabilidade μ_E tem as probabilidades

condicionais convenientes sse

$$\forall_\Lambda \in \mathcal{C} \quad \forall_y \in \mathbb{Z}^d - \Lambda \qquad p_\Lambda(\mu_E) = \int \sigma_\Lambda^y \, dp_{\mathbb{Z}^d - \Lambda}(\mu_E)\,(y)$$

Estas equações designam-se por equações de D.L.R. (Dobrushin - Lanford - - Ruelle).

A probabilidade σ_Λ^y pode ser vista como o estado de equilíbrio do sistema no interior do "contentor" finito Λ , com a dinâmica governada pelo mesmo hamiltoneano, mas com a configuração no exterior de Λ fixa y .

Como $X(\Lambda)$ é o produto cartesiano duma família finita de conjuntos podemos identificar σ_Λ^y com a sua densidade (Stieltjes) em relação à medida μ_Λ .

Usualmente σ_Λ^y toma a forma

$$Z_\Lambda(y)^{-1} \exp g^\Lambda(y, .)$$

onde para cada configuração $\omega \in X(\Lambda)$ $g^\Lambda(y, \omega)$ é proporcional à <u>energia da configuração ω</u> em Λ com a configuração em $\mathbb{Z}^d - \Lambda$ fixa : y .

$Z_\Lambda(y)$ é escolhido de forma que σ_Λ^y seja uma probabilidade :

$$Z_\Lambda(y) = \int_{X(\Lambda)} \exp g^\Lambda(y, \omega) \, d\mu_\Lambda(\omega)$$

$Z_\Lambda(y)$ designa-se por <u>função de partição</u>. No caso de S ser finito $Z_\Lambda(y)$ pode ser obtido por

$$\sum_{\omega \in X(\Lambda)} \exp g^\Lambda(y, \omega)$$

isto é, somando sobre todas as configurações no interior de Λ .

No caso geral, com $\omega = (\omega_1, \omega_2, \ldots \omega_{|\Lambda|}) \in \Lambda$, podemos escrever

$$Z(y) = \int_{S_{t_1}} \int_{S_{t_2}} \ldots \int_{S_{t_{|\Lambda|}}} \exp\left[g^{\Lambda}(y ; \omega_1, \ldots, \omega_{|\Lambda|})\right] d\mu(\omega_1)\, d\mu(\omega_2) \ldots d\mu(\omega_{|\Lambda|})$$

NOTA :

Se se quizer ver estes campos aleatórios como processos de Markov generalizados as quantidades $\exp g^{\Lambda}(.\,,.) / Z_{\Lambda}(.)$ tem o mesmo papel que as probabilidades de transição.

O leitor deve estar a interrogar-se porque é que esta definição é a definição correcta. E É MUITO DIFÍCIL RESPONDER SATISFATÒRIAMENTE. A única maneira de responder a esta pergunta era construir explìcitamente a dinâmica do sistema e verificar que estes estados não evoluem espontâneamente, isto é, que os estados de equilíbrio são exactamente aquelas probabilidades que verificam as equações D.L.R.. Porém, para muitos modelos a construção do sistema dinâmico que lhe corresponde não é fácil, e daí conhecerem-se muito poucos resultados e apenas em casos particulares (por ex.: LANFORD [17] , MARCHIORO , PELLEGRINOTTI,PRESSUTTI [18]). Podemos porém justificar a definição dizendo que muitos físicos a consideram correcta e que os resultados que se podem provar para estas medidas de probabilidade são aqueles que, de acordo com as experiências físicas, os estados de equilíbrio devem verificar.

Concretizando :

1 - Nos modelos sobre rede, as medidas que verificam as equações D.L.R. podem ser vistas como as medidas cuja distribuição no interior de cada conjunto finito Λ está em equilíbrio com a distribuição no exterior desse volume. Isto porque $p_{\mathbb{Z}^d - \Lambda}(\mu_E)$ é a distribuição no exterior de Λ e então nas equações D.L.R. temos uma representação do estado de equilíbrio,

no interior de Λ , dum sistema cujo estado no exterior está fixado $P_{\mathbb{Z}^d - \Lambda}^{(\mu_E)}$.

2 - Pode-se verificar que as medidas que satisfazem D.L.R. são as que podem ser obtidas como limites fracos (Van Hove) de sucessões da forma $\sigma_{\Lambda_n}^{y_n}$ ($n \geq 1$) com Λ_n crescendo para $\mathbb{Z}^d$ e $y_n \in X(\mathbb{Z}^d - \Lambda_n)$. Isto corresponde a tomar um "limite termodinâmico" : deixa-se o "contentor" expandir-se modificando ao mesmo tempo as condições fronteira. Esta segunda forma de ver talvez ajude a compreender que esta técnica não difere muito da maneira "clássica" de trabalhar em mecânica estatística do equilíbrio. Discutimos a definição de limite termodinâmico (VAN HOVE) no ponto I.5.7 .

Tudo isto pode formalizar-se de maneira mais geral utilizando o conceito de núcleo estocástico. (ver PRESTON [19] , GHIKMAN-SKOROKHOD [28]). Não o fazemos aqui visto não necessitarmos de tal generalidade para os capítulos seguintes.

Na formulação dum modelo sobre rede a estrutura particular do modelo não é importante. Basta que o conjunto X (espaço das configurações) tenha uma σ - algebra de Borelianos $\mathcal{F}$, que um conjunto de "indices" $\mathcal{C}$ tenha uma ordem parcial que notamos por $\subset$, que se tenha uma colecção de sub-σ - algebras $\{ \mathcal{F}_\Lambda : \Lambda \in \mathcal{C} \}$ decrescente, isto é, $\mathcal{F}_{\tilde{\Lambda}} \subset \mathcal{F}_\Lambda$ se $\Lambda \subset \tilde{\Lambda}$ e uma colecção de núcleos de probabilidade, isto é uma família de probabilidades condicionais que verifiquem certas condições de mensurabilidade e de compatibilidade com o Hamiltoneano.

DEFINIÇÃO : ESTADOS DE GIBBS

As probabilidades μ_E que satisfazem as equações D.L.R. designam-se por estados de equilíbrio ou estados de Gibbs associados ao hamiltoneano.

Podemos ver estes modelos como processos estocásticos "generalizados" [28] e nesse caso as densidades condicionais correspondem às densidades de transição dos processos usuais como já vimos. A diferença é que nos processos estocásticos usuais o conjunto de indices, $\mathbb{C} \subset \mathbb{R}$, e $\forall_t \in \mathbb{R}$ (tempo) $\mathcal{F}_t$ é a σ - álgebra dos acontecimentos observáveis até ao instante t (Podia escrever-se $\mathcal{F}_{[0,\,t]}$ em vez de $\mathcal{F}_t$). Alguns dos problemas de base são semelhantes : por exemplo, os problemas ligados às condições fronteira são idênticos aos problemas ligados às definições de probabilidades condicionais supondo que o processo está num determinado estado no instante t ; as equações D.L.R. têm um papel idêntico ao das condições de compatibilidade e às equações do tipo das de Kolmogorov, dos processos estocasticos usuais.

I.5.4 AS FUNÇÕES DENSIDADE DE PROBABILIDADE DAS MEDIDAS QUE VERIFICAM D.L.R ; OS POTENCIAIS

Salvo indicação em contrário os resultados desta secção são válidos sobre um conjunto qualquer numerável na situação descrita em I.5.3 (ver PRESTON [19] , cap II, III, IV). Vamos escrevê-los no caso particular da rede cúbica $\mathbb{Z}^d$.

A nossa redacção é uma adaptação do capítulo V do mesmo texto [19] .

No que se segue escrevemos $\overline{\Lambda}$ em vez de $\mathbb{Z}^d - \Lambda$.

Seja $\mathcal{F}_t$ a σ-álgebra de Borel sobre S_t , $\forall t \in \mathbb{Z}^d$ e sejam $\mathcal{F} = \prod_{t \in \mathbb{Z}^d} \mathcal{F}_t$, $\mathcal{F}_o(A) = \prod_{t \in A} \mathcal{F}_t$, $A \subset \mathbb{Z}^d$ e $\mathcal{F}(A) = (p_A)^{-1} \mathcal{F}_o(A)$, em que p_A é o projector canónico :

$$p_A : \prod_{t \in \mathbb{Z}^d} S_t = X \longrightarrow \prod_{t \in A} S_t = X(A)$$

Para cada $\Lambda \in \mathcal{C}$ definimos $\mathcal{F}_\Lambda = \mathcal{F}(\overline{\Lambda})$ e $\mu_\Lambda = \prod_{t \in \Lambda} d\mu_t$. Obtemos assim uma família $\{\mathcal{F}_\Lambda\}$ decrescente de σ-álgebras.

Supomos que σ_Λ^y é absolutamente contínua em relação a μ_Λ .

Vamos ver quais são as condições nas derivadas de Radon-Nikodym de σ_Λ^y de forma que σ_Λ^y sejam as probabilidades condicionais convenientes. As derivadas de Radon-Nikodym são designadas usualmente por densidades f^Λ , e fisicamente correspondem a POTENCIAIS.

No que se segue escrevemos x_A em vez de $p_A(x)$ e se $A = \{t\}$ escreveremos $x_t = x_{\{t\}} = p_{\{t\}}(x)$, a componente t da configuração x .

Seja $\{f^\Lambda\}$ $\Lambda \in \mathcal{C}$ uma família de funções $\mathcal{F}$-mensuráveis. $f^\Lambda(y \times .)$ como função de $X(\Lambda)$ para $y \in X(\overline{\Lambda})$ (y fixo) representará a densidade de σ_Λ^y em relação a $d\mu_\Lambda$.

Nestas condições queremos definir a função

$$\sigma_\Lambda^{x_{\overline{\Lambda}}} : X \times \mathcal{F} \longrightarrow \mathbb{R}$$

por

$$\sigma_{\Lambda}^{x_{\overline{\Lambda}}}(F) = \int_A f^{\Lambda}(x_{\overline{\Lambda}}, \omega)\, d\mu_{\Lambda}(\omega)$$

em que $A = \{\omega \in X(\Lambda) : (x_{\overline{\Lambda}}, \omega) \in F\}$ onde identificamos X com $X(\Lambda) \times X(\overline{\Lambda})$.

TEOREMA - 0 (PRESTON [19] pag 59 - 62)

A família $\{f_{\Lambda}\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ de funções $\mathcal{F}_{\Lambda}$ - mensuráveis define uma medida μ_E que verifica D.L.R., sse

I - 1 - $f_{\Lambda}(x) \geq 0 \quad \forall_{\Lambda \in \mathcal{C}}$, e para μ_{Λ} - quase todo $\omega \in X(\Lambda)$ (*)

I - 2 - $\int_{\Lambda} f^{\Lambda}(y, \omega)\, d\mu_{\Lambda}(\omega) = 1 \quad \forall_{y \in X(\overline{\Lambda})} \quad \forall_{\Lambda \in \mathcal{C}}$

I - 3 - $\Lambda \subset \tilde{\Lambda} \in \mathcal{C} \quad x, \tilde{x} \in X$ tal que $x_{\overline{\Lambda}} = \tilde{x}_{\overline{\Lambda}}$ (configurações que coincidem no exterior do volume mais pequeno) então

$$f^{\tilde{\Lambda}}(\tilde{x})\, f^{\Lambda}(x) = f^{\tilde{\Lambda}}(x)\, f^{\Lambda}(\tilde{x})$$

As duas primeiras condições são a caracterização usual das funções densidade de probabilidade e a terceira é uma condição de compatibilidade.

Vamos, agora, escrever uma representação da família de densidades de probabilidade $\{f^{\Lambda}\}$ na forma com que usualmente aparecem nos textos de mecânica estatística.

(*) "... μ - quase todo $\omega \in X$" quer dizer que o conjunto dos $\underline{\omega} \in X$ que não verificam a condição está contido num conjunto de medida nula.

Seja b um ponto de referência no espaço das configurações e seja

$$X_o = \{x \in X : \exists_{\Lambda \in \mathcal{C}} : x_{\overline{\Lambda}} = b_{\overline{\Lambda}}\}$$

isto é, X_o será o conjunto das configurações x que coincidem com b excepto (eventualmente) num conjunto finito Λ .

TEOREMA 1 (PRESTON [19] PROPOSITION 5.1)

Se $f_\Lambda(x) > 0 \qquad \forall_{x \in X} \qquad \forall_{\Lambda \in \mathcal{C}}$

Então

existe uma, e uma só, função $V : X_o \longrightarrow \mathbb{R}$ tal que :

(1) $V(b) = 0$

(2) $$f^\Lambda(x) = \frac{\exp\{V(x)\}}{\int \exp\{V(x_{\overline{\Lambda}}, \omega)\}\, d\mu_\Lambda(\omega)} \qquad \forall_{x \in X_o}$$

Evidentemente que podemos substituir a condição $V(b) = 0$ por outra condição $V(b) = a$, $\forall_{a \in \mathbb{R}}$ desde que fixemos a duma vez por todas.

Usualmente temos a situação recíproca : conhecemos uma função $V : X_o \longrightarrow \mathbb{R}$ e pretendemos definir os estados de equilíbrio (isto é, as medidas μ_E que verificam as equações D.L.R.). Verifica-se facilmente que se $V : X_o \longrightarrow \mathbb{R}$ com $V(b) = 0$ e se $f^\Lambda : X_o \longrightarrow \mathbb{R}$ é definida pela condição (2) do teorema anterior e supondo que todos os integrais têm sentido então f^Λ é uma família de densidades, que verificam a condição de compatibilidade mas em X_o em vez de em X . Vamos ver em que condições podemos estender a definição de X_o a X .

A função V pode ser vista como a energia potencial(*) do sistema em relação à configuração b , isto é, $V(x)$ é a energia(*) necessária para o

---

(*) afora constante

sistema passar da configuração b para a configuração x .

Em mecânica estatística a energia potencial é usualmente escrita como soma das <u>interacções</u> entre os diferentes nós da rede. Suponhamos que

$$V(x) = \sum_{\Lambda \in \mathcal{C}} \phi_\Lambda(x_\Lambda)$$

com $\phi_\Lambda : X(\Lambda) \longrightarrow \mathbb{R}$ $\mathcal{F}(\Lambda)$ - mensurável tal que

(1) $\phi_\Lambda(\omega) = 0$ se $\exists_{t \in \Lambda} \quad \omega_t = b_t$

(2) $\phi_\emptyset \equiv 0$

Devido à condição (1) não há problemas de convergência visto que $\forall_{x \in X_o}$ o conjunto $\{\Lambda \in \mathcal{C} : \phi(x) \neq 0\}$ é finito.

ϕ_Λ pode ser visto como o potencial devido à interacção a $|\Lambda|$ - corpos entre os nós de Λ .

É fácil ver que nestas condições

$$\phi_\Lambda(z) = \sum_{A \subset \Lambda} (-1)^{|\Lambda - A|} V(b_{\overline{A}} , z_A)$$

em que ϕ_Λ é $\mathcal{F}(\Lambda)$ - mensurável sse $V(b_{\overline{\Lambda}} , .) : X(\Lambda) \longrightarrow \mathbb{R}$ for $\mathcal{F}_o(\Lambda)$ - mensurável.

Se definirmos $g^\Lambda \quad \forall_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ por

$$g^\Lambda : X_o \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$g^\Lambda(x) = \sum_{\Lambda \in K(\Lambda)} \phi_\Lambda(x_\Lambda) \qquad \text{(II)}$$

com $K(\Lambda) = \{A \in \mathcal{C} : A \cap \Lambda \neq \emptyset\}$ obtemos

$$V(x_{\overline{\Lambda}} , \omega) - V(x_{\overline{\Lambda}} , b_\Lambda) = g^\Lambda(x_{\overline{\Lambda}} , \omega)$$

e podemos reescrever a condição (2) do teorema anterior na forma

$$f^{\Lambda}(x) = \frac{\exp \{g^{\Lambda}(x)\}}{\int \exp g^{\Lambda}(x_{\overline{\Lambda}}, \omega)\, d\mu_{\Lambda}(\omega)} \qquad \text{(III)}$$

Se $\emptyset_{\Lambda}$ verificar as propriedades que indicamos a seguir, a equação (II) pode servir para definir a extensão de $g^{\Lambda}(x)$ de X_o a X e portanto pode usar-se (III) para definir $f^{\Lambda}(x) \quad \forall_{x \in X}$.

Suponhamos que $\mu_t(S_t) < \infty \quad \forall_t$ (é usual dizer-se que a <u>medida</u> é <u>finita</u>).

Definimos $\|\emptyset_{\Lambda}\|$ por

$$\|\emptyset_{\Lambda}\| = \sup_{y \in X(\Lambda)} |\emptyset_{\Lambda}(y)|$$

Então :

<u>TEOREMA</u> 2 (PRESTON [19] PROPOSITION 5.2)

Se $\forall_{t \in \mathbb{Z}^d} \quad \sum_{\Lambda \in K(t)} \|\emptyset_{\Lambda}\| < \infty$ (*)

(isto é, a interacção sobre cada nó é finita, visto que a soma é feita sobre os $\Lambda \in \mathcal{C}$ tais que $t \in \Lambda$), então, para cada $\Lambda \in \mathcal{C}$, a equação (II) define uma função $g^{\Lambda} : X \longrightarrow \mathbb{R}$, limitada e $\mathcal{F}$- mensurável e se $f^{\Lambda} : X \longrightarrow \mathbb{R}$ for definida por (III) então $\{f^{\Lambda}\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ verificam as condições I - 1, I - 2 e I - 3, isto é, a família de densidades $\{f_{\Lambda}\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ define uma medida μ_E que verifica as equações D.L.R.

(*) Esta condição sobre os potenciais é uma das que mais usualmente aparece em Mecânica Estatística - ver D. RUELLE [4] , O. LANFORD, D. RUELLE [21] e também o ponto I.5.7 deste texto.

Temos agora um método de construção explícita de estados que verificam as equações D.L.R. a partir de funções $\{\emptyset_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$. Se $V : X_o \longrightarrow \mathbb{R}$ com $V(b) = 0$, chamamos POTENCIAL (de base b) à função V . Se $\{\emptyset_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ são definidos a partir de V como anteriormente chamamos a $\{\emptyset_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ potenciais de interacção correspondentes a V .

NOTA : Como não vamos estudar a dinâmica destes sistemas confundiremos muitas vezes o potencial V com o Hamiltoneano H do sistema (estático).

1.5.5 EXISTÊNCIA DE ESTADOS DE EQUILÍBRIO ; ESTRUTURA DO CONJUNTO DOS ESTADOS DE EQUILÍBRIO

Seja G o conjunto dos estados de Gibbs dum dado Hamiltoneano. Podem encontrar-se condições suficientes para que G não seja vazio. Como subproduto encontram-se geralmente condições suficientes para que G seja sequencialmente compacto. Não vamos tratar a situação mais geral ; remetemos o leitor interessado para PRESTON [19] capítulo 3 .

Designamos por G(V) o conjunto dos estados de Gibbs correspondentes ao potencial V . No que segue supomos que $\forall_{t \in \mathbb{Z}^d}$ $(S_t, \mathcal{F}_t)$ é um <u>espaço de Borel standard</u>, isto é, existe um espaço métrico separável completo Y tal que $\mathcal{F}_t$ é σ - isomorfa a $\mathcal{T}(y)$.

<u>TEOREMA</u> 3 (PRESTON [19] PROPOSITION 5.3)

Suponhamos que $\{\emptyset_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ satisfaz as condições do teorema anterior.

Então

G(V) não é vazio.

ESTRUTURA DO CONJUNTO DOS ESTADOS DE EQUILÍBRIO

Se o conjunto dos estados de Gibbs G(V) correspondentes a um potencial V não é vazio pode provar-se que o conjunto G(V) é <u>convexo</u>(*).

(*) Um subconjunto C dum espaço vectorial diz-se <u>convexo</u> se

$$\forall_{a_1, a_2 \in C} \quad \forall_{y \in [0,1]} \quad \lambda a_1 + (1-\lambda)\, a_2 \in C$$

Interessa portanto saber, se G(V) tem pontos "extremais"(**) e se, neste caso, G(V) pode ser representado em termos dos pontos "extremais".

Os pontos "extremais" de G(V) , quando existem, representam as fases puras do sistema e portanto estes estados têm propriedades particulares. Pode provar-se que :

TEOREMA 4 (PRESTON [19] , capítulo 2)

Se $(X, \mathcal{F})$ é um espaço de Borel standard então G(V) é convexo com pontos "extremais" e todos os estados têm uma decomposição única nos estados extremais (isto é, G(V) é um simplex de CHOQUET).

Para complementos sobre convexidade em modelos sobre rede ver também ISRAEL [22] .

NOTA :

Dois estados de Gibbs "extremais" μ e ν são (como medidas) mutuamente singulares, isto é, se $\exists_{A,B \in \mathcal{F}}$ tais que $A \cup B = X$ e $A \cap B = \emptyset$ e tais que

$$\forall_{E \in \mathcal{F}} \mu(A \cap E) = 0 = \nu(B \cap E)$$

(Ver HALMOS [12])

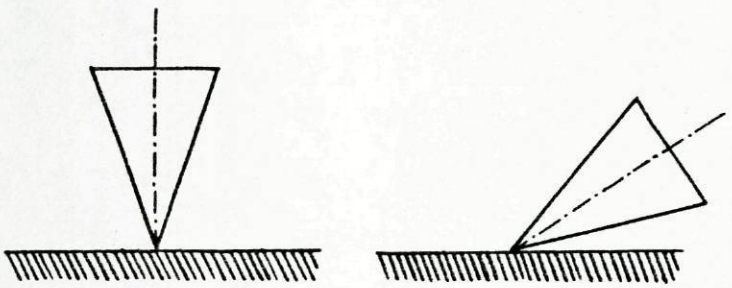
(**) Sendo C um conjunto convexo $x \in C$ é "extremal" se

$$y_1, y_2 \in C \ \wedge \ x = \frac{1}{2}(y_1 + y_2) \Rightarrow y_1 = y_2 = x$$

I.5.6 ESTADOS INVARIANTES

Quando está definido sobre X um grupo g de bijecções $\mathcal{F}$ - mensuráveis, se o potencial V e a configuração de base b forem g - invariantes, é natural estudar o conjunto dos estados de Gibbs g - invariantes. Nas condições que acabamos de enunciar , os estados de Gibbs não são necessàriamente g - invariantes, podendo mesmo não haver estados g - invariantes. A não invariância de alguns estados de Gibbs nestas condições corresponde ao fenómeno físico da quebra (espontânea) de simetria (ver um exemplo simples na figura I.4)

FIG. I.4 QUEBRA ESPONTÂNEA DE SIMETRIA



Qualquer pequena flutuação ("espontânea") faz o cone sair da posição de equilíbrio (simétrica), in B. Hoffman & Paty "L'étrange histoire des quanta" Ed. Seuil.

Enunciamos em seguida uma condição suficiente para que existam estados de Gibbs invariantes sobre uma rede qualquer.

TEOREMA 5 (PRESTON [19] pag. 46)

Se $\forall_t \quad S_t = S$, S - finito, e se $G(V) \neq \emptyset$ então há um estado g - invariante .

NOTA : Este resultado não é válido se S for infinito mesmo que numerável (ver contra - exemplo em PRESTON [19] pag. 33).

I.5.6.1 - INVARIÂNCIA POR TRANSLAÇÃO

Todos os resultados anteriores são generalizáveis a outros tipos de "rede". Os que se seguem são típicos da rede $\mathbb{Z}^d$ com $d \geq 1$, visto que o grupo G que vamos definir é isomorfo a $(\mathbb{Z}^d, +)$.

Suponhamos que $\forall_{t \in \mathbb{Z}^d} S_t = S$. Nestas condições podemos definir um grupo de bijecções $\mathcal{F}$ - mensuráveis $T_t : X \longrightarrow X$, $\forall_{t \in \mathbb{Z}^d}$ tais que :

(1) $T_t T_s = T_{t+s} \qquad s, t \in \mathbb{Z}^d$

(2) $T_o(x) = x \qquad \forall_{x \in \mathbb{Z}^d}$

(3) $T_t(\mathcal{F}(B)) = \mathcal{F}(B + t) \qquad \forall_{B \subset \mathbb{Z}^d} \quad \forall_{t \in \mathbb{Z}^d}$

onde como usualmente $B + t = \{s + t : s \in B\}$.

Uma forma, óbvia, para estas bijecções é fazer a componente s de $T_t(x)$ ser igual à componente $t + s$ de x

$$(T_t(x))_{\{s\}} = x_{\{s+t\}}$$

(no que se segue não escreveremos as chavetas, identificando conjuntos elementares com o seu elemento).

Consideramos $\mu_t = \mu \quad \forall_t$ e definimos o potencial V em função de $\{\phi_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$, onde $\{\phi_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ é $\mathbb{Z}^d$-invariante no sentido de :

$$\forall_{\Lambda \in \mathcal{C}} \quad \forall_{x \in X(\Lambda)} \quad \forall_{t \in \mathbb{Z}^d}$$

$$\phi_\Lambda(x) = \phi_{\Lambda + t}(x + t)$$

TEOREMA 6 (PRESTON [19] PROPOSITION 5.4)

Supondo os potenciais $\{\phi_\Lambda\}_{\Lambda \in \mathcal{C}}$ nas condições que acabamos de indicar e que $\sum_{\Lambda : t \in \Lambda} \|\phi_\Lambda\| < \infty \quad \forall_{t \in \mathbb{Z}^d}$, então

há estados de Gibbs $\mathbb{Z}^d$- invariantes associados ao potencial V .

Este teorema é facilmente generalizável para qualquer rede com estrutura de grupo comutativo. Em particular (via homorfismo) é válido para os subgrupos $\mathbb{Z}^d_o \subset \mathbb{Z}^d$ se $\mathbb{Z}^d_o$ tiver indice finito (isto é, se o grupo $\mathbb{Z}^d / \mathbb{Z}^d_o$ é finito). Os estados $\mathbb{Z}^d_o$-invariantes dizem-se <u>periódicos</u> e os estados $\mathbb{Z}^d$-invariantes dizem-se <u>invariantes por translação</u>. Alguns autores reduzem a análise a esta última classe de estados (por exemplo, ISRAEL [22]).

Pode provar-se que os estados "extremais" do conjunto (convexo) $G_{IT}(V)$ dos estados de Gibbs invariantes por translação são também "extremais" no conjunto de todos os estados de Gibbs do potencial invariante por translação V (isto é, dado que a mistura de dois estados invariantes por translação é invariante por translação, os estados invariantes por translação formam toda uma hiperface ou hiperaresta do simplex $G(V)$).

Completaremos a caracterização dos estados "extremais" associando-os ao conceito de ergodicidade no ponto I.5.7.3 .

I.5.6.2 - OUTRAS INVARIÂNCIAS

No caso em que $\forall_t \quad S_t = S$ e S tem uma estrutura de grupo, podemos fazer agir S sobre o espaço das configurações X da seguinte maneira : $\forall_{g \in S}$ definimos $\hat{g}$ por :

$$\hat{g}: X \longrightarrow X$$

$$\{\sigma\} \longrightarrow \hat{g}\{\sigma\}$$

tal que : $p_{\{t\}}(\hat{g}\{\sigma\}) = g\, p_{\{t\}}(\{\sigma\}) \quad \forall_{t \in \mathbb{Z}^d}$ isto é, $\hat{g}$ actua sobre as configurações compondo com g todos os elementos :

$$\hat{g}\{\sigma\} = \{g\sigma\}$$

Pode naturalmente construir-se um grupo mais geral combinando a invariância por translação com a invariância "interna" que acabamos de definir (via produto directo, por exemplo).

No caso particular da rede $\mathbb{Z}^d$ e se S for um grupo de Lie(*) compacto conexo, CH.PFISTER [57] provou que todos os estados de Gibbs são S - invariantes (sob condições muito gerais nas interacções).

Este resultado é uma generalização dos resultados clássicos de N.D. MERMIN [59] e de R.L. DOBRUSHIN, S.B. SHLOSMAN [58] .

(*) Grupo de Lie é um grupo munido duma estrutura de variedade diferencial, de tal forma que a aplicação

$$(x, y) \longrightarrow xy^{-1} \quad \text{é diferenciável.}$$

I.5.7 DEFINIÇÕES ALTERNATIVAS DE ESTADOS DE EQUILÍBRIO INVARIANTES POR TRANSLAÇÃO

I.5.7.1 A PRESSÃO E ESTADOS DE EQUILÍBRIO

Começamos por definir espaços de interacções e uma função nesse espaço (a pressão). Calculamos derivadas dessa função. Definimos em seguida limite termodinâmico (Van Hove). Concluímos enunciando alguns resultados sobre a pressão que permitem caracterizar os estados invariantes.

ESPAÇO DAS INTERACÇÕES

Uma interacção Φ associa a cada Λ subconjunto finito não vazio de $\mathbb{Z}^d$ uma função real $\Phi(\Lambda)$, contínua em S^Λ . Trataremos apenas o caso em que a interacção é invariante por translação ou seja

$$\Phi(\Lambda + t) = T_t \, \Phi(\Lambda)$$

em que T_t é a aplicação natural do espaço $\mathcal{C}(S^\Lambda)$ das funções contínuas em S^Λ , sobre o espaço $\mathcal{C}(S^{\Lambda+t})$ das funções contínuas em $S^{\Lambda+t}$. O hamiltoneano para um conjunto finito Λ (*) , como já vimos, é dado por :

$$H_\Lambda^\Phi = \sum_{\Lambda' \subset \Lambda} \Phi(\Lambda')$$

Uma interacção Φ tem "alcance" finito (finite range) se $\Phi(\Lambda) = 0$ para todo Λ com diâmetro suficientemente grande. Vamos designar por B_o o espaço vectorial das interacções com "alcance" finito.

(*) O hamiltoneano dum sistema infinito é apenas formal.

Os espaços de Banach(*) das interacções são obtidos completando B_o para diferentes normas. Designamos por B o completado de B_o para a norma :

$$|||\Phi||| = \sum_{\Lambda \ni 0} \frac{\|\Phi(\Lambda)\|_\infty}{|\Lambda|} \qquad (**)$$

em que $|\Lambda|$ é o número de nós (da rede) em Λ .

$\tilde{B}$ é o espaço das interacções completado de B_o para a norma

$$\|\Phi\|_\sim = \sum_{\Lambda \ni 0} \|\Phi(\Lambda)\|_\infty$$

Estes espaços de Banach são separáveis e $B_o \subset \tilde{B} \subset B$, sendo B_o denso em $\tilde{B}$ e em B .

Para cada $A \in \mathcal{C}(S^\Lambda)$ definimos uma interacção ψ_A^Λ por

$$\psi_A^\Lambda(\Lambda + t) = T_t A \qquad t \in \mathbb{Z}^d$$

$$\psi_A^\Lambda(\Lambda') = 0 \quad \text{se } \Lambda' \text{ não é um translatado de } \Lambda .$$

Introduzimos as seguintes notações para os valores esperados dos observáveis do sistema em $\Lambda \in \mathcal{C}$:

$$Z_\Lambda^\Phi(\beta) = < e^{-\beta H_\Lambda^\Phi} >_o$$

$$< A >_{\beta,\Lambda}^\Phi = Z_\Lambda^\Phi(\beta)^{-1} < A\, e^{-\beta H_\Lambda^\Phi} >_o$$

(*) Espaço de Banach é um espaço normado completo. Um espaço completo é um espaço em que toda a sucessão de Cauchy é convergente (para um ponto do espaço !!).

(**) $$\|\Phi(\Lambda)\|_\infty = \sup_{\{\sigma\} \in S^\Lambda} |\Phi(\Lambda)(\sigma)|$$

(Φ continua)

NOTAS :

1.- Esquecemos neste momento as condições fronteira (c.f. pag. 16). A justificação é dada no teorema 9.

2.- $Z_\Lambda(\beta)$ e $< A >_{\beta,\Lambda}$ são funções analíticas em β e em todos os parâmetros que entrem linearmente em H_Λ . É por esta razão que o modelo finito não tem transições de fase ; para se encontrar uma transição de fase é necessário passar a volume infinito(*). Do ponto de vista físico esta passagem ao sistema infinito deve dar uma descrição das propriedades do material removendo todos os efeitos de superfície (e portanto da forma).

DEFINIÇÃO : PRESSÃO

A pressão $P_\Lambda(\Phi)$ numa região finita $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ é dada por :

$$P_\Lambda(\Phi) = |\Lambda|^{-1} \log Z_\Lambda^\Phi(\beta) .$$

Como

$$H_\Lambda^{\Phi+t\psi_A^\Lambda} = \sum_{\Lambda' \subset \Lambda} |\Phi(\Lambda') + t\,\psi_A^{\tilde{\Lambda}}(\Lambda')| =$$

$$= H_\Lambda^\Phi + t \sum_{\Lambda' \subset \Lambda} \psi_A^{\tilde{\Lambda}}(\Lambda') =$$

$$= H_\Lambda^\Phi + t \sum_{\tilde{\Lambda}+t \subset \Lambda} T_{\tilde{t}}\, A \quad ,$$

vem,

(*) O leitor pode meditar sobre as consequências epistemológicas deste facto. Pode por exemplo constatar que SCHRÖDINGER ([133] pag. 7) evita uma frase equivalente à nossa escrevendo

$$\log(n!) = n(\log n - 1) \quad .$$

$$- \frac{d}{dt} P_\Lambda(\Phi + t\psi_A^{\tilde\Lambda})\Big|_{t=0} = \frac{1}{|\Lambda|} \left| \frac{- \frac{d}{dt}(Z_{\Lambda(\beta)}^{\Phi+t\psi_A^{\tilde\Lambda}})}{Z_{\Lambda(\beta)}^{\Phi+t\psi_A^{\tilde\Lambda}}} \right|_{t=0} =$$

$$= \frac{1}{|\Lambda|} \frac{< (\sum_{\tilde\Lambda + \tilde t \subset \Lambda} T_{\tilde t} A)\, e^{-H_\Lambda^\Phi} >}{Z_\Lambda^\Phi(\beta)} =$$

$$= \frac{1}{|\Lambda|} < \sum_{\tilde t + \tilde\Lambda \subset \Lambda} T_{\tilde t} A >$$

sendo esta última quantidade o valor médio do observável $\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\tilde t + \tilde\Lambda \subset \Lambda} T_{\tilde t} A$ à temperatura inversa $\beta = 1$ para o Hamiltoneano H_Λ^Φ. Como β pode ser absorvido no Hamiltoneano, tomaremos $\beta = 1$ para simplificar, nos problemas em que a temperatura não intervenha. Se só estivessemos interessados num sistema finito, podiamos tomar $\tilde\Lambda = \Lambda$ e obtinhamos o valor esperado do observável A (em Λ). Porém o que nos interessa são os sistemas infinitos (os únicos onde eventualmente haverá não analiticidade). Ora nos sistemas infinitos uma perturbação local (deixando de lado todos os outros transladados do observável A) deve ter um efeito desprezável. Esperamos que quando Λ cresce para $\mathbb{Z}^d$ se obtenha o valor esperado de A num estado invariante (por translação) do sistema infinito.

O primeiro ponto é estudar o limite da Pressão a volume infinito. Considerando uma sucessão de cubos (d - dimensionais), e então mostrando que o mesmo limite é obtido para qualquer sucessão de volumes finitos Λ_n tendendo para infinito no sentido de Van Hove, que passamos a definir :

Para cada número natural $\underline{a}$ particiona-se $\mathbb{Z}^d$ numa família C_a de de cubos da forma

$$\{i = (i_1, i_2, \ldots, i_d) : n_j a \leq i_j < (n_j + 1)a \wedge (n_1, \ldots, n_d) \in \mathbb{Z}^d \}.$$

Para cada conjunto finito $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ seja $N_a^+(\Lambda)$ o número de cubos da família C_a que intersectam Λ, e seja N_a^- o número de cubos da família C_a que estão contidos em Λ. É claro que $N_a^+ \geq N_a^-$, e, $N_a^+ - N_a^-$ é o número de cubos de C_a que intersectam a fronteira de Λ.

DEFINIÇÃO : LIMITE TERMODINÂMICO (VAN HOVE)

Uma sucessão Λ_n converge para $\mathbb{Z}^d$ no sentido de Van Hove sse $\forall_{a \in N}$

$$N_a^-(\Lambda_n) \longrightarrow \infty$$

$$\frac{N_a^-(\Lambda_n)}{N_a^+(\Lambda_n)} \longrightarrow 1$$

Esta definição foi proposta por VAN HOVE [32] (1949) e refinada por FISHER [31] (1964) ; consultar como textos mais recentes D.RUELLE [4], ISRAEL [22] . Alguns autores preferem a linguagem dos objectos "fractais" (B.MANDELBROT [29]) que, pelo menos no caso dos modelos sobre rede, não trouxe nada de novo para além de terminologia. (ver também Y.GEFEN, B. MANDELBROT, A.AHARONY [30] , onde a própria rede é "fractal")

De forma grosseira, $\Lambda_n \longrightarrow \mathbb{Z}^d$ (Van Hove) se as "peles" (com as camadas) dos Λ_n se tornarem desprezáveis em relação a Λ_n , ou, na linguagem fractal, se o limite da dimensão fractal do conjunto dos cubos de C_a que intersectam Λ_n e não estão contidos em Λ_n é inferior (estritamente) a d .

Sem entrarmos em detalhes vamos enunciar três teoremas relativos à definição de estados de equilíbrio através da pressão e das suas derivadas direccionais no espaço das interacções e um teorema sobre uma propriedade da pressão.

TEOREMA 7 (ISRAEL [22] T. I.2.3)

Seja $a \in \mathbb{N}$, seja C_a um cubo de lado a .

Então se $\Phi \in B$, existe

$$P(\Phi) = \lim_{a \to \infty} P_{C_a}(\Phi) .$$

Além disso P é uma função convexa em B , tal que

$$|P(\Phi) - P(\psi)| \leq |||\Phi - \psi|||$$

TEOREMA 8 (ISRAEL [22] T. I.2.4)

Se $\Lambda_n \longrightarrow \infty$ (Van Hove) e $\Phi \in B$

Então

$$P_{\Lambda_n}(\Phi) \longrightarrow P(\Phi)$$

TEOREMA 9 (ISRAEL [22] T. I.2.5)

$P(\Phi)$ é uma função intensiva, isto é, independente das configurações fixadas no exterior dos Λ_n .

Sabemos (teorema da representação de Riesz(*)) que o conjunto das funcionais positivas com norma um sobre $\mathcal{C}(S^{\Lambda})$ se identifica com o conjunto das medidas de probabilidade em S^{Λ} .

O teorema que se segue indica quais dessas funcionais são estados de Gibbs (isto é, que verificam as equações D.L.R.) invariantes por translação :

(*) Ver REED, SIMON [35] CAP IV teoremas IV 14 e IV 18 respectivamente para S compacto e S localmente compacto.

TEOREMA 10 (ISRAEL [22] Lema III.1.1 e Teorema III.2.1)

Os estados de Gibbs invariantes por translação identificam-se (T.R. Riesz) com as funcionais lineares positivas (de norma um) tangentes à Pressão.

NOTA : Se P é uma função convexa num espaço de Banach uma funcional T do mesmo espaço diz-se tangente a P em Φ se

$$\forall_{\psi \in B} \quad P(\Phi + \psi) \geq P(\Phi) + T(\psi) \ ,$$

isto é, a existência de funcional tangente não depende da existência de derivada.

I.5.7.2 A ENTROPIA E O PRINCÍPIO VARIACIONAL

Seja ρ um estado de equilíbrio e Λ um subconjunto finito de $\mathbb{Z}^d$. Como sabemos a restrição de ρ a $\mathcal{C}(S^\Lambda)$ define uma medida de probabilidade em S^Λ , e para simplificar as notações vamos supor que esta medida é absolutamente contínua em relação a μ_Λ com derivada de Radon - Nikodym $f^\Lambda \in L^1(S^\Lambda, \mu_\Lambda)$ de forma que $\forall_{A \in \mathcal{C}(S^\Lambda)}$

$$< A >_\rho = < A >_\rho^\Lambda = \int_{S^\Lambda} A(\sigma)\, f^\Lambda(\sigma)\, d\mu_\Lambda(\sigma) \ .$$

Nestas condições a entropia de ρ em Λ , $\mathcal{S}_\Lambda(\rho)$ é dada por

$$\mathcal{S}_\Lambda(\rho) = - <\log f^\Lambda>_\rho = - < f^\Lambda \log f^\Lambda >_o$$

Se ρ não for absolutamente contínua em relação a μ_Λ faz-se $\mathcal{S}_\Lambda(\rho) = - \infty$.

Esta definição é válida para estados invariantes, podendo sem complicações ser estendida para estados periódicos, isto é, estados tais que $\rho = \rho \circ T_t$ com t pertencendo a um subgrupo d - dimensional de $\mathbb{Z}^d$.

Da convexidade da função $t \longrightarrow t \log t$ para $t \geq 0$, vem :

$$t \log t \geq t - 1$$

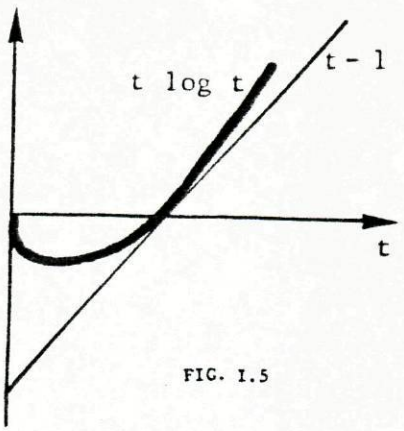


FIG. I.5

e como $f^{\Lambda}(\sigma) \geq 0$

$$- f^{\Lambda}(\sigma) \log f^{\Lambda}(\sigma) \leq 1 - f^{\Lambda}(\sigma)$$

vindo

$$\mathcal{S}_{\Lambda}(\rho) = - \int_{S^{\Lambda}} f^{\Lambda}(\sigma) \log f^{\Lambda}(\sigma) \, d\mu(\sigma) \leq 1 - \int_{S^{\Lambda}} f^{\Lambda}(\sigma) \, d\mu(\sigma) = 0 \ .$$

Concluimos que $\mathcal{S}_{\Lambda}(\rho)$ está bem definido e que $\mathcal{S}_{\Lambda}(\rho) \in [-\infty, 0]$ ■

TEOREMA 11 (ISRAEL [22] T. II.2.2)

Se ρ é um estado de equilíbrio invariante, a entropia média por nó :

$$s(\rho) = \lim_{\substack{\Lambda \to \infty \\ \text{Van Hove}}} |\Lambda|^{-1} \mathcal{S}_{\Lambda}(\rho)$$

existe (em $[-\infty, 0]$) .

Os estados de equilíbrio invariantes dos sistemas finitos podem ser caracterizados por um "princípio variacional" que pode ser utilizado para caracterizar os estados de equilíbrio invariantes dos sistemas infinitos.

Seja $\Lambda \in \mathcal{C}$ e seja $H_{\Lambda} \in \mathcal{C}(S^{\Lambda})$ o hamiltoneano do sistema.

Escrevemos sucessivamente as expressões da pressão, de energia média, e de entropia média num estado de equilíbrio invariante ρ_1 :

$$P_{\Lambda} = |\Lambda|^{-1} \log Z_{\Lambda} = \frac{\langle e^{-H_{\Lambda}} \rangle_o}{|\Lambda|}$$

$$\langle H_{\Lambda} \rangle_{\rho_1} = Z_{\Lambda}^{-1} \langle H_{\Lambda} \, e^{-H_{\Lambda}} \rangle_o$$

$$S_\Lambda(\rho_1) = - < f_1^\Lambda \log f_1^\Lambda >_{\rho_1} =$$

$$= - < Z_\Lambda^{-1} e^{-H_\Lambda} \log(Z_\Lambda^{-1} e^{-H_\Lambda}) >_o =$$

$$= + Z_\Lambda^{-1}(< e^{-H_\Lambda} \underbrace{\log Z_\Lambda}_{\in \mathbb{R}} >_o + < H_\Lambda e^{-H_\Lambda} >_o) =$$

$$= \log_n Z_\Lambda + < H_\Lambda >_{\rho_1}$$

$$= |\Lambda| P_\Lambda + < H_\Lambda >_{\rho_1}$$

Por outro lado, usando a desigualdade de Jensen ($\log \int f \, d\mu \geq \int \log f \, d\mu$)(*) vem, para qualquer estado de equilíbrio ρ tal que $S(\rho) > -\infty$:

(*) Nesta forma a desigualdade de Jensen é uma consequência imediata da desigualdade de Hölder : $\int g^n \, d\mu \geq (\int g \, d\mu)^n$, vem :

$$\int e^g \, d\mu = \int \Sigma \frac{g^n}{n!} \, d\mu =$$

$$= \Sigma \frac{1}{n!} \int g^n \, d\mu \geq$$

$$\text{Hölder} \longrightarrow \quad \geq \Sigma \frac{1}{n!} (\int g \, d\mu)^n =$$

$$= e^{\int g \, d\mu} .$$

Fazendo $g = \log f$ obtem-se a desigualdade que utilizamos.

$$S_\Lambda(\rho) - \langle H_\Lambda \rangle_\rho = \langle -\log f^\Lambda - H_\Lambda \rangle_\rho =$$

$$= \langle \log [(f^\Lambda)^{-1} \, e^{-H_\Lambda}] \rangle_\rho \leq$$

$$\text{Jensen} \rightarrow \leq \log \langle (f^\Lambda)^{-1} \, e^{-H_\Lambda} \rangle_\rho =$$

$$= \log \left\langle \frac{\langle e^{-H_\Lambda} \rangle_o}{e^{-H_\Lambda}} \, e^{-H_\Lambda} \right\rangle_\rho =$$

$$= \log \langle e^{-H_\Lambda} \rangle_o =$$

$$= |\Lambda| \, P_\Lambda$$

É fácil ver que a igualdade na desigualdade de Jensen acontece sse f for constante μ-quase sempre. Portanto, os estados de equilíbrio invariantes são os únicos estados do sistema finito em que a diferença $S_\Lambda(\rho) - \langle H_\Lambda \rangle_\rho$ é máxima e vale $|\Lambda| \, P_\Lambda$.

Provamos que :

TEOREMA 12 (ISRAEL [22] Lema II.3.1)

Para todo o estado ρ no conjunto finito $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ do Hamiltoneano H_Λ tem-se :

$$S_\Lambda(\rho) - \langle H_\Lambda \rangle_\rho \leq |\Lambda| \, P_\Lambda$$

A igualdade é atingida sse o estado ρ for de equilíbrio invariante.

A passagem ao volume infinito é apenas técnica :

Definimos $A_\Phi = \sum_{\Lambda \ni t} |\Lambda|^{-1} \, \Phi(\Lambda)$, a energia no nó t devido à interecção :

TEOREMA 13 (ISRAEL [22] II.3.2, II.3.3 e II.3.5)

$\forall_{\Phi \in B}$, $P(\Phi) = \sup_{\rho} \{s(\rho) - <A_\Phi>_\rho\}$ sendo o supremo atingido sse ρ for um estado de equilíbrio invariante do potencial Φ .

Completamos enunciando o chamado "princípio variacional inverso" :

TEOREMA 14 (ISRAEL [22] II.3.4)

Se ρ é um estado invariante então :

$s(\rho) = \inf \{P(\psi) + <A\psi>_\rho : \psi \in B\}$

Sobre este tema consultar também D.RUELLE [4] e [34] , S.MIRACLE--SOLE [60] e G.GALLAVOTTI - S.MIRACLE - SOLE [33] . ([33] e [34] são artigos originais sobre o princípio variacional para modelos sobre rede).

I.5.7.3 ESTADOS ERGÓDICOS E EXTREMALIDADE

Seja C_n um cubo d - dimensional de aresta n e seja A um observável do sistema, isto é, A será uma função contínua de X em $\mathbb{R}$.

Definimos o observável $C_n(A)$ por

$$C_n(A) = \frac{1}{n^d} \sum_{t \in C_n} T_t(A)$$

DEFINIÇÃO

Um estado invariante por translação ρ diz-se ERGÓDICO sse

$$\forall_{A \in \mathcal{C}(X)} \qquad \lim_{n \to \infty} <C_n(A)^2>_\rho = <A>_\rho^2$$

NOTA 1 : A variância das medidas de $C_n(A)$ no estado ρ é dada por

$$< (C_n(A) - < A >_\rho)^2 >_\rho = < C_n(A)^2 >_\rho - < A >_\rho^2$$

Este resultado é consequência do Teorema de KÖNIG para a variância e de

$$< C_n(A) >_\rho = \frac{1}{n^d} \sum_{t \in \Lambda_n} < T_t(A) >_\rho =$$

$$= \frac{1}{n^d} \sum_{t \in \Lambda_n} < A >_\rho = < A >_\rho$$

visto ρ ser invariante por translação.

Este valor da variância mostra que nos estados ergódicos as caracteristicas médias do sistema não flutuam ; é esse o comportamento das fases puras.

NOTA 2 : Esta definição de ergodicidade é muito próxima da definição clássica para processos estocásticos usuais : média no espaço das fases igual à média temporal. A única diferença é que o semi-grupo temporal é substituido pelo grupo das translações da rede.

Enunciamos uma caracterização alternativa dos estados de Gibbs "extremais" :

TEOREMA 15

Os estados ergódicos são os pontos "extremais" do conjunto convexo dos estados que verificam as equações D.L.R.

Para complementos ver ISRAEL [22] cap. IV-3, D.RUELLE [4] cap. 6 e CH.PRESTON [19] Teorema 4.I e os comentários que se seguem.

I.6 ALGUNS MODELOS PARTICULARES

I.6.1 INTRODUÇÃO

Nesta descrição limitamo-nos aos chamados modelos de "spin" vectorial. Esta designação é originada no facto de se poder "passar" dum modelo quântico para o modelo clássico que lhe corresponde substituindo o operador de spin σ_j em cada nó por um vector $\vec{s}_j \in S_j \subset \mathbb{R}^n$, e o traço pela integração em $\prod S_j$. Esta "passagem" do quântico ao clássico é válida para os grandes spins, não só a volume finito como no limite termodinâmico, E. LIEB [36] .

Para simplificar vamos supor que $\forall_{t \in \mathbb{Z}^d} \; S_t = S$, isto é, os estados possíveis de cada subsistema são os mesmos.

Para que os resultados enunciados no capítulo anterior sejam válidos vamos supor que o conjunto S é um espaço métrico separável(*) munido duma medida positiva finita μ . Muitas vezes S tem uma estrutura de grupo topológico(**) e nesse caso μ é usualmente a medida invariante(***) desse

---

(*) S diz-se separável se houver um subconjunto de S numerável e denso em S .

(**) Como S é um espaço métrico e um grupo, para S ser um grupo topológico basta que a operação seja contínua.

(***) Medida invariante μ num grupo topológico localmente compacto G é uma medida tal que :

$$1 - \; \exists_{F \subset G} \; , \; F \neq \emptyset \; , \; F \text{ boreliano tal que } \mu(F) \neq 0$$

$$2 - \left.\begin{array}{l} \forall_{F \subset G} \text{ boreliano} \\ \forall_{x \in G} \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} xF \text{ é boreliano} \\ \mu(xF) = \mu(F) \end{array}\right.$$

grupo (Medida de Haar). Como é sabido todo o grupo topológico compacto tem pelo menos uma medida de Haar, ver P.HALMOS [12] . Por vezes S será um grupo de Lie.

Consideramos o <u>espaço das configurações</u> do sistema $X = S^{\mathbb{Z}^d}$. Uma <u>configuração</u> do sistema $\{s(t) \in S \mid t \in \mathbb{Z}^d\}$ é, como vimos, um elemento de X caracterizado pela indicação do estado $s(t) = s_t$ em cada nó $\underline{t}$ da rede.

Vamos supor que a energia da configuração $\{s(t) : t \in \mathbb{Z}^d\}$, no conjunto finito Λ é dada por :

$$H_\Lambda (s(t)) = \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \in \mathbb{Z}^d}} \cup(s_i , s_j) / 2 + \sum_{i \in \Lambda} f_i(s_i)$$

onde as funções $\cup(. , .)$ e $f_i(.)$ são mensuráveis reais :

$$\cup : S \times S \longrightarrow \mathbb{R} \qquad f_i : S \longrightarrow \mathbb{R} \ .$$

Podiamos tratar modelos mais gerais, em que a função $\cup$ dependesse também de i e $j \in \mathbb{Z}^d$, ou ainda, em que no Hamiltoniano (H_Λ) para além da interacção a dois corpos $\cup(s_i , s_j)$ houvesse termos a $\underline{m}$ corpos $\cup(s_{i_1} , s_{i_2} , \ldots , s_{i_m})$.

É necessário que $\cup(s_i , s_j)$ decresça para zero quando a distância entre i e j tende para infinito de forma que :

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}^d} | \cup(s_i , s_j) | < \infty \qquad \forall_{i \in \mathbb{Z}^d}$$

Isto significa que a interacção entre spins muito distantes é pequena e que a interacção total sobre cada nó da rede é finita. Estas condições são essenciais para a existência de estados de Gibbs. (ver Teoremas 2 e 3)

Uma das formas de se obter um modelo que verifica estas condições é exigir que a interacção tenha alcance finito, conceito que passamos a definir.

Designamos por $|t|$ a distância do nó $t(\in \mathbb{Z}^d)$ à origem ; $|i-j|$ é portanto a distância entre os nós i e $j(\in \mathbb{Z}^d)$

DEFINIÇÃO :

Dizemos que a interacção tem alcance finito $r \in \mathbb{R}$ (finite range) se $\upsilon(s_i , s_j) = 0$ quando $|i-j| > r$. Quando $r = 1$, o modelo diz-se com interacção aos próximos vizinhos e nestas condições a 1^a soma do Hamiltoniano é restrita aos pares i , j tais que $|i-j| = 1$.

Vamos classificar os modelos a partir do conjunto dos estados dos subsistemas.

I.6.2 MODELOS DISCRETOS

I.6.2.1 MODELO DE ISING [3]

Neste modelo o conjunto S tem dois elementos, por exemplo :

① $S_{(s)} = \{-1 , 1\}$ interpretado como spin positivo e spin negativo.

② $S_{(n)} = \{0 , 1\}$ interpretado como gás sobre rede, nó com partícula ou nó vazio.

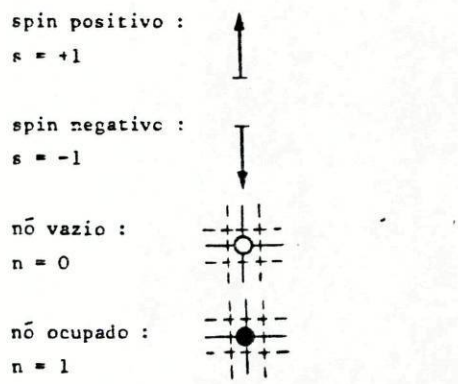


FIG. 1.6

Existe uma bijecção natural entre $S_{(n)}$ e $S_{(s)}$ dada por $s = 2n - 1$.

Em qualquer dos casos toma-se usualmente uma medida que dê o mesmo peso aos dois elementos de S .

O Hamiltoniano mais estudado é :

$$H_\Lambda(\{s(t)\}) = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i\in\Lambda \\ j\in\mathbb{Z}^d \\ |i-j|=1}} J(i,j)\, s_i\, s_j - h \sum_{i\in\Lambda} s_i$$

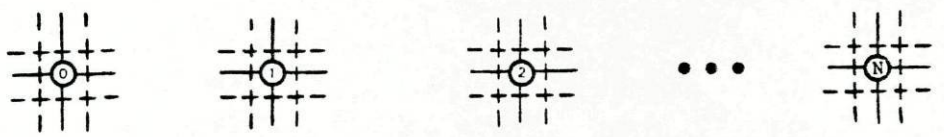
I.6.2.2 MODELO DE POTTS [13]

Neste modelo $S = \{0, 1, 2, \ldots, N\}$ ou $S = \{-\frac{N}{2}, 1-\frac{N}{2}, \ldots, \frac{N}{2}-1, \frac{N}{2}\}$ com uma bijecção natural entre os elementos $\underline{n}$ do primeiro conjunto e os elementos $\underline{s}$ do segundo dada por : $s = n - \frac{N}{2}$.

A primeira versão é facilmente identificada com o grupo $\mathbb{Z}_{N+1}$, conjunto dos restos da divisão inteira com divisor $N+1$ (classes de congruência módulo $N+1$).

Físicamente o modelo de Potts pode ser interpretado de diferentes formas :

1 - GÁS SOBRE REDE : Os nós da rede podem estar vazios ou ocupados por uma de N partículas diferentes (caso das ligas metálicas por exemplo) :



nó vazio — nó com partícula tipo 1 — nó com partícula tipo 2 — ... — nó com partícula tipo N

FIG. I. 7

Usualmente estuda-se o hamiltoniano :

$$H_\Lambda(\{n(t)\}) = -\sum_{\substack{i\in\Lambda \\ j\in\mathbb{Z}^d}} J(i,j)\, \delta(n_i,n_j) \quad , \text{ com } \delta(n_i,n_j) = \begin{cases} 0 & \text{se } n_i \neq n_j \\ 1 & \text{se } n_i = n_j \end{cases}$$

NOTA : Os "gases sobre rede" não exibem as propriedades usuais dos gases.

2 - SPINS

2.1 Spins de grandeza constante, formando ângulos $n\theta$ com uma direcção fixa :

$$\theta = 2\pi/(N+1) \quad \text{e} \quad n \in \{0, 1, 2, \ldots N\}$$

Ex. : $N = 9$

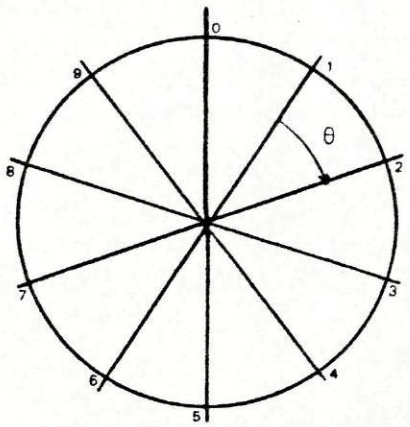


FIG. I.8

Alguns autores tentaram com esta interpretação, fazendo estimações uniformes em N , obter resultados para o modelo $X-Y$ a que nos referimos a seguir. A técnica a usar seria a seguinte : tomava-se como hamiltoniano, por exemplo

$$H_\Lambda(\{n(t)\}) = \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \in \mathbb{Z}^d}} J(i,j) \cos\left[(n_i - n_j)\theta\right] + \sum_{i \in \Lambda} h_i \cos(n_i \theta)$$

e procura-se o limite deste modelo quando $N \to \infty$, que seria o modelo $X-Y$. (J. BELLISSARD sugeriu-nos este método, que atribuia a J. VILLAIN, para tratar o modelo $X-Y$)

2.2 Spins com direcção fixa e grandeza inteira ("bosões") ou "semi-inteira" ("fermiões"), respectivamente para N par e N impar.

Ex. 1. N = 3 Ex. 2. N = 4

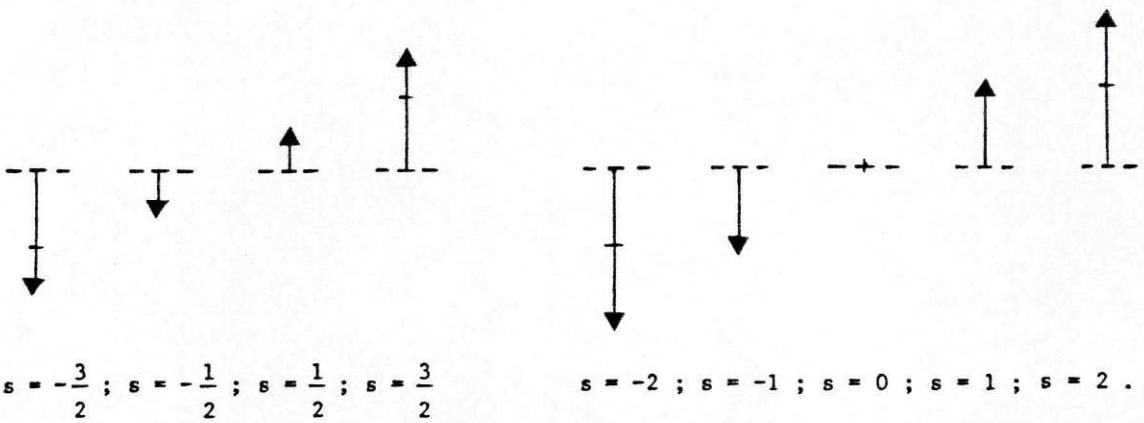


FIG. I.9

Indicamos um hamiltoniano provavelmente interessante a estudar, (por exemplo para N = 2 e d = 3)

$$H_\Lambda (\{s_t\}) = \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \in \mathbb{Z}^d}} J(i,j)\, s_i\, s_j + \ldots$$

em que as interacções estejam em competição, por exemplo :

$$J(i,j) = \begin{cases} J_1 & \text{se } |i-j| = 1 \\ -J_2 & \text{se } |i-j| = 2 \\ 0 & \text{nos outros casos} \end{cases} \qquad (J_1, J_2 > 0)$$

Voltaremos à ideia de interacção em competição.

A medida que usualmente se usa é a medida de probabilidade uniforme em S :

$$\forall_{a \in S} \qquad \mu(\{a\}) = \frac{1}{N+1}$$

NOTA 1 : Pode-se simular anisotropia neste modelo modificando a medida.

Nota 2 : Obtem-se um modelo equivalente alargando S ao intervalo $[0, N]$ conservando o suporte da medida.

Nota 3 : O modelo de Ising é o caso particular deste modelo quando $N = 1$. Foi indicado separadamente pelo conhecimento particular que se tem deste modelo, bem como por ter sido historicamente o primeiro modelo a ser estudado. Uma outra razão para o destaque é que todos os outros modelos sobre rede foram definidos generalizando-o.

I.6.3 MODELOS CONTÍNUOS

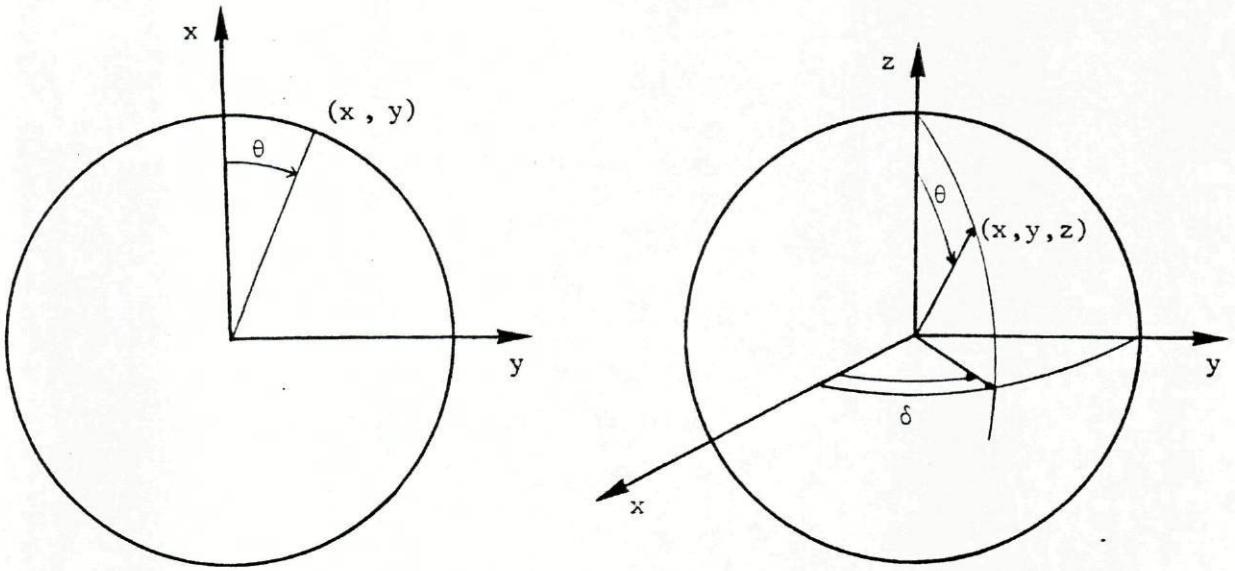
I.6.3.1 MODELO XY E MODELO DE HEISENBERG

Uma forma de generalizar o modelo de Ising é aumentar a dimensão de S , mantendo S esférico. Note-se que $\{-1, 1\}$ é a "superfície esférica" de raio 1 centrada na origem de $\mathbb{R}^n$ com $n = 1$.

Fazendo $n = 2$ obtemos o modelo X-Y ou rotor ("rotator") plano. O conjunto dos estados dos subsistemas é $S = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 = 1\} =$ $= \{(\cos\theta, \sin\theta) \in \mathbb{R}^2 , \theta \in [0, 2\pi[\}$ ou ainda $S = U(1) =$ $= \{e^{i\theta} \in \mathbb{C} : \theta \in [0, 2\pi[\}$, ficando patente na última escrita o grupo multiplicativo subjacente.

Para $n = 3$ obtemos o modelo de Heisenberg $S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$ ou ainda (ver figura) $S = \{(\sin\theta\cos\delta, \sin\theta\sin\delta, \cos\theta) : \theta \in [0, \pi[, \delta \in [0, 2\pi[\}$.

Um grupo subjacente é o grupo das rotações de $\mathbb{R}^3$, $SO(3)^{(*)}$ com a relação usual com o grupo $SU(2)^{(*)}$.



MODELO X-Y

MODELO DE HEISENBERG

FIG. I.10

Indicamos em seguida Hamiltonianos para o rotor plano (isotrópico) e para o modelo de Heisenberg com parâmetro de anisotropia α :

$$U_\Lambda\,(s(t)) = -\sum_{\substack{i\in\Lambda \\ j\in\mathbb{Z}^d}} J(i,j)\cos(\theta_i - \theta_j) + h\sum_{i\in\Lambda}\cos\theta_i$$

(*) $SO(3)$ grupo de rotações de $\mathbb{R}^3$, isomorfo ao grupo das matrizes ortogonais de terceira ordem com determinante igual a 1 . A matriz M diz-se ortogonal sse $MM^{tr} = 1$.

- $SU(2)$ grupo das matrizes unitárias complexas 2×2 com determinante 1 . $SU(2)$ é o grupo de matrizes da forma $\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{bmatrix}$ com $\alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta} = 1$. Como é sabido há um homomorfismo de $SU(2)$ em $SO(3)$ com núcleo $\{I, -I\}$. Ver N. JA. VILENKIN [14] pag. 104 - 105 .

$$U_\Lambda(s(t)) = \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \in \mathbb{Z}^d}} J(i,j)\left[z_i z_j + \alpha(x_i x_j + y_i y_j)\right] + h \sum_{i \in \Lambda} z_i$$

$$\alpha \in [0,1] \quad , \begin{cases} s_i = (x_i, y_i, z_i) \\ s_j = (x_j, y_j, z_j) \end{cases}$$

I.6.3.2 MODELOS COM "SPIN" NÃO LIMITADO

Vamos caracterizar um modelo geral em que $S = \mathbb{R}^n$ é localmente compacto. Obtemos diferentes modelos particulares conforme a escolha da medida μ .

Supomos que a medida é uma probabilidade com densidade $\rho(\vec{s})$ dependendo apenas do comprimento de $\vec{s} \in \mathbb{R}^n$. Para a existência de comportamento termodinâmico (i.e. para que o conjunto dos estados de Gibbs não seja vazio) é necessário que $\rho(\vec{s})$ decresça suficientemente depressa quando $|\vec{s}| \to \infty$; concretizando :

$$(I) \quad \int_S e^{-bs^2} \rho(\vec{s})\, d\vec{s} < \infty \quad , \forall_{b < b_o}$$

onde, sempre que nada for dito em contrário $b_o = \infty$; isto significa que a probabilidade dos spins grandes deve ser quando muito gaussiana. Exemplos típicos, são as medidas da forma

$$\rho(\vec{s}) = \exp\left[-V_j(s)\right] \qquad (s = |\vec{s}|)$$

em que $V_j(s)$ é um polinómio par em $|\vec{s}|$, com $j = 2m$, $m \in \mathbb{N}$ $V_j(s) = a_o s^j + a_2 s^{j-2} + \ldots + a_{j-2} s^2 + a_j$ com $a_o > 0$. Se $j \geq 4$ a condição (I) anterior é verificada para $b_o = +\infty$, enquanto que para $j = 2$, tem-se $b_o = a_o$.

Este modelo contém como casos particulares todos os modelos anteriores ;

por exemplo, tomando

$$\rho(\vec{s}) = K\ \delta(|\vec{s}| - 1)$$

obtemos para $n = 1, 2, 3$ respectivamente os modelos de Ising, X-Y e de Heisenberg.

Outros casos particulares importantes são obtidos quando o suporte da medida é um compacto não reduzido à sua fronteira ; por exemplo a esfera fechada centrada na origem :

$$\rho(\vec{s}) = 0 \quad \text{se} \quad |\vec{s}| > 1 \ .$$

Definimos o hamiltoniano

$$H_\Lambda\ (s(t)) = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \in \mathbb{Z}^d}} J(i-j)\ \vec{s}_i\ \vec{s}_j - \sum_{i \in \Lambda} h\ \vec{s}_i$$

em que $J(i-j)$ é uma matriz $n \times n$ simétrica :

$$J(i-j)\ \vec{s}_i\ \vec{s}_j = \sum_{\gamma,\delta=1}^{n} J_{\gamma\delta}(i-j)\ s_i^\gamma\ s_j^\delta$$

Resumimos num teorema alguns resultados :

TEOREMA LEBOWITZ [15]

Se a interacção $J(i-j)$ tem alcance finito, e se a medida ρ verifica (I) então :

(1) A pressão está bem definida e é uma função intensiva, se as configurações no exterior de Λ são limitadas.

(2) O conjunto dos estados de Gibbs do Hamiltoniano H_Λ não é vazio.

NOTA :

Comparando com os Teoremas 3, 9 e 10 verificamos que conseguimos

passar do caso em que S é compacto ao caso em que S é apenas localmente compacto introduzindo uma condição sobre as configurações no exterior de $\Lambda \in \mathcal{C}$, e uma condição (I) sobre a medida à priori ρ .

I.7 FERROMAGNETISMO, ANTIFERROMAGNETISMO

(...)

Se num modelo as configurações mais prováveis, isto é, com energia mínima são configurações com os spins todos paralelos dizemos que o sistema é ferromagnético. Isto significa que o modelo é atractivo, isto é, há tendência para s_i e s_j serem próximos (em S) se i e j são próximos (em $\mathbb{Z}^d$), pelo menos para valores extremos dos parâmetros (por exemplo $\beta = \infty$). Se a interacção for aos próximos vizinhos os modelos definidos em I-6 são ferromagnéticos se $J(i,j) > 0 \quad \forall_{i,j}$.

Se pelo contrário as configurações mais prováveis são configurações com spins próximos vizinhos "anti-paralelos", dizemos que o sistema é antiferromagnético. Neste caso (ver figura) o sistema (1) comporta-se, essencialmente, como a sobreposição de dois ferromagnetes (2) e (3) sobre redes com malha com lado $\sqrt{2}$.

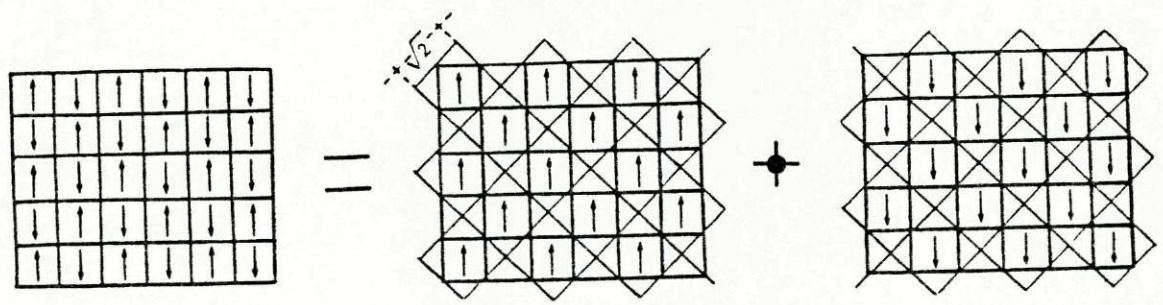


FIG. I.11

Os modelos anteriormente considerados têm um comportamento antiferromagnético (isto é repulsivo) se as interacções forem aos próximos vizinhos e $J(i,j) < 0 \quad \forall_{i,j \in \mathbb{Z}^d}$.

Não vamos estudar modelos com comportamento intermediário como o "anti-ferromagnetismo por camadas", como por exemplo o caso apresentado na figura onde, se a interacção for aos próximos vizinhos $J_z < 0$ e

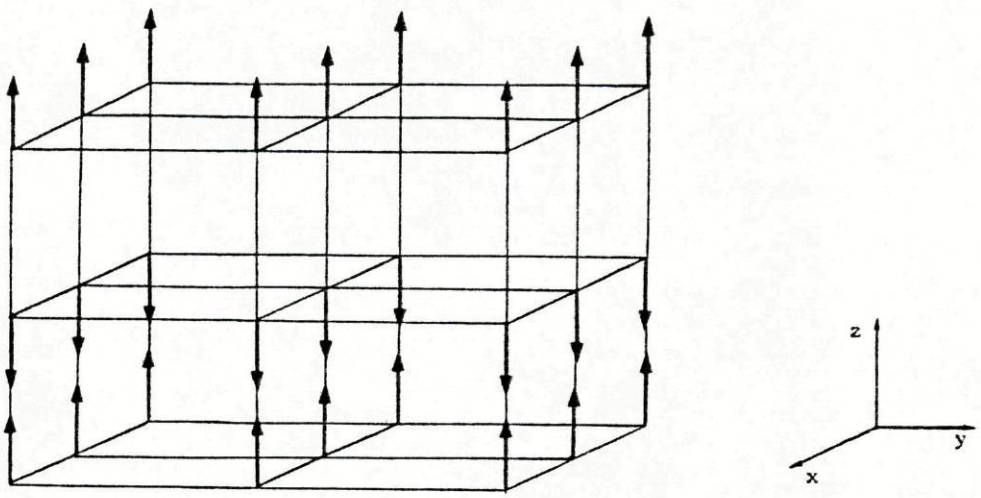
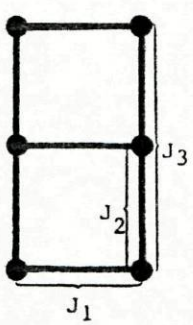
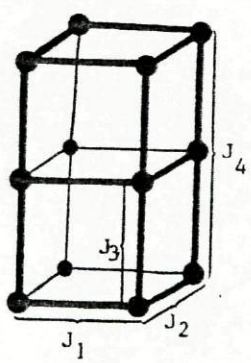


FIG. I.12

$J_x > 0$, $J_y > 0$. Também não vamos estudar os modelos com interacção em competição, do tipo do modelo ANNNI (anisotropic next nearest neighbour Ising) em que $J(i,j) > 0$ se $|i-j| = 1$ e $J(i,j) = 0$ se $|i-j| \neq 0$ excepto se $|i-j| = 2$ e a aresta (i,j) for paralela a um dos eixos (fixo) da rede $\mathbb{Z}^d$, sendo nesse caso $J(i,j) < 0$. (ver figura)



$d = 2$; $J_1, J_2 > 0$; $J_3 < 0$



$d = 3$; $J_1, J_2, J_3 > 0$; $J_4 < 0$

FIG. I.13

Estes modelos foram introduzidos por ELLIOT [107] em 1961. Indicamos algumas pistas e bibliografia no ponto I - 10 - 3 .

No capítulo II indicamos condições gerais para que um modelo tenha comportamento antiferromagnético. Condições análogas para se obter um comportamento ferromagnético podem ser encontradas em MALISHEV [38] .

I.8 TRANSIÇÕES DE FASE E ARGUMENTOS DE PEIERLS

I.8.1 AS TRANSIÇÕES DE FASE

Intuitivamente diz-se que um sistema tem uma transição de fase quando é macroscópicamente instável ; isto é, "pequenas" modificações nas condições exteriores (campo magnético, temperatura, etc.) provocam "grandes" modificações em variáveis macroscópicas do sistema (magnetização, densidade, etc.).

Para nós "provar (a existência de) uma transição de fase é provar a existência duma ordem a longa distância (L.R.O.*) a temperatura suficientemente baixa"(**), E.LIEB [39] . Dado que S é geralmente um grupo, ou pelo menos um conjunto com "simetria", por vezes a existência de L.R.O. é equivalente à existência de mais de um estado de equilíbrio ; muitas vezes exibe-se a existência de mais do que um estado de equilíbrio exibindo dois valores médios diferentes para o mesmo observável, o que implica medidas de probabilidade (isto é, estados) diferentes. Construimos medidas diferentes no Capítulo II usando condições fronteira (isto é, condições no exterior dos sucessivos volumes $\Lambda \in \mathcal{C}$) diferentes.

I.8.2 O ARGUMENTO DE PEIERLS E POSITIVIDADE DE REFLEXÃO

A primeira tentativa para provar a existência duma transição de fase é provàvelmente devida a R.PEIERLS [40] (1936) e apesar de o artigo em

---

(*) "Long range order"

(**) Com excepções nos modelos com grande entropia. Ver I.9.

questão ter incorrecções(*) o método utilizado mostrou-se muito frutuoso.

Suponhamos dois nós da rede suficientemente separados : $x, y \in \mathbb{Z}^d$. Consideramos as configurações em que os spins s_x e s_y são opostos. Em todas estas configurações há um contorno envolvendo o nó x ou um contorno envolvendo o nó y . Um contorno γ é uma poligonal (fechada) sobre a rede tal que todos os spins adjacentes a γ têm a propriedade seguinte :

Os spins interiores a γ são paralelos entre si e antiparalelos aos spins exteriores a γ .

Sendo γ um contorno suponhamos que se pode provar que a probabilidade $P(\gamma)$ de que o contorno γ ocorra numa configuração é tal que

$$P(\gamma) \leq \exp\left[-C(\beta)\,|\gamma|\right]$$

onde $|\gamma|$ é o comprimento do contorno γ e $C(\beta) \to \infty$ quando $\beta \to \infty$. Como o número de contornos de comprimento $|\gamma|$ é majorado (afora constante multiplicativa) por $3^{|\gamma|}$ (se $d \geq 2$) , a probabilidade P_{+-} de se ter dois spins antiparalelos verifica :

$$P_{+-} \leqslant \sum_{|\gamma|=4}^{\infty} \exp\left[(-C(\beta) + \log 3)\,|\gamma|\right]$$

e portanto $P_{+-} \longrightarrow 0$ quando $\beta \longrightarrow \infty$ (o que indica existência de L.R.O.)

O raciocínio que acabamos de descrever aplica-se a todos os casos, ficando apenas pendente a estimativa de $P(\gamma)$. Para o ferromagnete de Ising a duas dimensões com interacção aos próximos vizinhos, o argumento original de Peierls para a estimativa de $P(\gamma)$ é o seguinte :

(*) Só corrigidas em (1964) por R.GRIFFITHS [41] e independentemente (1965) por R.L.DOBRUSHIN [42] .

$$P(\gamma) = Z^{-1} \sum_{\gamma \in \{s(t)\}} \exp\left[-\beta H(\{s(t)\}\right] \; ;$$

(soma sobre todas as configurações que contêm γ). Para cada termo do numerador, consideramos o termo correspondente do denominador (i.e. Z) onde <u>todos</u> os spins no interior de γ foram invertidos. Restringimos a soma do denominador a estes termos e obtemos $P(\gamma) \leq \beta J |\gamma|$, quer dizer $C(\beta) \leq \beta J$, com $J = \min_{ij} J(i,j) > 0$. A estimativa obtida é independente de $\Lambda \in \mathcal{C}$ sendo portanto válida para volume infinito.

Como é evidente, este argumento não é aplicável no caso de S ser contínuo nem no caso da interacção ter alcance infinito(*). Porém foi possível adaptar este argumento ao caso do antiferromagnete de Ising R.L.DOBRUSHIN [25] e ao ferromagnete de Heisenberg anisotrópico Y.MALYSHEV [38] . O objectivo principal da nossa contribuição (capítulos 2 e 3) [44, 45] é a generalização ao antiferromagnete de Heisenberg anisotrópico. Provaremos que para β suficientemente pequeno este modelo apresenta uma transição de fase para todos os valores α do parâmetro de anisotropia, $|\alpha| < 1$. Este resultado vai ser consequência duma propriedade verificada num modelo menos restritivo que o antiferromagnete anisotrópico de Heisenberg.

Por causa da dificuldade da estimação de $P(\gamma)$ alguns autores desenvolveram um método alternativo, a "positividade de reflexão" (Reflection Positivity, R.P.).

Com este método reduz-se as estimativas da quantidade local $P(\gamma)$ a uma estimativa de $P(\tilde{\gamma})$ em que $\tilde{\gamma}$ é um contorno "universal" cobrindo toda a rede. Com efeito se se verifica a R.P. tem-se :

(*) Também não é aplicável para os modelos quânticos, que não analisamos.

$$P(\gamma) = P(\tilde{\gamma})^{a|\gamma|/|\Lambda|}$$

com $a \simeq 1$ e $\Lambda \in \mathcal{C}$.

A ideia de combinar a R.P. (OSTERWALDER, SCHRADER [46] , E.NELSON [47]), com o argumento de Peierls é devida a GLIMM, JAFFE, SPENCER [48] em teoria quântica dos campos. A primeira aplicação à mecânica estatística é devida a FRÖHLICH , LIEB [49] .

Quando R.P. é verificada as demonstrações são mais simples ; porém quando há R.P. o modelo é necessàriamente invariante por translação, porque R.P. obriga ao uso de condições no exterior de Λ periódicas, entre outras condições Λ tem que ser paralelipipedico ; Este é o inconveniente principal da utilização da R.P. comparativamente com o argumento de Peierls, visto neste último não ser necessária invariância por translacção, sendo suficiente um minorante para a interacção, o que do ponto de vista físico é mais satisfatório.

Em todo o ponto I.8 seguimos muito de perto E.LIEB [39] onde se encontra uma pequena introdução à técnica R.P. que não descrevemos. O texto de base para o estudo da R.P. é FRÖHLICH, ISRAEL, LIEB e SIMON [112] .

I.9 FRAGMENTOS DE HISTÓRIA (1920 - 1980 ...)

Não pretendemos fazer um resumo de história da mecânica estatística rigorosa dos modelos sobre rede. A intenção é apenas de tentar localizar as nossas preocupações.

"Para os físicos matemáticos a história começa em 1920" (BELLISARD [50]) com o modelo de Ising [3] proposto por Lenz [51] e estudado por Ising na sua tese (1925) onde mostra que a uma dimensão o modelo não tem transições de fase. (Uma versão moderna deste resultado pode ser encontrada em SIMON-SOKAL [74]).

Devido a este resultado negativo o modelo foi abandonado e HEISENBERG [5] (1928) propôs o modelo, que hoje tem o seu nome, na esperança de que seria mais fácil exibir nele uma transição de fase.

Foi porém para o modelo de Ising bidimensional (interacções aos próximos vizinhos) que se obteve o primeiro resultado positivo, PEIERLS [40] (*).

(Os resultados que se seguem, salvo indicação em contrário, dizem respeito ao mesmo modelo).

Em 1941 o primeiro resultado quantitativo é obtido por KRAMERS, WANNIER [75] e também por MONTROLL [76] , que calcularam a temperatura de Curie (crítica) usando a autodualidade deste modelo. Concretizando, notaram a existência duma relação de simetria para a pressão entre as regiões de alta e de baixa temperatura (dualidade).

(*) A prova de Peierls não é completamente correcta visto não ter sido tomado em conta as condições fronteira. A prova correcta foi obtida independentemente por GRIFFITHS [41] e DOBRUSHIN [77] .

Este resultado foi confirmado em (1944) por ONSAGER [78] que calculou a pressão e a magnetização.

Em 1949 ONSAGER [79] encontrou a magnetização espontânea. O cálculo não foi publicado, sendo redescoberto por YANG [80] em 1952. KAUFMAN [81] em 1949 simplificou a matemática do trabalho de ONSAGER e conjuntamente [82] estudaram as funções de correlação.

Citamos o Teorema de LEE e YANG [83] (e YANG, LEE [84]) de entre uma das primeiras tentativas para se obter um resultado rigoroso geral. Neste trabalho demonstra-se a ausência de transição de fase se existir um campo exterior não nulo.

Os trabalhos de Onsager, Kaufman e Yang , muito gerais, são "extremamente complicados". "Esta complexidade deu ao modelo Ising a reputação de dificuldade que o acompanha". "E durante algum tempo talvez a notoriedade deste modelo fez muitos físicos supor que estava completamente resolvido por Onsager, Kaufman e Yang" (entre aspas citações livres de B.Mc. COY, T.T. WU [2]).

Vários desenvolvimentos e sobretudo simplificações foram realizados até ao início dos anos sessenta e é importante não deixar de citar os trabalhos de KASTELEYN, KAC, MONTROLL, POTTS, SZEGO e WARD ; o leitor encontrará complementos e bibliografia no texto de Mc COY e WU [2] .

Relativamente a outros modelos, foram realizados neste período grande número de trabalhos "semi-rigorosos" (na linguagem de J.BELISSARD [50]). Ver artigo de revisão de FISHER [86] .

É porém nos anos 1965 - 1970 que se renova o interesse pelos modelos de mecânica estatística sobre rede. Por um lado trabalhos como os de Mc Coy, Wu em que se procura calcular novas quantidades no modelo de Ising bidimensional, provaram que o modelo tem comportamento histerético [87] e pelo estudo do caso em que a interacção J é uma variável aleatória, que

permitem o estudo quantitativo da influência de impurezas nas transições de fase [88] (ver também os capítulos XIII e XIV do livro dos mesmos autores [2]).

Por outro lado nesta mesma época (1965 - 1970) com os especialistas da Teoria Axiomática dos campos bloqueados por enormes dificuldades, "começa" (BELISSARD [50]) a mecânica estatística rigorosa propriamente dita. Com efeito SCHWINGER [89] em 1958 tinha notado que a Teoria dos Campos e a Mecânica Estatística estavam intimamente ligados e talvez por isso grande número de especialistas de Teoria Construtiva dos Campos se tenham dedicado à Mecânica Estatística, a partir dessa data.

Depois de 1965 a evolução é muito mais difícil de descrever dada não só a nossa proximidade temporal, mas também devido ao grande número de trabalhos publicados. A referência de base para os trabalhos dos anos 60 é D.RUELLE [4] .

Sobre a ligação à Teoria construtiva dos campos ver também B.SIMON [90] e GUERRA, ROSEN, SIMON [91] .

I.10 COLECTÂNEA DE ALGUNS RESULTADOS CONHECIDOS

Descrevemos rapidamente no que se segue resultados relativos à existência (ou não existência) de transição de fase em alguns modelos, tendo em conta a dimensionalidade da rede.

Destacamos naturalmente o modelo de Ising.

I.10.1 MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL COM INTERACÇÕES FERROMAGNÉTICAS AOS PRÓXIMOS VIZINHOS E CAMPO MAGNÉTICO EXTERIOR h .

A existência de transição de fase foi provada por PEIERLS [40] sendo a prova completada por DOBRUSHIN [77] e GRIFFITHS [41] .

A unicidade do estado de equilíbrio foi provada para $h \neq 0$ por RUELLE [92] e por LEBOWITZ, MARTIN-LÖF [93] . Estes últimos provam também a unicidade do estado de equilíbrio se $h = 0$ e $T > T_c$ em que T_c é a temperatura acima da qual não há magnetização espontânea.

GALLAVOTTI, MIRACLE-SOLE [53] provaram que se $h = 0$ e $T \leq T_o < T_c$ todo o estado de equilíbrio invariante por translação é combinação convexa de apenas dois estados "extremais" (e que estes podem ser obtidos com condições fronteira + ou -).

Os resultados anteriores são facilmente generalizados para $d \geq 2$ e para modelos com S finito, qualquer, PIROGOV, SINAI [94] , MARTIROSYAN [95] .

Os resultados que se seguem são típicos da rede quadrada bidimensional : LEBOWITZ [96] provou que a temperatura T_c por ele definida em [93] coincide com a temperatura crítica de ONSAGER [78] . MESSAGER, MIRACLE-SOLE [99] provam que se $h = 0$ $\forall_{T \leq T_c}$ todo o estado de equilíbrio

invariante por translação é combinação convexa de dois estados "extremais" usando a autodualidade do modelo : $\forall_{\mu_E \in G} \quad \exists_{\lambda \in [0,1]} : \mu_E = \lambda_{\mu_1} + (1-\lambda)\mu_2$ em que μ_1 e μ_2 são os estados "extremais" de G .

Como HIGUCHI [97] AIZENMAN [98](*) provaram que todos os estados de equilíbrio são invariantes por translação. Ficou assim completa a descrição dos estados do ferromagnete bidimensional de Ising.

O modelo antiferromagnético sem campo exterior (h = 0) é em tudo idêntico ao modelo que acabamos de descrever (basta inverter um spin em cada dois - ver capítulo II). Porém se $h \neq 0$ a inversão dum spin em cada dois introduz um termo de volume, não podendo, por isso, ser tratado pelo mesmo processo. DOBRUSHIN [25] , combinando o argumento de PEIERLS com a transformação (a que damos o seu nome no capítulo II), provou a não unicidade do estado de equilíbrio.

Exceptuando que os estados extremais (fases puras) não são invariantes por translação (são periódicos) todos os outros resultados são idênticos aos do modelo ferromagnético (ver também MIRACLE - SOLE [100] , GALLAVOTTI, MARTIN - LÖF, MIRACLE - SOLE [101]).

I.10.2 MODELO DE ISING COM DIMENSÃO SUPERIOR A DOIS ; TENSÃO SUPERFICIAL E TRANSIÇÃO RUGOSA

Consideramos o modelo de Ising sobre $\mathbb{Z}^d$ (com $d \geq 3$) e com interacções aos próximos vizinhos. O hamiltoniano num conjunto finito $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$

(*) Seguindo uma ideia que já era mais ou menos tida como certa (c.f. MESSAGER, MIRACLE - SOLE [108] , [99] e D.MERLINI [68] , [69]).

com condições fronteira b especificadas por $\sigma_j = \tilde{\sigma}_j$ se $j \notin \Lambda$ é dado por

$$-H_\Lambda^b = J \sum_{\substack{i,j \in \Lambda \\ |i-j|=1}} \sigma_i \sigma_j + J \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \notin \Lambda \\ |i-j|=1}} \sigma_i \tilde{\sigma}_j$$

sendo $\Lambda = \Lambda(M,L)$ um paralelipipedo com lados

$L_1 = 2M$ e $L_2 = L_3 = \ldots = L_d = 2L$ sendo

$$\Lambda_{(M,L)} = \{i \in \mathbb{Z}^d : -M \leq i_1 \leq M-1, -L \leq i_\alpha \leq L-1, \alpha = 2,\ldots,d\}$$

Designamos por $\Lambda_{(L)}$ o cilindro infinito

$$\Lambda_{(L)} = \lim_{M \to \infty} \Lambda_{(M,L)} = \{i \in \mathbb{Z}^d : -L \leq i_\alpha \leq L-1, \alpha = 2,\ldots, d\}$$

Consideramos as condições fronteira :

1) + isto é $\tilde{\sigma}_j = +1 \quad , \quad \forall_{j \notin \Lambda}$

2) − isto é $\tilde{\sigma}_j = -1 \quad , \quad \forall_{j \notin \Lambda}$

3) ± isto é $\begin{cases} \tilde{\sigma}_j = +1 & \text{se } j_1 \geq 0 \\ \tilde{\sigma}_j = -1 & \text{se } j_1 < 0 \end{cases}$

Ver figura

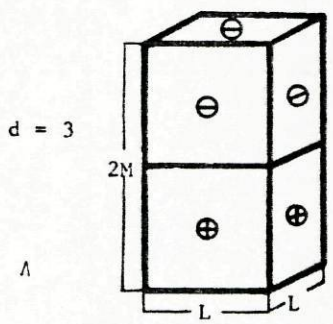


FIG. I.14

Designamos por $< A >^b$ o valor esperado do observável A no estado de Gibbs μ^b associado à condição fronteira b :

$$\lim_{\substack{M\to\infty \\ L\to\infty}} \mu^b_{L,M} = \lim_{L\to\infty} \mu^b_L = \mu^b$$

$$\lim_{\substack{M\to\infty \\ L\to\infty}} < A >^b_{L,M} = \lim_{L\to\infty} < A >^b_L = < A >^b = \mu^b(A)$$

A Temperatura crítica em dimensão d , $T_c(d)$, é definida de forma unívoca por (LEBOWITZ, MARTIN - LÖF [93]) :

$$< \sigma_i >^+ = - < \sigma_i >^- = m^+(\sigma) > 0 \qquad \text{para } T < T_c$$

e μ^b independente de b se $T > T_c(d)$.

A tensão superficial é definida como o limite termodinâmico da diferença de energia livre (pressão), por unidade de secção, entre o sistema com condições fronteira $\pm$ e com condições fronteira + , e foi introduzido por GRUBER, HINTERMANN, MESSAGER, MIRACLE - SOLE [85] :

Fazendo $K = \beta J$

$$\tau_{\Lambda_{(M,L)}}(K) = - \frac{1}{|L|} \log\left[Z^+(K) / Z^{\pm}(K) \right]$$

onde $|L| = 2^{d-1} \times L_2 \times L_3 \times \ldots \times L_d$ é a área da secção recta do cilindro $\Lambda(\infty, L)$

$$\tau_{\Lambda_L}(K) = \frac{1}{|L|} \lim_{M\to\infty} \tau_{\Lambda_{(M,L)}}(K)$$

então a tensão superficial (vezes β) é dada por

$$\tau(K) = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^{d-1}} \tau_L(K)$$

Os limites existem e $\tau(K) \equiv \tau(K; d)$ é crescente em K e (por isso) também é crescente em d (BRICMONT, LEBOWITZ, PFISTER [64]).

LEBOWITZ, PFISTER [104] provaram que

$$\tau = 0 \quad \text{se} \quad T \geq T_c \quad \text{e} \quad \tau > 0 \quad \text{se} \quad T < T_c$$

isto é $\tau \neq 0$ se e só se há magnetização espontânea. Além disso, conjuntamente com BRICMONT [64] provaram que $\tau(k) \leq 2K\left[m^*(K)\right]^2$ em que $m^*(K)$ é a magnetização espontânea ; sendo para $d = 2$

$$\tau(K; 2) = 2K + \log(\text{th } K) \quad , \quad \text{ONSAGER [78]} \; .$$

Os estados $< \; >^+$ e $< \; >^-$ são invariantes por translação e extremais. Para $d = 2$ como vimos (HIGUCHI [97] , AISENMAN [98]) :

$$< \; >^{\pm} = \frac{1}{2}(< \; >^+ + < \; >^-)$$

enquanto que, para $d \geq 3$ $< \; >^{\pm}$ não é invariante por translação para $T < T_c$ $(d-1)$ VAN BEIJEREN [103] .

Além disso se T suficientemente pequeno o estado $< \; >^{\pm}$ em $d \geq 3$ tem uma interface (de DOBRUSHIN) rígida localizada próximo de $i_1 = 0$, que separa a fase pura $+$ para $i_1 >> 0$ da fase pura $-$ para $i_1 << 0$ DOBRUSHIN [102] . Depois de associarmos configurações e contornos como usualmente, a interface é definida como o contorno conexo aberto que se extende para fora do volume finito Λ . A diferença entre $d = 2$ e $d \geq 3$ é que a baixa temperatura a posição da interface no primeiro caso flutua com uma amplitude proporcional a $\sqrt{L}$ quando $L \to \infty$ (GALLAVOTTI [43] , ABRAHAM, REED [105]) enquanto que no segundo caso as flutuações são exponencialmente pequenas com L . Contudo em ambos os casos a largura intrínseca da interface é exponencialmente pequena a baixa temperatura $\beta J >> 1$

(BRICMONT, LEBOWITZ, PFISTER [106]).

Definimos temperatura de enrugamento (rougthening) $T_R(d)$,como a mais baixa temperatura para a qual $\mu^{\pm}$ é invariante por translação, isto é,

$$\mu^{\pm} = \frac{1}{2}(\mu^{+} + \mu^{-}) \quad \text{sse} \quad T > T_R(d)$$

Segue-se por VAN BEIJEREN [103] que

$$T_c(d-1) \leq T_R(d) \leq T_c(d)$$

A questão é saber-se se $T_R(d)$ é ou não estritamente inferior a $T_c(d)$. A resposta é evidentemente afirmativa se $d = 2$, visto que $T_R(2) = 0$ (GALLAVOTTI [43] , ABRAHAN, REED [105]) mas não há resposta para $d \geq 3$, embora devido aos cálculos numéricos de WEEKS,GILMER, LEAMY [109] se espere que

$$T_R(3) \simeq 0{,}57\ T_c(3) < T_c(3) \quad \text{e que}$$

$$T_R(d) = T_c(d) \quad \text{se} \quad d \geq 4$$

também se espera BRICMONT, FONTAINE, LEBOWITZ [141] que se $T_R < T_c$ só haja estados invariantes por translação se $T > T_R$ como no caso $d = 2$ (HIGUCHI [97] , AISENMAN [98]). O ponto mais obscuro, visto que nem ao nível intuitivo se tem informação, é o facto de não se saber quais as modificações que ocorrem na estrutura da interface quando $T = T_R$.

Referir-nos-emos posteriormente (I.10.3.2) à existência de tensão superficial no modelo de Potts, bem como à ligação dos resultados anteriores com o limite S.O.S. (solid on solid) que descrevemos no capítulo IV.

I.10.3 MODELOS COM GRANDE ENTROPIA

1.10.3.1 MODELOS COM INTERACÇÕES EM COMPETIÇÃO

O autor deve confessar que não consegue entender em que ponto está o conhecimento matemático destes modelos. No modelo ANNNI "não há teorias 'exactas' do diagrama de fases em 2 ou 3 dimensões" (BAK [110]).

As teorias aproximadas propostas por VILLAIN, BAK [61] e por FISHER, SELKE [111] são contraditórias. (ver artigo de revisão de BAK [110]). Do ponto de vista matemático este modelo é particularmente interessante pela possibilidade de exibir um grande número de estados, eventualmente infinito, no sentido em que os definimos no ponto I.5.3.

O modelo correspondente com S contínuo, X-Y ou Heisenberg, tem um estado fundamental(*) helicoidal, isto é, na direcção em que as interacções competem $\sigma_i \sigma_{i+1} = \cos\theta$ para algum $\theta \in]0, 2\pi[$ sendo θ função de J_4 / J_3 (ver figura I. 14).

Em dimensão um ou dois esta ordem helicoidal não persiste a temperatura não nula (ver por exemplo PFISTER [57]). Em dimensão 3 espera-se que esta ordem se mantenha ; porém FRÖHLICH, ISRAEL, LIEB, SIMON [112] não conseguiram prová-lo usando a positividade de reflexão (R.P.). Por sugestão de B.SOUILLARD, conjuntamente com A.MESSAGER,o autor tentou provar a ordem helicoidal adaptando a definição intrínseca dos contornos de MALISHEV [38] que introduziu em [44] e [45] e que está descrita no capítulo II.

(*) Uma configuração $\sigma \in S^{\mathbb{Z}^d}$ diz-se um estado fundamental do hamiltoniano H sse $\forall_{\Lambda \in \mathcal{C}} \; \forall_{\sigma' \in S^{\mathbb{Z}^d}} \; H_\Lambda(\sigma) \leq H(\sigma')$ μ-quase sempre.

O único resultado que parece ter sido obtido (não publicado), é que se esta ordem existir, também existem estados correspondentes a "hélices" de passo variável, isto é, $\sigma_i \, \sigma_{i+1} = \cos \theta_i$ sendo o angulo θ_i dependente de i , no mesmo estilo dos estados propostos por FISHER, SELKE [111] para o modelo ANNNI. Nestas condições o diagrama de fases será (?) muito mais complicado.

Esperamos não aumentar a controvérsia dizendo que provavelmente o primeiro (único até agora ?) resultado rigoroso em modelos com interacções em competição é devido a DOBRUSHIN, GERTSIK [37] .

Estes autores tomaram o hamiltoniano

$$H_\Lambda = \sum_{i \in \Lambda} h \, \sigma_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} J_{ij}(\sigma_i , \sigma_j) + \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \notin \Lambda}} J_{ij}(\sigma_i , \sigma_j)$$

com

$$J_{ij}(\sigma_i , \sigma_j) = \begin{cases} a \, \sigma_i \, \sigma_j & |i-j| = 1 \\ b \, \sigma_i \, \sigma_j & |i-j| = \sqrt{2} \\ 0 & |i-j| > \sqrt{2} \end{cases}$$

Substituiram este modelo por um modelo a $2^4 = 16$ particulas (equivalente) ; as partículas são :

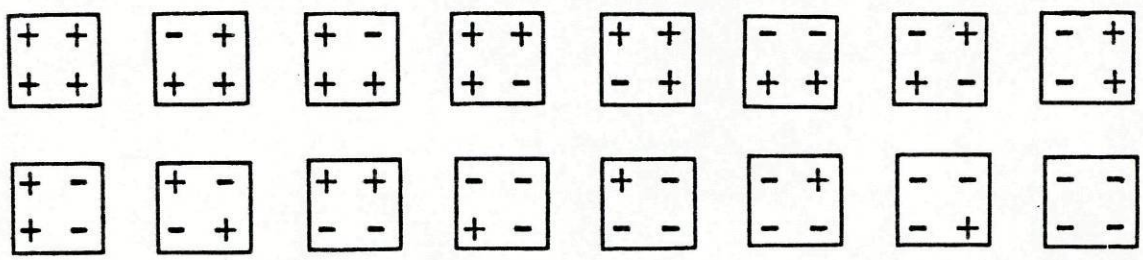


FIG. I.15

Em seguida usam o argumento de PEIERLS [40] para provar a existência de 2 ou 4 (respectivamente, 2 ou 4 ou 6) estados de Gibbs extremais periódicos a baixa temperatura se $d = 2$ (respectivamente, se $d = 3$), conforme os valores de h , a e b .

Damos dois exemplos de ordem que persiste a $T \neq 0$:

$$1 - \quad d = 3 \quad \text{se} \quad a < 0 \,,\, b > \frac{|a|}{4} \,,\, |h - 3(a+2b)| < \min\{2b \,,\, a+4b\}$$

Estados :

$$1.1 \quad \sigma_1(x \,,\, y \,,\, z) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \text{ par} \\ -1 & \text{se } x \text{ impar} \end{cases}$$

$$1.2 \quad \sigma_2(x \,,\, y \,,\, z) = \sigma_1(z \,,\, x \,,\, y)$$

$$1.3 \quad \sigma_3(x \,,\, y \,,\, z) = \sigma_1(y \,,\, z \,,\, x)$$

$$1.4 \quad \sigma_4(x \,,\, y \,,\, z) = -\sigma_1(x \,,\, y \,,\, z)$$

$$1.5 \quad \sigma_5(x \,,\, y \,,\, z) = -\sigma_2(x \,,\, y \,,\, z)$$

$$1.6 \quad \sigma_6(x \,,\, y \,,\, z) = -\sigma_3(x \,,\, y \,,\, z)$$

$$2 - \quad d = 2 \quad \text{se} \quad b > \frac{|a|}{2} \,,\, |\mu - 2(a+b)| < \min\{2b \,,\, a+2b\}$$

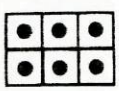
Estados :

$$2.1 \quad \sigma_1(x \,,\, y) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \text{ par} \\ -1 & \text{se } x \text{ impar} \end{cases}$$

$$2.2 \quad \sigma_2(y \,,\, x) = \sigma_1(x \,,\, y)$$

$$2.3 \quad \sigma_3(x \,,\, y) = -\sigma_1(x \,,\, y)$$

$$2.4 \quad \sigma_4(x \,,\, y) = -\sigma_2(x \,,\, y)$$

Deve ser possível, mas com combinatória muito complicada considerando modelos a $2^6 = 64$ particulas  , adaptar esta técnica para o modelo ANNNI.

I.10.3.2 UM MODELO DE DOBRUSHIN - SCHLOSMAN

MODELO DE POTTS

DOBRUSHIN, SCHLOSMAN [113] estudaram hamiltonianos do tipo

$$H(\sigma) = \sum_{|i-j|=1} (\sigma_i - \sigma_j)^2 + \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \cup(\sigma_i) \qquad \sigma \in S = \mathbb{R} \qquad d \geq 2$$

para potenciais $\cup$ particulares.

É sabido, que para potenciais razoáveis (LEBOWITZ, PRESSUTTI [15] , CASSANDRO, OLIVIERI, PELLIGRINOTTI, PRESSUTTI [114]), para T grande, o estado de Gibbs é único.

Para potenciais com dois mínimos globais (figura Ⓐ) o diagrama de fases é idêntico ao do ferromagnete de Ising se $\cup$ verificar algumas condições suplementares, como foi provado por Malishev [38] . Se na primeira parcela do hamiltoniano substituirmos o quadrado da diferença pelo quadrado da soma $(\sigma_i + \sigma_j)^2$, e na segunda $\cup(\sigma)$ por $\cup(\sigma) + h\sigma$, obtemos o antiferromagnete com campo magnético h , que tem um diagrama de fases idêntico ao do antiferromagnete de Ising com campo magnético (ver [45] , [44] e capítulo II). Estes dois resultados foram obtidos usando o argumento de PEIERLS, e os estados de Gibbs são pequenas perturbações dos estados fundamentais.

Se $\cup$ for convexa com um só mínimo - figura Ⓑ , DOSS e ROGER [115] provaram que há um único estado de Gibbs, usando a teoria dos campos de Markov em interacção.

Em 1980 DOBRUSHIN, SCHLOSMAN [113] tentavam provar uma conjectura de J.FRITZ ; se $\cup$ tem um só mínimo global então o estado de Gibbs é único. Provaram, porém, que a conjectura era falsa se $\cup$ for da forma da figura Ⓒ ,

isto é, se para além das condições usuais para existência de comportamento termodinâmico, υ tiver dois mínimos em c_1 e c_2 sendo o mínimo mais baixo (c_1) suficientemente fundo e apertado relativamente ao outro (c_2), e se a "barreira" entre os dois mínimos for suficientemente alta e larga, isto é, se $\int_a^b \upsilon(\sigma)\, d\sigma$ for suficientemente grande ; concretizando, nestas condições, há uma temperatura $T = T_c$ na qual coexistem pelo menos dois estados de Gibbs limite, um associado ao mínimo global C_1 (estado já existente se $T < T_c$) e o outro correspondente ao mínimo local c_2 .

Usando o desenvolvimento de Taylor à volta dos pontos de mínimo, tem-se

$$\upsilon(c_k + \Delta) = a_k + \frac{m_k}{2}\,\Delta^2 + O(\Delta^3)$$

$$k = 1, 2$$

As condições necessárias para a não unicidade do estado de Gibbs que acabamos de indicar podem ser descritas de forma simplificada como :

1) RELAÇÃO ENERGIA - MASSA

$$a_1 < a_2 \quad e \quad m_1 >> m_2$$

2) BARREIRA EM ENERGIA

$$\max_{\sigma \in [c_1, c_2]} \upsilon(\sigma) >> \max\{a_1, a_2\}$$

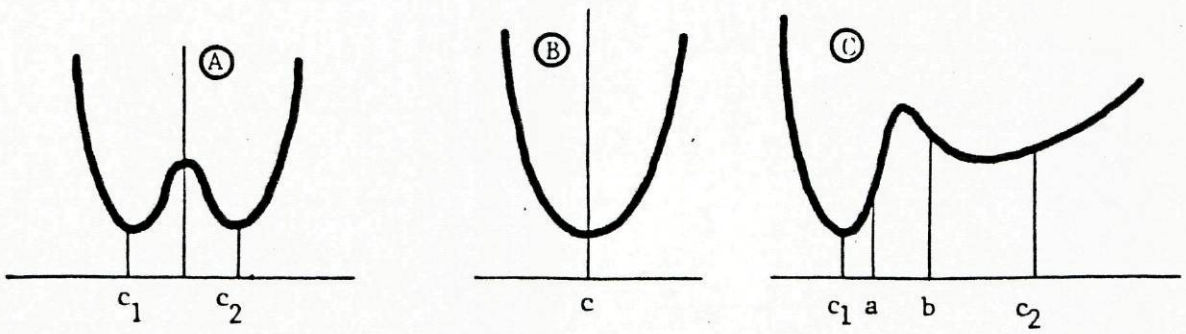


Fig. I.16

Este resultado foi obtido usando a positividade de reflexão do modelo (R.P.).

O principal interesse deste modelo é o de pela primeira vez se exibirem estados de Gibbs a baixa temperatura que não correspondem a perturbações de estado fundamental, e sugeriu assim a KOTECKY - SHLOSMAN [116] a forma de demonstrar a existência duma transição de fase de primeira espécie no modelo de Potts se $d \geq 2$ e se q for suficientemente grande.

Sabia-se desde 1975 , PIROGOV - SINAI [94] que a baixa temperatura no modelo de Potts existem q estados invariantes por translação, tendo KOTECKY - SHLOSMAN [116] provado que persistem $\forall_{T \leq T_c}$ e portanto que se $T = T_c$ coexistem pelo menos $q+1$ estados. Em Julho de 1981 J.LEBOWITZ informou A.MASSAGER e o autor, que R.ISRAEL tinha anunciado uma demonstração de que se $T = T_C$, havia no máximo $q+1$ estados com positividade de reflexão. Este resultado nunca foi publicado. Tudo o que se sabe é que a baixa temperatura o número de fases invariantes por translação é q , PFISTER não publicado, ver BRICMONT, LEBOWITZ, MESSAGER [117] . Neste último trabalho é definido um isomorfismo entre modelos de Potts com $q = 2^n$ particulas e modelos de Ising. Em particular para a tensão superficial podem provar que se $\ell , \ell' \in \{0, 1 \ldots, q-1\}$, $\ell \neq \ell'$

$$\tau_{\ell\ell'} = - \lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^{d-1}} \lim \left(Z^{\ell\ell'}_{LM} / Z^{\ell}_{LM} \right)$$

existe se $q = 2^n$ e que

$$\tau > 0 \quad \text{se} \quad T < T_c \quad \text{e}$$

$$\tau = 0 \quad \text{se} \quad T > T_c$$

ficando em aberto o caso $T = T_c$.

HINTERMANN, KUNZ, F.Y.WU [118] tinham provado que a temperatura critica é única se $q \geq 4$.

Em dimensão dois usando a dualidade como transformação de "PEIERLS" para determinar a probabilidade dos contornos separando fases ordenadas e desordenada LAANAIT, MESSAGER, RUIZ [119] provaram a existência duma tensão superficial positiva entre as fases ordenadas se $T \leq T_C$ e entre as fases ordenadas e desordenada se $T = T_C$.

O leitor no artigo de revisão de F.Y.WU [120] encontrará complementos sobre o modelo de POTTS.

I.10.4 OUTROS RESULTADOS

I.10.4.1 MODELOS COM INTERACÇÕES COM LONGO ALCANCE

Para interacções com alcance finito não há transição de fase se $d = 1$ (ver DYSON [127], SIMON, SOKAL [74]). Para o modelo de Ising, DYSON [121] [122] demonstrou, que se

$$J(i-j) \equiv J(r) \geq C\left[\frac{\log \log (|r|+3)}{r^2+1}\right]$$

há magnetização espontânea a baixa temperatura.

Por outro lado se

$$\lim_{N \to \infty} \left[\log N\right]^{-\frac{1}{2}} \sum_{r=1}^{N} J(r)\, r \longrightarrow 0$$

ROGERS, THOMPSON [123] mostraram que a magnetização espontânea é nula $\forall_T$.

ANDERSON, YUVAL [124] tinham verificado que a fronteira entre os dois comportamentos era $J(r) = \frac{1}{r^2}$ e THOULESS [125] previu uma descontinuidade da magnetização em função da temperatura : o efeito de Thouless.

Supondo que a baixa temperatura há magnetização espontânea SIMON, SOKAL [74] estabeleceram a descontinuidade se a função de correlação

$$< \sigma_x \sigma_y > (\beta) - \left[< \sigma_x > (\beta)\right]^2$$

tivesse um decaimento polinomial $\forall_{T < T_C}$.

FRÖHLICH e SPENCER [126] provaram a existência de transição neste caso, completando a prova de SIMON, SOKAL [74] .

A duas dimensões d = 2 KUNZ, PFISTER [128] provaram que há transição de fase no modelo X - Y isotrópico se $J(r) \sim r^{-\alpha}$ com $2 < \alpha < 4$.

I.10.4.2 MODELOS COM INTERACÇÕES A CURTA DISTÂNCIA E SIMETRIA CONTÍNUA

Se d = 2 o modelo de Heisenberg (ou X - Y) isotrópico não tem transição de fase se a interacção for aos próximos vizinhos pelo argumento de MERMIN, WAGNER [59] ou usando os refinamentos de DOBRUSHIN, SHLOSMAN [58] , PFISTER [57] ou ainda, utilizando as desigualdades de KUNZ, PFISTER, VUILLERMOT [129] (ver BRICMONT, FONTAINE, L.J.LANDAU [131]). Este resultado não é verdadeiro no caso anisotrópico, ferromagnético ou antiferromagnético. Com efeito MALISHEV [38] demonstrou a existência de transição de fase para o caso ferromagnético para qualquer valor do parâmetro de anisotropia α ($|\alpha| < 1$).

No caso antiferromagnético resultados idênticos foram obtidos por FRÖHLICH, LIEB [49] se o modelo for invariante por translação, usando a positividade de reflexão, e numa situação mais geral por CALHEIROS [45] , [44] , utilizando o argumento de PEIERLS.

Provavelmente o resultado mais interessante é a demonstração da existência de transição de fase no ferromagnete de Heisenberg (isotrópico) se $d \geq 3$, por FRÖHLICH, SIMON, SPENCER [130] que desta forma iniciaram a utilização da positividade de reflexão em mecânica estatística rigorosa.

Concluindo, podemos ainda hoje dizer como LAUDAU, LIFCHITZ [132] (1967) que o único modelo (deste tipo) com solução conhecida é o modelo de Ising bidimensional, com interacção aos próximos vizinhos sem campo magnético (ONSAGER [78] (1944)).

C A P Í T U L O II

ESTUDO DE UM MODELO ANTIFERROMAGNETICO GENÉRICO

"In short, one does not have to study physics in order to understand what is going in this review. Basically, only the concept of probability and the purely geometrical counting of "clusters" configurations is necessary; and usually we do this here on two-dimensional lattices like large chessboards"

D. Stauffer , "Scaling theory of percolation clusters"
Physics Reports 54 Nº 1 (1979) pag. 4 .

Os capítulos II e III correspondem a um trabalho publicado em 1980 e 1983 em duas versões [44 , 45]

RESUMO DOS CAPÍTULOS II e III

Definimos um modelo antiferromagnetico genérico. Para esse modelo mostramos a existência duma transição de fase a baixa temperatura se o "campo magnético" exterior for suficientemente pequeno. Este resultado é obtido sem que o modelo seja necessariamente invariante por translação.

Relativamente ao "campo magnético" exterior só é necessário que ele tenha uma componente uniforme, e que seja pequeno, não havendo restrições sobre a "direcção".

No capítulo III mostramos que o modelo antiferromagnético (clássico) de Heisenberg com parâmetro de anisotropia α arbitrário, é um caso particular deste modelo genérico.

Estratégia Geral :

Fixamos no conjunto S dois pontos (correspondentes aos spins na direcção do eixo dos zz e com sentidos diferentes). Nestes dois pontos supomos propriedades extremais para as interacções. Fixamos vizinhanças desses pontos e definimos um contorno (block wall) separando as duas fases na rede. Damos uma definição intrínseca do contorno, e provamos a sua equivalência com a definição recursiva de Malyshev. Estimamos o número de contornos com número fixo de nós, e a probabilidade de cada um comparando a energia duma "nuvem" (cluster) de configurações contendo o contorno com a energia da "nuvem" das configurações obtidas das anteriores por "eliminação" do contorno. A prova é concluida utilizando como usualmente o argumento de Peierls.

II.1 NOTAÇÕES; CONDIÇÕES RESTRITIVAS

Como no capítulo I tomamos :

- $\mathbb{Z}$ - grupo dos inteiros
- $T = \mathbb{Z}^\nu$ com $\nu \geq 2$ a rede
- S - espaço métrico separável, conjunto dos spins possíveis em cada nó. Para simplificar supomos que S não depende de $t \in T$.
- μ - medida positiva finita sobre S .
- $U : S \times S \longrightarrow \mathbb{R}$ função mensurável real verificando

  (1) $\forall_{s_1, s_2} \quad U(s_1, s_2) = U(s_2, s_1)$ (simetria)

  (2) U limitado inferiormente.

  Esta função é uma generalização de interacção a dois corpos (spin - spin).
- $h : S \longrightarrow \mathbb{R}$ função mensurável real que é uma generalização da interacção spin campo magnético exterior.
- $\Delta = \{t \in T : |t| = 1\}$ em que $|.|$ é a norma euclideana em $\mathbb{Z}^\nu$. $t_1 - t_2 \in \Delta$ significa que t_1 e t_2 são próximos vizinhos.

Separamos a rede T em duas subredes T_1 e T_2 de forma que os nós mais próximos vizinhos de um nó t_1 da subrede T_1 são nós da subrede T_2 e vice-versa (ver figura).

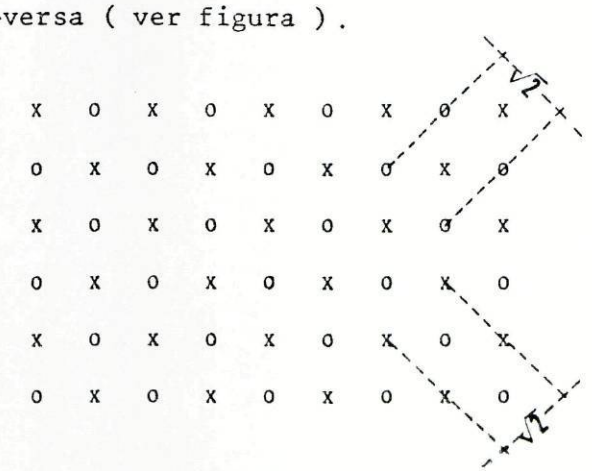


FIG. II.1

Para simplificar as notações vamos tratar o caso $\nu = 2$. A generalização para $\nu > 2$ é trivial.

Definimos agora o Hamiltoneano geral que vamos tratar :

$$H_\Lambda(s_1, \ldots, s_{|\Lambda|} \,|\, \{s(t) : t \notin \Lambda\}) =$$

$$= \sum_{\substack{t_i - t_j \in \Delta \\ t_i \in \Lambda}} U(s_i, s_j)/2 + \sum_{i=1}^{|\Lambda|} h(s_i) + \eta\psi$$

onde $\Lambda = \{t_1, t_2, \ldots, t_{|\Lambda|}\} \subset T$, $\{s(t) \mid t \notin \Lambda\}$ é a configuração no exterior de Λ (condição fronteira). Simplificamos a escrita escrevendo s_i em vez de $s(t_i)$.

ψ é o campo alternado, "staggered field", definido por :

$$\psi = \sum_{\substack{i \in T_1 \\ i \in \Lambda}} U(s_i, s_o) - \sum_{\substack{i \in T_2 \\ i \in \Lambda}} U(s_i, s_o)$$

A média de ψ ,

$\mathcal{C}_\Lambda = \dfrac{<\psi>_\Lambda}{|\Lambda|}$, campo alternado por nó, ou seja a diferença de "magnetização" entre as duas subredes.

Seja $s_o \in S$ um spin verificando certas condições, e que a partir de agora fica fixado.

Consideramos como usualmente (ver I - 5.4) as densidades condicionais de Gibbs a volume finito ($\Lambda \in \mathcal{C}$) :

$$\text{(A)} \quad f_\Lambda(s_1, s_2, \ldots, s_{|\Lambda|} \,|\, \{s(t) : t \notin \Lambda\}) = \frac{\exp\{-\beta H_\Lambda(s_1, \ldots, s_{|\Lambda|} \,|\, s(t))\}}{\int \exp\{-\beta H_\Lambda(s_1, \ldots, s_{|\Lambda|} \,|\, s(t))\} d\mu(s_1) \ldots d\mu(s_{|\Lambda|})}$$

Sabemos que para esta interacção há pelo menos uma distribuição de Gibbs limite (quando $\Lambda \to \infty$) verificando D.L.R. (Teorema 2 , cap I).

DEFINIÇÃO : TRANSFORMAÇÃO ADMISSÍVEL

Sejam (X_1, Σ_1, μ_1) e (X_2, Σ_2, μ_2) dois espaços de medida. Uma bijecção mensurável $\gamma : X_1 \to X_2$ diz-se <u>admissível</u> se a medida $\mu_1 \circ \gamma^{-1}$ for absolutamente contínua em relação a μ_2 e a derivada de Radon-Nykodim correspondente verificar a seguinte condição :

$$\exists_{c_1, c_2} \text{ tais que } 0 < c_1 \leq \frac{d(\mu_1 \circ \gamma^{-1})}{d\mu_2} \leq c_2 < \infty \quad \text{quase sempre em } (X_2, \Sigma_2, \mu_2) .$$

Restringimos o nosso estudo ao caso em que as funções U e h verificam :

- (U1) : $U(s_1, s_2)$ é contínua com dois mínimos absolutos nos pontos (s_o, s_o') e (s_o', s_o) .
- (U2) : SIMETRIA g : há uma bijecção g de S , que conserva a medida, tal que :

  U2.1. $g(s_o) = s_o'$

  U2.2. $g = g^{-1}$

  U2.3. $U(gs_1, gs_2) = U(s_1, s_2) \qquad \forall_{s_1, s_2 \in S}$

  A transformação g é uma involução. A condição U2.3 indica que quando "g-invertemos" dois spins conjuntamente a energia que os "liga" não se altera.
- (U3) : Existem duas vizinhanças 0_1 e 0_2 do ponto $s_o \in S$, com $0_1 \subset 0_2$ tais que $\mu(0_1) > 0$ e $0_2 \cap g(0_2) = \emptyset$. Existe $\varepsilon > 0$ tal que :

$$U(s_1, s_2) < U(s_1', s_2') - \varepsilon \qquad \forall_{(s_1, s_2) \in O_1 \times gO_1}{}^{(*)}$$
$$\forall_{(s_1', s_2') \notin O_2 \times gO_2}$$

Estas vizinhanças correspondem às zonas polares de S . A necessidade de se considerar estas vizinhanças vem do carácter contínuo do spin. Ver figura II.2 página 92.

- (U4): $\mu(O_2 - O_1) > 0$, e existe uma transformação $\chi: O_2 - O_1 \longrightarrow A_o \subset O_1$, com A_o boreliano tal que $\mu(A_o) > 0$. χ é tal que

  U4.1. $\forall_{s_1 \in gO_1} \; \forall_{s_2 \in O_2 - O_1} : U(s_1, \chi s_2) < U(s_1, s_2) - \varepsilon$

  U4.2. $\forall_{s_1 \in O_2 - O_1} \; \forall_{s_2 \in g(O_2 - O_1)} : U(\chi s_1, g\chi g\, s_2) < U(s_1, s_2) - \varepsilon$

  NOTA 1: A transformação $\overline{\chi} = g\chi g : g(O_2 - O_1) \longrightarrow g(O_1)$ tem as mesmas propriedades que a função χ , com a diferença de actuar nas vizinhanças de $s_o' = g(s_o)$.

  NOTA 2: As condições U_3 e U_4 tomam o modelo g-antiferromagnético, visto previligiarem as configurações em que dois "spins" s_i e s_j próximos vizinhos ($i - j \in \Delta$) são aproximadamente g-simétricos, isto é, um spin próximo de s_o e o outro próximo de s_o' . Condições idênticas para comportamento g-ferromagnético podem ser encontradas em Malishev [38] .

Na obtenção do resultado, ε vai ter um papel equivalente a $|J| = \min |J(i, j)|$ do modelo de Ising que tratamos em I.8.2 .

- (U5): Há uma partição do conjunto $S \sim \{O_2 \cup gO_2\}$, $\{F_1, F_2, \ldots, F_k\}$, tal que :

$$\bigsqcup_{i=1}^{k} F_1 = S \sim \{O_2 \cup gO_2\} \quad , \quad \mu(F_i) > 0 \qquad \forall_i$$

e existem transformações admissíveis f_i tais que :

(*) $A_1 \times A_2$ é o produto cartesiano usual.

$f_i : F_i \longrightarrow A_i \subset O_1$, com A_i boreliano tal que

$\mu(A_i) > 0 \qquad (i = 1, 2, \ldots, k)$

Definimos

$$b = \min\{\frac{\partial\mu \circ f_i}{\partial\mu}, \frac{\partial\mu \circ \chi}{\partial\mu}\} \; ; \; b > 0 \; .$$

- (U6): Existe $d > 0$ tal que

U6.1. $$d = \sup_{\substack{s_1, s_3 \in O_1 \\ s_2, s_4 \in gO_1}} [U(s_1, s_2) - U(s_3, s_4)]$$

e

U6.2. $$\sup_{\substack{s_1 \in O_1 \\ s_2 \in gO_1}} U(s_1, s_2) < \inf_{\substack{s_3 \in O_1 \\ s_4 \in O_1}} U(s_3, s_4) + 3d - \varepsilon$$

- (H1): $h : S \longrightarrow \mathbb{R}$ é uma função limitada, isto é, $\exists \Delta h \in \mathbb{R}$ tal que :

$$\Delta h = \sup_{s \in S} h(s) - \inf_{s \in S} h(s)$$

Esta condição é suficiente para se obter o resultado pretendido. Juntando as condições H_2 e H_3 vê-se imediatamente que h é uma generalização do campo magnético (c.f. Ising) :

- (H_2): $h(g(s)) = - h(s) \qquad \forall_{s \in S}$

- (H_3): $h(s_o) \geq h(s)$ e $h(s_o') \leq h(s) \qquad \forall_{s \in S}$

e neste caso

$$\Delta h = h(s_o) - h(s_o')$$

Com efeito, por exemplo no modelo de Ising, $S = \{-1, 1\} = \{s_o, s_o'\}$ e $g(s) = -s$. O campo magnético é $h(s) = hs$, $h > 0$. Neste caso

$$\Delta h = 2h \; .$$

As condições U6 e H1 são necessárias para o tratamento dos "antiferromagnetes" com campo exterior, nos quais o tratamento usual pelo argumento de Peierls implica a comparação da energia associada a pares de spins (muito) afastados. Por outro lado a condição U6 não é necessária se O_2 tiver apenas um elemento, por exemplo, no modelo de Ising (c.f. DUBROSHIN [77], GINIBRE [62], GRIFFITHS [41], [1]).

II.2 ENUNCIADO DO RESULTADO PRINCIPAL: EXISTÊNCIA DE TRANSIÇÃO DE FASE NO MODELO

TEOREMA

Se a função $U(s_1, s_2)$ satisfaz as condições U1 - U6 , se a função h verifica a condição H1 e se $\varepsilon > \Delta h$, então para uma temperatura suficientemente baixa há pelo menos duas distribuições limite (de Gibbs) diferentes, com distribuições condicionais caracterizadas pelas densidades da fórmula (A) .

NOTA 1 : Os valores de β para os quais provamos a não unicidade do estado de equilíbrio são estimados na demonstração. A nossa estimativa depende do parâmetro de anisotropia (no modelo de Heisenberg de $1 - |\alpha|$, c.f. capítulo III). Pode-se melhorar as estimativas optimizando as vizinhanças O_1 e O_2 .

NOTA 2 : O resultado é verdadeiro desde que a função $|h|$ seja majorada. Portanto, no modelo de Heisenberg o resultado é independente da direcção do campo magnético.

NOTA 3 : O termo $\eta\psi$ do hamiltoneano é importante. "O campo alternado" ψ tem no antiferromagnete o mesmo papel que o campo magnético nos ferromagnetes. Como no ferromagnete a transição de fase vai resultar duma descontínuidade dum valor médio, neste caso $\frac{<\psi>_\Lambda}{|\Lambda|}$, no limite termodinâmico ($\Lambda \longrightarrow \infty$) , como função de η ,para $\eta = 0$, desde que a temperatura seja suficientemente baixa (β grande). No limite termodinâmico este valor médio, é uma função de η impar, não decrescente, sendo portanto suficiente provar que

$$\hat{\mathcal{C}} = \lim_{\eta \to 0^+} \mathcal{C}(\eta) > 0$$

Para isso construimos condições fronteira tais que $\mathcal{C}_\Lambda = \frac{\langle \psi \rangle_\Lambda}{|\Lambda|}$ tenha um minorante $r > 0$ independente de $|\Lambda|$.

II.3 DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA

Organizamos a demonstração em partes :

- Começamos (II.3.1) com algumas definições geométricas e separamos o conjunto S dos valores do "spin" em cada nó em subconjuntos associados às subredes T_1 e T_2 . Em seguida adaptamos ao caso antiferromagnético a definição recursiva do contorno Rm(M) de Malyshev.

Damos depois (II.3.2) uma definição intrínseca do contorno Rm(M) e provamos a sua equivalência com a definição recursiva (lema 1). Completamos II.3.2 com mais alguns lemas de combinatória (geométricos).
(Lemas 2 a 5).

No ponto II.3.3. definimos transformações do espaço das configurações, e demonstramos (Lema 6) algumas propriedades do transformado do contorno Rm(M) .

Estimamos em seguida II.3.4. a variação de energia devida às transformações anteriores e concluimos a demonstração combinando todas as desigualdades obtidas.

Fixaremos de forma arbitrária um nó $t_o \in T_1 \cap \Lambda$ (ou, o que é equivalente, um nó $t'_o \in T_2 \cap \Lambda$). O que vamos provar é que a probabilidade das configurações em que $s_{t_o} \in S\text{-}0_1$ (ou $s_{t'_o} \in S\text{-}g0_1$) é inferior a 1/2 , porque utilizando então a g-simetria obtemos o resultado pretendido. Este último paragrafo mostra que a base da nossa prova é uma extensão do argumento de PEIERLS.

II.3.1 DEFINIÇÕES GEOMÉTRICAS

DEFINIÇÃO 1 : A - nó

Seja $A \subset S$ um conjunto mensurável tal que $\mu(A) > 0$. Um nó $t_o \in T$ diz-se um A - nó da configuração $\{s(t)\}$ se $s(t_o) \in A$.

DEFINIÇÃO 2 : Nós e conjuntos interagindo

(esta definição é facilmente generalizada para o caso de a interacção não ser aos próximos vizinhos)

Diremos que os nós $t_1, t_2 \in T$ interagem se $t_1 - t_2 \in \Delta$. Diremos que os conjuntos $T', T'' \subset T$ interagem se $\exists_{t'} \in T'$ e $\exists_{t''} \in T''$ tais que t' e t'' interagem.

DEFINIÇÃO 3 : caminho d - conexo

conjunto d - conexo

Um conjunto ordenado de nós $(t_1, t_2, \ldots, t_n) \subset T^n$ é um caminho d - conexo se $|t_i - t_{i-1}| \leq d$ para $i = 2, 3, \ldots, n$. Um conjunto $T' \subset T$ diz-se d - conexo se $\forall_{t'}, t'' \in T'$ há um caminho d - conexo de t' a t'' .

NOTA : Se $T' \subset T$ é d - conexo, também é d' - conexo para todo o $d' \geq d$.

Numa configuração fixada diremos que um nó está bem orientado $t \in B$ quando :

$$\left.\begin{array}{l} t \text{ é um } 0_1\text{-nó e } t \in T_1 \\ \text{ou} \\ t \text{ é um } g0_1\text{-nó e } t \in T_2 \end{array}\right\}$$

Os nós que não estão bem orientados serão, genericamente, designados por

mal orientados. Destes os nós tais que $g \circ s(t)$ "está bem orientado", isto é, os nós tais que

$$\left.\begin{array}{l} t \text{ é um } gO_1\text{-nó e } t \in T_1 \\ \text{ou} \\ t \text{ é um } O_1\text{-nó e } t \in T_2 \end{array}\right\}$$

diremos que estão <u>muito mal orientados</u> $t \in M$. Os nós t , mal orientados mas não muito mal orientados serão designados por <u>intermédios</u> $t \in m$.

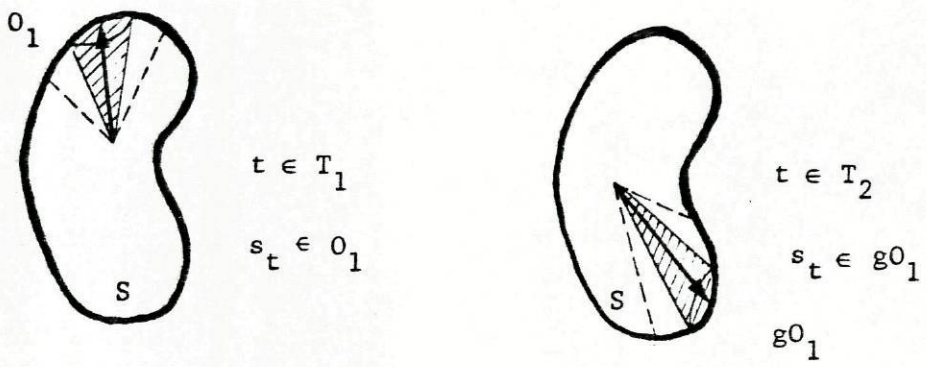


Figura II.2 spins de nós bem orientados

NOTA : Muitas vezes diremos spin mal orientado quando estiver subentendido a que subrede pertence o nó.

No que se segue $\Lambda \subset T$ é um conjunto de nós quadrado e centrado na origem para simplificar. Supomos Λ suficientemente grande. As configurações que vamos considerar são todas tais que os nós no exterior de Λ são bem orientados, isto é, nos nós $t \in T_1 \sim \Lambda : s(t) \in O_1$, e nos nós $t \in T_2 \sim \Lambda : s(t) \in gO_1$.

Com estas definições o que temos a provar é que a probabilidade de um

nó t_o estar mal orientado (m ou M) é inferior a 1/2 .

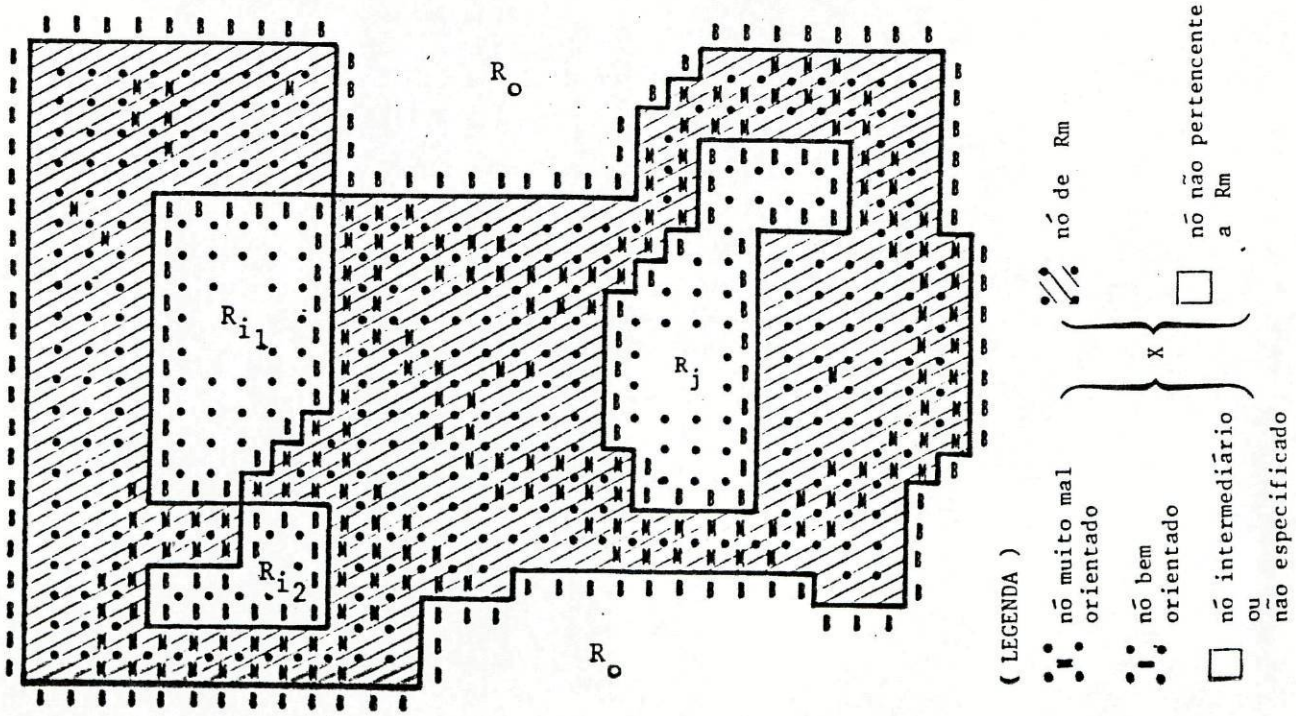
Como os nós exteriores a Λ estão bem orientados, os nós mal orientados de qualquer destas configurações estão no interior de Λ . Vamos estudar as componentes 1-conexas de nós mal orientados, e os conjuntos que interagem com essas componentes o que nos dará um controle da variação de energia na vizinhança das configurações bem orientadas.

Seja então um nó $t_o \in \Lambda$ mal orientado e seja Rm a componente maximal 1-conexa de nós mal orientados (m ou M) contendo t_o . Sabemos que $Rm \subset \Lambda$.

Decompomos o conjunto T-Rm nas suas componentes 1-conexas maximais : R_o, R_1, ..., R_q . Os nós destas componentes interagindo com Rm são necessàriamente bem orientados : com efeito, se $t \notin Rm$ interage com Rm , se t fosse mal orientado $\{t\} \cup Rm$ era 1-conexo com todos os nós mal orientados e por isso Rm não era uma componente maximal.

Designamos por R_o a componente que contém T-Λ . (ver figura II.3)

FIGURA II.3



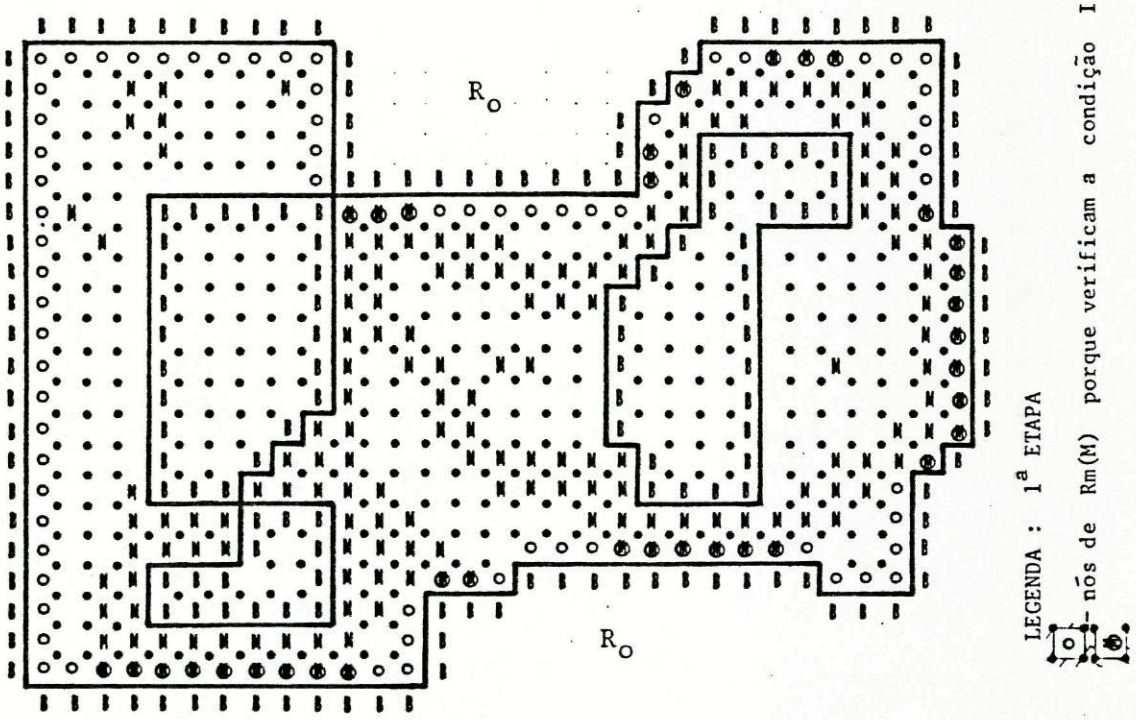
DEFINIÇÃO : "A spread gradually altering bord" (Malyshev)

Vamos agora definir por recorrência o conjunto Rm(M) bordo exterior da fase M (comparar com MALYSHEV [38]). Rm(M) é um subconjunto de Rm . São elementos de Rm(M) :

CONDIÇÃO I - Os nós de Rm que interagem com R_o (isto é, a camada exterior de Rm).

Ver figura II.4.

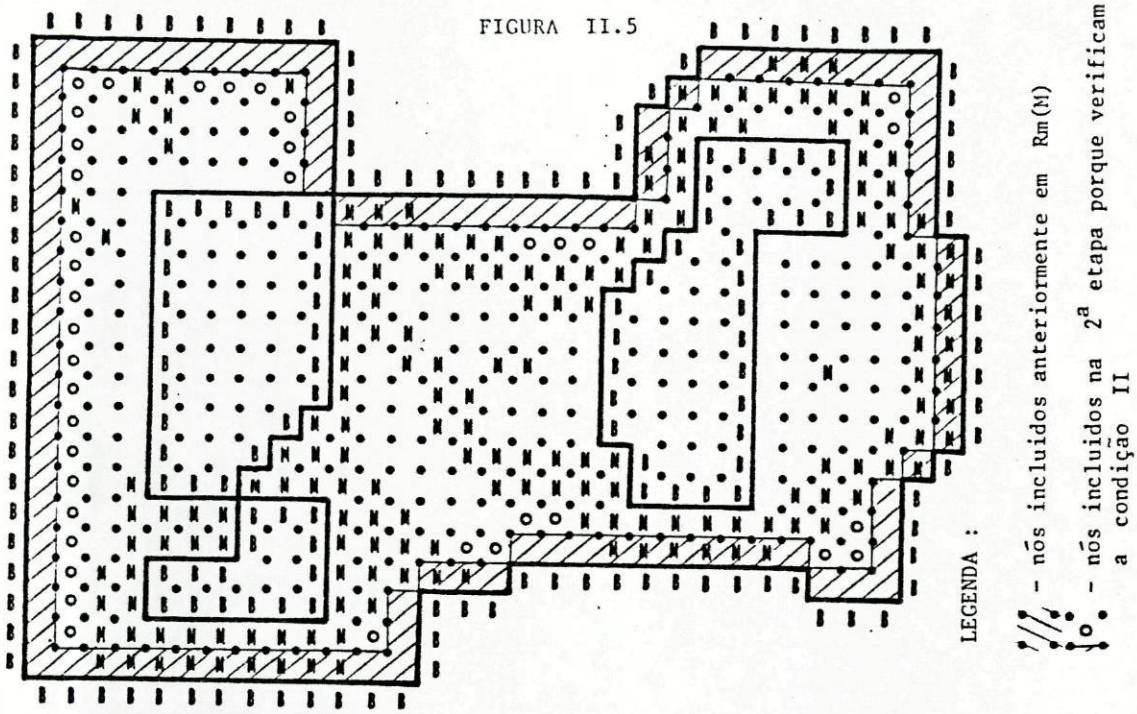
FIGURA II.4



CONDIÇÃO II - Os nós m de Rm que interagem com nós incluidos anteriormente em Rm(M).

Ver figura II.5.

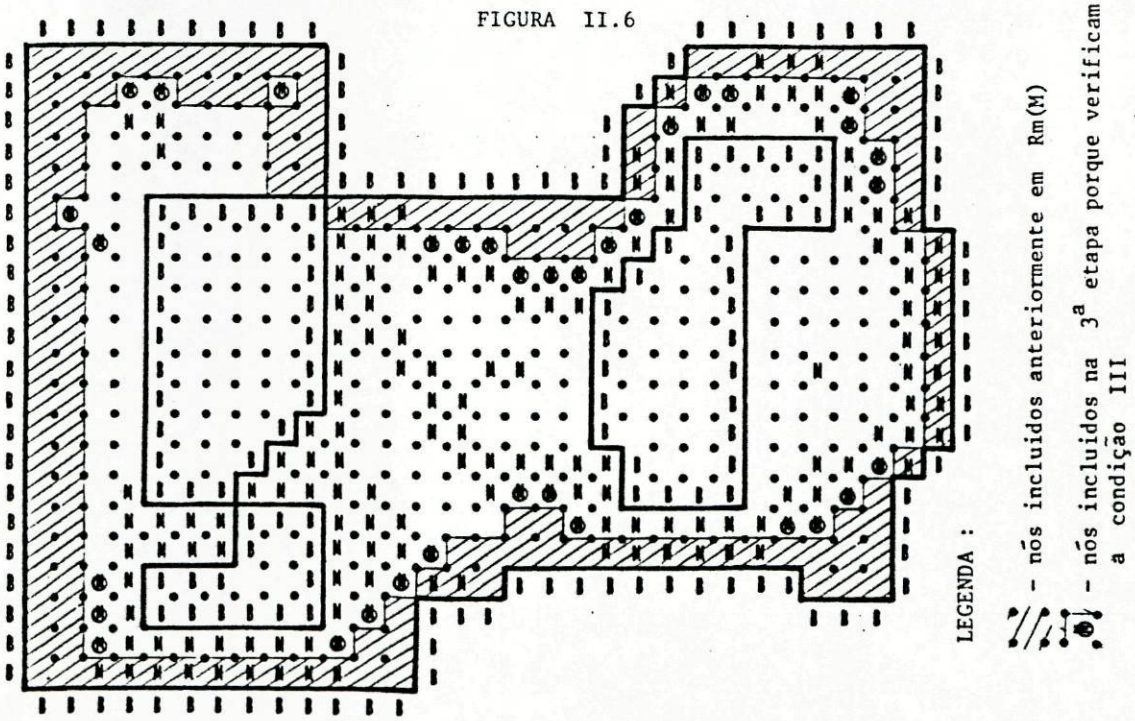
FIGURA II.5



CONDIÇÃO III - Os nós M de Rm que interagem com pelo menos um m já incluido em Rm(M).

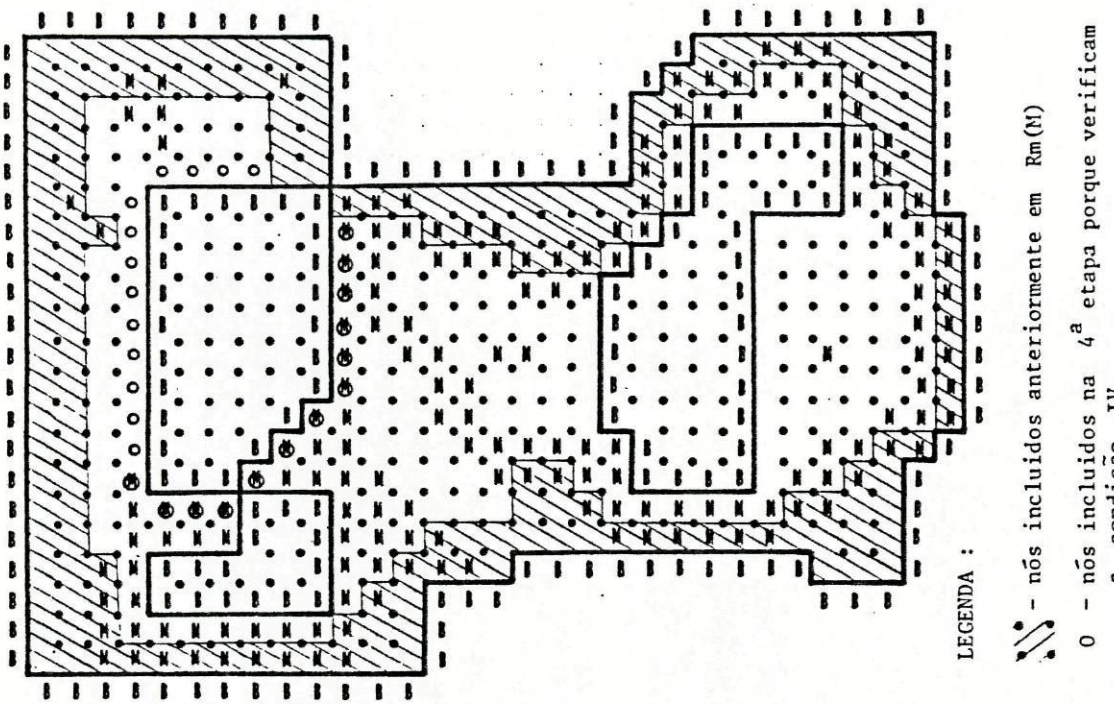
Ver figura II.6.

FIGURA II.6



CONDIÇÃO IV - Os nós Rm que interagem com os R_i se estes R_i interagem com nós já anteriormente incluidos em Rm(M). Ver figura II.7.

FIGURA II.7



Retoma-se a Condição II e continua-se o processo até que não se possa juntar mais nós a Rm(M) , quer dizer até que a recorrência defina conjuntos vazios (de nós) em todas as condições.

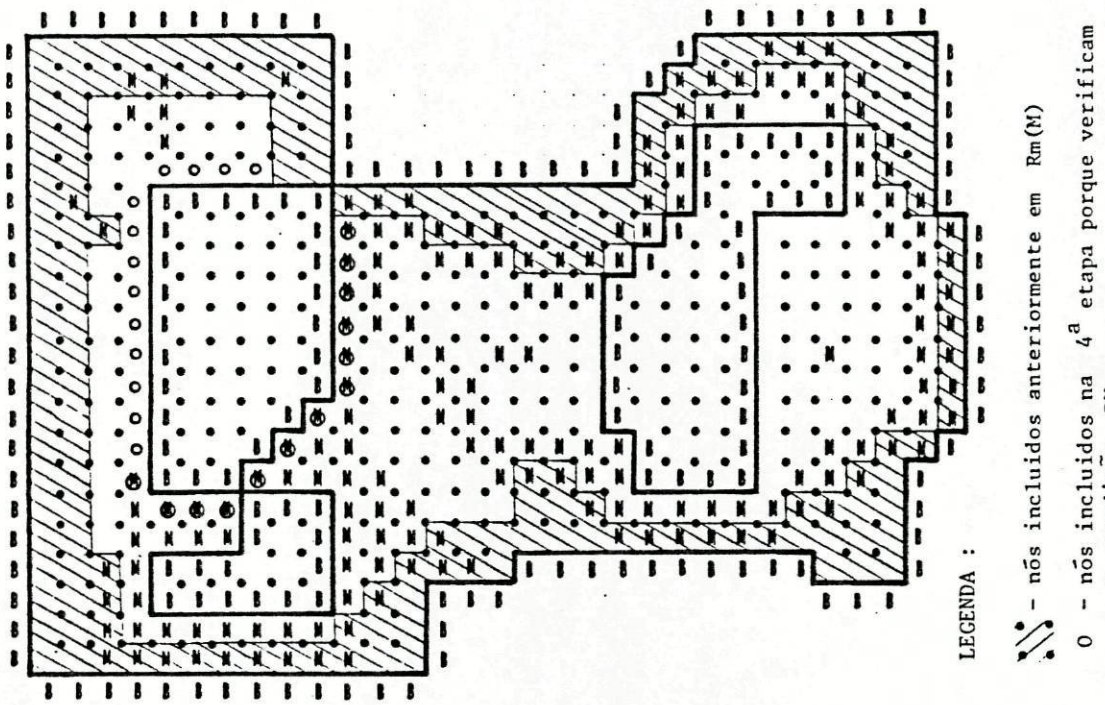
O processo é finito visto que

$$Rm(M) \subset Rm \subset \Lambda \qquad e \qquad \Lambda \text{ é finito.}$$

- As figuras que se seguem (II.8 a II.13) indicam como se conclui a Construção de Rm(M).

CONDIÇÃO IV - Os nós Rm que interagem com os R_i se estes R_i interagem com nós já anteriormente incluidos em Rm(M). Ver figura II.7.

FIGURA II.7



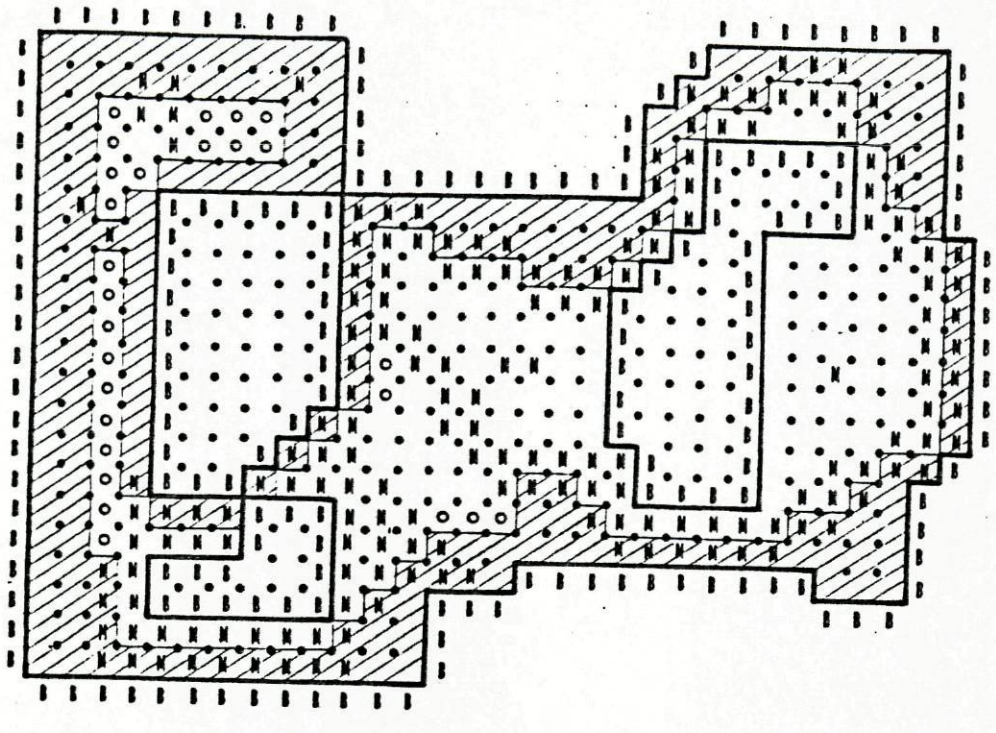
Retoma-se a Condição II e continua-se o processo até que não se possa juntar mais nós a Rm(M) , quer dizer até que a recorrência defina conjuntos vazios (de nós) em todas as condições.

O processo é finito visto que

$$Rm(M) \subset Rm \subset \Lambda \qquad \text{e} \qquad \Lambda \text{ é finito.}$$

- As figuras que se seguem (II.8 a II.13) indicam como se conclui a Construção de Rm(M).

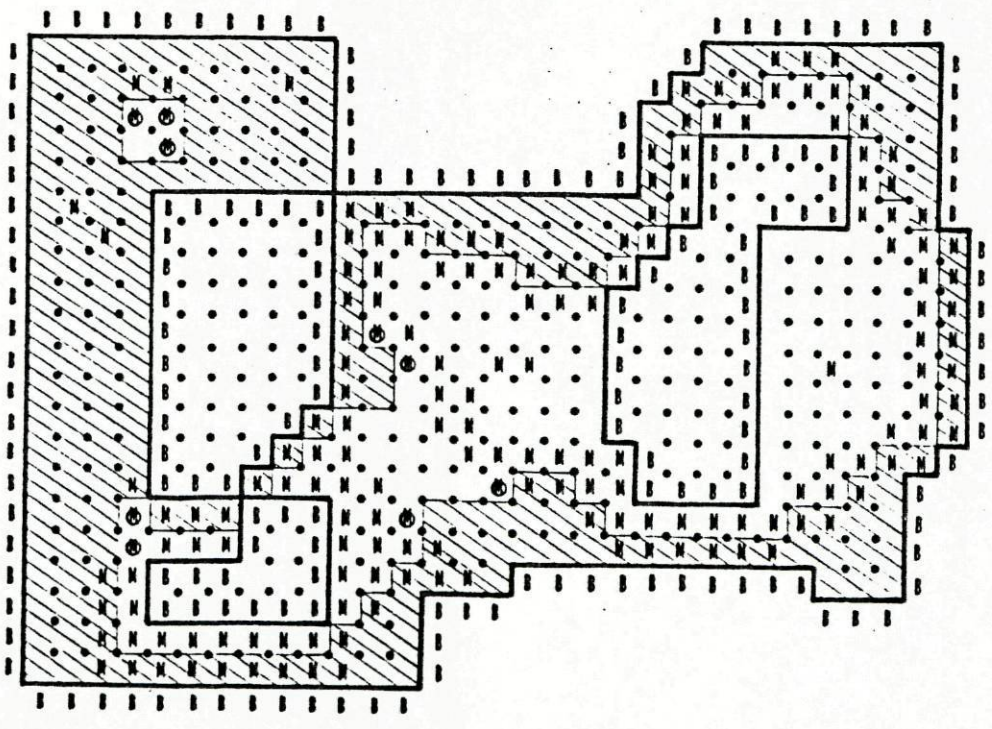
FIGURA II.8.



LEGENDA :

- nós incluídos anteriormente em Rm(M)
- nós incluídos na 5ª etapa porque verificam a condição II

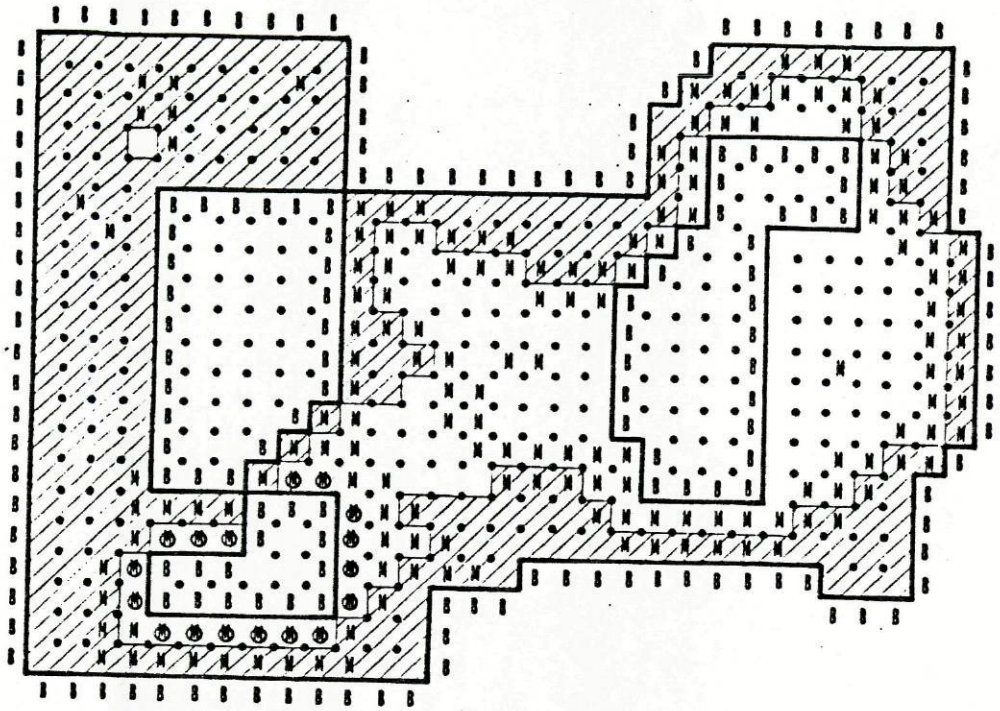
FIGURA II.9



LEGENDA :

- nós anteriormente incluídos em Rm(M)
- nós incluídos na 6ª etapa porque virificam a condição III

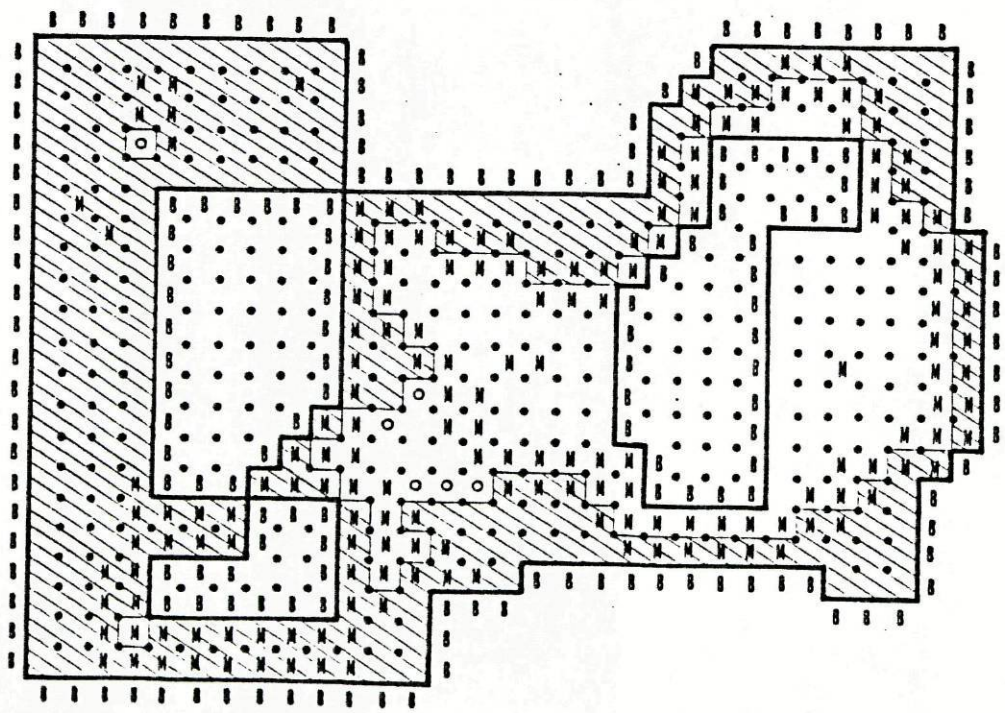
FIGURA II.10



LEGENDA :

- nós anteriormente incluidos em Rm(M)
- nós incluidos na 7ª etapa porque verificam a condição IV

FIGURA II.11



LEGENDA :

- nós anteriormente incluidos em Rm(M)
- nós incluidos na 8ª etapa porque verificam a condição II

FIGURA II.12

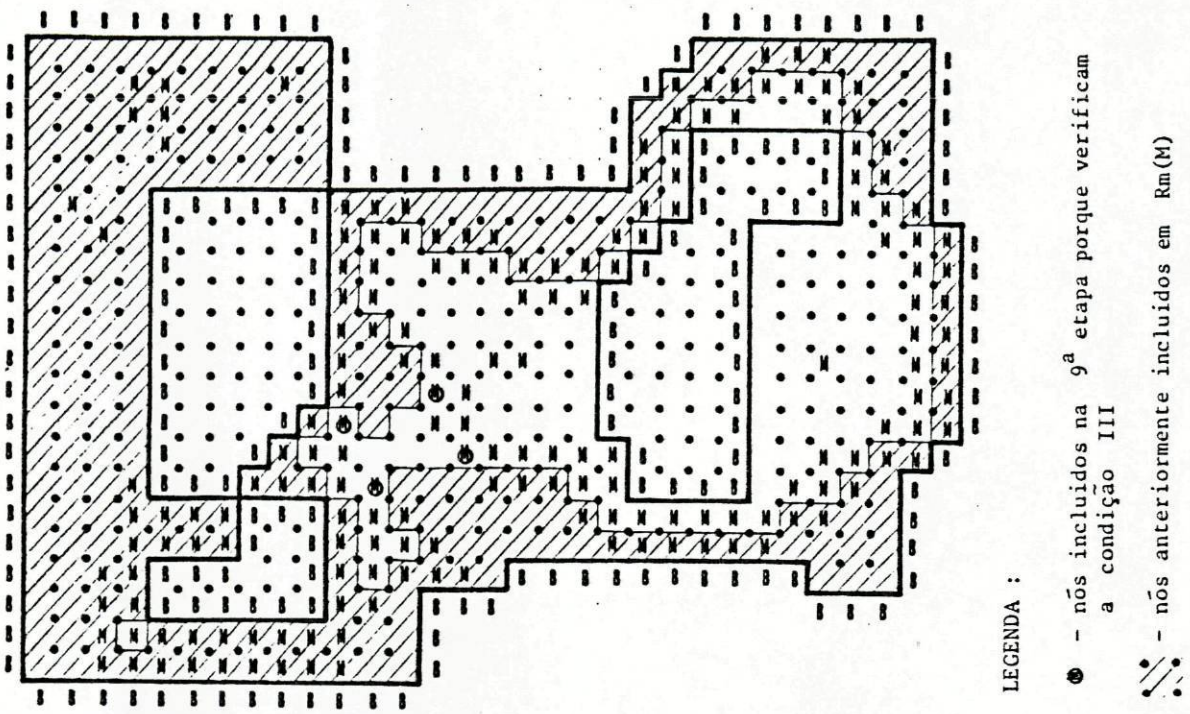


FIGURA II.13

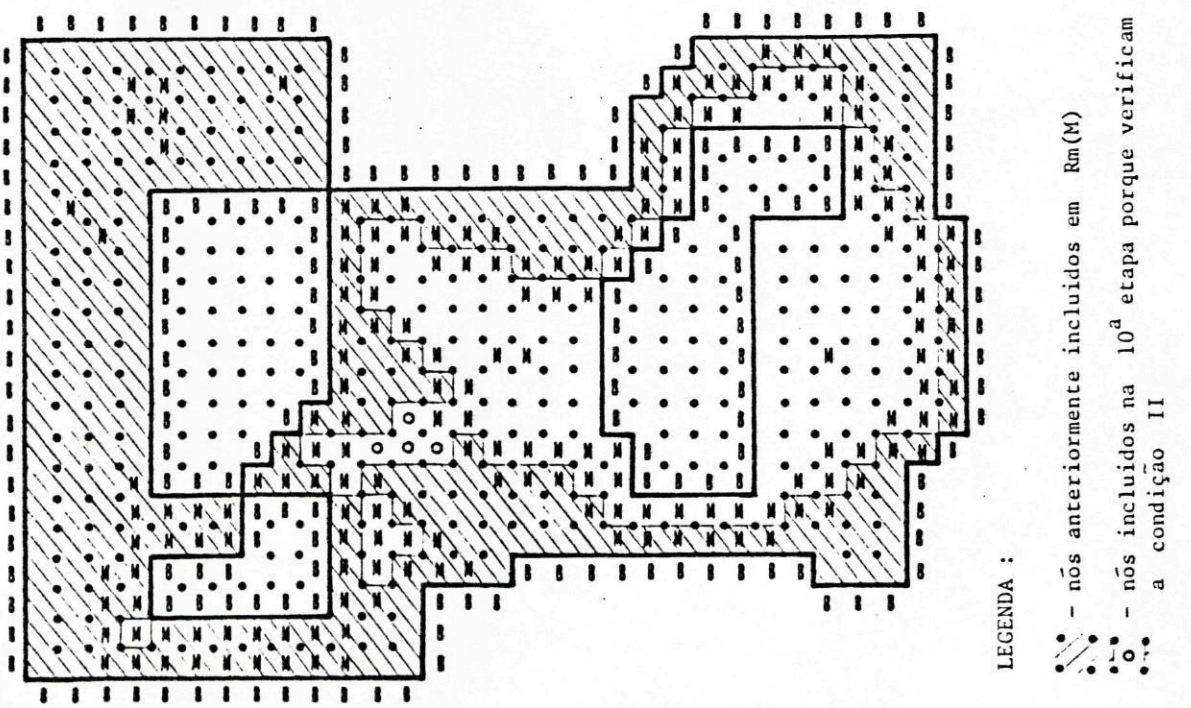
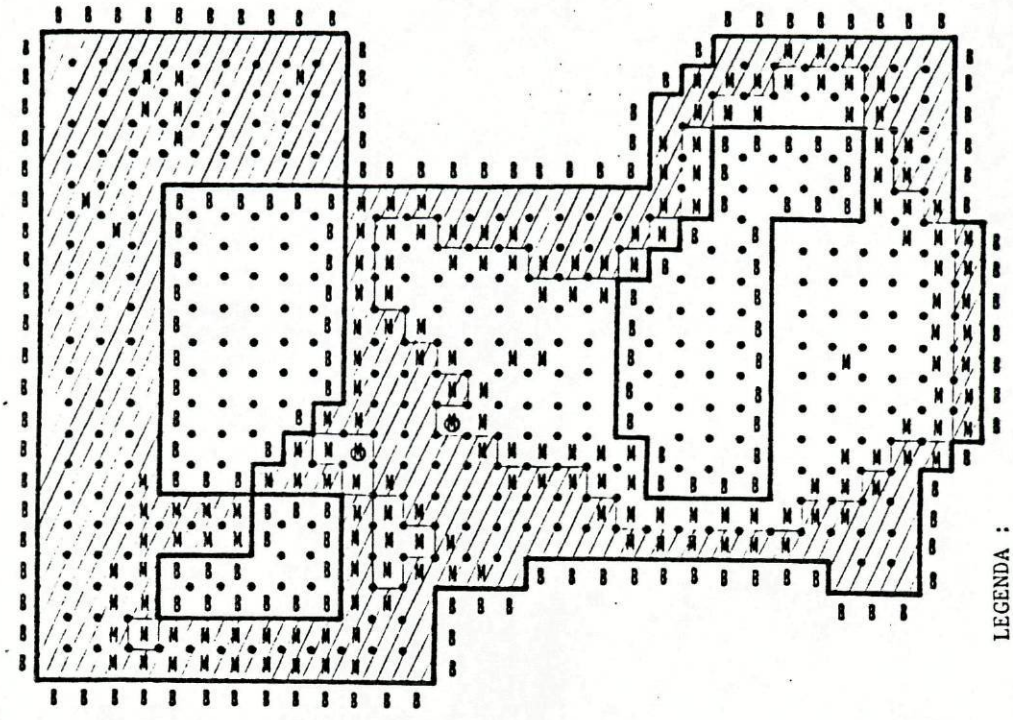


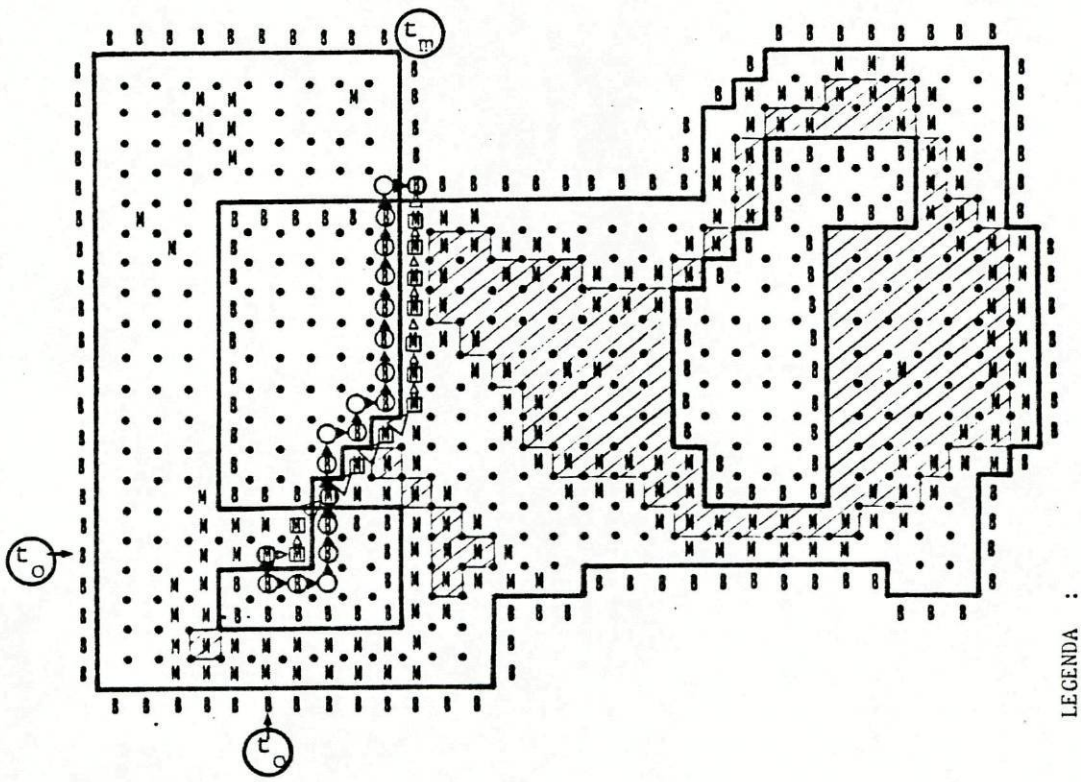
FIGURA II.14



LEGENDA :

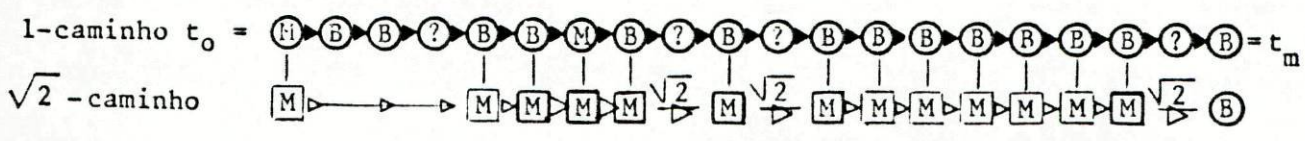
- nós incluidos anteriormente em Rm(M)
- nós incluidos na 11ª etapa porque verificam a condição III

FIGURA II.15



LEGENDA :

- Rm ~Rm(M)
- um 1 caminho de t_o a tm sem dois nós M consecutivos ($t_o \in Rm(M)$) $t_m \in R_o$
- um $\sqrt{2}$ caminho em Rm(M) de t_o a t_m



II.3.2. LEMAS GEOMÉTRICOS

II.3.2.1. DEFINIÇÃO INTRÍNSECA DO CONTORNO Rm(M)

DEFINIÇÃO :

O conjunto Rm(M) é o subconjunto dos nós de Rm que podem ser ligados a R_o por um caminho 1-conexo sem dois nós M consecutivos. (Este caminho terá eventualmente nós do conjunto Rm ~Rm(M) , e eventualmente nós dos R_i's que interagem com Rm(M)).

LEMA 1 :

As duas definições são equivalentes.

Demonstração

Seja X o bordo de MALYSHEV e seja Y o bordo definido intrinsecamente.

1^a Parte : $t \in X \Rightarrow t \in Y$

CONDIÇÃO I : Os nós incluidos em X porque verificam a condição I estão evidentemente ligados a R_o por um caminho 1-conexo com um só nó. Neste caminho não há evidentemente dois nós M consecutivos.

Para os nós incluidos por verificarem as condições II e III basta verificar, por recorrência que se os nós anteriores

estão ligados a R_o por um caminho 1-conexo não contendo dois nós M consecutivos, os novos nós verificam a mesma condição:

- CONDIÇÃO II : Os novos nós t a incluir em Rm(M) são m e interagem com um nó t_1 ligado a R_o por um caminho 1-conexo $t_1, t_2, \ldots t_n$ sem dois nós M consecutivos. Portanto o caminho $t, t_1, t_2, \ldots t_n$ é também 1-conexo e não tem dois nós M consecutivos.

- CONDIÇÃO III : Os novos nós t a incluir em Rm(M) por verificarem a condição III são M mas interagem com um nó $t_1 \in Rm(M)$ que é m , e que está ligado a R_o por um caminho $t_1, \ldots, t_n$ 1-conexo sem dois nós M consecutivos. Como t é M e t_1 é m o caminho 1-conexo $t, t_1, \ldots t_n$ também não tem dois nós M consecutivos.

CONDIÇÃO IV : Os nós t incluidos em Rm(M) por verificarem a condição IV interagem com um nó (do bordo) dum R_i, que interage com um nó t_m incluido anteriormente em Rm(M). Há portanto um caminho 1-conexo $t_1, \ldots t_m, t_{m+1}$ sem dois nós M consecutivos dum nó $t_{m+1} \in R_i$ a R_o . Basta mostrar que há um caminho 1-conexo $t_{m+1}, t_{m+2}, \ldots, t_{m+r}, t$ sem dois consecutivos M . Ora para obter este caminho basta contornar R_i , os nós serão B eventualmente intercalados por outros nós. Ver figura II.15. O que utilizamos foi o facto de, o conjunto dos nós interagindo com um conjunto 1-conexo ser $\sqrt{2}$-conexo. ■

2^a Parte : $t \in Y \Rightarrow t \in X$

Seja $t_1, t_2, \ldots, t_n, t_{n+1} = t \in Y$ um caminho 1-conexo de R_o até t , sem dois nós M consecutivos. Os nós deste caminho ou são elementos de Rm ou pertencem a R_i's convenientes, como

vamos ver.

$t_1 \in X$ porque verifica a condição I.

1º caso

Suponhamos que nenhum nó do caminho é B , isto é, o caminho está incluido em Rm , sendo portanto todos os seus nós m ou M . Supondo que $t_i \in X$ vamos provar que $t_{i+1} \in X$ (i = 1, ..., n). Se t_{i+1} é um m-nó então $t_{i+1} \in Y$ por verificar a condição II. Se t_{i+1} é um M-nó então t_i é um m-nó visto que no caminho não há dois M-nós consecutivos e portanto t_{i+1} é um M-nó verificando a condição III

2º caso

O caminho tem nós B . Seja t_j o primeiro nó B . Como $t_j \notin Rm$, t_j pertence a um R_i . Até t_{j-1} a demonstração segue como no 1º caso, quer dizer $t_{j-1} \in X$. Seja t_k , o primeiro nó depois de $t_j (k > j)$ pertencente a Rm . t_k interage com $t_{k-1} \in R_i$ e t_{j-1} interage com o mesmo R_i ; pela condição IV t_k pertence portanto a X .

Prossegue-se o raciocínio para os nós t_{k+1}, ... t_n, $t_{n+1} = t$ alternando os dois argumentos anteriores ■

NOTAÇÃO : Designamos por R_o, R_{i_1}, ..., R_{i_a} os R_i's interagindo com Rm(M) e por R_{j_1}, ..., R_{j_b} os outros. Definimos $\overset{o}{Rm}$ por

$$\overset{o}{Rm} = Rm \cup R_{j_1} \cup R_{j_2} \cup \ldots \cup R_{j_b}$$

II.3.2.2. OUTROS LEMAS GEOMÉTRICOS

Juntamos num lema várias das propriedades dos conjuntos que acabamos de definir, e que vão ser úteis para a obtenção do resultado principal :

LEMA 2 :

Para cada configuração $\{s(t)\}$ tem-se :

(1) $T = \overset{o}{Rm} \cup R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$

(2) $R_k \cup R_{k'}$ se $k \neq k'$ não é 1-conexo

(3) Se $R_k \cup R_{k'}$ é $\sqrt{2}$-conexo (isto é R_k e $R_{k'}$ "tocam-se" num canto) então verifica-se uma e só uma das condições :

3.1 $R_k \cup R_{k'} \subset \overset{o}{Rm}$

3.2 $R_k \cup R_{k'} \subset T - \overset{o}{Rm}$

(4) As linhas poligonais fechadas formadas por arestas da rede dual(*), que separam os nós de $Rm(M)$ dos nós de $Rm - Rm(M)$ dividem a rede T em duas regiões : a primeira contém $Rm(M) \cup R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$; a segunda contém $(Rm - Rm(M)) \cup R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$.

(5) As duas regiões definidas em (4) só interagem através de nós de Rm . Em particular, o conjunto $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots R_{i_a}$ está separado da região $[Rm - Rm(M)] \cup R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$ por, pelo menos

---

(*) Os nós da rede dual são os centros das faces (quadrados deste caso) da rede primal. As arestas duais estão contidas nas mediatrizes das arestas primais, nas redes regulares.

uma camada de nós de $Rm(M)$ (isto é, a sua reunião não é 1 - conexa).

Demonstração

(1) Consequência imediata da definição de $\overset{o}{Rm}$ ■

(2) R_k é a sua própria componente 1 - conexa maximal ; portanto $R_k \cup R_{k'}$ não é 1 - conexo ■

(3) NOTA : Como indica a figura II.16 $R_k \cup R_{k'}$ pode ser $\sqrt{2}$ - conexo.

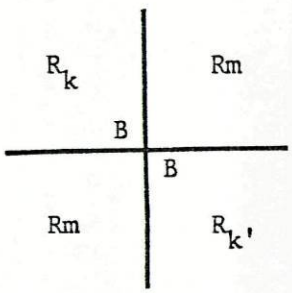


figura II.16

Se $R_k \cup R_{k'}$ é $\sqrt{2}$ - conexo, como R_k e $R_{k'}$ são 1 - conexos e $R_k \cup R_{k'}$ não é 1 - conexo, existem nós $t_k \in R_k$ e $t_{k'} \in R_{k'}$ tais que $|t_k - t_{k'}| = \sqrt{2}$. t_k e $t_{k'}$ realizam o mínimo da distância entre nós de R_k e $R_{k'}$, t_k interage portanto com $\overline{R_k}$ e $t_{k'}$ com $\overline{R_{k'}}$. Se $R_k \not\subset \overset{o}{Rm}$, existe um nó $t \in Rm(M)$ que interage com t_k e com $t_{k'}$, isto é $|t - t_k| = |t - t_{k'}| = 1$. Portanto condição IV (e definição de $\overset{o}{Rm}$) $R_{k'} \not\subset \overset{o}{Rm}$. Ver figura II.17. De forma semelhante se prova o caso $R_k \subset \overset{o}{Rm}$.

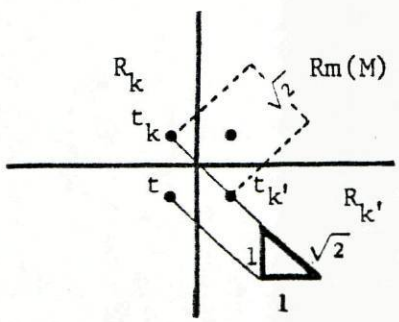


figura II.17

(4) Rm é um conjunto finito e cada nó de Rm(M) está no interior da linha poligonal definida pela camada exterior de Rm(M) dada pela condição I . Portanto estes contornos são fechados.

O conjunto $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ só interage com Rm(M) (condições I e IV) e portanto estão todos na mesma região. Pelo resultado (3) deste lema $R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$ estão necessàriamente na outra região. (ver figura II.15).

(5) Pelo ponto (2) deste lema sabemos que a distância entre o conjunto $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ e o conjunto $R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$ é superior a $\sqrt{2}$ e portanto pelo menos 2. Portanto nenhum nó da primeira reunião interage com um nó da segunda. Os R_j' não interagem com Rm(M) (condição IV) e os R_i's e R_o não interagem com Rm - Rm(M) (condição IV). (ver figura II.15)

COROLÁRIO

A região $Rm(M) \cup R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ é 1-conexo .

Demonstração :

Cada região R_i é por definição 1-conexa e portanto cada nó de $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ pode ser ligado a um nó do mesmo R_i interagindo com Rm(M) , por um caminho 1-conexo sem sair desse R_i . Por conseguinte pode também ser ligado a um nó de Rm(M) através dum caminho 1-conexo (condição IV). Os caminhos 1-conexos construidos na demonstração do Lema 1, ligando cada nó de Rm(M) a R_o estão na região $Rm(M) \cup R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ o que completa a demonstração. ■

LEMA 3 :

O conjunto Rm(M) é $\sqrt{2}$ - conexo

NOTA : Dois nós de Rm interagindo com uma mesma componente conexa R_o, R_i ou R_j podem ser ligados por um caminho $\sqrt{2}$ - conexo em Rm .

Demonstração :

Sejam t_1 e t_2 nós de Rm(M) ; vamos construir em Rm(M) um caminho $\sqrt{2}$ - conexo de t_1 a t_2 . Pelo lema 1 sabemos que há caminhos 1 - conexos de t_1 a $\tilde{t}_1$ e de t_2 a $\tilde{t}_2$ em que $\tilde{t}_1$ e $\tilde{t}_2$ interagem com R_o . Por outro lado há um caminho $\sqrt{2}$ - conexo em Rm(M) de $\tilde{t}_1$ a $\tilde{t}_2$ constituido por nós interagindo com R_o (condição I e nota anterior).

Vamos construir um caminho $\sqrt{2}$ - conexo em Rm(M) de t_1 a $\tilde{t}_1$. Para isso tomamos o caminho 1 - conexo do lema 1 e substituimos nesse caminho os nós de cada R_i por nós pertencentes a Rm interagindo com esse R_i ; desta forma contornamos os R_i's sendo os elementos do novo caminho nós de Rm(M) visto verificarem pelo menos a condição IV. O caminho assim obtido é (devido à nota anterior) $\sqrt{2}$ - conexo (ver figura II.18).

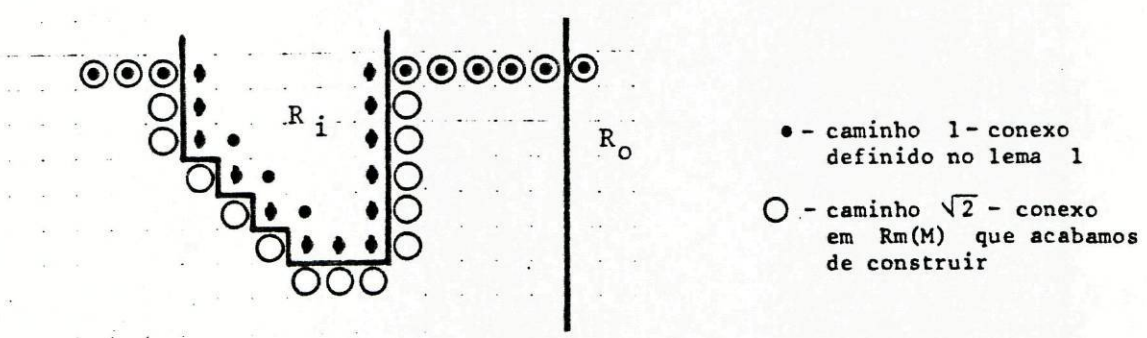


FIG. II.18

Fazemos a mesma construção e obtemos um caminho $\sqrt{2}$ - conexo de t_2 a $\tilde{t}_2$. Desta forma concluimos a demonstração visto que o caminho $t_1 \ldots \tilde{t}_1 \ldots \tilde{t}_2 \ldots t_2$ é um caminho $\sqrt{2}$ - conexo em $Rm(M)$. ■

LEMA 4

O número de conjuntos $\sqrt{2}$ - conexos contendo um nó fixo t_o , com exactamente ℓ nós, é não superior a $8^{\ell-1}$.

A demonstração é uma variante do "three way argument" e pode ser encontrada em MALYSHEV [38] .

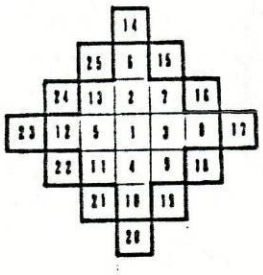
Adaptamos ao caso discreto uma caracterização de JORDAN : Dizemos que um conjunto $A \subset \Lambda$ envolve um ponto $t_o \in \Lambda$ se todo o caminho 1 - conexo ligando t_o a $T \sim \Lambda$ contem pelo menos um elemento de A . Em particular se $t_o \in A$, A envolve t_o .

LEMA 5

O número de conjuntos $\sqrt{2}$ - conexos com ℓ nós envolvendo um nó fixo $t_o \in \Lambda$ não excede $K8^{-1}\ell^2$ em que K é uma constante.

Demonstração :

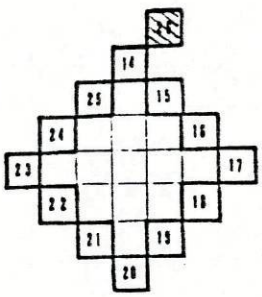
Basta verificar que o conjunto $\sqrt{2}$ - conexo com comprimento fixo, ℓ que envolve maior número de pontos é o "quadrado" se $\frac{\ell}{4}$ for inteiro, ou uma pequena deformação do quadrado se $\frac{\ell}{4}$ não for inteiro. Ver figura II.19.



$\ell = 12$

NM = 25

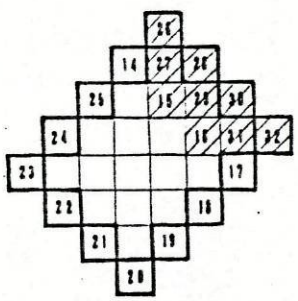
$\frac{\ell^2}{8} = 18$



$\ell = 13$

NM = 26

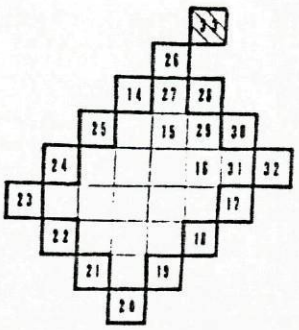
$\frac{\ell^2}{8} = 21{,}125$



$\ell = 14$

NM = 32

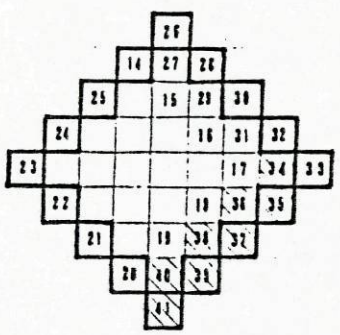
$\frac{\ell^2}{8} = 24{,}5$



$\ell = 15$

NM = 33

$\frac{\ell^2}{8} = 28{,}125$



$\ell = 16$

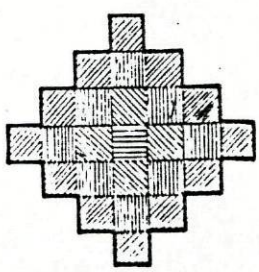
NM = 41

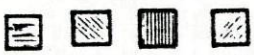
$\frac{\ell^2}{8} = 32$

Figura II.19

Seja $NM(\ell)$ o número máximo de nós envolvidos por um conjunto $\sqrt{2}$ - conexo com ℓ nós .

1 - Se ℓ for múltiplo de 4 (ver figura) tem-se :





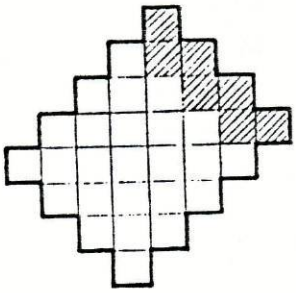
1 + 4 + 8 + 12 = 25

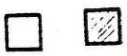
$$NM(\ell) = 1 + \sum_{i=4,8,\ldots\ell} i = 1 + \frac{\ell+4}{2} \times \frac{\ell}{4} =$$

$$= \frac{8 + \ell^2 + 4\ell + (4-4)}{8} = \frac{(\ell+2)^2 + 4}{8}$$

$$(\ell > 0)$$

2 - Se ℓ for par mas não múltiplo de 4 , $\frac{\ell}{4}$ é um "semi-inteiro", isto é, $\frac{\ell}{4} + \frac{1}{2}$ é inteiro, tem-se (ver figura)





$$25 + \frac{14}{2} = 32$$

$$NM(\ell) = \frac{[(\ell - 2) + 2]^2 + 4}{8} + 2\,\frac{\ell - 2}{4} + 1 =$$

$$= \frac{\ell^2 + 4\ell + 4}{8} = \frac{(\ell + 2)^2}{8}$$

3 - Se o resto da divisão inteira de ℓ por 4 for 1 tem-se :

$$NM(\ell) = \frac{[(\ell - 1) + 2]^2 + 4}{8} + 1 = \frac{(\ell + 1)^2 + 12}{8} \qquad (\ell > 1)$$

4 - Se o resto da divisão inteira de ℓ por 4 for 3 tem-se :

$$NM(\ell) = \frac{[(\ell - 1) + 2]^2}{8} + 1 = \frac{(\ell + 1)^2 + 8}{8}$$

Em qualquer dos casos o comportamento assimptótico é :

$$\frac{\ell^2}{8} \div NM(\ell) \xrightarrow[\ell \to \infty]{} 1$$

concluimos que

$$NM(\ell) \leq k\,\frac{\ell^2}{8}$$

A constante k é obtida como um valor não inferior a

$$\max_{\ell} \left\{\frac{NM(\ell)}{\ell^2/8}\right\} = 8 \quad \text{(ver apendice II.1)}$$

Para concluir basta notar que o número de conjuntos

$\sqrt{2}$ - conexos contendo t_o com nº de nós fixo ℓ , não excede o nº máximo de nós envolvidos num conjunto $\sqrt{2}$ - conexo com ℓ nós ■

Juntando os lemas 1 a 5 concluimos que o nº máximo de conjuntos Rm(M) com ℓ nós envolvendo um ponto t_o (fixo) não excede $c\ell^2 8^\ell$ em que c é uma constante.

II.3.3. TRANSFORMAÇÃO DE DUBROSHIN E TRANSFORMAÇÃO DE MALYSHEV

Neste ponto consideramos um conjunto $Rm(M)$ fixo. Vamos construir uma transformação $G : S^T \longrightarrow S^T$ em duas etapas G_1 e G_2 de forma que

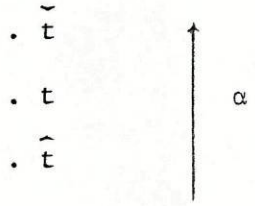
$$G = G_2 \circ G_1$$

II.3.3.1. TRANSFORMAÇÃO DE DUBROSHIN (SHIFT)

Esta transformação foi introduzida por DUBROSHIN [77] para o antiferromagnete de Ising; ver também GRIFFITHS [1] [41] .

Seja $t \in T$ e seja $\hat{t}$ o nó imediatamente inferior a t relativamente a um eixo fixo α , e seja $\check{t}$ o nó imediatamente superior a t segundo o mesmo eixo α . Naturalmente que

$$t = \check{\hat{t}} = \hat{\check{t}}$$



G_1 é definido por :

$$(G_1\, s)\,(t) = \begin{cases} s(t) & \text{se } t \notin \overset{o}{Rm} \quad (1) \\ s(\hat{t}) & \text{se } t \text{ e } \hat{t} \in \overset{o}{Rm} \quad (2) \\ gs(\hat{t}) & \text{se } t \in \overset{o}{Rm} \text{ e } \hat{t} \notin \overset{o}{Rm} \quad (3) \end{cases}$$

- O primeiro ramo (1) desta transformação conserva os spins de R_o e dos R_i's que interagem com Rm(M).

- O segundo ramo (2) faz subir um nó os spins de $\overset{o}{Rm}$ segundo a direcção escolhida. A "camada" (*) superior de $\overset{o}{Rm}$ é eliminada visto os nós correspondentes terem sido ocupados (ramo 1).

- O terceiro ramo (3) substitui a "camada" (*) inferior de Rm(M) que interage com $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ incluido no complementar de $\overset{o}{Rm}$. O efeito é fazer uma cópia g- simétrica da camada superior de $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ e coloca-a na camada inferior de $\overset{o}{Rm}$.

Devido às condições I e IV da definição recursiva de Rm(M) sabemos que a camada exterior de Rm interagindo com R_o, R_{i_1}, ... R_{i_a} pertence a Rm(M) , e por isso os contornos que separam Rm(M) de Rm ~ Rm(M) têm entre eles e os conjuntos R_o , R_{i_1} ,... R_{i_a} pelo menos uma "camada" de nós. Portanto na configuração $\{G_1\ s(t)\}$ os transformados desses contornos não saiem do conjunto Rm da configuração inicial $\{s(t)\}$.

Vamos agora analisar em detalhe o efeito desta transformação :

1 - Como transformação da configuração s(t) , determinando os spins da configuração $G_1\ s(t)$;

2 - Como transformação da classificação dos nós em M , m , e B , sendo para isso necessário ter em conta que a operação "~" faz passar um spin dum nó duma subrede para um nó de outra subrede.

Decompomos a rede T numa reunião dijunta de conjuntos utilizando a configuração $\{s(t)\}$:

(*) Escrevemos camada entre aspas visto estas camadas serem em geral descontínuas.

$$T = Rm(M) \cup \{Rm \sim Rm(M)\} \cup$$

$$\cup \{R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\} \cup \{R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a} \cup R_o\}$$

como anteriormente temos

$$\overset{o}{Rm} = Rm(M) \cup \{Rm \sim Rm(M)\} \cup \{R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\} \ .$$

O ramo (1) de G_1 só actua sobre os spins dos nós de $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$; para estes nós G_1 deixa os spins invariantes bem como a classificação dos nós (m , M ou B).

Pelo Lema 2 os nós sobre os quais actua o ramo (3) de G_1 pertencem a Rm(M). Trata-se de nós $t \in Rm(M)$ tais que $\hat{t} \in R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$. Por isso em $\{s(t)\}$ t é m ou M e $\hat{t}$ é necessàriamente B visto pertencer a um R_i (e interage com Rm). O nó $\hat{t}$ com spin g $s(\hat{t})$ seria M , por isso o nó t com o mesmo spin é um nó B .

Para todos os outros nós da rede T , actua o ramo (2) da transformação G_1 e neste caso há apenas uma translação; os spins correspondentes a nós M no nó seguinte transformam os nós em B ; os spins correspondentes a nós m , no nó seguinte mantêm a classificação; e os spins correspondentes a nós B tornam o nó seguinte M . Este último caso só pode acontecer para os nós t tais que $\hat{t} \in R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$, e neste caso $t \in Rm \sim Rm(M)$, em consequência do Lema 2.

O quadro I resume estas informações. Ver também figura II.20.

Concluindo, a configuração $\{G_1 \circ s(t)\}$ é obtida translatando a configuração $\{s(t)\}$ exceptuando os nós de $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ onde $\{G_1\ s(t)\}$ coincide com $\{s(t)\}$ e os nós de Rm(M) (em $\{s(t)\}$) que são translatados de nós de $Ro \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ (supomos sempre translações definidas por " ^ ").

QUADRO I

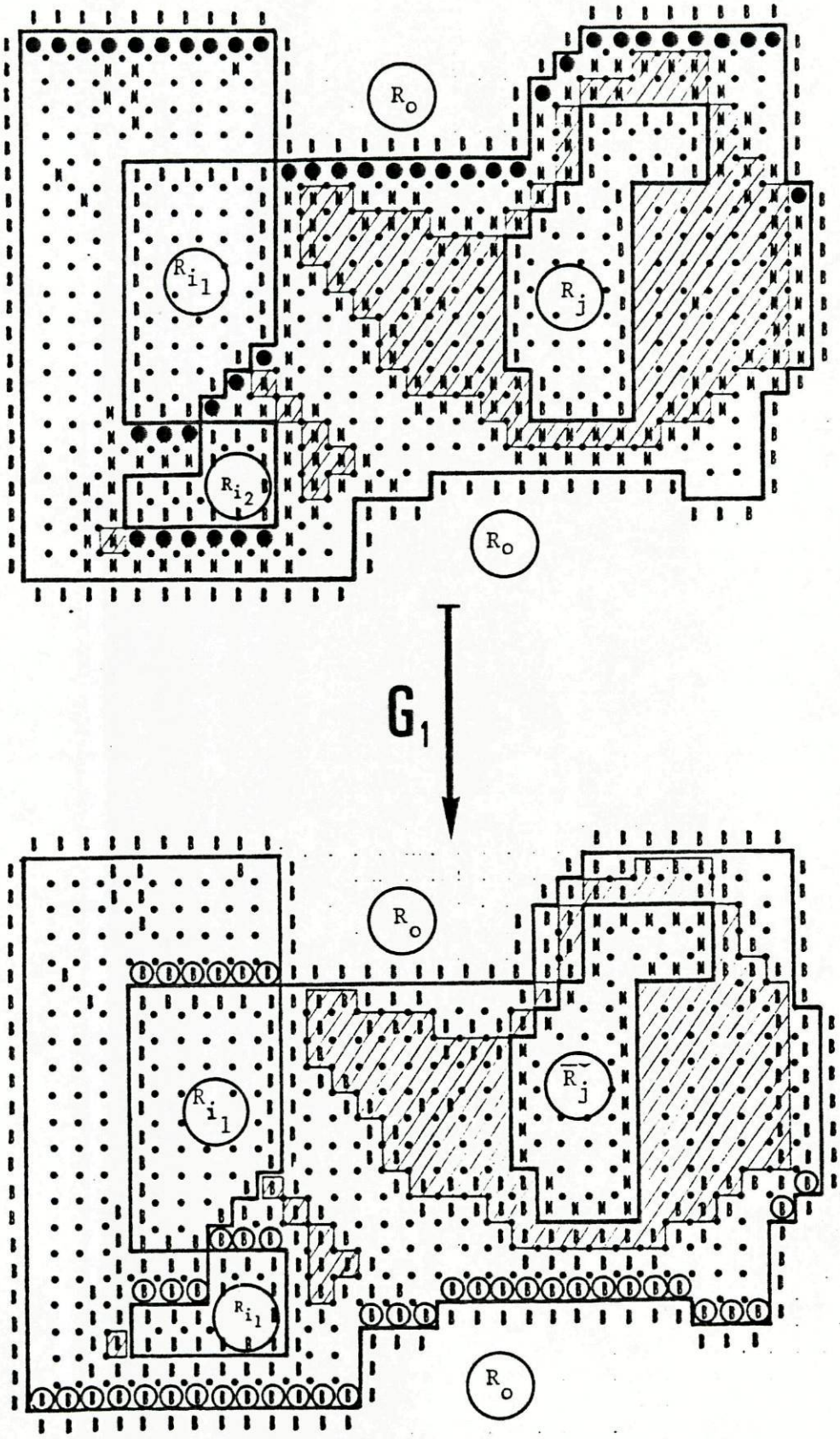
$\{s(t)\} \longrightarrow \{G_1\ s(t)\}$

$t\ . \longrightarrow -- .\ t$

$\hat{t}\ .$

	Sub conjunto	Ramo de G_1	Transformação dos spins	Transformação da classificação do nós
(A)	$R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$	(1)	$\overset{s}{\cdot} \xrightarrow{G_1} \overset{s}{\cdot}$	$\overset{B}{\cdot} \longrightarrow \overset{B}{\cdot}$ $\overset{m}{\cdot} \longrightarrow \overset{m}{\cdot}$ $\overset{M}{\cdot} \longrightarrow \overset{M}{\cdot}$
(B)	$Rm(M)$	(3) se $\hat{t} \in R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots R_{i_a}$	$\cdot \xrightarrow{G_1} \overset{gs(\hat{t})}{\cdot}$ $\overset{s}{\cdot}$	$\cdot \longrightarrow \overset{m}{\cdot}$ $\overset{m}{\cdot}$ $\cdot \longrightarrow \overset{B}{\cdot}$ $\overset{M}{\cdot}$
		(2) se $\hat{t} \in \overset{o}{Rm}$	$\cdot \xrightarrow{G_1} \overset{s}{\cdot}$ $\overset{s}{\cdot}$	$\cdot \longrightarrow \overset{m}{\cdot}$ $\overset{m}{\cdot}$ $\cdot \longrightarrow \overset{B}{\cdot}$ $\overset{M}{\cdot}$
(C)	$Rm \sim Rm(M)$	(2)	$\cdot \xrightarrow{G_1} \overset{s}{\cdot}$ $\overset{s}{\cdot}$	$\cdot \longrightarrow \overset{m}{\cdot}$ $\overset{m}{\cdot}$ $\cdot \longrightarrow \overset{B}{\cdot}$ $\overset{M}{\cdot}$
(D)	$R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$	(2)	$\cdot \xrightarrow{G_1} \overset{s}{\cdot}$ $\overset{s}{\cdot}$	$\cdot \longrightarrow \overset{m}{\cdot}$ $\overset{m}{\cdot}$ $\cdot \longrightarrow \overset{B}{\cdot}$ $\overset{M}{\cdot}$ $\cdot \longrightarrow \overset{M}{\cdot}$ $\overset{B}{\cdot}$

$$\left(\overset{o}{Rm} = Rm(M) \cup \{Rm \sim Rm(M)\} \cup \{R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\} \right)$$



● spins que saem de Rm(M) e da configuração por aplicação de G_1

Ⓑ ↓ spins que entram em Rm(M) por aplicação de G_1 .

FIGURA II.20

DEFINIÇÃO :

Se $A \subset T$ definimos o translatado de A por

$$\tilde{A} = \{t \in T : \hat{t} \in A\}$$

Sabemos que

$$Rm(M) = \overset{o}{Rm} - \{(Rm - Rm(M)) \cup R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\}$$

A transformação G_1 sugere que consideremos o conjunto :

$$\tilde{Rm}(M) = \overset{o}{Rm} - \widetilde{\{(Rm - Rm(M)) \cup R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\}}$$

LEMA 6

$\tilde{Rm}(M)$ tem o mesmo número de nós que $Rm(M)$. Os nós de $\tilde{Rm}(M)$ na configuração G_1 $s(t)$ são de tipo m ou B (isto é, não são M).

Demonstração :

Pelo lema 2 sabemos que

$$\widetilde{\{(Rm - Rm(M)) \cup R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\}} \cap \{R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}\} = \emptyset$$

visto que uma condição necessária para que $t \in \tilde{A}$ é que t interaja com um nó de A . Portanto

$$\widetilde{\{(Rm - Rm(M)) \cup R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}\}} \subset \overset{o}{Rm}$$

e por isso $Rm(M)$ e $\tilde{Rm}(M)$ são complementares (em $\overset{o}{Rm}$) de conjuntos com o mesmo número de nós : têm portanto o mesmo número de nós.

Pelo quadro I os spins de G_1 o s que são M encontram-se nos nós $t \in R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ e nos nós t tais que $\hat{t} \in R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$. No primeiro caso $t \notin Rm(M)$. No segundo

$t \in \overline{R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}}$ e portanto $t \notin Rm(M)$ visto $R_{j_1} \cup \ldots \cup R_{j_b}$ estar separado de $Rm(M)$ por pelo menos uma camada de nós ■

NOTA 1 : A demonstração deste lema realça uma ideia que estava implícita no lema 2, a saber :

quando translatamos de uma unidade os contornos que separam $Rm(M)$ de $\{Rm - Rm(M)\}$ não saiem de $\overset{o}{Rm}$ nem mesmo de Rm .

NOTA 2 : É fácil ver que

$$\tilde{Rm}(M) = \{t \in Rm : \hat{t} \in Rm(M)\} \cup$$
$$\cup \{t \in Rm(M) : \hat{t} \in R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}\}$$

II.3.3.2. TRANSFORMAÇÃO DE MALYSHEV

Esta transformação foi introduzida por MALYSHEV [38] no caso do ferromagnete anisotrópico. Esta transformação vai levar os spins de $T_1 \cap \tilde{Rm}(M)$ para 0_1 , e os spins de $T_2 \cap \tilde{Rm}(M)$ para $g0_1$ de forma que todos os spins de $\tilde{Rm}(M)$ fiquem bem orientados B ; para isso usamos as transformações χ , $\tilde{\chi}$ e f_i , $i = 1, \ldots, k$ (definidas na condição U5).

G_2 é uma transformação do espaço das configurações definidas por (comparar com [38]) :

$$G_2 \circ s(t) = \begin{cases} f \circ s(t) & \text{se} \quad t \in \tilde{Rm}(M) \\ s(t) & \text{se} \quad t \notin \tilde{Rm}(M) \end{cases}$$

onde f é definida por :

$$f \circ s(t) = \left\{ \begin{array}{lll} s(t) & \text{se} & s(t) \in 0_1 \\ \chi\, s(t) & \text{se} & s(t) \in 0_2 - 0_1 \\ f_i \circ s(t) & \text{se} & s(t) \in F_i \\ \chi g\, s(t) & \text{se} & s(t) \in g(0_2 - 0_1) \end{array} \right\} \text{e} \quad t \in T_1$$

$$\left\{ \begin{array}{lll} s(t) & \text{se} & s(t) \in g\, 0_1 \\ g\, \chi\, g\, s(t) & \text{se} & s(t) \in g(0_2 - 0_1) \\ g \circ f_i\, s(t) & \text{se} & s(t) \in F_i \\ g \circ \chi\, s(t) & \text{se} & s(t) \in 0_2 - 0_1 \end{array} \right\} \text{e} \quad t \in T_2$$

Vimos que $Rm(M)$ está separado do seu complementar em T por contornos que o separam de $Rm \sim Rm(M)$ e por contornos que o separam de $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$; no primeiro caso as interacções através do contorno(*) são entre nós $M-M$, enquanto que no segundo caso podem ser $B-m$ ou $B-M$. (evidentemente que nos referimos à configuração $s(t)$).

Por outro lado (na configuração $G_2 \circ G_1 \circ s(t)$) $\tilde{Rm}(M)$ está separado do seu complementar por dois tipos de "contornos" : os que separam $\tilde{Rm}(M)$ de $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$ e os que o separam de $\widetilde{\overline{Rm \sim Rm(M)}}$; nos dois casos a interacção através do "contorno" é $B-B$,quer dizer a transformação $G = G_2 \circ G_1$ eliminou o bordo exterior da "fase" mal orientada $Rm(M)$.

(*) isto é, entre dois spins um dum lado, outro do outro lado do contorno.

II.3.4. ESTIMATIVA DA VARIAÇÃO DE ENERGIA

Começamos por separar o conjunto das configurações em subconjuntos, nuvens (clusters) :

Seja $\mathcal{T}$ a partição de S nos subconjuntos

$F_1, F_2, \ldots, F_k, g\,0_1, g(0_2 - 0_1), 0_2 - 0_1, 0_1$.

DEFINIÇÃO : NUVEM (CLUSTER) DE CONFIGURAÇÕES

Fixada uma configuração $\{s(t)\}$ e um bordo $Rm(M)$, dizemos que as configurações $\{s_1(t)\}$ e $\{s_2(t)\}$ pertencem à mesma nuvem se $\forall_{t \in Rm(M)}$, $s_1(t)$ e $s_2(t)$ pertencem ao mesmo elemento da partição $\mathcal{T}$. Neste caso escrevemos $s_1 \sim s_2$.

A relação $\sim$ é uma relação de equivalência.

O número de nuvens é não superior a $(k+4)^{\ell}$, em que ℓ é número de nós de $Rm(M)$.

Para simplificar as notações escrevemos para uma configuração s da nuvem L

$$U_s = U_\Lambda(s(t_1), \ldots, s(t_{|\Lambda|}) / s(t)\}$$

Em U_s podemos distinguir três termos : a energia de interacção no interior de Λ , a energia de interacção entre Λ e $T - \Lambda$ e finalmente a energia devida ao campo magnético. Não há outros termos porque tomamos $\eta = 0$.

LEMA 7

Para qualquer configuração $\{s(t)\}$ com condições exteriores a Λ fixadas como anteriormente, tem-se

$$U_{Gs} \leq U_s - (\varepsilon - \Delta h)\,\ell$$

em que ε e Δh foram definidos nas condições U1 - U6 e F1 e ℓ é o número de nós do conjunto $Rm(M)$ usado para definir G .

NOTA : Relembramos que é o caso $\varepsilon > \Delta h$ que nos interessa, e que nesse caso $\exists_{\delta} > 0$ tal que

$$U_{Gs} + \delta\ell \leq U_s$$

Demonstração :

De momento deixamos de lado o termo associado ao campo magnético nas expressões de U_s e de U_{Gs} .

Como queremos controlar a diferença $U_s - U_{Gs}$, é fácil ver que podemos substituir Λ por $Rm(M)$ em U_s e Λ por $\tilde{Rm}(M)$ nos termos correspondentes em U_{Gs} . Com efeito para os nós não interagindo com $Rm(M)$ a transformação G limita-se a reproduzir o spin de $\{s(t)\}$ num nó (translatado ou não) que interage com outros nós que sofreram em bloco o mesmo ramo (1) da transformação G_1 ; em $U_s - U_{Gs}$ estes termos anulam-se e portanto não contribuem para a diferença de energia.

É cómodo considerar a bijecção natural $\sim$ de $Rm(M)$ em $\tilde{Rm}(M)$. Definimos $\sim(t) = \tilde{t}$ pelo translatado de t quando for possível ou por um "salto" quando o translatado de t pertencer a $R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$.

Notamos por

$$\overset{\smile}{t}^n = \underbrace{\overset{\smile}{t} \cdots \overset{\smile}{t}}_{n \text{ vezes}} \qquad \text{e} \qquad \overset{\frown}{t}^n = \underbrace{\overset{\frown}{t} \cdots \overset{\frown}{t}}_{n \text{ vezes}}$$

sendo $\overset{\smile}{t}^1 = \overset{\smile}{t}$ e $\overset{\frown}{t}^1 = \overset{\frown}{t}$. Isto permite-nos formalizar a transformação $\sim$:

$$\begin{array}{ccc} Rm(M) & \xrightarrow{\sim} & \tilde{R}m(M) \\ t & \longrightarrow & \tilde{t} \end{array} \qquad \text{em que :}$$

- se existe $n > 0$ tal que $\overset{\smile}{t}^n \in Rm(M)$ escolhemos o mais pequeno destes $\underline{n}$, digamos n_o e escrevemos

$$\tilde{t} = \overset{\smile}{t}^{n_o}$$

- senão escrevemos

$$\tilde{t} = \overset{\frown}{t}^{m_o}$$

em que m_o é o maior inteiro para o qual $\overset{\frown}{t}^{m_o} \in Rm(M)$. Este caso acontece se e só se $\overset{\smile}{t} \in R_o$.

A figura II.21 ilustra a transformação $\sim$.

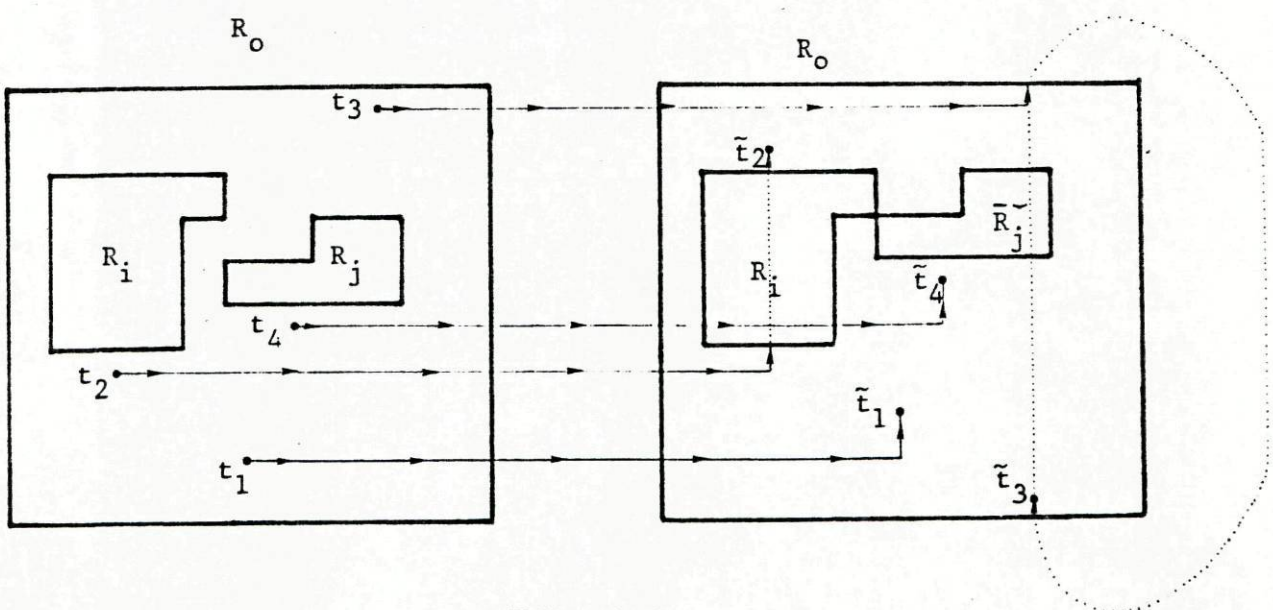


FIGURA II.21

Para cada nó $t \in Rm(M)$ vamos comparar a soma com quatro termos $\sum_{t_i \in \{t\}+\Delta} \cup(s(t), s(t_i))$ com a soma correspondente em $\tilde{t} \in \tilde{Rm}(M)$.

1º caso

$t + \Delta \in Rm(M)$

Neste caso $G \circ s(\tilde{t}_i)$ está bem orientado B , se $t_1 = t$ ou $t_1 \in \{t\} + \Delta$. Como $s(t_1)$ é m ou M de U3 ou U4 obtemos

$$\cup(G \circ s(\tilde{t}), G \circ s(\tilde{t}_i)) < \cup(s(t), s(t_i)) - \varepsilon \qquad (A)$$

excepto para os casos em que t e t_i sejam conjuntamente M onde se tem :

$$\cup(G \circ s(\tilde{t}), G \circ s(\tilde{t}_i)) = \cup(s(t), s(t_i))$$

Mas, para cada nó $t \in Rm(M)$ que é mal orientado M $\exists_{t_i} \in Rm(M)$ tal que $t_i \in \{t\} + \Delta$ e t_i é m ; para este nó t_i verifica-se a desigualdade (A).

Em consequência tem-se :

$$\sum_{t_i \in \{t\}+\Delta} \left[\cup(G \circ s(\tilde{t}), G \circ s(\tilde{t}_i)) - \cup(s(t), s(t_i)) \right] < -\varepsilon \qquad (B)$$

(ver apêndice II.2 casos 1-A a 1-I)

2º caso

$$(\{t\} + \Delta) \cap (Rm - Rm(M)) \neq \emptyset$$

e

$$(\{t\} + \Delta) \cap (R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}) = \emptyset$$

Esta condição significa que $\exists_{t_i} \in \{t\} + \Delta$ tal que $t_i \in Rm - Rm(M)$ e portanto este t_i não pode ser incluído em nenhuma etapa em $Rm(M)$; a única possibilidade é serem t_i e t nós M de configuração $\{s(t)\}$. Ora um nó M só pode ser incluido em $Rm(M)$

(definição indutiva) se verificar as condições I, III ou IV. Ora as condições I e IV não se podem verificar. Portanto há um nó $t_i \in \{t\} + \Delta$ intermédio m . Obtemos a desigualdade (B) pelo mesmo processo que no 1º caso.

(ver apêndice II - 2 casos 1 - G a 1 - H)

3º caso

$$\{t\} + \Delta \cap (Rm \sim Rm(M)) = \emptyset$$

e

$$\{t\} + \Delta \cap (R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}) \neq \emptyset$$

Se $\tilde{t} = \check{t}$ reencontramos a desigualdade (B) utilizando o argumento do 1º caso : se $t_i \in R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$, o nó t_i é de tipo B ,enquanto o nó t é do tipo m ou M , e a passagem a uma ligação de tipo B - B implica a desigualdade (A) (mesmo quando, como é o caso $\tilde{t}$ interage com $\check{t}_i$ e,por isso,

$$G \circ s(\check{t}_i) = s(\check{t}_i) \neq s(t_i)) .$$

Se por outro lado $\tilde{t} \neq \check{t}$, sabemos que o nó t é do tipo m ou M ; pelas condições U3 e U4 o último caso(M) é o mais desfavorável, porque como $\hat{t} \in R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}$, $\hat{t}$ é um nó de tipo B de configuração $\{s(t)\}$.

Como $s(\tilde{t})$ e $s(\check{t})$ serão ambos de tipo B , vê-se que também aqui o caso mais desfavorável é aquele em que o nó t tem o máximo de ligações M - M na configuração $\{s(t)\}$.

Ver figura II.22 :

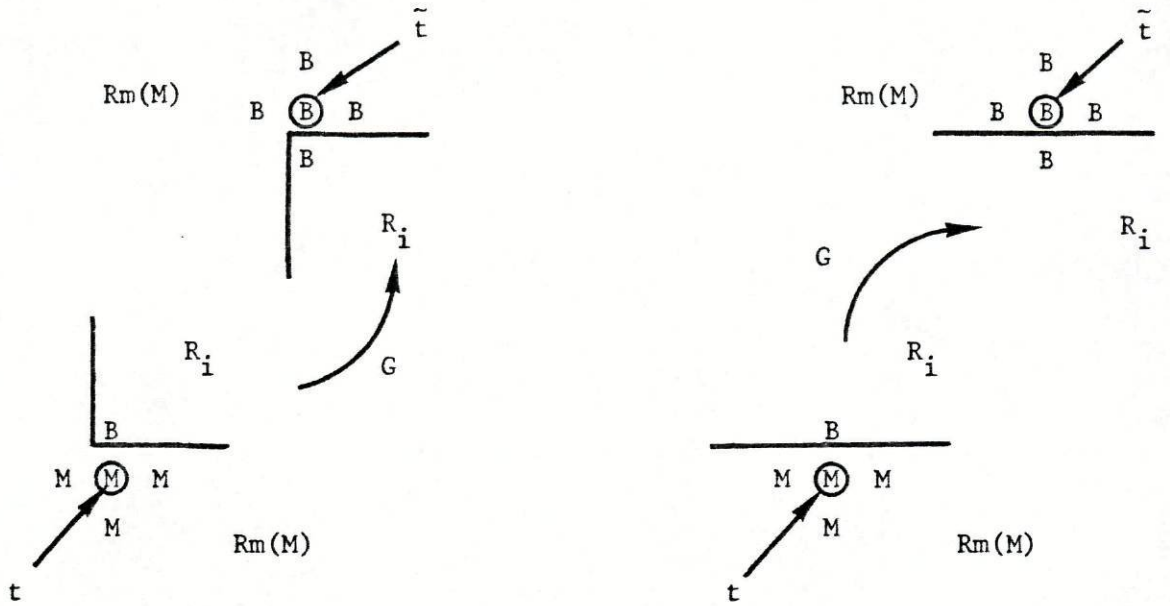


FIGURA II.22

Concluindo, o caso mais desfavorável é o caso em que 3 ligações M - M e uma ligação B - M se vão transformar (por G) em 4 ligações B - B .

Para cada ligação M - M a condição U6.1 garante que o aumento de energia será inferior a $\underline{d}$. Para a ligação M - B a condição U6.2 garante uma diminuição de energia de pelo menos $\underline{\varepsilon + 3d}$. Reencontramos somando a desigualdade (B)

4º caso

$$(\{t\} + \Delta) \cap (Rm - Rm(M)) \neq \emptyset$$

e

$$(\{t\} + \Delta) \cap (R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}) \neq 0$$

Este caso é a combinação do 2º e 3º casos. Resolve-se da mesma forma.

Em definitivo a soma para $t \in Rm(M)$ dos primeiros membros da desigualdade (B)

$$\sum_{t \in Rm(M)} \sum_{t_i \in \{t\}+\Delta} \cup(G \circ s(\tilde{t}) , G \circ s(t_i)) - \cup(s(t) , s(t_i)) \leq - \ell\varepsilon$$

Tomando agora em consideração o campo magnético devemos juntar Δh por nó de $Rm(M)$. Obtemos o resultado pretendido

$$\cup_{G \circ s} \leq \cup_s - (\varepsilon - \Delta h)\ell \quad \blacksquare$$

NOTA 1 : Como tinhamos anunciado há diminuição de energia se $\Delta h < \varepsilon$. No caso do modelo de Ising a duas dimensões obtem-se uma condição semelhante: $H < 4J$. (c.f. GRIFFITHS [1])

NOTA 2 : É indispensável limitar a transformação G a $Rm(M)$, porque a transformação de todo o complementar de R_o depende em geral do volume Λ , devido à existência de campo magnético.

Concluimos agora a demonstração do teorema :

Como g conserva a medida e todas as outras transformações são admissíveis, cada uma das ℓ integrações faz aparecer um factor b (condição U5). Note-se que nem todas as transformações introduzidas conservam a medida, porém a admissibilidade implica que

$$Z_L / Z_{GL} \leq \exp\{-\beta\ell(\varepsilon - \Delta h)\}\ b^{-\ell}$$

em que

$$Z_L = \sum_{s \in L} \cup_s \qquad Z_{GL} = \sum_{s \in L} \cup_{Gs}$$

(soma sobre todas as configurações duma nuvem)

Combinando todas as estimativas, podemos controlar a probabilidade de que um nó t_o esteja mal orientado (m ou M) : escrevemos de forma esquemática estas estimativas visto tratar-se do argumento usual de Peierls, tendo em conta o conceito de nûvem de configurações.

Tem-se :

$$P(\ t_o \text{ mal orientado }) \leq P(\ t_o \text{ envolvido por um contorno }) \leq$$

$$\leq \sum_{\ell} P(\ t_o \text{ envolvido por um contorno de comprimento } \ell\ ) \leq$$

$$\leq \sum_{\ell} \left(\begin{array}{c}\text{número de contornos}\\ \text{geométricos com}\\ \text{comprimento } \ell\end{array}\right) \times P\left(\begin{array}{c}\text{cada}\\ \text{contorno de}\\ \text{comprimento } \ell\end{array}\right) \leq$$

$$\leq \sum_{\ell} c\ell^2\ 8^{\ell} \times \left(\begin{array}{c}\text{número de}\\ \text{nûvens de}\\ \text{configurações}\end{array}\right) \times P\left(\begin{array}{c}\text{da nûvem}\\ \text{c/ maior}\\ \text{probabi-}\\ \text{lidade}\end{array}\right) \leq$$

$$\leq \sum_{\ell} c\ell^2\ 8^{\ell}(k+4)^{\ell}\ \exp\{-\beta\ell(\varepsilon - \Delta h)\}\ b^{\ell}$$

Este último termo é independente de Λ . Escolhendo β suficientemente grande (isto é temperatura suficientemente baixa), podemos tomar o último termo arbitràriamente pequeno, e em particular inferior a $1/2$ se $\beta < \beta_o$. Para $\beta < \beta_o$ tem-se uma transição de fase, no sentido que existem duas distribuições de Gibbs limite com distribuições condicionais dadas pela fórmula (A) da secção II.1. Estas distribuições limites não são invariantes por translação.

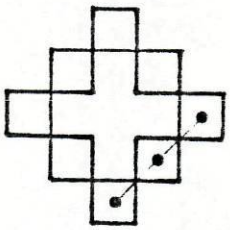
As condições no exterior de Λ que tomamos dão uma das distribuições limite. Se tomarmos as condições exteriores a Λ g- simétricas das anteriores, g- invertendo cada spin no exterior de Λ obteriamos a outra distribuição.

Pode-se obter uma distribuição da outra translatando o sistema de uma unidade segundo um dos eixos de $\mathbb{Z}^d$.

A P E N D I C E

II - 1

DETERMINAÇÃO DA CONSTANTE DO LEMA 5



O lado do quadrado é aproximadamente $\sqrt{2}\,\frac{\ell}{4}$ daí que a área seja aproximadamente $\frac{\ell^2}{8}$

A sucessão $NM(\ell)$ foi determinada na demonstração do Lema 5 :

$$NM(\ell) = \begin{cases} \dfrac{(\ell+2)^2+4}{8} & \text{se } \ell \equiv 0 \pmod 4,\ \ell \neq 0 \quad ; \quad NM(0) = 0 \\ \dfrac{(\ell+1)^2+12}{8} & \text{se } \ell \equiv 1 \pmod 4,\ \ell \neq 1 \quad ; \quad NM(1) = 1 \\ \dfrac{(\ell+2)^2}{8} & \text{se } \ell \equiv 2 \pmod 4 \\ \dfrac{(\ell+1)^2+8}{8} & \text{se } \ell \equiv 3 \pmod 4 \end{cases}$$

Consideramos as subsucessões

$$u_n^i = \frac{8NM(4n+i)}{(4n+i)^2} \qquad \begin{matrix} i = 1, 2, 3, 4 \\ n \in \mathbb{N}_o \end{matrix}$$

correspondentes aos diferentes "ramos" de $NM(\ell)$. Todas estas subsucessões são decrescentes e como $NM(\ell)$ converge para 1 , cada sucessão converge para 1 . Por isso

$$K \geq \max_{\ell \in \mathbb{N}} \left\{\frac{8NM(\ell)}{\ell^2}\right\} = \max_{i=1,2,3,4} \{u_o^i\} =$$

$$= \max\left\{8,\ 4,\ \frac{8}{3},\ \frac{5}{2}\right\} = 8$$

Completamos o nosso estudo de $NM(\ell)$ indicando alguns valores numéricos:

ℓ	$NM(\ell)$	$\ell^2/8$	$\frac{8NM(\ell)}{\ell^2}$
0	0	0	———
1	1	1/8	8
2	2	1/2	4
3	3	1 + 1/8	2,6667
4	5	2	2,5
5	6	3,125	1,9200
6	8	4,5	1,7778
7	9	6,125	1,4694
8	13	8	1,6250
9	14	10,125	1,3827
10	18	12,5	1,4400
11	19	15,125	1,2562
12	25	18	1,3889
13	26	21,125	1,2308
14	32	24,5	1,3061
15	33	28,125	1,1733
16	41	32	1,2813
⋮	. . .	. . .	. . .
48	313	288	1,0868
49	314	300,125	1,0462
50	338	312,5	1,0816
51	339	325,125	1,0427
52	365	338	1,0799
⋮	. . .	. . .	. . .
100	1301	1250	1,0408
101	1302	1275,125	1,0211
102	1352	1300,5	1,0396
103	1353	1326,125	1,0203
104	1405	1352	1,0392
. ⋮ .	. . .	. . .	. . .
1000	125501	125000	1,0040
1001	125502	125250,125	1,0020
1002	126002	126500,5	1,0040
1003	126003	125751,125	1,0020
1004	126505	126002	1,0040
. . .	. . .	. . .	. . .
10000	12505001	12500000	1,0004
10001	12505002	12502500,125	1,0002
10002	12510002	12505000,5	1,0004
10003	12510003	12507501,125	1,0002
10004	12515005	12510002	1,0004

A P E N D I C E

II - 2

Variação da energia devido à transformação G .

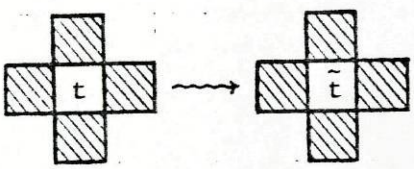
■ interacção em que a energia diminuiu de pelo menos ε

► interacção em que a energia diminuiu de pelo menos $\underline{\varepsilon + 3d}$

← interacção em que a energia aumentou de $\underline{d}$ no máximo

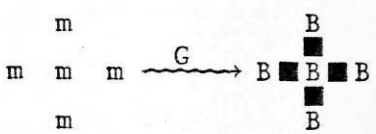
Não são assinaladas as interacções (arestas) em que não houve variação de energia.

As figuras indicam as variações na classificação dos spins :

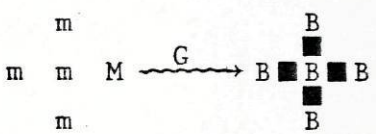


1º caso $\{t + \Delta\} \subset Rm(M)$

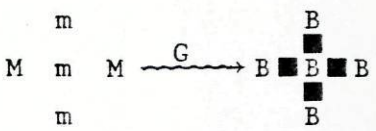
1A



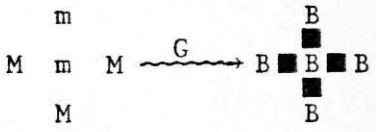
1B



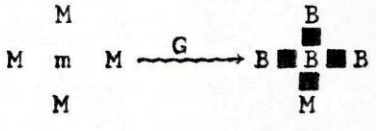
1C



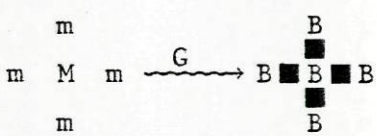
1D



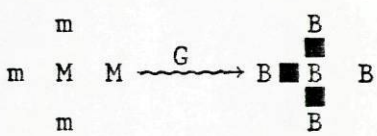
1E



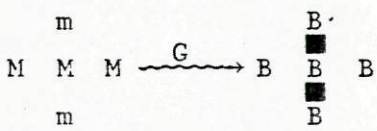
1F



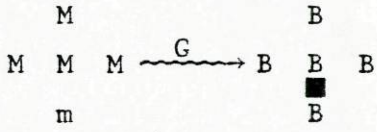
1G



1H



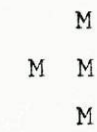
1I



A energia das ligações M-M é a mesma das ligações B-B correspondentes visto terem sido obtidas por uma translação. Não incluimos algumas configurações possíveis visto estarem representadas (energeticamente) neste conjunto. Por exemplo

está representada (energeticamente) em 1C . Nos outros casos faremos a mesma simplificação.

O caso em que t é M tem uma possibilidade a menos que o caso em que t é m . Se se tivesse



o ponto central, $t \notin Rm(M)$.

2º caso

$$\{t + \Delta\} \cap [Rm - Rm(M)] \neq \emptyset$$

e

$$\{t + \Delta\} \cap [R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}] = \emptyset$$

Neste caso t é forçosamente M e os nós de $\{t + \Delta\} \cap [Rm - Rm(M)]$ são também M (um pelo menos, três no máximo).

Reencontramos os casos 1G 1H e 1I

3º caso

$$\{t + \Delta\} \cap [Rm \sim Rm(M)] = \emptyset$$

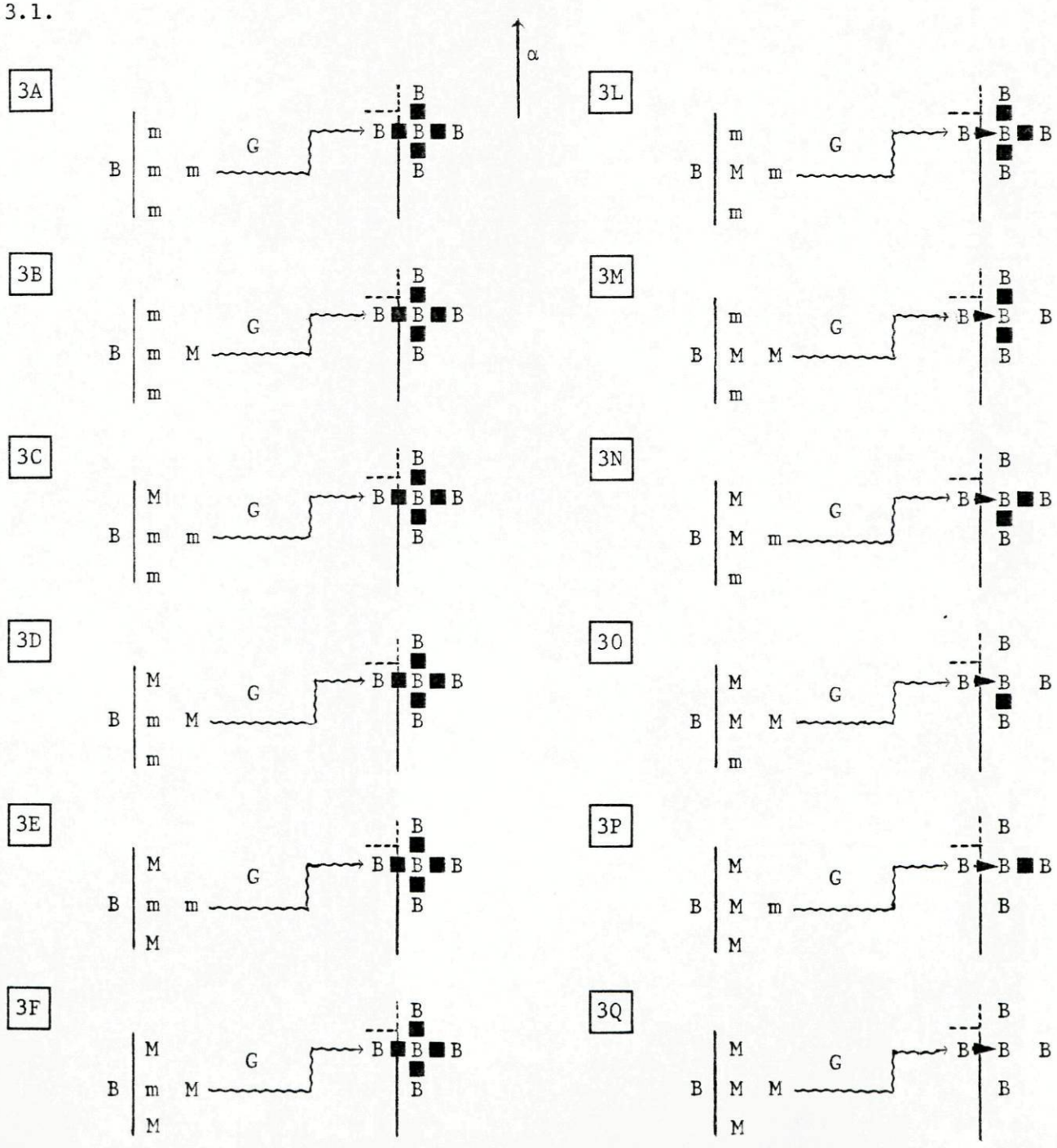
e

$$\{t + \Delta\} \cap (R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}) \neq \emptyset$$

3.1 $\tilde{t} = \check{t}$

3.2 $\tilde{t} \neq \check{t}$

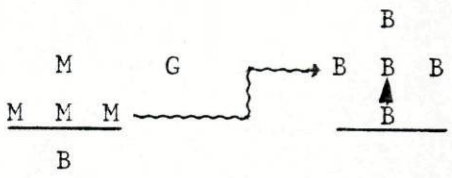
3.1.



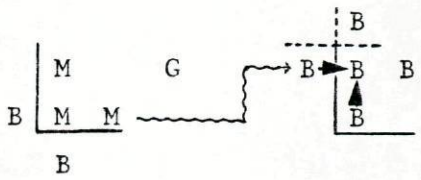
Se $\hat{t} \in R_i$ as situações são idênticas às anteriores.

Dois exemplos :

3G



3S



3.2. Há dois subcasos :

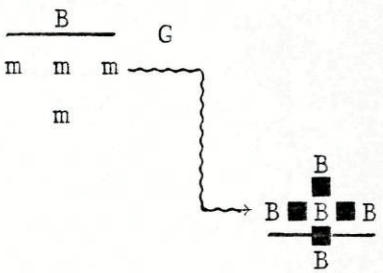
3.2.1. $\tilde{t} = \hat{t}^n$ para algum $n \in \mathbb{N}$

3.2.2. $\tilde{t} = \check{t}^n$ para algum $n \in \mathbb{N}$

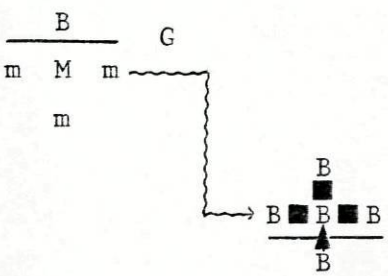
Vamos indicar apenas alguns casos extremos :

3.2.1.

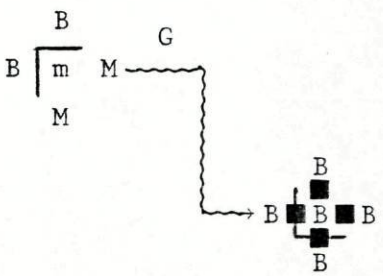
3H



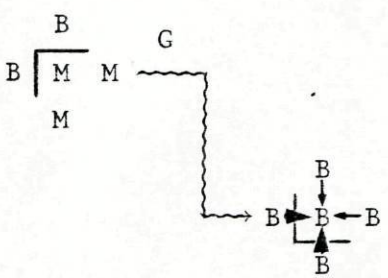
3T



3I

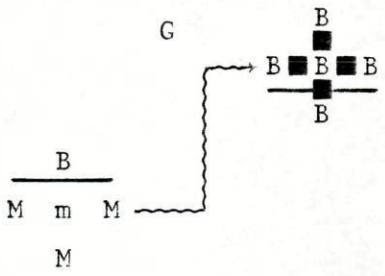


3U

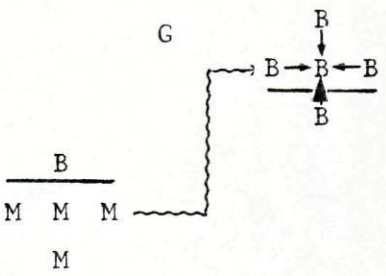


3.2.2.

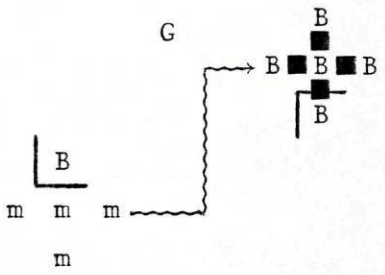
3J



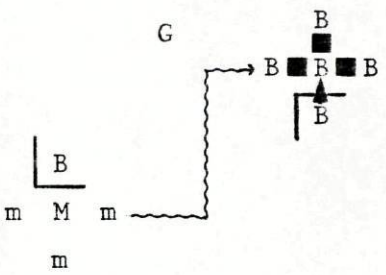
3V



3K



3W



NOTA : O caso 3V é o caso mais desfavorável.

4º caso

$$\{t + \Delta\} \cap (R_o \cup R_{i_1} \cup \ldots \cup R_{i_a}) \neq \emptyset$$

$$\{t + \Delta\} \cap [Rm - Rm(M)] \neq \emptyset$$

Neste caso (como no 2º caso) t é necessàriamente M e pelo menos um dos nós de $\{t + \Delta\}$ também é M . Reencontramos os casos 3M a 3Q e casos do tipo de 3S 3U e 3V .

C A P Í T U L O III

ANTIFERROMAGNETE DE HEISENBERG ANISOTRÕPICO

"Le concret, est-ce
de l'abstract rendu
familier par l'usage ?"

Benoit Mandelbrot em
"Penser les Mathématiques"
Ed. Seuil 1982

Neste capítulo vamos mostrar que o modelo antiferromagnético anisotrópico de Heisenberg é um caso particular do modelo genérico que tratamos no capítulo II, e que, por isso, tem uma transição de fase.

III.1 D E S C R I Ç Ã O D O M O D E L O

O conjunto S de valores do spin em cada nó é neste caso a esfera unidade :

$$S = \{s = (x, y, z) : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$$

Fazemos :

1 - $U(s_1, s_2) = |J| \left[z_1 z_2 + \alpha(x_1 x_2 + y_1 y_2)\right]$ em que $J \in \mathbb{R}$ e $|\alpha| < 1$.

Tomamos para simplificar a escrita $J = 1$.

2 - $h(s) = h_x x + h_y y + h_z z$ com $h = (h_x, h_y, h_z) \in \mathbb{R}^3$

3 - $\psi = \sum_{i \in T_1} z_i - \sum_{i \in T_2} z_i$

(T_1 e T_2 subredes definidas como no capítulo II)

4 - A transformação g é definida por

$$g : S \longrightarrow S$$

$$g(x, y, z) = g(x, y, -z)$$

5 - A medida μ é uma medida invariante para as rotações euclideanas e portanto invariante por reflexão (g).

Escolhemos $\delta > 0$ e tomamos

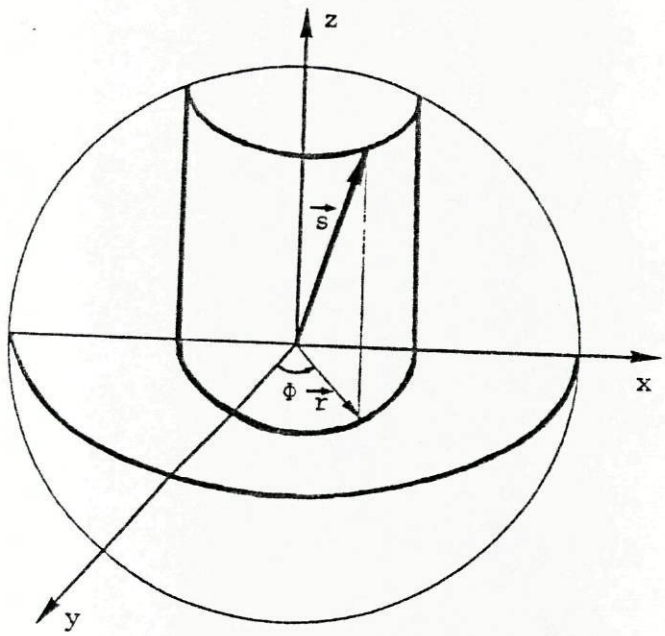
$$O_1 = \{s = (x, y, z) : r = \sqrt{x^2 + y^2} < \delta\}$$

e

$$O_2 = \{s = (x, y, z) : r < 2\delta\}$$

Definimos a transformação χ em coordenadas polares (r, Φ), $x = r \cos \Phi$ e $y = r \sin \Phi$ de forma que se segue :

$$\begin{cases} \chi(\Phi) = \Phi \\ \chi(r) = \delta - (2\delta - r)\,(1 - |\alpha|)\,/\,2 \end{cases}$$



III.2 VERIFICAÇÃO DAS CONDIÇÕES RESTRITIVAS DE II.1

Vamos verificar sucessivamente as condições U1 - U6 e F1. Para isso tomamos

$$\varepsilon = (1 - |\alpha|)^2 \delta^2 / 5$$

(U1): $U(s_1, s_2) = z_1 z_2 + \alpha(x_1 x_2 + j_1 j_2)$

é uma função contínua finita sobre S^2 e atinge o mínimo absoluto em dois pontos :

$$(s_o, s_o') \quad \text{e} \quad (s_o', s_o) \quad \text{com}$$

$$s_o = (0, 0, 1) \qquad s_o' = g(s_o) = (0, 0, -1)$$

(U2): é evidente.

(U3): No que se segue supomos δ suficientemente pequeno para que $O_2 \cap gO_2 = \emptyset$. Basta mostrar que :

$$U(s_1, s_2) < U(s_1', s_2') - \varepsilon \qquad \forall (s_1, s_2) \in O_1 \times gO_1$$

$$\forall (s_1', s_2') \notin O_2 \times gO_2$$

Vamos então supor $s_1 \in O_1$, $s_2 \in gO_1$ e por simetria basta analisar o caso

$$s_1' \in S - (O_2 \cup gO_2) \qquad s_2' \in S \quad .$$

Definimos $\underline{a}$ por :

$$a = \sup_{\substack{s_1 \in O_1 \\ s_2 \in gO_1}} [z_1 z_2 + \alpha(x_1 x_2 + y_1 y_2)] = \begin{pmatrix} z_1 > 0 \\ z_2 < 0 \end{pmatrix}$$

$$= \sup_{s_1, s_2 \in O_1} [-z_1 z_2 + \alpha(x_1 x_2 + y_1 y_2)] = \begin{pmatrix} z_1 > 0 \\ z_2 > 0 \end{pmatrix}$$

$$= - \inf_{s_1, s_2 \in O_1} [z_1 z_2 - \alpha (x_1 x_2 + y_1 y_2)] =$$

$$= - \inf_{s_2 \in O_1} (\sqrt{1 - \delta^2}\, z_2 - \alpha \delta x_2) .$$

Como $U(s_1, s_2)$ é invariante para as rotações em torno do eixo dos z fizemos $s_1 = (\delta, 0, \sqrt{1 - \delta^2})$.

Obtemos finalmente (visto que o produto escalar é máximo quando os vectores são colineares, e do mesmo sentido)

$$a = -(1 - \delta^2 - |\alpha| \delta^2) = - 1 + \delta^2 (1 + |\alpha|) \quad .$$

Da mesma forma, se se fizer $s_2' = (x_2', 0, z_2')$ obtemos

$$b = \inf_{\substack{s_1' \in S \sim (O_2 \cup \mathcal{S} O_2) \\ s_2' \in S}} (z_1' z_2' + \alpha x_1' x_2') =$$

$$= \inf_{\substack{|z_1'| \leq \sqrt{1 - 4\delta^2} \\ |z_2'| \leq 1}} (z_1' z_2' + \alpha x_1' x_2') =$$

$$= \inf (\sqrt{1 - 4\delta^2}\, z_2' + \alpha\, 2\delta\, x_2') =$$

$$= \min (-\sqrt{1 - 4\delta^2}\, , -|\alpha| 2\delta) =$$

$$= - \max (\sqrt{1 - 4\delta^2}\, , |\alpha| 2\delta) =$$

$$= -\sqrt{1 - 4\delta^2} \quad , \text{ se } \delta \text{ suficientemente pequeno.}$$

Como

$$\sqrt{1 + x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \ldots + \frac{(-1)^{n-1}\, (2n-2)!}{2^{2n-1}\, (n-1)!\, n!}\, x^n + \ldots$$

vem

$$b \leq - \sqrt{1 - 4\delta^2} = -(1 - 2\delta^2 - 0(\delta^4)) =$$

$$= -1 + 2\delta^2 + 0(\delta^4)$$

E portanto

$$a - b = -1 + \delta^2 + \delta^2|\alpha| + 1 - 2\delta^2 - 0(\delta^4) =$$

$$= -\delta^2(1 - |\alpha|) - 0(\delta^4) < -[(1 - |\alpha|)^2 \delta^2/5] = -\varepsilon$$

(U4): Começamos por provar U4.1 :

$$\forall_{s_1} \in gO_1 \qquad \forall_{s_2} \in O_2 - O_1 \qquad U(s_1, \chi s_2) < U(s_1, s_2) - \varepsilon$$

Sejam $s_1 = (r_1, \Phi_1)$ e $s_2 = (r_2, \Phi_2)$ com $r_1 \geq 0$ e $r_2 \geq 0$

então

$$U(s_1, s_2) = -\sqrt{1 - r_1^2}\sqrt{1 - r_2^2} + \alpha r_1 r_2(\cos \Phi_1 \cos \Phi_2 + \operatorname{sen} \Phi_1 \operatorname{sen} \Phi_2)$$

(o sinal menos da primeira parcela vem de $z_1 < 0$)

Calculamos :

$$\frac{\partial U}{\partial r_2} = + \frac{\sqrt{1 - r_1^2}}{\sqrt{1 - r_2^2}} r_2 + \alpha r_1(\cos \Phi_1 \cos \Phi_2 + \operatorname{sen} \Phi_1 \operatorname{sen} \Phi_2) \geq$$

$$\geq \frac{\sqrt{1 - r_1^2}}{\sqrt{1 - r_2^2}} r_2 - |\alpha| r_1 \overset{(*)}{\geq} r_2 - |\alpha| r_1 \geq$$

$$\geq \delta(1 - |\alpha|)/2 + 0(\delta^2) \quad , \text{ se tomarmos}$$

$$r_2 \geq \delta[1 - (1 - |\alpha|)/2] \quad \text{e} \quad r_1 \leq \delta$$

Então :

$$U(s_1, s_2) - U(s_1, \chi s_2) \geq (r_2 - \chi(r_2)) \inf \frac{\partial U}{\partial r_2} \geq$$

$$\geq \frac{1 - |\alpha|}{2} \delta \frac{1 - |\alpha|}{2} \delta$$

$$= \left(\frac{1 - |\alpha|}{2}\right)^2 \delta^2 \geq \frac{(1 - |\alpha|)^2}{5} \delta^2 = \varepsilon$$

(*) $\quad 0 < r_1 < \delta$, $\delta < r_2 < 2\delta$ $\Rightarrow$

$$\begin{cases} \sqrt{1 - r_1^2} \geq 1 - \delta^2 \\ \sqrt{1 - r_2^2} \leq 1 - \delta^2 \end{cases} \Rightarrow \frac{\sqrt{1 - r_1^2}}{\sqrt{1 - r_2^2}} \geq \frac{\sqrt{1 - \delta^2}}{\sqrt{1 - \delta^2}} = 1$$

se $r_2 - \chi(r_2) \geq \frac{1-|\alpha|}{2}\delta$, isto é, se $r_2 \geq \delta$, e

portanto em particular se

$(r_2, \Phi_2) \in O_2 - O_1$.

Para U4.2, da mesma forma , tem-se

$$\forall s_1 = (r_1, \Phi_1) \in O_2 - O_1 \qquad \forall s_2 = (r_2, \Phi_2) \in g(O_2 - O_1)$$

$$A = U(s_1, s_2) - U(\chi s_1, g\chi g s_2) =$$

$$= \frac{r_1^2}{2} + \frac{r_2^2}{2} - \alpha r_1 r_2(\cos\Phi_1 \cos\Phi_2 + \operatorname{sen}\Phi_1 \operatorname{sen}\Phi_2) -$$

$$- \frac{\chi(r_1)^2}{2} - \frac{\chi(r_2)^2}{2} + \alpha\chi(r_1)\chi(r_2)(\cos\Phi_1 \cos\Phi_2 + \operatorname{sen}\Phi_1 \operatorname{sen}\Phi_2) +$$

$$+ \theta(\delta^2) \geq$$

$$\geq \frac{r_1^2}{2} + \frac{r_2^2}{2} - |\alpha| r_1 r_2 - \frac{\chi(r_1)^2}{2} - \frac{\chi(r_2)^2}{2} + |\alpha|\chi(r_1)\chi(r_2) +$$

$$+ \theta(\delta^2) =$$

$$= \frac{(r_1 - r_2)^2}{2} + (1-|\alpha|) r_1 r_2 - \frac{(\chi(r_1) - \chi(r_2))^2}{2} -$$

$$- (1-|\alpha|)\chi(r_1)\chi(r_2) + \theta(\delta^2) \geq$$

$$\geq (1-|\alpha|)\,\delta^2[1 - |\alpha| - (1-|\alpha|)^2/4] + \theta(\delta^2)$$

visto que $|r_1 - r_2| \geq |\chi(r_1) - \chi(r_2)|$

e

$$\inf_{\substack{s_1 \in O_2 - O_1 \\ s_2 \in g(O_2 - O_1)}} [r_1 r_2 - \chi(r_1)\chi(r_2)]$$

é atingido quando $r_1 = r_2 = \delta$ e neste caso tem-se

$$A \geq 3(1-|\alpha|^2)\,\delta^2/4 + \theta(\delta^2) > (1-|\alpha|^2)\,\delta^2/5 = \varepsilon$$

(U5) : Esta condição é evidente.

NOTA : Baseamo-nos abundamente em MALYSHEV [38] visto que afora sinais estas condições são em tudo idênticas ao caso ferromagnético. As condições U6 e F1 são específicas do caso antiferromagnético.

(U6) : Em U3 calculamos

$$a = \sup_{\substack{s_1 \in O_1 \\ s_2 \in gO_1}} U(s_1, s_2) = -1 + \delta^2(1 + |\alpha|)$$

bem como

$$b = \inf_{s_3, s_4 \in O_1} U(s_3, s_4) = -a = 1 - \delta^2(1 + |\alpha|)$$

Para verificarmos a condição U6.1 calculamos a constante $d > 0$, supremo da diferença de energia entre duas ligações B - B (ou M - M)

$$d = \sup_{\substack{s_1, s_3 \in O_1 \\ s_2, s_4 \in gO_1}} (U(s_1, s_2) - U(s_3, s_4)) =$$

$$= \sup_{\substack{s_1 \in O_1 \\ s_2 \in gO_1}} U(s_1, s_2) - \inf_{\substack{s_4 \in gO_1 \\ s_3 \in O_1}} U(s_3, s_4) =$$

$$= a - (-1) = a + 1 = \delta^2(1 + |\alpha|)$$

Para que se verifique U6.2 é necessário que

$$a < -a - \varepsilon - 3(a + 1)$$

ou seja

$$\varepsilon < -3 - 5a$$

o que é equivalente a

$$\varepsilon = (1 - |\alpha|)\frac{\delta^2}{5} < -3 - 5(1 - \delta^2(1 + |\alpha|))$$

Simplificando obtemos

$$(26 + 23|\alpha| + |\alpha|^2)\ \delta^2 < 10$$

que se verifica se

$$\delta^2 < \frac{10}{26 + 23 + 1} = \frac{1}{5}$$

visto que o máximo de $26 + 23|\alpha| + |\alpha|^2$ é atingido quando $|\alpha| = 1$

(F1)- como $h(s) = h_x\, x + h_y\, y + h_z\, z$

$$x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$$

$h(s) \in [-|h|, |h|]$ em que

$$|h| = \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2}$$

e

$$\Delta h = 2|h| \quad \blacksquare$$

III.3 C O N C L U S Ã O

Em consequência do teorema do capítulo II, obtem-se :

COROLÁRIO :

O modelo antiferromagnético de Heisenberg clássico com parâmetro de anisotropia α , $|\alpha| < 1$ arbitrário, tem uma transição de fase para uma temperatura suficientemente baixa se $2|h| < \varepsilon$, isto é, se o campo magnético é suficientemente pequeno.

NOTA : O sentido desta transição de fase foi discutido no capítulo II : em resumo, há uma descontinuidade na diferença de magnetização entre as subredes T_1 e T_2 .

C A P Í T U L O IV

UMA GENERALIZAÇÃO DO TEOREMA DOS CAMINHOS DE SHERMAN

"Se eu fosse o criador teria
pensado mais simples"

Afonso X (1252 - 1284)
sobre o sistema Ptolomaico em
"Libros del saber de astronomia"

IV.1 I N T R O D U Ç Ã O

A solução do modelo de Ising bidimensional com campo magnético nulo é um resultado já clássico e como vimos (cap. I) foi obtido pela primeira vez por ONSAGER [78] . Dada a complexidade da solução proposta vários autores tentaram métodos alternativos : SHERMAN [71] , BURGOYNE [65] , GLASSER [73] e GRUBER [66] . NEWEL e MONTROLL [70] , apresentam um artigo de revisão em que as técnicas usadas para o estudo deste problema são divididas em dois grupos :

1 - Técnicas algébricas (matrizes, álgebras de Lie) correspondentes aos trabalhos de ONSAGER e de KAUFMAN [78] , [81] , [82] .

2 - Técnicas combinatórias (teoria dos grafos, ...) correspondentes aos trabalhos de SHERMAN, GRUBER e GLASSER [71] , [72] , [66] , [73] .

Não fazemos uma exposição exaustiva destas técnicas. Limitamo-nos ao necessário para o nosso trabalho.

O tratamento rigoroso da combinatória para a energia livre, com condições fronteira (+) foi realizado por SHERMAN [71] [72] que, assim, provou uma conjectura de FEYNMAN sobre os caminhos não orientados em grafos planares.

Este resultado foi usado, mais recentemente em ligação com a inexistência de estados de equilíbrio não invariantes por translação no modelo de Ising bidimensional, (MERLINI [68] , HIGUCHI [97] , AIZENMAN [98]) tendo MERLINI [69] fornecido uma solução combinatória simples a baixa temperatura.

Uma questão que é muitas vezes discutida é a ligação entre o modelo de Ising e o modelo S.O.S. (Solid on Solid)*. Em particular, conjectura de TEMPERLEY, espera-se que a tensão superficial no limite S.O.S.* coincida com o valor exacto para $T \leq T_c$ (T_c , temperatura crítica). A razão fundamental

---

(*) Ver Apêndice IV.2.

para tal facto é desconhecida, (Lebowitz, comunicação em privado); G. GROENEWALD anunciou uma demonstração combinatória em Junho de 1982.

Neste trabalho retomamos o teorema de Sherman sobre caminhos (trajectórias) e grafos demonstrado para condições fronteira (+). Por dualidade estende-se o resultado para a condição fronteira livre (free).

Em seguida generalizamos o teorema para condições fronteira quaisquer ; a razão entre duas funções de partição com condições fronteira arbitrárias e o desenvolvimento (cluster expansion) para os observáveis na fronteira pode então ser dado em termos dum conjunto de trajectórias (abertas e fechadas) na rede.

Em [63] analizamos como aplicação o desenvolvimento para a tensão superficial e a relação com o limite S.O.S., verificando gràficamente uma conjectura de TEMPERLEY para $T \leq T_c$. Retomamos sucintamente essa análise.

O trabalho descrito neste capítulo foi realizado conjuntamente com D. MERLINI [63] e submetido ao J. of Statistical Physics.

IV.2 O TEOREMA DE SHERMAN

IV.2.1 DEFINIÇÕES E NOTAÇÕES

IV.2.1.1 GRAFOS

Um grafo não orientado $G = \{P_1, P_2 \ldots P_n ; A_1 \ldots A_m\}$ é formalmente um complex(*) de dimensão 2 cujas arestas (arcos) são células de dimensão 1 e cujos nós (vértices) são células de dimensão 0 .

Não vamos analizar esta situação formal (geral). O leitor interessado nesse aspecto encontrará informação nos textos de ALEXANDROV [134] e de KURATOWSKY [16] .

Nos grafos que vamos considerar o espaço euclideano de base é $\mathbb{R}^2$. Os grafos (não orientados) G são então constituidos por um conjunto $\mathcal{N}$, os nós do grafo, e por um subconjunto $\mathcal{A}$ das partes de $\mathcal{N}$ com dois elementos, as arestas; Eventualmente haverá arestas das quais teremos várias cópias. Notação

$$G = (\mathcal{N}, \mathcal{A})$$

Se numa aresta $\{a, b\}$ pudermos (ou, se for conveniente) atribuir uma ordem (a, b) dizemos que a é o nó inicial, e que b é o nó final da aresta orientada (a, b) . Uma aresta orientada é por vezes designada por arco.

(*) Um complex é uma família (usualmente finita) de simplexes dum espaço euclideano, contendo todas as faces dos simplexes e tal que a intersecção dos fechos de dois desses simplexes é,ou vazio,ou o fecho da face que lhes é comum.

Um grafo em que todas as arestas são orientadas diz-se grafo orientado. Se $A = (a, b)$ for uma aresta orientada escrevemos A^{-1} para designar a aresta orientada (b, a).

Para simplificar a exposição vamos supor no que se segue que $\mathcal{N} \subset \mathbb{Z}^2$ e que $\mathcal{A}$ é um conjunto de pares de próximos vizinhos.

Um grafo admissível é um conjunto de arestas entre próximos vizinhos tais que em cada nó se encontram um número par de arestas.

Os nós em que se encontram 4 arestas são particularmente interessantes e designamo-los por cruzamentos.

Os grafos que vamos considerar não são necessàriamente conexos.

IV.2.1.2 TRAJECTÓRIAS

Vamos agora definir trajectória sobre um grafo. Esta definição pode ser vista como generalização do conceito de caminho 1-conexo que introduzimos no capítulo II.

Dizemos que duas sucessões de arestas são γ-equivalentes se podem ser obtidas uma da outra por permutação circular, ou por inversão da sucessão das arestas :

$$(A_1, A_2, \ldots, A_s) \overset{\gamma}{\equiv} (A_2, \ldots, A_s, A_1)$$

$$(A_1, A_2, \ldots, A_s) \overset{\gamma}{\equiv} (A_s^{-1}, A_{s-1}^{-1}, \ldots, A_2^{-1}, A_1^{-1}) \overset{\gamma}{\equiv} (A_1, A_2, \ldots, A_s)^{-1}$$

Uma classe de equivalência Γ, para a relação γ, diz-se um "caminho orientado" ou trajectória do grafo G se $\exists\, (A_1^{\mu_1}, A_2^{\mu_2}, \ldots, A_s^{\mu_s}) \in \Gamma$ com $\mu_i = \pm 1$, e tal que $\forall i \in \{1, \ldots, s-1\}$:

(1) O nó final de $A_i^{\mu_i}$ coincide com o nó inicial de $A_{i+1}^{\mu_{i+1}}$

(2) $\left(A_i^{\mu_i}\right)^{-1} \neq A_{i+1}^{\mu_{i+1}}$

A condição (1) diz-nos que se $A_i^{\mu_i}$ for da forma (a_i , a_{i+1}) então $A_{i+1}^{\mu_{i+1}}$ será da forma (a_{i+1} , a_{i+2})

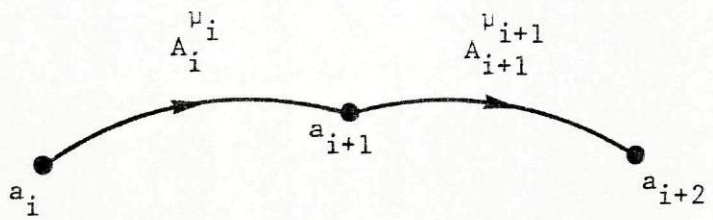
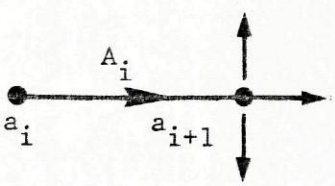


FIG. IV.1

A condição (2) diz-nos que $a_{i+2} \neq a_i$, isto é, que não há reflexão no nó a_{i+1} :



(em $\mathbb{Z}^2$)

FIG. IV.2

A necessidade do uso de classes de equivalência vem do facto de numa trajectória fechada não estar fixado de forma natural um nó inicial, e de qualquer caminho poder ser percorrido nos dois sentidos. Cada trajectória (classe de equivalência) tem pelo menos um caminho (unicursal) no sentido do capítulo II.

Uma trajectória diz-se <u>fechada</u> se todos os elementos da classe de equivalência verificam as condições (1) e (2) ou, o que é equivalente, se para todos os elementos da classe :

$$a_1 \equiv a_{s+1}$$

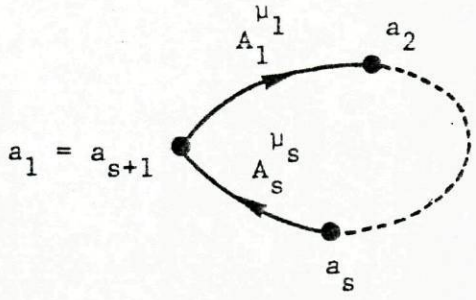


FIG. IV.3

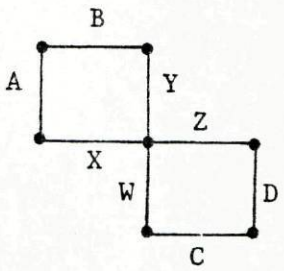
Não há restrições sobre o nº de vezes que cada aresta aparece numa trajectória.

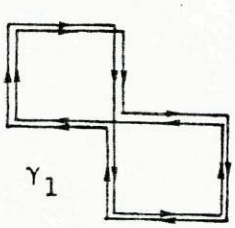
Uma trajectória <u>periódica</u>, é uma trajectória fechada que pode ser obtida repetindo várias vezes uma subtrajectória fechada. Escrevemos $(A_1^{\mu_1} \ldots A_s^{\mu_s})^r$, com $r \in \mathbb{N}$, a trajectória obtida por repetição r vezes da trajectória $A_1^{\mu_1}, \ldots, A_s^{\mu_s}$.

Definimos <u>multiplicidade</u> duma trajectória fechada $A_1^{\mu_1} \ldots A_s^{\mu_s}$ como o maior $r \in \mathbb{N}$ para o qual existe uma trajectória fechada $B_1 \ldots B_t$ tal que

$$(B_1 \ldots B_t)^r = A_1^{\mu_1} \ldots A_s^{\mu_s}$$

NOTA : Uma trajectória pode ter todas as arestas repetidas um mesmo número de vezes sem que a trajectória seja periódica ; exemplo :





$$\gamma_1 = (YBAX)(ZDCW)(X^{-1}A^{-1}.B^{-1}Y^{-1})(ZDCW) =$$

$$= C_1\, C_2\, C_1^{-1}\, C_2 \neq [\,\bullet\,]^2$$

em que $C_1 = (YBAX)$ e

$C_2 = (ZDCW)$

FIG. IV.4

No desenho dos caminhos é necessário separar ligeiramente as arestas repetidas para distinguir os diferentes comportamentos nos cruzamentos. De outra forma não é sempre claro no desenho qual a sucessão de arestas da trajectória. O sinal da trajectória, que definimos a seguir, é independente da forma como forem duplicadas as arestas (WHITNEY [140]).

O sinal duma trajectória + ou - é definido como o sinal de $(-1)^N$ em que N é o número de autocruzamentos da trajectória ; exemplos :

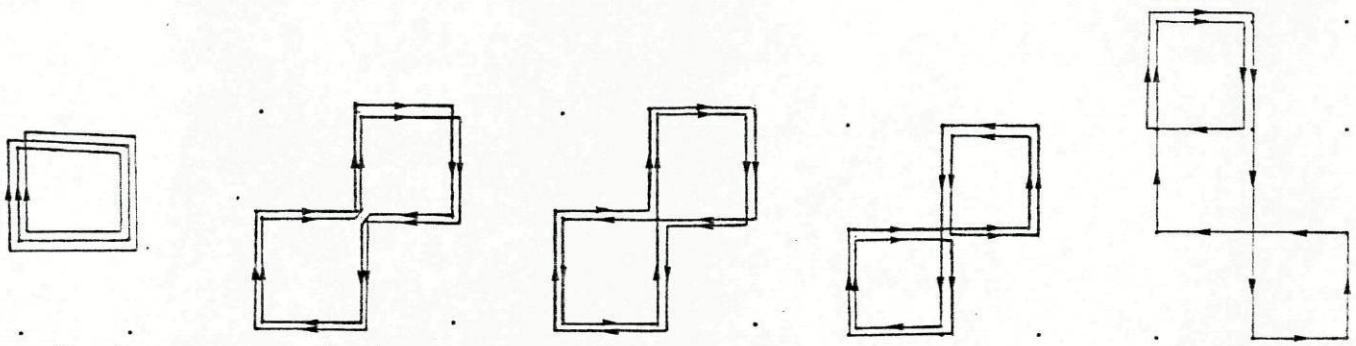


FIGURA IV.5

IV.2.2 O TEOREMA

Associamos a cada aresta $\underline{i}$ uma indeterminada d_i . Então para cada grafo admissível G associamos

$$I(G) = \prod d_i$$

produto sobre as arestas do grafo (produto comutativo).

Para cada trajectória P definimos

$$I(P) = \prod d_i^{\mu_i}$$

em que μ_i é o nº de vezes que a aresta i é atravessada por P .

Fazemos $W(P) = (-1)^{N_P} I(P)$ em que N_P é o número de autocruzamentos de P .

TEOREMA

$$1 + \sum_{G} I(G) = \prod_{P} [1 + W(P)]$$

Soma sobre todos os grafos admissíveis, e produto sobre todas as trajectórias fechadas não periódicas.

É esta a conjectura de Feyman, provada pela primeira vez por SHERMAN [71] . O leitor encontra em BURGOYNE [65] uma demonstração simples.

IV.2.3 APLICAÇÃO AO MODELO DE ISING

Consideramos o modelo de Ising bidimensional com interacções aos próximos vizinhos, com função de partição, no volume Λ (finito) :

$$Z_{\Lambda} = \sum_{\{\sigma\} \in \{-1,1\}^{\Lambda}} \exp \beta \sum_{\substack{i \in \Lambda \\ j \in \Lambda \cup \partial\Lambda}} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

em que $\partial\Lambda = \{i \notin \Lambda : \exists_{j \in \Lambda} \quad i - j \in \Delta\}$.

Para cada conjunto $A \subset \Lambda$ definimos σ_A por :

$$\sigma_A = \prod_{i \in A} \sigma_i$$

Se $B = (i , j)$ for uma aresta da rede $\sigma_B = \sigma_i \sigma_j$ e para simplificar escrevemos $J_B = J_{ij}$

Com estas notações obtemos :

$$Z_{\Lambda} = \sum_{\{\sigma\}} \exp \{\beta \sum_{B} J_B \sigma_B\} =$$

$$= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{B} e^{\beta J_B \sigma_B} = \sum \prod_{B} e^{K_B \sigma_B} \quad ; \quad K_B = \beta J_B \text{ e } \sigma_B = \pm 1 .$$

Como $\text{ch } x + \text{sh } x = e^{x}$ e

$$\text{sh}(\sigma x) = \sigma \text{ sh } x$$

$$\text{ch}(\sigma x) = \text{ch } x$$

vem :

$$Z_{\Lambda} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{B} (\text{ch } K_B + \sigma_B \text{ sh } K_B) =$$

$$= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{B} (\text{ch } K_B) \prod_{B} (1 + \sigma_B \text{ th } K_B)$$

A reunião dos contornos separando spins (+1) de spins (-1) em cada configuração, pode ser vista como um grafo sobre a rede dual.

Supondo que a todas as configurações correspondem grafos admissíveis* vem, desenvolvendo o 2º produto

$$Z_{\Lambda} = 2^{|\Lambda|} \left(\prod_{B} \text{ch } K_B\right) \left(1 + \sum_{G} I(G)\right)$$

em que os pesos das arestas é $d_B = \text{th } K_B$. Ver por exemplo, NEWELL, MONTROLL [70] , ou BURGOYNE [65] .

(*) Discutimos sucintamente estas questões em IV.2.4 . A restrição a grafos admissíveis é consequência do não aparecimento de potências impares de σ_i no desenvolvimento de

$$\sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} \left[1 + \sigma_i \sigma_j \text{ th}(\beta J_{ij})\right]$$

Designamos por <u>função de partição reduzida</u> a quantidade Z^*_Λ definida por

$$Z^*_\Lambda = \frac{Z_\Lambda}{2^{|\Lambda|} \prod_B \text{ch } K_B} = 1 + \sum_G I(G)$$

Aplicando logaritmos e usando o teorema vem

$$Z^*_\Lambda = e^{\log Z^*_\Lambda} = e^{\log\left[1 + \sum_G I(G)\right]} =$$

$$= e^{\log \prod_P [1 + W(P)]} = e^{\sum_P \log[1 + W(P)]}$$

Desenvolvendo o logaritmo obtemos

$$Z^*_\Lambda = \exp \sum_P \{W(P) - \frac{1}{2}[W(P)]^2 + \frac{1}{3}[W(P)]^3 + \ldots)$$

em que o 1º termo corresponde às trajectórias simples enquanto que todos os outros correspondem às trajectórias periódicas.

A justificação deste facto vem de :

- (1) Como mostrou WHITNEY [140] o sinal duma trajectória periódica é igual ao sinal do período de base vezes $[-(-1)^{\mu_P}] = (-1)^{N_P}$ em que μ_P é a ordem de multiplicidade da trajectória P , e N_P o número de autocruzamentos.

- (2) Os termos correspondentes a trajectórias com multiplicidade μ_P devem ser pesados com $\frac{1}{\mu_P}$, visto que, o número de escolhas possíveis para início da trajectória periódica P é igual ao número total de arestas dividido pela multiplicidade da trajectória (c.f. BURGOYNE [65]).

Finalmente podemos escrever

$$Z_{\Lambda}^{*} = \exp\left[\sum_{P} \frac{(-1)^{N_P}}{\mu_P} \prod_{B} (\text{th } K_B)^{n_B}\right]$$

soma sobre todas as trajectórias fechadas P , e em que n_B é o número de vezes que a aresta B ocorre na trajectória P .

No apêndice IV.1 o autor tenta dar algum apoio intuitivo à compreensão do teorema.

IV.2.4 REFINAMENTO DO TEOREMA

IV.2.4.1 MOTIVAÇÃO

O teorema obtido por SHERMAN aplica-se, como vimos, à situação em que os grafos associados aos contornos são admissíveis, isto é, todos os contornos são fechados. A existência ou não de contornos abertos depende da condição fronteira. Para condições fronteira homogéneas (+) ou (-) os contornos são todos fechados. Para estas condições fronteira é aplicável o teorema.

Por dualidade podemos também aplicar o teorema para a condição fronteira livre (free) caracterizada pela não fixação dos spins no exterior do volume finito Λ .

Ora, é sabido que, em muitos casos as condições fronteira que interessa estudar dão origem a contornos abertos ; ver por exemplo GALLAVOTTI, MIRACLE-SOLE [53] . Um caso particularmente interessante foi já referido em I.10.2 : - O Modelo de Ising tridimensional.

IV.2.4.2 NOTAÇÕES ; USO DA DUALIDADE

Seja $\mathcal{B}$ o conjunto das condições no exterior de Λ (b.c.); dado que vamos apenas considerar interacções aos próximos vizinhos só nos vai interessar a restrição de cada condição fronteira (b.c.) a $\partial\Lambda$. Assim, cada condição fronteira $b \in \mathcal{B}$, pode ser caracterizada pelo conjunto dos nós i_o de $\partial\Lambda$ tais que $\sigma(i_o) = -1$, sendo os nós $j_o \in \partial\Lambda - b$ tais que $\sigma(j_o) = +1$.

Vamos decompor b em componentes $\sqrt{2}$- conexas maximais $\{C_i\}_{i=1,\ldots,\alpha}$ de forma que :

(1) $\bigcup_{i=1}^{\alpha} C_i = b$,

(2) $C_i \cap C_j = \emptyset$ se $i \neq j$

(3) $C_i \cup C_j$ se $i \neq j$ não é $\sqrt{2}$- conexo(*).

Consideramos a rede Λ^* dual de $\Lambda \cup \partial\Lambda$, cujos nós são os centros dos quadrados unitários de $\Lambda \cup \partial\Lambda$. A cada aresta $B \in \Lambda \cup \partial\Lambda$ corresponde uma aresta dual B^* (ortogonal à aresta B) e a cada componente de b na fronteira $\partial\Lambda$ corresponde uma trajectória b^* dada por $b^* = \{B_i^*\}$, que é o conjunto das arestas B_i^* duais das arestas $B_i = \{i, j\}$ tais que $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_i$ com $i \in \Lambda$ e $j \in b$.

De igual forma podemos escrever $b^* = \bigcup_{i=1}^{\alpha} C_i^*$ em que cada C_i^* é um caminho 1- conexo, ao longo do bordo do quadrado aberto Λ^* (sem condições exteriores (free)). Note-se que o produto (diferença simétrica) $\prod_{B_j^* \in C_i^*} B_j^* = \overline{C_i^*} = \{i_1^*, i_2^*\}$ é o par constituido pelos pontos extremos de C_i^* .

Usamos em seguida a transformação de dualidade alta-baixa temperatura tal que para cada par de arestas duais (B, B^*) as interacções estão relacionadas por :

(*) Se escrevessemos 1- conexo em vez de $\sqrt{2}$ - conexo complicavamos a solução do problema devido aos "cantos" de Λ .

$$\text{th } K^*_{B^*} = e^{-2K_B}$$

com

$$K_B = \beta J_B$$

e $\beta = \frac{1}{KT}$ em que K é a constante de Boltzmann.

O Hamiltoneano H_Λ com condição fronteira b é dado por

$$H_\Lambda(\sigma/b) = - \sum_{B \in (\Lambda \cup \partial\Lambda) x \Lambda} J_B \sigma_B \qquad \left(\begin{array}{l} \text{campos devidos à condição} \\ \text{fronteira incluidos} \end{array} \right)$$

Fazemos $Z_b = \sum_{\{\sigma\}} e^{-B H_\Lambda(\sigma/b)}$ (soma sobre todas as configurações em Λ); Z_b é portanto a função de partição com condição fronteira b .

Obviamente $Z_{b=\emptyset} = Z_+$ é a função de partição para a condição fronteira + em $\partial\Lambda$. Pela dualidade alta-baixa temperatura considerada temos [67] (GRUBER, HINTERMAN, MERLINI) :

$$\frac{Z_{b,\Lambda}}{Z_{+,\Lambda}} = \langle \sigma_{b^*} \rangle^{free}_{\Lambda^*}(K^*) = \langle \prod_{i=1}^{\alpha} \sigma_{\overline{C}_i^*} \rangle_{\Lambda^*}(K^*)$$

Vamos no que segue analizar os grafos em Λ^* , com condições fronteira abertas, a alta temperatura; estes grafos correspondem aos contornos em Λ com condição fronteira + e a baixa temperatura.

O teorema pode assim ser reescrito para um domínio aberto Λ^* : A função de partição reduzida $\overline{Z}_{\Lambda^*}$ é dada pelo exponencial da soma de trajectórias fechadas conexas (1-ciclos), isto é o desenvolvimento(*) é :

(*) cluster expansion.

$$\overline{Z}_{\Lambda^*} = \frac{Z_{\Lambda^*}}{2^{|\Lambda^*|} \prod_{B^* \in \Lambda^*} \operatorname{ch} K^*_{B^*}} = e^{\sum_P W(P)} = e^{\sum_P \frac{(-1)^{N_P}}{\mu_P} \prod_{B^* \in P} (\operatorname{th} K^*_{B^*})^{n_{B^*}}}$$

Onde, como anteriormente

P - é um ciclo (caminho fechado conexo) genérico, com peso $W(P)$.

N_P - é o número de autocruzamentos de P .

μ_P - é a multiplicidade do ciclo P .

n_{B^*} - nº de vezes que a aresta B^* ocorre em P . Sendo portanto $\sum_{B^* \subset P} n_{B^*} = \ell(P)$ o comprimento de P .

$\operatorname{th} K^*_{B^*} = e^{-2K_B}$ é o factor de Boltzmann a baixa temperatura associado à aresta $B^* \in \Lambda^*$. A série anterior converge se $K^*_{B^*} < K_{Cr} \quad \forall_{B \in \Lambda}$ onde K_{Cr} (ponto crítico) é dado por $e^{-2K_{Cr}} = \operatorname{th} K_{Cr}$ (se $K^*_{B^*} = K \; \forall_B$)

$$\left(K_{Cr} = 0{,}4406867935 = \frac{1}{2} \log(\sqrt{2} + 1) \right)$$

IV.2.4.3 ENUNCIADO E DEMONSTRAÇÃO

TEOREMA :

Seja $Z_{\Lambda,b}$ a função de partição do modelo de Ising com campo magnético nulo e condição fronteira arbitrária b , com $b^* = \bigcup_{i=1}^{\alpha} C^*_i$ como definido anteriormente.

Então o desenvolvimento de $Z_{\Lambda,b}$ em Λ é dado por :

$$Z_{\Lambda,b} = Z_{\Lambda,+} \langle \sigma_{b^*} \rangle_{\Lambda^*}(K^*) = Z_{\Lambda,+} R_{\Lambda,b} = Z_{\Lambda,+} \sum_{\bigcup_{i=1}^{\alpha} b^*_i = b^*} \frac{1}{\alpha!} \prod_i S_{\overline{b}^*_i} \qquad (A)$$

onde $S_{\overline{b^*_i}} = S \prod_{C_{j^*} \in b^*_i} C_j$, em que $S_{\overline{C_{i^*}}}$ é a soma sobre todas as trajectórias P de Λ^* que começam e acabam nos pontos extremos de C_{i^*} com peso $W_{\overline{C_{i^*}}}(P) = (-1)^{N_P} \prod_{B^* \in P} e^{-2K_B n_{B^*}}$.

DEMONSTRAÇÃO :

Z_b separa-se no produto de Z_+ (afora um factor, a exponencial da soma de todos os caminhos fechados conexos) e R_b (a contribuição de todos os caminhos abertos contendo o efeito da condição fronteira b). (ver também G. GALLAVOTTI, S. MIRACLE - -SOLE [53])

Introduzimos um caminho P_{i^*} formado pelas arestas auxiliares $\{B_{i\ell^*}\}$ adjacentes a Λ^* com interacções a dois corpos $\{\lambda_{i\ell}\}$ para a componente C_{i^*} de b^* , ver figura IV.6, e definimos :

$$Z_\Lambda(\{\lambda_{i\ell,K^*}\}) = \sum_\sigma e^{-\beta^* H_{\Lambda^*} + \sum_{(i,\ell)} \lambda_{i\ell} \sigma_{B^*_{i\ell}}} =$$

$$= A \times e^{\sum_{\overline{P}} W(\overline{P})}$$

onde A é um factor que não vai intervir e $\overline{P}$ é um caminho fechado qualquer (T. Sherman usual) contendo ou não arestas auxiliares.

A correlação que nos interessa (equação (A)) é então dada por :

$$< \sigma_{b^*} >_{\Lambda^*} = \frac{Z_{b,\Lambda}}{Z_{+,\Lambda}} = \lim_{\{\lambda_{i\ell}\} \to 0} \prod_{(i\ell)} \frac{\frac{\partial}{\partial \lambda_{i\ell}} Z_{\Lambda^*}(\{\lambda_{i\ell}, K^*\})}{Z_\Lambda(\{\lambda_{i\ell}, K^*\})}$$

Começamos por analizar o caso em que b^* só tem uma componente conexa, isto é, $b^* = C_1^*$. Como todo o caminho $\overline{P}$ passando por $\{B_{i\ell}^*\}$ contém todas as arestas auxiliares o mesmo número de vezes para utilização do Teorema de Sherman usual podemos assimilar o conjunto das arestas $\{B_{i\ell}^*\}$ com uma só aresta $\tilde{B}_1^*$ (uma linha) com interacção λ_1 , $\tilde{B}_1^*$ exterior a Λ^* tendo como nós extremos os extremos de C_1^* . Como pelo Teorema Sherman ($\lambda_1 = K_{\tilde{B}_1^*}$)

$$Z_{(\Lambda^*,\lambda_1)} = e^{\sum_P \frac{(-1)^{N_P}}{\mu_P} \prod (\text{th } K_{B^*}^*)^{n_B^*} \left(2^{|\Lambda^*|} \prod_{B^* \in \Lambda^*} \text{ch } K_{B^*}^*\right)}$$

onde P é uma trajectória qualquer; e, separando as trajectórias que contêm a linha $\tilde{B}_1^*$ das que não a têm, vem :

$$Z_{(\Lambda^*,\lambda_1)} = \exp \left\{ \sum_{\{P:\tilde{B}_1^* \notin P\}} \frac{(-1)^{N_P}}{\mu_P} \prod_{B^* \in P} (\text{th } K_{B^*}^*)^{n_B^*} + \right.$$

$$\left. + \sum_{\{\overline{P}:\tilde{B}_1^* \in \overline{P}\}} \frac{(-1)^{N_{\overline{P}}}}{\mu_{\overline{P}}} \prod_{B^* \in \overline{P}} (\text{th } K_{B^*}^*)^{n_B^*} (\text{th } \lambda_1)^{n_{\tilde{B}_1}} \right\} \times$$

$$\times 2^{|\Lambda^*|+1} \prod_{B^* \in \Lambda^*} \text{ch } K_{B^*}^* \times \text{ch } \lambda_1$$

derivando em ordem a λ_1 e representado o exponencial entre chavetas da fórmula anterior por exp { ... } obtemos :

$$\frac{\partial\, Z(\Lambda^*, \lambda_1)}{\partial \lambda_1} = 2^{|\Lambda^*|+1} \prod \operatorname{ch} K^*_{B^*} \Bigg[\operatorname{sh} \lambda_1 \exp\{ \ldots \} +$$

$$+ \operatorname{ch} \lambda_1 \exp\{ \ldots \} \times n_{\tilde{B}^*_1} \times$$

$$\times \sum_{\{\overline{P}:\tilde{B}^*_1 \in \overline{P}\}} \frac{(-1)^{N_{\overline{P}}}}{\mu_{\overline{P}}} \prod_{B^* \in \overline{P}} (\operatorname{th} K^*_{B^*})^{n_{B^*}} \frac{(\operatorname{th} \lambda_1)^{n_{\tilde{B}^*_1}-1}}{\operatorname{ch}^2 \lambda_1} \Bigg] =$$

$$= 2^{|\Lambda^*|+1} \prod \operatorname{ch} K^*_{B^*} \operatorname{ch} \lambda_1 \exp\{ \ldots \} \times$$

$$\times \left[\operatorname{th} \lambda_1 + \sum_{\{\overline{P}:\tilde{B}_1^* \in \overline{P}\}} \frac{(-1)^{N_{\overline{P}}}}{\mu_{\overline{P}}} \prod_{B^* \in P} (\operatorname{th} K^*_{B^*})^{n_{B^*}} \frac{n_{\tilde{B}^*_1}}{\operatorname{ch}^2 \lambda_1} \right]$$

E, portanto, dividindo por $Z(\Lambda^*, \lambda_1)$ obtem-se

$$\langle \sigma_{\overline{c}_1^*} \rangle_{\Lambda^*}(K^*, \lambda_1) = \operatorname{th} \lambda_1 +$$

$$+ \sum_{\{\overline{P}:\tilde{B}^*_1 \in \overline{P}\}} \frac{(-1)^{N_{\overline{P}}}}{\mu(\overline{P})} \frac{(\operatorname{th} \lambda_1)^{n_{\tilde{B}_{1^*}}-1}}{\operatorname{ch} \lambda_1} \prod_{B^* \in P} (\operatorname{th} K^*_{B^*})^{n_{B^*}} \frac{n_{\tilde{B}^*_1}}{\operatorname{ch}^2 \lambda_1}$$

e

$$\langle \sigma_{\overline{c}_1^*} \rangle_{\Lambda^*}(K^*) = \lim_{\lambda_1 \to 0} \langle \sigma_{\overline{c}_1^*} \rangle_{\Lambda^*}(K^*, \lambda_1) =$$

$$= \sum_{\{\overline{P}:\tilde{B}^*_1 \in \overline{P}\}} (-1)^{N_{\overline{P}}} \prod_{B^* \in \overline{P}} (\operatorname{th} K^*_{B^*})^{n_{B^*}}$$

visto só contribuirem os termos em que $n_{\tilde{B}^*_1}-1 = 0$, isto é, a aresta $\tilde{B}^*_1$ aparece uma vez no caminho $\overline{P}$ e portanto a multiplicidade do ciclo $\overline{P}$, $\mu_{(\overline{P})}$ é $\mu_{(\overline{P})} = 1$.

Concluimos reescrevendo com o aspecto que pretendemos, visto que $\text{th}\, K_{B^*}^* = e^{-2K_B}$

$$< \sigma_{\overline{c}_i^*} >_{\Lambda^*}(K^*) = \sum_{\overline{P}} (-1)^{N_{\overline{P}}} \prod_{B^* \in \overline{P}} e^{-2K_B\, n_{B^*}} = \sum_{\overline{P}} W_{c_i^*}(\overline{P}) = S_{\overline{c}_1^*}$$

Provamos assim o teorema para o caso em que $b^* = C_1^*$ para qualquer Λ finito.

Se $b^* = C_1^* \cup C_2^*$ é fácil ver que

$$\lim_{\substack{\lambda_1 \to 0 \\ \lambda_2 \to 0}} < \sigma_{\overline{C}_1^*}\, \sigma_{\overline{C}_2^*} >_\Lambda (K^*, \lambda_1, \lambda_2) = S_{\overline{C}_1^*\, \overline{C}_2^*} + S_{\overline{C}_1^*}\, S_{\overline{C}_2^*}$$

em que $S_{\overline{C}_1^*\, \overline{C}_2^*}$ são os pesos dos caminhos que começam numa componente e terminam na outra. A fórmula para o caso geral $b^* = (C_1^*, C_2^*, \ldots, C_\alpha^*)$ é então imediata e o teorema fica assim demonstrado.

A construção usada na demonstração é ilustrada pela figura IV.6.

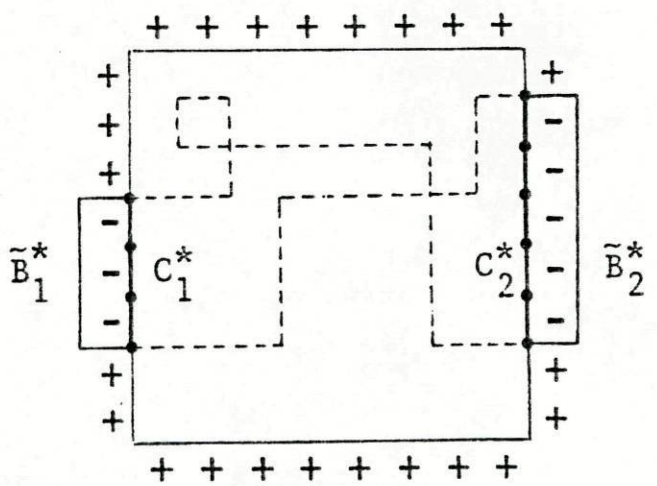


FIGURA IV.6

IV.3 D E S E N V O L V I M E N T O D A T E N S Ã O S U P E R F I C I A L

Seja $Z+-$ como definido em I.10.2, com uma pequena modificação : sendo $x = (x_1, x_2)$

$$\sigma_x = \begin{cases} +1 & \text{se} \quad x \in \partial\Lambda \qquad x_1 < 0 \\ -1 & \text{se} \quad x \in \partial\Lambda \qquad x_2 < 0 \end{cases}$$

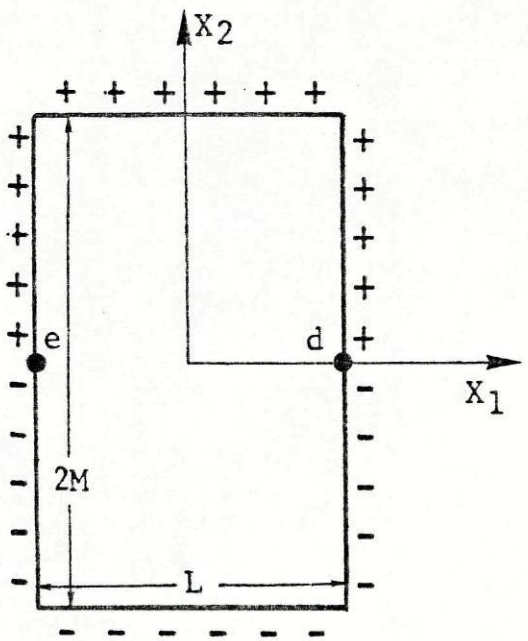
(x tem coordenadas semi-inteiras, isto é, $x_i = z_i + \frac{1}{2}$ com $z_i \in \mathbb{Z}$ e $i = 1,2$).

Definimos tensão superficial τ como usualmente através de

$$e^{-\tau L} = \frac{Z+-}{Z++} = \langle \sigma_d \, \sigma_e \rangle_{\Lambda^*}(K_1^*, K_2^*)$$

em que os nós $\underline{\underline{e}}$ e $\underline{\underline{d}}$ têm as seguintes coordenadas :

$$e = (-\frac{L}{2}, 0) \quad ; \quad d = (\frac{L}{2}, 0)$$



$\Lambda = (L+1, 2M)$

FIGURA IV. 7

Para simplificar tomamos

$$K_B = \begin{cases} K_1 & \text{se } B \text{ horizontal} \\ K_2 & \text{se } B \text{ vertical} \end{cases}$$

Usando o Teorema Sherman generalizado obtemos

$$< \sigma_e , \sigma_d >_{\Lambda^*} (K_1^* K_2^*) = \sum_{P_{e,d}} (-1)^{N_P} e^{-2K_2 n_{2P}} e^{-2K_1 n_{1P}}$$

em que n_{iP} é o número de interacções em P com a direcção i, $i=1,2$; é claro que $n_{2P} \geq L-1$.

Consideramos a tensão superficial $\bar{\tau}$ "grande canónica" introduzida por GALLAVOTTI [43] , e que coincide com τ se $T \leq T_c$ (BRICMONT, LEBOWITZ, PFISTER [64])

$$\Phi = e^{-\bar{\tau}L} = \lim_{M \to \infty} \sum_{i \in \mathbb{Z}} \frac{Z^i_{L,M+-}}{Z_{L,M++}} = \sum_{i \in \mathbb{Z}} < \sigma_e \sigma_{d_i} >_{\Lambda(L,\infty)} \qquad (B)$$

em que $Z^i_{L,M+-}$ é definido com condições fronteira semelhantes a $+-$:

$x = (x_1 , x_2) \in \partial B$

$$\sigma_x = \begin{cases} -1 & \text{se } (x_1 < 0 \text{ e } x_2 < 0) \text{ ou } (x_1 > 0 \text{ e } x_2 < i) \\ +1 & \text{nos outros casos} \end{cases}$$

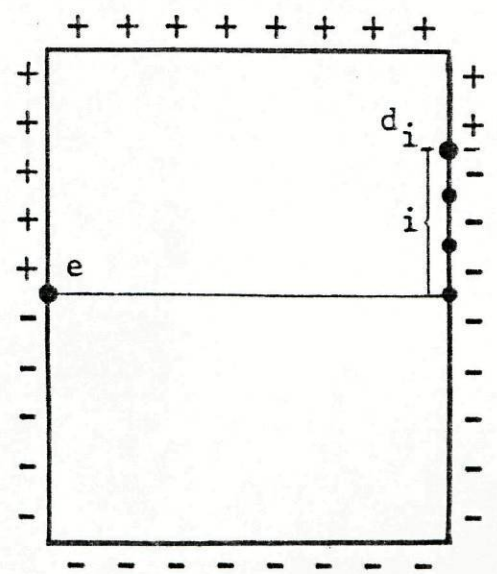


FIGURA IV .8

$e^{-\bar{\tau}L}$ é então a soma sobre todos os caminhos começando em $e = (-\frac{L}{2}, 0)$ e terminando em $d_i = (\frac{L}{2}, i)$ $\quad i \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$.

Para o cilindro $\tilde{\Lambda} = (L, \infty)$ TEMPERLEY conjecturou que "todas as trajectórias com pelo menos quatro arestas nalgum nó não contribuem em Z_i^{+-}". Por isso em dimensão 2 o limite S.O.S. seria exacto e coincidiria com o resultado de Onsager.

A razão pela qual o limite S.O.S. é exacto em dimensão 2 não foi (ainda) obtida usando desigualdades e/ou a equação (B) que foi estabelecida rigorosamente em dimensão dois se $T \leq T_c$. Limitamo-nos aqui a uma curta discussão investigando a equação (B) ; No nosso trabalho [63] , calculamos alguns termos do desenvolvimento.

O valor da tensão superficial τ dado por Onsager é

$$\tau_{\text{Ising}} = 2(K_2 - K_1^*)$$

Fazendo $\Phi' = e^{2K_2 L}$, Φ o limite S.O.S. para a faixa (L, ∞) é "facilmente calculado" (*):

(*) Com D.MERLINI escrevemos "easily computed to be

$$\Phi'_{SOS} = \lim_{K_2 \to \infty} \Phi'(K_1, K_2) = e^{-L \, \ell n \, \text{th} K_1}" \, .$$

no trabalho que conjuntamente realizamos [63] pag. 7 , (10). Os autores não foram capazes de reproduzir o cálculo anteriormente realizado (?) sem o uso de $\tau = \bar{\tau}$, o que não está provado se $T > T_c$, embora tal deva ser verdadeiro (ver BRICMONT, ..., [64] Teorema 3).

$$\Phi'_{SOS} = \lim_{K_2 \to \infty} \Phi'(K_1, K_2) = e^{2K_2 L} e^{-\tau L}$$

$$= e^{2K_2 L} e^{-2K_2 L} e^{2K_1^* L} = e^{-L \ln \text{th } K_1} \qquad (C)$$

visto que $e^{-2K_1^*} = \text{th } K_1$

(o leitor notará que $\Phi'(K_2, K_1)$ é independente de K_2).

Calculamos em seguida $\Phi'(K_1, K_2 = 0)$:

$$\Phi'(K_1, K_2 = 0) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \frac{Z^i{}_{+-}(K_1, 0)}{Z_{++}(K_1, 0)} = 1 + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{\overline{Z}_{+-}}{\overline{Z}_{++}} \right)^i$$

onde $\overline{Z}_{+-}$, respectivamente $\overline{Z}_{++}$, são as funções de partição de modelos de Ising a uma dimensão com comprimento $\underline{L}$, interacção J_1 e condições fronteira $+-$, respectivamente $++$. Estes modelos unidimensionais são independentes (*).

Somando a série geométrica, obtemos :

$$\Phi'(K_1, K_2 = 0) = 1 + 2 \frac{\overline{Z}_{+-}}{\overline{Z}_{++}} \cdot \frac{1}{1 - \left(\frac{\overline{Z}_{+-}}{\overline{Z}_{++}} \right)}$$

Como $\frac{\overline{Z}_{+-}}{\overline{Z}_{++}} = \frac{1 - X^L}{1 + X^L}$ com $X = \text{th } K_1$ obtemos

$$\Phi'(K_1, K_2 = 0) = \frac{1}{K^L} = e^{-L \ln \text{th } K_1} = \Phi'(K_1, K_2 = \infty)$$

(*) Não estão "acoplados".

Definindo $\alpha(K_1, K_2)$ por

$$\alpha(K_1, K_2) = 2K_2 - \bar{\tau}(K_1, K_2) = \frac{1}{L} \log \Phi'(K_1, K_2) \quad ,$$

se fosse possível provar que α é monótona em K_2 , conjuntamente com (B) obtinhamos

$$\tau_{SOS} = \tau_{Ising} = 2(K_2 - K_1^*)$$

obtendo assim o resultado pretendido.

NOTA :

$$\Phi' = e^{2k_2(L-1)} \, e^{-\bar{\tau}L}$$

$$= e^{2K_2(L-1)} \lim_{M \to \infty} \sum_{i \in \mathbb{Z}} \left(\frac{Z^i_{LM+-}}{Z_{LM++}} \right) =$$

$$= e^{2K_2(L-1)} \lim_{M \to \infty} \sum_{i \in \mathbb{Z}} < \sigma_e \, \sigma_{d_i} >_{\Lambda(L,2M)} =$$

$$= e^{2K_2(L-1)} \lim_{M \to \infty} \sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{P_{ed_i}} (-1)^{N_P} e^{-2K_2 n_{2P}} \, e^{-2K_1 n_{1P}}$$

$$\lim_{K_2 \to \infty} \Phi' = \lim_{M \to \infty} \lim_{K_2 \to \infty} \sum_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{P_{ed_i}} (-1)^{N_P} e^{2K_2(L-1-n_{2P})} \, e^{2K_1 n_{1P}} \qquad (*)$$

O único termo não nulo no limite $K_2 = \infty$ é correspondente a $2K_2(L-1-n_{2P}) \leq 0$; isto significa que $n_{2P} = L-1$ visto que $n_{2P} \geq L-1$ e $K_2 > 0$. Portanto os caminhos que contribuem têm $L-1$ interacções $+-$ na

---

(*) A troca de limites significa que fazemos o limite S.O.S. em volume finito.

direcção $x_2^* = x_1$. As trajectórias que contribuem só intersectam cada linha paralela a x_2 uma vez. Não têm portanto quatro arestas num só nó, nem têm, por isso, autocruzamentos. Ver Fig. IV.9

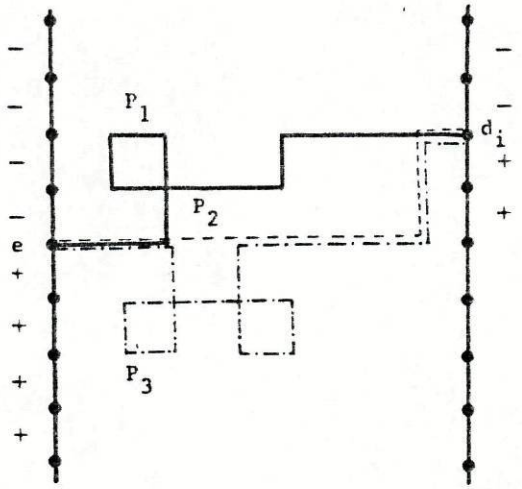
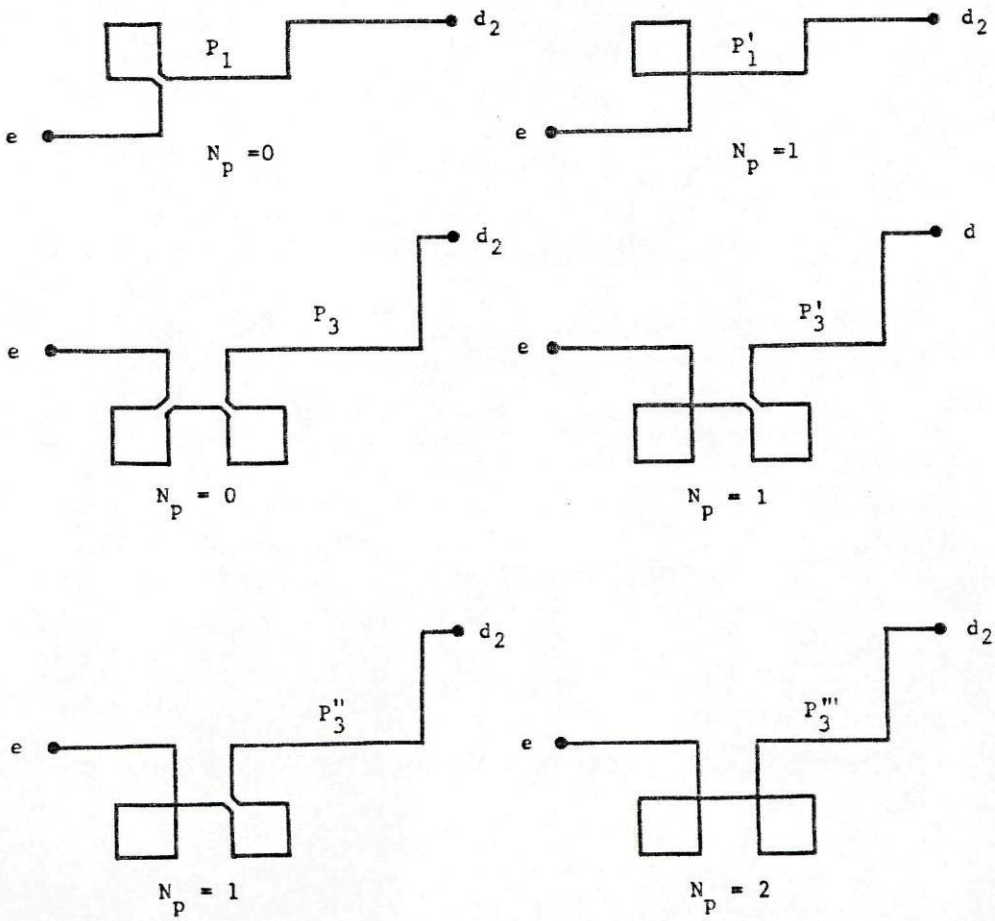


FIG. IV.9
"VERIFICAÇÃO" GRÁFICA DA CONJECTURA DE TEMPERLEY"

3 Caminhos que aparecem no desenvolvimento de $< \sigma_e \sigma_{di} >$. P_1 e P_3 são compensados (não aparecem no limite S.O.S.) :



P_2 aparece no limite S.O.S.

A P E N D I C E

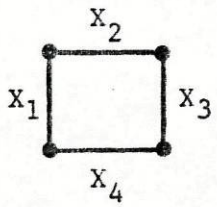
IV - 1

Neste apêndice o autor tenta dar uma ideia intuitiva do Teorema de SHERMAN.

O ponto de partida é o desenvolvimento do logaritmo :

$$\log(1+X) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{X^n}{n}$$

1 - Supomos a rede reduzida a uma "plaquette"



$$X_i = e^{K_i}$$

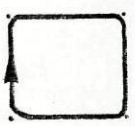
$$\prod_{i=1}^{4} X_i = C$$

A função de partição é dada

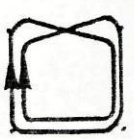
$$Z = 1 + C = e^{\log(1+C)} = \exp\left(C - \frac{C^2}{2} + \frac{C^3}{3} + \ldots\right)$$

(1.1) (1.2) (1.3) ...

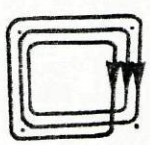
1.1 $N_P = 0$; $\mu_P = 1$



1.2 $N_P = 1$; $\mu_P = 2$



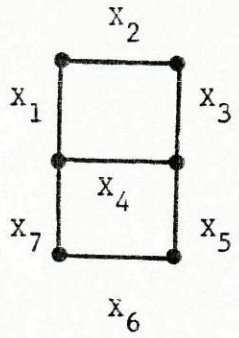
1.3 $N_P = 2$; $\mu_P = 3$



...

(N_P - nº de auto-cruzamentos; μ_P = multiplicidade)

2 - Rede com duas "plaquettes"

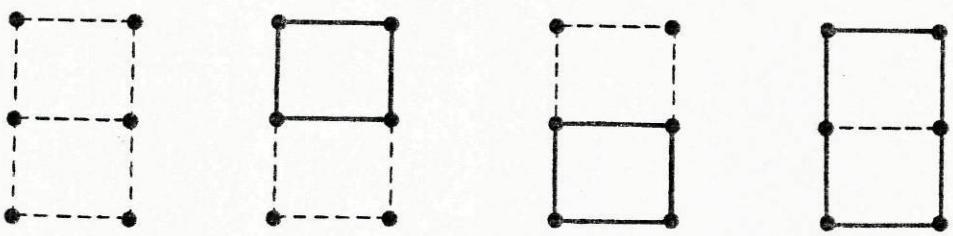


$$X_i = e^{K_i}$$

$$\prod_{i=1}^{3} X_i = C_1$$

$$\prod_{i=5}^{7} X_i = C_2$$

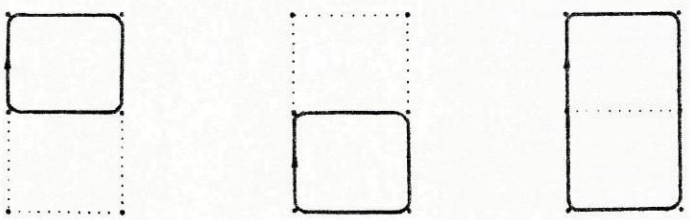
$$Z = 1 + C_1 X_4 + C_2 X_4 + C_1 C_2$$



$$Z = \exp\left(\Sigma\,(-1)^{n+1}\,\frac{(C_1 X_4 + C_2 X_4 + C_1 C_2)^n}{n}\right)$$

2.1

n = 1



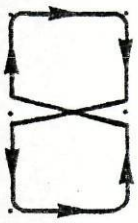
$C_1 X_4$ $C_2 X_4$ $C_1 C_2$

2.2

n = 2 Os quadrados perfeitos são idênticos a 1.2

$$-\frac{(C_1 X_4)^2}{2} \; ; \; -\frac{(C_2 X_4)^2}{2} \; ; \; -\frac{(C_1 C_2)^2}{2} \; .$$

Os termos cruzados



$-C_1 X_4 C_2 X_4$

$N_P = \mu_P = 1$

$-C_1 X_4 C_1 C_2$

$N_P = \mu_P = 1$

$-C_2 X_4 C_1 C_2$

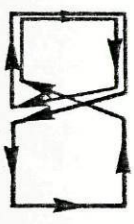
$N_P = \mu_P = 1$

2.3

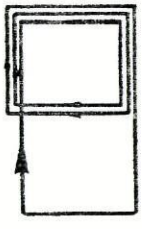
n = 3 Os cubos perfeitos são idênticos a 1.3

$$\left(\frac{(C_1 X_4)^3}{3} \quad \frac{(C_2 X_4)^3}{3} \quad \frac{(C_1 C_2)^3}{3} \right)$$

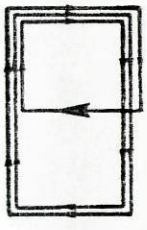
2.3.1



$(C_1 X_4)^2 (C_2 X_4)$



$(C_1 X_4)^2 (C_1 C_2)$



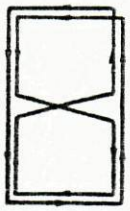
$(C_1 C_2)^2 (C_1 X_4)$

estas trajectórias são idênticas às correspondentes a $(C_2 X_4)^2 (C_1 X_4)$, $(C_2 X_4)^2 (C_1 C_2)$ e $(C_1 C_2)^2 (C_2 X_4)$.

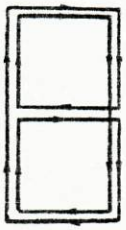
2.4 Falta-nos analizar o termo

$$2(C_1 X_4)\ (C_2 X_4)\ (C_1 C_2)$$

O coeficiente $\underline{2}$ não está previsto no Teorema de Sherman. O aparecimento deste coeficiente significa que há, por exemplo, duas trajectórias não periódicas com o mesmo peso :



e



De forma ordenada designando as arestas pelos pesos

$(X_4\ C_1\ \ X_4\ C_2\ C_1\ C_2)$ e $X_4\ C_2\ C_1\ X_4\ \ C_1\ C_2$

etc.

A P E N D I C E

IV - 2

O MODELO S.O.S. (Solid - on - Solid)

Seja $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$ um volume finito. A cada nó $n \in \Lambda$ associamos uma variável $h_n \in \mathbb{Z}$ que representa o desvio (local) duma interface relativamente a um plano de referência.

Definimos o Hamiltoneano H_Λ por :

$$H_\Lambda = \varepsilon \sum_{\substack{m-n \in \Delta \\ m,n \in \Lambda}} |h_n - h_m|^\alpha$$

com $\varepsilon , \alpha > 0$ (usualmente $\alpha = 1$).

Uma forma alternativa :

$$H_\Lambda = -\varepsilon \sum_{\substack{i-j \in \Delta \\ i,j \in \mathbb{Z}^{d+1}}} S_i S_j + V(S_i)$$

com $S_i = \pm 1$, correspondendo ao nó $i \in \mathbb{Z}^d$ estar ocupado (+1) ou vazio (-1).

O potencial $V(S_i)$ é tal que impede a existência de estruturas "penduradas", isto é $V(\{S_i\}) = +\infty$ se $\exists_m \exists_{h_m, h'_m}$ tal que

$$h_m > h'_m \qquad S_{(m,h_m)} = 1 \text{ e } S_{(m,h'_m)} = -1 .$$

Esta condição designa-se por restrição S.O.S. Ver figura 1.

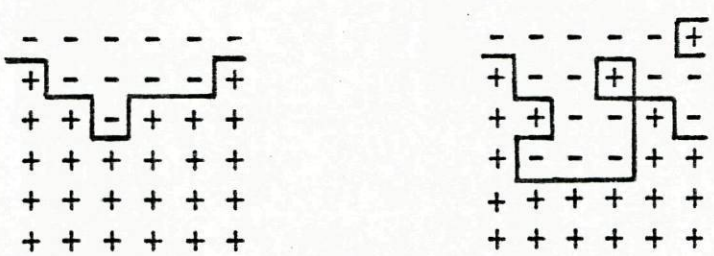


Figura 1

Comfiguração com probabilidade positiva

Comfiguração com probabilidade nula

Se $V \equiv 0$ obtemos o modelo de Ising em dimensão $d+1$.

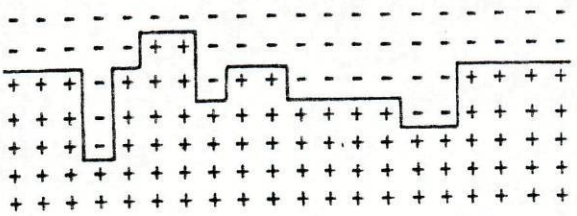
O hamiltoneano (se $\alpha = 1$) pode ser redefinido de forma a ser proporcional à interface, e verifica as condições exigidas para existência de estados de equilíbrio, FRÖHLICH, PFISTER, SPENCER [139] .

O modelo descreve a interface do limite dum modelo de Ising a (d+1) - dimensões com condições fronteira (+ -) quando $J_z \to \infty$ mantendo fixas as interacções nas outras direcções (limite S.O.S.).

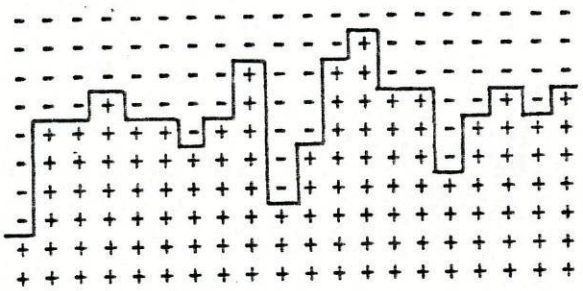
Figura 2

Do ponto de vista físico este modelo pode servir para a descrição do crescimento cristalino (MÜLLER - KRUMBHAAR [137]) : formação de novas camadas num cristal a partir duma solução ou por sublimação dum vapor (A restrição S.O.S não dá uma descrição realística nas proximidades do ponto de fusão).

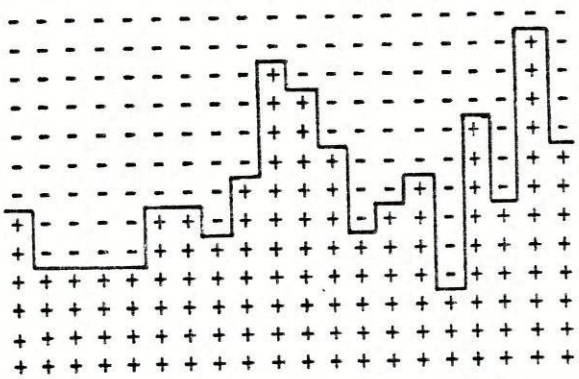
A interface a baixa temperatura é muito rugosa e a alta temperatura lisa. Ver fig. 3.



3a) baixa temperatura : $\beta J = 0,3$



3b) temperatura "crítica" : $\beta J = 0,5 \simeq 0,44$



3c) alta temperatura : $\beta J = 1,5$

FIGURA 3

Simulação monte-carlo dum modelo S.O.S. (condições fronteira periódicas) :

Referimos finalmente alguns resultados relativamente a este modelo :

1 - $T_c(d) = \infty \qquad \forall_d$

2 - $T_R(2) = 0$

3 - $0 < T_R(3) < \infty$

4 - $T_R(d) = \infty \qquad \forall_{d \geq 4}$

Em BRICMONT, FONTAINE, LEBOWITZ [106] e FRÖHLICH, PFISTER, SPENCER [139] o leitor encontra complementos e bibliografia.-

REFERÊNCIAS E BIBLIOGRAFIA

"Deux dangers ménacent le monde :
l'ordre et le désordre"

Paul Valery

NOTA : 1 : Quando um "pré-print" não tem data escrevemos $\geq$ seguido da data de referência mais recente nele inserida.

NOTA : 2 : Para alguns textos históricos não indicamos o título por o desconhecermos ; isto acontece entre outros para alguns textos em russo, para os quais transcrevemos o título em Inglês.

[105] D.B. ABRAHAM, P. REED "INTERFACE PROFILE OF THE ISING FERROMAGNET IN TWO DIMENSIONS"
Comm. Math. Phys. 49 , 35 (1976)

[98] M. AIZENMAN
Comm. Math. Phys. 73 , 83 (1980)

[134] P.S. ALEXANDROV "INTRODUCTION À LA THEORIE HOMOLOGIQUE DE LA DIMENSION ET LA TOPOLOGIE COMBINATOIRE" Ed. Mir 1977.

[124] P.W. ANDERSON , G. YUVAL
J. Phys. C4 , 607 (1971)

[110] P. BAK "COMMENSURATE PHASES, INCOMMENSURATE PHASES AND THE DEVIL'S STAIRCASE"
Rep. Prog. Phys. 45 , 587 - 629 (1982)

[6] R. BALIAN "DU MICROSCOPIQUE AU MACROSCOPIQUE - COURS DE PHYSIQUE STATISTIQUE DE L'ECOLE POLITECNIQUE"
Ed. Ellipses Paris 1982(?)

[135] G. BAXTER "LOCAL WEIGHTS WHICH DETERMINE AREA, AND THE ISING MODEL"
J. Math. Phys. 8 , 3 , 399 - 405 (1967)

[50] J. BELLISARD "A L'ASSAUT DU POINT CRITIQUE, 1920 - 1976" Conferência dada em 28 de Setembro de 1976 no "Rencontre des Embiez - - Societé Française de Physique , Pré - print 76/855 CPT - CNRS Marseille.

[141] J. BRICMONT , J.R. FONTAINE , J. LEBOWITZ "SURFACE TENSION, PERCOLATION AND ROUGHTENING" Pré - print (09) Université Catholique de Louvain (1982)

[131] ———— , ———— , L.J. LANDAU "ON THE UNIQUENESS OF THE EQUILIBRIUM STATE FOR PLANE ROTATORS" Comm. Math. Phys. 56 , 281 - 296 (1977)

[106] ———— , J.L. LEBOWITZ , CH. PFISTER "ON THE LOCAL STRUCTURE OF THE PHASE SEPARATION LINE IN THE TWO - DIMENSIONAL ISING MODEL" J. Stat. Phys. 36 , 313 (1981).

[64] ———— , ———— , ———— "ON THE SURFACE TENSION OF LATTICE SYSTEMS" Annals of the New York Ac. of Sciences Vol. 337 , 214 , (1980)

[117] ———— , ———— , A. MESSAGER "FIRST - ORDER PHASE TRANSITION IN POTTS AND ISING SYSTEMS" Phys. Letters 95A, 3, 4 , 169 - 172 (1983).

[65] P.N. BURGOYNE "REMARKS ON THE COMBINATORIAL APPROACH TO THE ISING PROBLEM" Journal of Mathematical Physics 4 , 1320 (1963)

[44] F.J.L.C. CALHEIROS "SYSTEMES DE SPIN VECTORIEL : EXISTENCE D'UNE TRANSITION DE PHASE POUR LE MODELE D'HEISENBERG ANTIFERROMAGNETIQUE ET ANISOTROPE"
UNIVERSITÉ de Provence 1980.

[45] ———————— "THE EXISTENCE OF A PHASE TRANSITION IN CLASSICAL ANTIFERROMAGNETIC MODELS"
Journal of Statistical Physics Vol 31 , Nº 1 , 141 - 154 (1983).

[63] ———————— , D. MERLINI "A REFINEMENT OF THE SHERMAN THEOREM ON PATH FOR THE TWO - DIMENSIONAL ISING MODEL"
Prê-print RUHR - UNIVERSITAET Bochum (1983).

[114] M. CASSANDRO , E. OLIVIERI , A. PELLIGRINOTTI , E. PRESSUTI "EXISTENCE AND UNIQUENESS OF DLR - MEASURES FOR UNBOUNDED SPIN SYSTEMS"
Z. Wahrsheinlich Keitsteorie , V 41 , 313 - 336 (1978).

[77] R.L. DOBRUSHIN "EXISTENCE OF A PHASE TRANSITION IN TWO - AND THREE - DIMENSIONAL LATTICE MODELS"
Teor. Veroyatn. Primen 10 , 209 - 230 (1965).

[42] ———————— " "
Dokl. Acad. Nauk. SSSR 160 , 1046 (1965).
Tradução em Inglês Sov. Phys. Dokl 10 , 111 (1965)

[23] ———————— "THE DESCRIPTION OF A RANDON FIELD BY MEANS OF CONDITIONAL PROBABILITIES AND CONDITIONS OF ITS REGULARITY"
Teor. Veroyatn. Primen. 2 , 201 - 229 (1968)
Tradução em Inglês de H. Folguera Tr. Prob. Appl. 2 , 197 - 224 (1968).

[24] ———————— "GIBBSIAN RANDON FIELDS FOR LATTICE SYSTEMS WITH PAIRWISE INTERACTION"
Funct. Analysis Appl. 2 , 4 , 31 - 43 (1968)
Trad. em Inglês 2 , 292 - 301 (1968)

[25] ———————— "THE PROBLEM OF UNIQUENESS OF A GIBBSIAN RANDON FIELD AND THE PROBLEM OF PHASE TRANSITIONS"
Funct. Analysis Appl. 2 , 4 , 44 - 57 (1968)

[26] ———————— "GIBBSIAN RANDON FIELDS. THE GENERAL CASE"
Funct. Analysis Appl. 3 , 1 , 27 - 35 (1969)
Trad. em Inglês 3 , 22 - 28 (1969)

[52] ———————— "DEFINITION OF RANDON VARIABLES BY CONDITIONAL DISTRIBUTIONS"
Teor. Veroyatn. Primen. 15 , 469 - 497 (1970)

[102] ———————— "GIBBSIAN STATE WHICH DESCRIBES CO - EXISTENCE OF PHASES FOR A THREE - DIMENSIONAL ISING - MODEL"
Teor. Veroyatn. Primen. 17 , 612 - 639 (1972)

[37] ———————— , V.M. GERTSIK "GIBBS STATES IN A LATTICE MODEL WITH NEXT NEIGHBOUR INTERATION"
Funct. Anal. Applic. Vol 8 , Nº 3 , 12 - 25 (1974)

[58] ———————— , S.B. SHLOSMAN "ABSENCE OF BREAKDOWN OF CONTINOUS SIMMETRY IN TWO DIMENSIONAL MODELS OF STATISTICAL PHYSICS"
Communications Mathematical Physics , 42 , 31 - 40 (1975).

[113] ———————— , ———————— "PHASES CORRESPONDING TO THE LOCAL ENERGY MINIMA"
Pré-print Institute of the Information transmission Problems Ac. of Sciences URSS > 1980.

[115] H. DOSS , O. ROGER "PROCESSUS DE DIFUSION ASSOCIÉS AUX MESURES DE GIBBS"
Z. Wahr. Vol 46 , 107 - 124 (1973).

[121] F. DYSON "EXISTENCE OF A PHASE TRANSITION IN A ONE - DIMENSIONAL ISING FERROMAGNET"
Comm. Math. Phys. 12 , 91 - 107 (1969)

[127] ———— "NON - EXISTENCE OF SPONTANEOUS MAGNETIZATION IN ONE - - DIMENSIONAL ISING FERROMAGNET"
Comm. Math. Phys. 12 , 212 - 215 (1969).

[122] ———— "AN ISING FERROMAGNET WITH DISCONTINUOUS LONG - RANGE ORDER"
Comm. Math. Phys. 21 , 269 - 283 (1971).

[107] R. ELLIOT "PHENOMENOLOGICAL DISCUSSION OF MAGNETIC ORDERING IN THE HEAVY RARE - EARTH METALS"
Phys. Rev. 124 , 346 (1961).

[31] M.E. FISHER "THE FREE ENERGY OF A MACROSCOPIC SYSTEM"
ARCH. RAT. Mech. Anal. 17 , 377 - 410 (1964)

[86] M.E. FISHER " "
Rep. Prog. Theor. Phys. 30 , 615 (1967)

[111] ———————— , W. SELKE "INFINITELY MANY COMMENSURATE PHASES IN A SIMPLE ISING MODEL"
Phys. Rev. Letters 44 , 23 , 1502 - 1505 (1980)

[49] J. FRÖHLICH , E. LIEB " ."
Phys. Rev Lett 38 , 440 (1977)
detalhes e correcções em :
J. FRÖHLICH , E. LIEB "PHASE TRANSITIONS IN ANISOTROPIC LATTICE SPIN SYSTEMS"
Comm. Math. Phys. 60 , 233 (1978).

[112] ———————— , R. ISRAEL , E. LIEB , B. SIMON "PHASE TRANSITIONS AND REFLECTION POSITIVITY - I: GENERAL THEORY AND LONG RANGE LATTICE MODELS"
Comm. Math. Phys. 62 , 1 - 34 (1978).

[139] J. FRÖHLICH , CH. - E. PFISTER , T. SPENCER "IN THE STATISTICAL MECHANICS OF SURFACES"
Pré-print IHES 20/1982.

[126] ———————— , TH. SPENCER "THE PHASE TRANSITION IN THE ONE - DIMENSIONAL ISING MODEL WITH $1/r^2$ INTERACTION ENERGY"
Pré-print 51 Institut des Hautes Etudes Scientifiques (1981).

[130] ———————— , B. SIMON , TH. SPENCER "INFRARED BOUNDS, PHASE TRANSITIONS AND CONTINUOUS SYMMETRY BREAKING"
Comm. Math. Phys. 50 , 79 - 85 (1976).

[43] G. GALLAVOTTI "THE PHASE SEPARATION LINE IN THE TWO - DIMENSIONAL ISING MODEL"
Comm. Math. Phys. 27 , 103 (1972).

[33] ———————— , S. MIRACLE - SOLE "A VARIATIONAL PRINCIPLE FOR THE EQUILIBRIUM OF HARD SPHERE SYSTEMS"
Ann. Inst. H. Poincaré , sect A , 8 - 287 - 299 (1968).

[53] ———————— , ———————— "EQUILIBRIUM STATES OF THE ISING MODEL IN THE TWO PHASE REGION"
Phys. Rev. 5B , 2555.

[101] ———————— , ———————— , A. MARTIN - LÖF "SOME PROBLEMS CONNECTED WITH THE DESCRIPTION OF COEXISTING PHASES AT LOW TEMPERATURE IN THE ISING MODEL"
Lecture Notes of the Battelle - Seattle Summer Recontres in Mathematics and Physics Ed. Springer , 162 - 204 (1971).

[30] Y. GEFEN , B. MANDELBROT , A. AHARONY "CRITICAL PHENOMENA ON FRACTALS"
Pré-print Harvard s/data (≥ 1979).

[11] J.W. GIBBS - "GRAFICAL METHODS IN THE THERMODYNAMICS OF FLUIDS"
Transactions of Connecticut Academy II (1873) 309 - 342 , Collected works I , 1 - 32.
- "A METHOD OF GEOMETRICAL REPRESENTATION OF THERMODYNAMIC PROPERTIES OF SUBSTANCES BY MEAN OF SURFACES"
T.A.C. II (1873) 382 - 404 Coll. Works 33 - 54.
- "ON THE EQUILIBRIUM OF HETEROGENEOUS SUBSTANCES"
T.A.C. III (1875 - 1876) 108 - 248 , (1877 - 1878) 343 - 524 , Collected Works I , 55 - 353.

[62] J. GINIBRE "ON SOME RECENT WORK OF DOBRUSHIN" em "SYSTÈMES À UN NOMBRE INFINI DE DEGRÉS DE LIBERTÉ"
Ed. CNRS 1970 , pag 163 - 175.

[73] M. GLASSER "EXACT PARTITION FUNCTION FOR THE TWO - DIMENSIONAL ISING MODEL"

Am.. J. of Phys. 38 , 1033 (1970).

[48] J. GLIMM , A. JAFFE , T. SPENCER "PHASE TRANSITIONS FOR $\emptyset_2^4$ QUANTUM FIELDS"

Comm. Math. Phys. 45 , 203 - 216 (1973)

[91] F. GUERRA , L. ROSEN , B. SIMON "BOSE FIELD THEORY AS CLASSICAL STATISTICAL MECHANICS" em "CONSTRUCTIVE QUANTUM FIELD THEORY"

Lecture Notes in Physics nº 25 , Springer 1973 , pag. 243 - 297.

[28] I. GUIKMAN , A. SKOROKHOD "INTRODUCTION À LA THÉORIE DES PROCESSUS ALÉATOIRES"

Ed. Mir 1980.

[1] R.B. GRIFFITHS "RIGUROUS RESULTS AND THEOREMS" em "PHASE TRANSITIONS AND CRITICAL PHENOMENA"

DOMB & GREEN Eds. Sect. V , 55 - 70 (1972).

[41] ———————— "PEIERLS PROOF OF SPONTANEOUS MAGNETIZATION IN A TWO - DIMENSIONAL ISING FERROMAGNET"

Phys. Rev. 136A , 437 (1964).

[66] C. GRUBER , EPFL - Lausanne , Cour AVCP , Verbier (Vd) 1972.

[67] ———————— , A. HINTERMANN , D. MERLINI "GROUP ANALYSIS OF CLASSICAL LATTICE SYSTEMS"

Lecture Notes in Physics Nº 60 Ed. Springer (1977).

[85] ———— , ———— , A. MESSAGER , S. MIRACLE - SOLE "ON THE UNIQUENESS OF THE INVARIANT EQUILIBRIUM STATE AND SURFACE TENSION"
Comm. Math. Phys. 56 , 147 - 159 (1977).

[12] P. HALMOS "MESURE THEORY"
Ed. Springer Verlag (1974).

[5] W. HEINSENBERG ,
Z. Physik 29 , 619 (1928).

[97] Y. HIGUCHI "ON THE ABSENCE OF NON TRANSLATION INVARIANT GIBBS STATES FOR THE TWO DIMENSIONAL ISING MODEL"
27 , Randon Fields , Esztergom (HUNGARY) , 517 - 533 (1979).

[118] A. HINTERMANN , H. KUNZ , F.Y. WU "EXACT RESULTS FOR THE POTTS MODEL IN TWO DIMENSIONS"
J. Stat. Phys. 19 , 623 - 632 (1978).

[3] E. ISING "BEITRAG ZUR THÉORIE DES FERROMAGNETISMUS"
Zeits. fur Phys. 31 , 253 - 258 (1925).

[22] R. ISRAEL "CONVEXITY IN THE THEORY OF LATTICE GASES"
Ed. Princeton University Press , New Jersey (1979).

[136] M. KAC , J. WARD "COMBINATORIAL SOLUTION OF THE TWO DIMENSIONAL ISING MODEL"
Phys. Rev. 88 , 1422 (1952).

[81] B. KAUFMAN "CRYSTAL STATISTICS II. PARTITION FUNCTION EVALUATED BY SPINOR ANALYSIS"
Phys. Rev. 76 , 1232 (1949).

[82] ———— , L. ONSAGER "CRYSTAL STATISTICS III. SHORT RANGE ORDER IN A BINARY ISING LATTICE"

Phys. Rev. 76 , 1244 (1949).

[116] R. KOTECKY , S.B. SHLOSMAN "FIRST - ORDER PHASE TRANSITIONS IN LARGE ENTROPY LATTICE MODELS"

Comm. Math. Phys. 83 , 493 - 515 (1982).

[75] H.A. KRAMERS , G.H. WANNIER "STATISTICS OF THE TWO DIMENSIONAL FERROMAGNET"

Part I Phys. Rev. 60 , 252 (1941)

Part II Phys. Rev. 60 , 263 (1941).

[9] E. KRÖNER "STATISTICAL CONTINUUM MECHANICS"

Ed. Springer Verlag (1972).

[128] H. KUNZ , CH.-E. PFISTER "FIRST ORDER PHASE TRANSITIONS IN THE PLANE ROTATOR FERROMAGNETIC MODEL IN TWO - - DIMENSIONS"

Comm. Math. Phys. 46 , 245 - 251 (1976).

[129] ——— , ———— , P.A. VUILLERMOT "INEQUALITIES FOR SOME CLASSICAL SPIN VECTOR MODELS"

J. Phys. A , 9 , 1673 (1976).

[16] K. KURATOWSKI "INTRODUCTION TO SET THEORY AND TOPOLOGY"

Ed. Pergamon (1972).

[119] L. LAANAIT , A. MESSAGER , J. RUIZ "PHASES COEXISTENCE AND SURFACE TENSIONS FOR THE POTTS MODEL"

Pré-print 1609 - CPT - Marseille (1984).

[132] L. LANDAU , E. LIFCHITZ "PHYSIQUE STATISTIQUE"
Ed. Mir 1967.

[17] O. LANFORD "TIME EVOLUTION OF LARGE CLASSICAL SYSTEMS"
Lecture Notes in Physics nº 38 , Ed. Springer Verlag (1975).

[21] ———— , D. RUELLE "OBSERVABLES AT INFINITY AND STATES WITH SHORT RANGE CORRELATIONS IN STATISTICAL MECHANICS"
Comm. Math. Phys. 13 , 194 - 215 (1969).

[96] J. LEBOWITZ "BOUNDS ON THE CORRELATIONS AND ANALYCITY PROPERTIES OF FERROMAGNETIC ISING SPIN SYSTEMS"
Comm. Math. Phys. 28 , 313 - 321 (1972).

[93] ———— , A. MARTIN - LÖF "ON THE UNIQUENESS OF THE EQUILIBRIUM STATE FOR ISING SPIN SYSTEMS"
Comm. Math. Phys. 25 , 276 - 282 (1972).

[104] ———— , CH. - E. PFISTER "SURFACE TENSION AND PHASE COEXISTENCE"
Phys. Rev. Lett. 46 , 1031 (1981).

[15] ———— , E. PRESUTTI "STATISTICAL MECHANICS OF SYSTEMS WITH UNBOUNDED SPINS"
Comm. Math. Phys. 50 , 195 - 218 (1976).

[83] T.D. LEE , C.N. YANG "STATISTICAL THEORY OF EQUATIONS OF STATE AND PHASE TRANSITIONS II. LATTICE GAS AND ISING MODEL"
Phys. Rev. 87 , 410 - 419 (1952).

[51] W. LENZ , " ."
Z. Physik 21 , 613 (1920).

[36] E. LIEB "THE CLASSICAL LIMIT OF QUANTUM SPIN SYSTEMS"
Comm. Math. Phys. 31 , 327 (1973).

[39] ——— "NEW PROOFS IN LONG RANGE ORDER"
Lecture Notes in Physics - "Proceedings of the International Conference on Mathematical Problems in Theoretical Physics" Roma (1977) Ed. Springer.

[38] V. MALYSHEV "PHASE TRANSITIONS IN CLASSICAL HEISENBERG FERROMAGNETS WITH ARBITRARY PARAMETER OF ANISOTROPY"
Comm. Math. Phys. 40 , 75 - 82 (1975).

[29] B. MANDELBROT "THE FRACTAL GEOMETRY OF NATURE"
Ed. Freeman N.York (1983).

[18] C. MARCHIORO , A. PELLEGRINOTTI , E. PRESSUTTI "EVOLUTION FOR ν - DIMENSIONAL STATISTICAL MECHANICS"
Comm. Math. Phys. 40 , 175 - 186 (1975).

[95] D.G. MARTIROSYAN "TO THE PROBLEM OF AN UPPER BOUND FOR THE NUMBERS OF PERIODICAL GIBBS STATES FOR LATTICE GAS MODELS"
UPS. Mat. Nauk. 30 , Nº 6 , 181 - 182 (1975).

[2] B. Mc. COY , T.T. WU "THE TWO DIMENSIONAL ISING MODEL"
Ed. Harvard University Press , Cambridge , Mass. (1973).

[87] ——— , ——— "THEORY OF TOEPLITZ DETERMINANTS AND THE SPIN CORRELATION FUNCTIONS OF THE TWO DIMENSIONAL ISING MODEL"
IV - Phys. Rev. 162 , 436 (1967)
V - Phys. Rev. 174 , 546 (1968).

[88] ———— , ——— - "RANDOM IMPURITIES AS THE CAUSE OF SMOOTH SPECIFIC HEATS NEAR THE CRITICAL TEMPERATURE"
Phys. Rev. Lett. 21 , 549 (1968).
- "THEORY OF A TWO DIMENSIONAL ISING MODEL WITH RANDOM IMPURITIES. I. THERMODYNAMICS"
Phys. Rev. 176 , 631 (1968).

[68] D. MERLINI "BOUNDARY CONDITIONS AND CLUSTER PROPERTY IN TWO - DIMENSIONAL ISING FERROMAGNETS"
J. of Stat. Phys. 21 , 6 , 739 - (1979).

[69] ———— "UNIQUENESS OF THE EVEN CORRELATION FUNCTIONS FOR THE TWO DIMENSIONAL ISING MODEL IN CYLINDRICAL GEOMETRY AT LOW TEMPERATURE"
Lett. Nuovo Cimento 30 , 474 (1981).

[59] N.D. MERMIN "ABSENCE OF ORDERING IN CERTAIN CLASSICAL SYSTEMS"
Journ. Math. Phys. 8 , 5 , 1061 - 1064 (1967).

———— , H. WAGNER "ABSENCE OF FERROMAGNETISM OR ANTIFERROMAGNETISM IN ONE - OR TWO - DIMENSIONAL ISOTROPIC HEISENBERG MODELS"
Phys. Rev. Letters 17 , 1133 - 1136 (1966).

[99] A. MESSAGER , S. MIRACLE - SOLE "EQUILIBRIUM STATES OF THE TWO - - DIMENSIONAL ISING MODEL IN THE TWO - PHASE REGION"
Comm. Math. Phys. 40 , 187 - 196 (1975).

[108] ———— , ———— "CORRELATION FUNCTIONS AND BOUNDARY CONDITIONS IN THE ISING FERROMAGNET"
J. Stat. Phys. 17 , 245 - 262 (1977).

[60] S. MIRACLE - SOLE "FORMULATION VARIATIONNELLE DE LA THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE DES SYSTÈMES INFINIS"
Thèse Univ. Aix - Marseille (1968).

[55] ———————— "FONDEMENTS MATHEMATIQUES DE LA MECÂNIQUE STATISTIQUE"
Depto. Física Teórica GIFT - Univ. Zaragoza.

[100] ———————— "THEOREMS ON PHASE TRANSITION WITH A TREATMENT FOR THE ISING MODEL" em
"CRITICAL PHENOMENA" Lecture Notes in Physics Nº 54
Ed. Springer Verlag 1976 , 189 - 214.

[76] E.W. MONTROLL "STATISTICAL MECHANICS OF NEAREST NEIGHBOUR SYSTEMS"
J. Chem. Phys. 9 , 707 (1941).

[137] H. MULLER - KRUMBHAAR "MONTE CARLO SIMULATION OF CRYSTAL GROWTH" em
K. Binder "MONTE CARLO METHODS IN STATISTICAL PHYSICS"
Ed. Springer 1979.

[47] E. NELSON "PROBABILITY THEORY AND EUCLIDEAN QUANTUM FIELD THEORY" em
"CONSTRUCTIVE QUANTUM FIELD THEORY"
(Ed. G. Velo , A. Wightman) Lecture Notes in Physics
Nº 25 , Ed. Springer (1973).

[70] G. NEWELL , E.W. MONTROLL "ON THE THEORY OF ISING MODEL OF FERROMAGNETISM"
Rev. Mod. Phys. 25 , 353 - 389 (1953).

[78] L. ONSAGER "CRYSTAL STATISTICS I - A TWO DIMENSIONAL MODEL WITH AN ORDER - DESORDER TRANSITION"
Phys. Rev. 65 , 117 (1944).

[79] ———— " . "

Suppl. Nuovo Cimento 6 , 61 (1949).

[46] K. OSTERWALDER , R. SCHRADER - " . "

Helv. Phys. Acta 46 , 277 (1973)

- "AXIOMS FOR EUCLIDEAN GREEN'S FUNCTIONS"

Comm. Math. Phys. 31 , 83 - 112 (1973)

[40] R. PEIERLS "ON ISING'S MODEL OF FERROMAGNETISM"

Proc. Cambridge Philos. Soc. 36 , 477 - 481 (1936).

[138] J.K. PERCUS "COMBINATORIAL METHODS"

Ed. Springer 1971.

[94] S.A. PIROGOV , YA.G. SINAI "PHASE DIAGRAMS OF CLASSICAL LATTICE SYSTEMS"

I - Teor. Math. Fiz. 25 , 358 (1975)

II - Teor. Math. Fiz. 26 , 61 (1976).

[57] CH - E. PFISTER "ON THE SYMMETRY OF GIBBS STATES IN TWO DIMENSIONAL LATTICE SYSTEMS"

Comm. Math. Phys. 79 , 181 (1981).

[13] R.B. POTTS " . "

- Proc. Camb. Phil. Soc. 48 , 106 - 9 (1952)

- Ph.D Thesis (1951) University of Oxford.

[19] CH. PRESTON "RANDOM FIELDS"

Lecture Notes in Mathematics Nº 534 , Ed. Springer (1976).

[20] ———— "GIBBS STATES ON COUNTABLE SETS"

Ed. Cambridge University Press 1974.

[35] M. REED , B. SIMON "MATHEMATICAL METHODS OF MODERN MATHEMATIC PHYSICS - Vol I : FUNCTIONAL ANALYSIS"
Ed. Academic Press (1972).

[7] F. RODDIER "DISTRIBUTIONS ET TRANSFORMÉE DE FOURIER"
Ed. Ediscience 1971.

[123] J.B. ROGERS , C.J. THOMPSON "ABSENCE OF LONG-RANGE ORDER IN ONE--DIMENSIONAL SPIN SYSTEMS"
J. Stat. Phys. 25 , 4 , 669-678 (1981).

[4] D. RUELLE "STATISTICAL MECHANICS - RIGOROUS RESULTS"
Ed. W.A. Benjamin (1969).

[92] ———— "ON THE USE OF SMALL EXTERNAL FIELDS IN THE PROBLEM OF SYMMETRY BREAKDOWN IN STATISTICAL MECHANICS"
Ann. of Phys. 69 , 364-374 (1972)

[27] ———— "SUPERSTABLE INTERACTIONS IN STATISTICAL MECHANICS"
Comm. Math. Phys. 18 , 127-159 (1970).

[34] ———— "A VARIATIONAL FORMULATION OF EQUILIBRIUM STATISTICAL MECHANICS AND THE GIBBS PHASE RULE"
Comm. Math. Phys. 5 , 324-329 (1967).

[133] E. SCHRÖDINGER "STATISTICAL THERMODYNAMICS"
Ed. Cambridge University Press 1962.

[89] J. SCHWINGER "ON THE EUCLIDEAN STRUCTURE OF RELATIVISTIC FIELD THEORY"
Proc. Nat. Acad. Sci. U.S. 44 , 956-965 (1958).

[71] S. SHERMAN "COMBINATORIAL ASPECTS OF THE ISING MODEL FOR FERROMAGNETISM : I. A CONJECTURE OF FEYNMAN ON PATHS AND GRAPHS"
J. Math. Phys. 1 , 3 , 202-217 (1960).

[72] ———— "ADDENDUM: COMBINATORIAL ... "
J. Math. Phys. 4 , 9 , 1213 (1963).

[56] YA.G. SINAI "THEORY OF PHASE TRANSITIONS - RIGOROUS RESULTS"
Ed. Pergamon (1982).

[90] B. SIMON "THE $P(\Phi)_2$ EUCLIDEAN (QUANTUM) FIELD THEORY"
Ed. Princeton University Press (1974).

[74] ———— , A.D. SOKAL "RIGOROUS ENTROPY - ENERGY ARGUMENTS"
J. Stat. Phys. 25 , 679 (1981).

[10] D. STAUFFER "SCALING THEORY OF PERCOLATION CLUSTERS"
Phys. Reports 54 , Nº 1 (1979).

[125] D.J. THOULESS "LONG - RANGE ORDER IN ONE - DIMENSIONAL ISING SYSTEMS"
Phys. Rev. 187 , 2 , 732 - 733.

[103] H. VAN BEIJEREN "INTERFACE SHARPNESS IN THE ISING SYSTEM"
Comm. Math. Phys. 40 , 1 - 7 (1975).

[32] L. VAN HOVE "QUELQUES PROPRIETÉS GENERALES DE L'INTEGRALE DE CONFIGURATION D'UN SYSTEME DE PARTICULES AVEC INTERACTION"
Physica 15 , 951 - 961 (1949).

[61] J. VILLAIN , P. BAK "TWO - DIMENSIONAL ISING MODEL WITH COMPETING INTERACTIONS : FLOATING PHASE, WALLS AND DISLOCATIONS"
Journal de Physique 42 , 657 (1981).

[14] N.JA. VILENKIN "SPECIAL FUNCTIONS AND THE THEORY OF GROUP REPRESENTATIONS"
Am. Math. Soc. (1968).

[8] V. VLADMIROV "DISTRIBUTIONS EN PHYSIQUE MATHEMATIQUE"
Ed. Mir 1979.

[109] J. WEEKS , G. GILMER , H. LEAMY "STRUCTURAL TRANSITION IN THE ISING MODEL INTERFACE"
Phys. Rev. Letters 31 , 549 (1973).

[140] H. WHITNEY " . "
Comp. Math. 4 , 276 (1937).

[54] K. WILSON , I. KOGUT "THE RENORMALISATION GROUP"
Phys. Reports 126 , Nº 2 1975.

[120] F.Y. WU "THE POTTS MODEL"
Rev. Mod. Phys. 54 , 235 - 268 (1982).

[80] C.N. YANG "THE SPONTANEOUS MAGNETISATION OF THE TWO DIMENSIONAL ISING MODEL"
Phys. Rev. 85 , 808 (1952).

[84] ———— , T.D. LEE "STATISTICAL THEORY OF EQUATIONS OF STATE AND PHASE TRANSITIONS I : THEORY OF CONDENSATION"
Phys. Rev. 87 , 404 - 409 (1952).-

ÍNDICE

CAPÍTULO I

UMA INTRODUÇÃO AO ESTUDO DE MODELOS DE SPIN SOBRE REDE 1

I.1. RESULTADOS RIGOROSOS EM FÍSICA 3

I.2. GENERALIDADES SOBRE MECÂNICA ESTATÍSTICA. AS TRANSIÇÕES DE FASE 5

I.3. SISTEMAS TERMODINÂMICOS 8

I.4. OS MODELOS : GENERALIDADES 10

I.5. MODELOS SOBRE REDE E SEUS ESTADOS DE EQUILÍBRIO 12

I.5.1. Introdução 12

I.5.2. Modelo sobre rede ; Espaço das configurações 13

I.5.3. Os estados de equilíbrio / Equações D.L.R. 16

I.5.4. As funções densidade de probabilidade das medidas que verificam D.L.R. ; Os potenciais 21

I.5.5. Existência de estados de equilíbrio ; Estrutura do conjunto dos estados de equilíbrio 27

I.5.6. Estados invariantes 29

I.5.6.1. Invariância por translação 30

I.5.6.2. Outras invariâncias 32

I.5.7. Definições alternativas de estados de equilíbrio invariantes por translação 33

I.5.7.1. Pressão e estados de equilíbrio 33

I.5.7.2. A Entropia e princípio variacional 39

I.5.7.3. Estados ergódicos e "extremalidade" 43

I.6. ALGUNS MODELOS PARTICULARES 45

I.6.1. Introdução 45

I.6.2. Modelos discretos 47

I.6.2.1. Modelo de Ising 47

I.6.2.2. Modelo de Potts 48

I.6.3. Modelos contínuos 51

I.6.3.1. Modelo X-Y e Modelo de Heisenberg 51

I.6.3.2. Modelo com "spin" não limitado 53

I.7. FERROMAGNETISMO, ANTIFERROMAGNETISMO, (...) 56

I.8. AS TRANSIÇÕES DE FASE E O ARGUMENTO DE PEIERLS 59

I.8.1. As transições de fase 59

I.8.2. Argumento de Peierls e positividade de reflexão .. 59

I.9. FRAGMENTOS DE HISTÓRIA (1920-1970) 63

I.10. COLECTÂNEA DE ALGUNS RESULTADOS CONHECIDOS 66

I.10.1. Modelo de Ising Bidimensional 66

I.10.2. Modelo de Ising em dimensão superior a dois.
Tensão superficial e transição rugosa 67

I.10.3. Modelos com grande entropia 72

I.10.3.1. Modelos com interacções em competição ... 72

I.10.3.2. Um modelo de Dobrushin-Schlosman.
Modelo de Potts 75

I.10.4. Outros resultados 78

I.10.4.1. Modelos com interacções com longo alcance. 78

I.10.4.2. Modelos com interacções a curta distância
e simetria contínua 79

CAPÍTULO II

ESTUDO DE UM MODELO ANTIFERROMAGNÉTICO GENÉRICO 81

II.1 NOTAÇÕES ; CONDIÇÕES RESTRITIVAS 83

II.2. ENUNCIADO DO RESULTADO PRINCIPAL : EXISTÊNCIA DUMA TRANSIÇÃO DE FASE NO MODELO 89

II.3. DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 91

II.3.1. Definições geométricas 92

II.3.2. Lemas geométricos 102

II.3.2.1. Definição intrínseca do contorno Rm(M) .. 102

II.3.2.2. Outros lemas geométricos 105

II.3.3. Transformação de Dobrushin e transformação de Malyshev 113

II.3.3.1. Transformação de Dobrushin 113

II.3.3.2. Transformação de Malyshev 119

II.3.4. Estimativa da variação de energia 121

APÊNDICE II.1 130

APÊNDICE II.2 133

CAPÍTULO III

ANTIFERROMAGNETE DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO 139

III.1. DESCRIÇÃO DO MODELO 140

III.2. VERIFICAÇÃO DAS CONDIÇÕES RESTRITIVAS DE II.1 142

III.3. CONCLUSÃO 148

CAPÍTULO IV

UMA GENERALIZAÇÃO DO TEOREMA DOS CAMINHOS DE SHERMAN 149

IV.1. INTRODUÇÃO 150

IV.2. O TEOREMA DE SHERMAN 152

IV.2.1. Definições e notações 152

IV.2.1.1. Grafos 152

IV.2.1.2. Trajectórias 153

IV.2.2. O Teorema 156

IV.2.3. Aplicação ao Modelo de Ising 157

IV.2.4. Refinamento do Teorema 160

IV.2.4.1. Motivação 160

IV.2.4.2. Notações ; Uso de dualidade 161

IV.2.4.3. Enunciado e Demonstração 163

IV.3. DESENVOLVIMENTO DA TENSÃO SUPERFICIAL 168

APÊNDICE IV.1 174

APÊNDICE IV.2 179

REFERÊNCIAS E BIBLIOGRAFIA 183

ÍNDICE 202