

Caracterização da fase desordenada do modelo de Ising d-dimensional via desigualdades de correlações ¹

Gastão A. Braga

Departamento de Matemática - UFMG
gbraga@mat.ufmg.br

Francisco Fontenele Araujo Jr.

Estudante do curso de bacharelado em Física da UFMG
ffaraujo@fisica.ufmg.br

Resumo

Considerando o modelo de Ising d- dimensional para sistemas ferromagnéticos, analisamos neste trabalho algumas conseqüências das desigualdades de correlação propostas por Griffiths (1967) e por Simon (1980) e Lieb (1980). Mostramos, por exemplo, que se a segunda desigualdade de Griffiths for válida, então a magnetização será uma função crescente com relação ao inverso da temperatura, β e ao campo magnético externo h . Como conseqüência, construímos o limite termodinâmico para as correlações e mostramos que o inverso do comprimento de correlação $m(\beta)$ está bem definido para qualquer valor de $\beta \geq 0$. Ainda como conseqüência da monotonicidade, provamos que com relação a β , a magnetização é uma função contínua à direita e que $m(\beta)$ é uma função contínua à esquerda. Prosseguindo a análise, usamos a desigualdade de Simon-Lieb para mostrar que para qualquer valor de β inferior ao valor crítico β_c a correlação spin-spin decai exponencialmente. Por fim, provamos que no ponto crítico o inverso do comprimento de correlação é exatamente igual a zero, indicando que β_c é um ponto de transição de fase de segunda ordem.

¹Projeto apoiado pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG). Trabalho premiado na I Semana do Conhecimento da UFMG, de 18 a 23 de setembro de 2000.

1 Introdução

Sistemas ferromagnéticos são tradicionalmente estudados no contexto da mecânica estatística do equilíbrio, havendo para os mesmos uma ampla literatura. Tal literatura engloba os mais diversos tipos de abordagem, desde formalismos essencialmente físicos, até o tratamento físico-matemático rigoroso e sofisticado, como por exemplo, em [6] e [12].

Neste trabalho, procuramos caracterizar a fase desordenada do modelo de Ising d-dimensional segundo um tratamento rigoroso simplificado, plenamente acessível aos estudantes de física ou matemática em etapa final de graduação. Embora a exposição abaixo evolua de forma essencialmente autocontida, é desejável que o leitor já possua um primeiro contato com nosso artigo anterior [2], no qual introduzimos com mais detalhes a motivação e os elementos teóricos presentes no estudo da transição de fase ordenada \rightleftharpoons desordenada, culminando com a construção do limite termodinâmico da energia. Assim, faremos a seguir algumas considerações bastante sucintas sobre o modelo em foco.

Fisicamente, um sistema ferromagnético (por exemplo, um ímã) é um sólido cuja estrutura microscópica pode ser representada por um subconjunto finito Λ de pontos do espaço discreto d-dimensional \mathbb{Z}^d , onde os seus átomos supostamente se encontram. Tal subconjunto Λ é chamado de *rede* e a posição de cada átomo na rede fica determinada pelo vetor $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$, que em mecânica estatística é denominado *sítio* x . Segundo as propriedades magnéticas da matéria, cada átomo da rede Λ produz um momento magnético ao qual associa-se um vetor denominado *spin* capaz de assumir apenas duas orientações. Deste modo, associamos a cada sítio x da rede uma variável aleatória σ_x tal que $\sigma_x = +1$ (spin orientado para “cima”) ou $\sigma_x = -1$ (spin orientado para “baixo”). No ferromagnetismo existe uma certa tendência de que spins $\sigma_x \sigma_y$ se orientem no mesmo sentido. Tal tendência está associada a uma constante de acoplamento $J_{xy} \geq 0$. Ademais, o comportamento do sistema é fundamentalmente influenciado pela temperatura T (por conveniência também podemos considerar o inverso da temperatura $\beta = 1/kT$, em que k é a constante de Boltzmann), pelo campo magnético externo h e pelas condições de contorno, *cc*, impostas ao sistema. Denotemos por $\partial\Lambda$ à fronteira (externa) de Λ , isto é, ao conjunto dos pontos $x \notin \Lambda$ cuja distância² a Λ é igual a 1. As condições de contorno *cc* impostas ao sistema resultam da prescrição de uma configuração de spins $\{\mu\}$ na fronteira $\partial\Lambda$, sendo que os mesmos interagem com os spins mais internos da rede³. Por

²A distância entre dois pontos $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ e $y = (y_1, y_2, \dots, y_d)$ em \mathbb{R}^d é definida por $\|x - y\| \equiv \max |x_i - y_i|$, em que $i = 1, \dots, d$.

³Na ausência spins na fronteira, diremos que a condição de contorno é livre

exemplo, condições de contorno positivas são obtidas fixando-se como $+1$ o estado de cada spin μ da fronteira da rede, i.e., $\mu_x = +1, \forall x \in \partial\Lambda$. Analogamente, condições de contorno negativas correspondem à imposição $\mu_x = -1, \forall x \in \partial\Lambda$. Além das condições de contorno descritas acima (ilustradas na figura 1), também poderíamos ter condições periódicas, nas quais o modelo está definido sobre um toro, ou até mesmo condições periódicas em uma direção e livre na direção ortogonal à periódica.

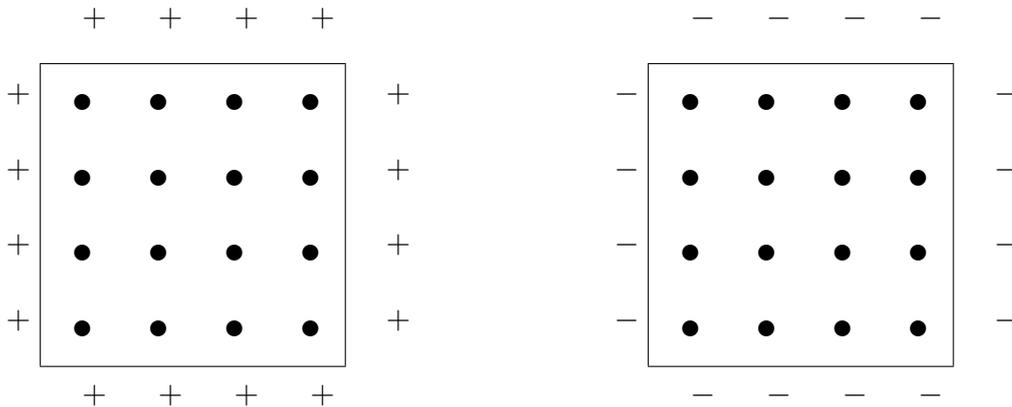


Figura 1: Imposição de condições de contorno

A energia associada a uma configuração $\{\sigma\}$ em Λ , com condições de contorno $\{\mu\}$, constantes de acoplamento $J_{xy} \geq 0$ e campo magnético externo $h_x \geq 0$ é definida pelo seguinte Hamiltoniano

$$H_{\Lambda,cc}(\{\sigma\}) = - \sum_{\langle x,y \rangle} J_{xy} \sigma_x \sigma_y - \sum_{x \in \Lambda} h_x \sigma_x - \sum_{\langle x,y \rangle: x \in \Lambda, y \in \partial\Lambda} J_{xy} \sigma_x \mu_y \quad (1)$$

onde a primeira soma descreve as interações ferromagnéticas entre pares não ordenados de sítios vizinhos $\langle x,y \rangle \in \Lambda$, i.e., para os quais $\|x - y\| = 1$; a segunda soma descreve as interações dos spins da rede Λ com o campo magnético externo h_x em cada sítio $x \in \Lambda$ e a terceira soma descreve interações devidas às condições de contorno.

Construído o Hamiltoniano do sistema, a função partição $Z_{\Lambda,cc}$ a volume Λ e condições de contorno cc é dada por

$$Z_{\Lambda,cc} = \sum_{\{\sigma\}} \exp[-\beta H_{\Lambda,cc}(\{\sigma\})], \quad (2)$$

em que $\sum_{\{\sigma\}}$ denota a soma sobre todas as $2^{|\Lambda|}$ configurações possíveis. Nesse contexto, podemos finalmente introduzir a definição de valor esperado, apresentada a seguir.

Definição 1.1 (Valor esperado) *Seja $\varphi(\{\sigma\})$ uma função das variáveis de spin indexadas por um subconjunto $A \subset \Lambda$. Então, definimos o valor esperado de $\varphi(\{\sigma\})$ a volume finito Λ e com condições de contorno cc por:*

$$\langle \varphi(\{\sigma\}) \rangle_{\Lambda, cc} = \frac{1}{Z_{\Lambda, cc}} \sum_{\{\sigma\}} \varphi(\{\sigma\}) e^{-\beta H_{\Lambda, cc}}.$$

Observação: Quando $\varphi(\{\sigma\}) = \sigma_x \sigma_y$, com $x, y \in \Lambda$, o valor esperado $\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, cc}$ é chamado de *correlação spin-spin*.

Introduzidas as definições preliminares, voltemos ao foco do presente trabalho, elaborando breves considerações sobre a fase desordenada do modelo de Ising. Em termos termodinâmicos, a fase desordenada corresponde à região de temperaturas T superiores à temperatura crítica T_c , i.e., $T > T_c$. Equivalentemente, podemos por conveniência definir $\beta_c = 1/kT_c$ e focalizar a região $\beta < \beta_c$. Assim, para qualquer $\beta < \beta_c$ a desordem orientacional dos spins na rede faz com que a magnetização espontânea do sistema ferromagnético seja nula. Ainda nesse contexto, podemos inferir intuitivamente que dois spins σ_x e σ_y ficam cada vez menos correlacionados à medida que cresce a distância de separação $\|x - y\|$ entre eles. Dito de outra forma, a correlação spin-spin tende a zero quando a distância entre os spins tende a infinito. Tal fato nos leva imediatamente à questão: de que maneira a correlação spin-spin na fase desordenada se aproxima do valor zero? A princípio, poderíamos imaginar diversos tipos de decaimento para zero, como por exemplo, segundo o inverso da distância $\|x - y\|^{-1}$, ou o inverso do quadrado da distância $\|x - y\|^{-2}$, ou exponencial $e^{-\|x-y\|}$, etc. Contudo, a obtenção rigorosa da forma de decaimento passa pelo estudo de certas desigualdades de correlações. O estudo de tais desigualdades constitui o alicerce a partir do qual podemos extrair um apreciável número de propriedades matemáticas capazes de caracterizar plenamente a fase desordenada, e este será nosso objetivo nas próximas seções.

Em nosso roteiro, abordamos na seção 2 a segunda desigualdade de Griffiths e algumas de suas aplicações. Na seção 3 introduzimos um estudo breve e elementar acerca do decaimento exponencial da correlação spin-spin em altas temperaturas. Tal estudo tem como objetivo motivar a análise da existência do inverso do comprimento de correlação realizada na seção 4. Na seção 5 utilizamos resultados deduzidos na seção 2 para apresentar algumas propriedades da magnetização. A seção 6 talvez seja uma das mais fundamentais, pois introduz a definição da susceptibilidade magnética χ , a conexão dela com as correlações spin-spin e o significado matemático da condição $\chi < \infty$. Por fim, apresentamos na seção 7.1 a desigualdade de Simon-Lieb com dois objetivos: provar que a correlação spin-spin decai exponencialmente se, e somente se,

a susceptibilidade magnética é finita; e, calcular o inverso do comprimento de correlação no ponto crítico. No apêndice, fazemos referência a alguns resultados relativos ao limite pontual de seqüências de funções monótonas, resultados esses que serão usados no texto. Cumpre notar que um estudo similar ao deste trabalho também foi feito, em [3], para processos de percolação de elos independentes na rede \mathbb{Z}^d na fase subcrítica.

2 Desigualdades de correlações e aplicações

Em termos físicos, as desigualdades de correlações procuram traduzir quantitativamente nossa intuição acerca do comportamento esperado para o sistema em estudo. Por exemplo, em sistemas ferromagnéticos a interação entre dois spins vizinhos σ_x e σ_y é relevante tanto para os próprios interagentes quanto para os demais spins da rede Λ , ou seja, uma interação atua indiretamente no alinhamento de todos os outros spins da rede. Assim, no ferromagnetismo o estado $\sigma_x = \sigma_y$ (spins paralelos) é *mais provável* do que o estado $\sigma_x = -\sigma_y$ (spins antiparalelos), de modo que o *valor esperado* para o produto $\sigma_x \sigma_y$ deve ser não negativo. Colocado de modo mais preciso, a correlação spin-spin deve ser não negativa, i.e., $\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_\Lambda \geq 0$. Tal raciocínio constitui a essência da primeira desigualdade Griffiths. Já a segunda desigualdade de Griffiths está associada à ideia de monotonicidade. Por exemplo, se $\langle \sigma_0 \rangle_\Lambda$ denota a magnetização efetiva computada na origem, é de se esperar que esse valor aumente quando aumentamos a intensidade do campo magnético externo aplicado. Como uma função será crescente com respeito a h se a sua derivada for positiva, nós esperamos que a derivada de $\langle \sigma_0 \rangle_\Lambda$ com respeito ao campo externo seja positiva, isto é,

$$\frac{\partial}{\partial h_x} \langle \sigma_0 \rangle_\Lambda \geq 0.$$

2.1 A segunda desigualdade de Griffiths

A seguir, apresentaremos a segunda desigualdade de Griffiths [7,8,6] e algumas de suas conseqüências. Uma prova elementar da primeira desigualdade de Griffiths encontra-se em [2].

Definição 2.1 *Seja A um subconjunto da rede Λ . Então denotamos o produto das variáveis de spin com suporte em $A \subset \Lambda$ por $\sigma^A = \prod_{x \in A} \sigma_x$.*

Teorema 2.1 (Segunda desigualdade de Griffiths) ⁴ *Considere o mo-*

⁴A rigor, Griffiths introduziu, em 1967, tal desigualdade para correlações entre pares. Contudo, a forma generalizada (3) foi introduzida por Kelly e Sherman, em 1968.

delo de Ising definido em uma rede $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ com Hamiltoniano ferromagnético dado por (1) e condições de contorno livres, positivas, periódicas ou uma combinação destas. Então:

$$\langle \sigma^A \sigma^B \rangle_{\Lambda, cc} - \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda, cc} \langle \sigma^B \rangle_{\Lambda, cc} \geq 0. \quad (3)$$

Prova: A seguir, apresentaremos a prova da desigualdade no caso particular (e que mais nos interessa) em que $A = \{x\}$ e $B = \{y\}$. De maneira similar prova-se o caso geral, isto é, $A = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ e $B = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$, veja [6]. Também assumiremos condições de contorno livres. Se as condições de contorno forem periódicas então o modelo de Ising estará definido sobre um toro e por isto basta repetir os argumentos dados abaixo para provarmos a desigualdade neste caso. Com condições de contorno positivas, o valor de μ_y na última parcela do hamiltoniano (1) será uniformemente igual 1 para todo $y \in \partial\Lambda$, o que é equivalente a dizer que a intensidade do campo magnético externo para os sítios x da fronteira interna de Λ aumentará de $J_{xy} \geq 0$. Portanto, a prova apresentada abaixo também vale para condições de contorno positivas.

A prova da desigualdade se baseia no método de duplicação de variáveis: em cada sítio x nós introduzimos uma nova variável $\mu_x = \pm 1$ (dessa maneira, a cada sítio x associa-se um vetor de spin $\vec{\sigma}_x = (\sigma_x, \mu_x)$) e duplicamos a energia do sistema:

$$\begin{aligned} H_{\Lambda, \text{livre}}(\{\sigma\}, \{\mu\}) &= - \sum_{\langle x, y \rangle} J_{xy} [\sigma_x \sigma_y + \mu_x \mu_y] - \sum_{x \in \Lambda} h_x [\sigma_x + \mu_x] = \quad (4) \\ &- \sum_{\langle x, y \rangle} J_{xy} \vec{\sigma}_x \cdot \vec{\sigma}_y - \sum_{x \in \Lambda} h_x [\sigma_x + \mu_x]. \end{aligned}$$

Denotaremos valores esperados com respeito a este novo hamiltoniano por $\langle \cdot \rangle_{\Lambda, d}$. Observe que $\langle \sigma_x \rangle_{\Lambda, d} = \langle \mu_x \rangle_{\Lambda, d} = \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda}$. Também obtemos $\langle \sigma_x \mu_y \rangle_{\Lambda, d} = \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda} \langle \mu_y \rangle_{\Lambda}$ e que $\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, d} = \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda} = \langle \mu_x \mu_y \rangle_{\Lambda} = \langle \mu_x \mu_y \rangle_{\Lambda, d}$. De acordo com estas identidades, podemos escrever

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda} - \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda} \langle \sigma_y \rangle_{\Lambda} = \frac{1}{2} \langle (\sigma_x - \mu_x)(\sigma_y - \mu_y) \rangle_{\Lambda, d} = \left\langle \frac{\sigma_x - \mu_x}{\sqrt{2}} \frac{\sigma_y - \mu_y}{\sqrt{2}} \right\rangle_{\Lambda, d}.$$

A última identidade nos induz a introduzir uma mudança de coordenadas (uma rotação de $\pi/4$) no espaço dos spins:

$$\chi_x = \frac{\sigma_x - \mu_x}{\sqrt{2}} \quad \xi_x = \frac{\sigma_x + \mu_x}{\sqrt{2}}.$$

Como o produto interno é invariante por rotações, nestas novas coordenadas o hamiltoniano se reescreve como

$$H_{\Lambda, \text{livre}}(\{\chi\}, \{\xi\}) = - \sum_{\langle x, y \rangle} J_{xy} [\chi_x \chi_y + \xi_x \xi_y] - \sum_{x \in \Lambda} \sqrt{2} h_x \xi_x,$$

e a correlação truncada spin-spin como

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda} - \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda} \langle \sigma_y \rangle_{\Lambda} = \langle \chi_x \chi_y \rangle_{\Lambda, d}.$$

Então, a segunda desigualdade de Griffiths estará provada se mostramos que $\langle \chi_x \chi_y \rangle_{\Lambda, d} \geq 0$. Contudo, este valor esperado é a razão de duas grandezas: o denominador (a função partição) é estritamente positivo pois é a soma de termos estritamente positivos, seja qual for o valor real de J_{xy} e de h_x ; o numerador será positivo se $J_{xy} \geq 0$ e se $h_x \geq 0$ pois, sob estas condições, podemos expandir o fator de Gibbs em uma série de potências para obter uma representação do numerador como uma soma de termos da forma

$$\sum_{\{\chi\}} \sum_{\{\xi\}} \chi_{x_1}^{m_1} \chi_{x_2}^{m_2} \cdots \chi_{x_k}^{m_k} \xi_{y_1}^{n_1} \xi_{y_2}^{n_2} \cdots \xi_{y_l}^{n_l},$$

que serão ou nulos ou não negativos pois a soma acima fatora num produto de somas, cada uma delas sendo simétrica em torno da origem

$$\prod_{i=1}^{i=k} \sum_{\{\chi_{x_i}\}} \chi_{x_i}^{m_i} \prod_{j=1}^{j=l} \sum_{\{\chi_{y_j}\}} \chi_{y_j}^{n_j}.$$

Além disto, cada um destes termos tem prefatores que são positivos pois os mesmos envolvem produtos de coeficientes da série de Taylor da função exponencial e produtos de potências de J_{xy} e $\sqrt{2}h_x$. Portanto, o numerador do valor esperado $\langle \chi_x \chi_y \rangle_{\Lambda, d}$ também é positivo, o que prova a desigualdade. \square

2.2 Aplicações

A partir da segunda desigualdade de Griffiths podemos provar que as correlações entre spins são funções crescentes com respeito aos parâmetros $\beta \geq 0$, $J_{xy} \geq 0$ e $h_x \geq 0$. Para obter este resultado nós estudaremos o sinal da derivada da função correlação com respeito ao parâmetro desejado e em seguida aplicaremos a segunda desigualdade de Griffiths para concluir que tal derivada é não negativa.

Corolário 2.1 *Sob as hipóteses do teorema 2.1, a correlação entre spins é função não decrescente com respeito às constantes de acoplamento J_{xy} e ao campo magnético externo h_x .*

Prova: Fixada uma das condições de contorno para a qual vale a segunda desigualdade de Griffiths, a derivada parcial de $\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, cc}$ com respeito à variável J_{zw} pode ser facilmente calculada e será igual a

$$\frac{\partial}{\partial J_{zw}} \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, cc} = \beta [\langle \sigma_x \sigma_y \sigma_z \sigma_w \rangle_{\Lambda, cc} - \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, cc} \langle \sigma_z \sigma_w \rangle_{\Lambda, cc}].$$

Supondo ferromagnetismo então as hipóteses do teorema 2.1 estão satisfeitas e podemos usá-lo para concluir que a derivada acima é não negativa, o que implica que a correlação a volume finito é função não decrescente de J_{zw} . De maneira análoga provamos que a correlação é função não decrescente com respeito a h_x , $x \in \Lambda$. □

Observação: Do corolário acima, é fácil concluir que, sob as hipóteses do teorema 2.1, as correlações também são funções monótonas com respeito a β . Basta considerar $\beta_{xy} \equiv \beta J_{xy}$ e usar regra da cadeia.

Uma das aplicações mais importantes da segunda desigualdade de Griffiths é a construção do limite termodinâmico para as correlações. Esse limite pode ser construído para a energia livre usando-se o método das desigualdades de correlação e isto pode ser visto em nosso trabalho anterior [2]. Aqui o ponto de vista é mais probabilístico e queremos construir uma medida de probabilidade que irá descrever o sistema físico no limite do volume infinito.

Teorema 2.2 (O limite termodinâmico) *Considere o Hamiltoniano (1) ferromagnético e condições de contorno livres ou positivas. Sejam Λ_n , $n = 1, 2, \dots$, uma seqüência de volumes encaixantes e A um subconjunto de Λ_n para todo n . Então existe o limite*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n, cc} \equiv \langle \sigma^A \rangle_{cc}.$$

Prova: A seguir daremos a prova para condições de contorno livres. Para condições de contorno positivas o resultado decorre diretamente do corolário 2.2. Como o sistema é ferromagnético e as condições de contorno são livres, podemos usar a primeira desigualdade de Griffiths (veja [2]) para concluir que $0 \leq \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n} \forall n$. Por outro lado, $\langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n} \leq 1 \forall n$ pois as variáveis de spin assumem no máximo o valor 1. Lembrando que toda seqüência monótona limitada é convergente, só nos resta provar que $\langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n} \leq \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_{n+1}} \forall n$. Para tanto, vamos construir uma versão auxiliar $H'(a)$ para o Hamiltoniano do sistema de spins:

$$H'(a) = H_{\Lambda_n} + a H_{\Lambda_{n+1} \setminus \Lambda_n}$$

em que H_{Λ_n} é o Hamiltoniano para a rede Λ_n , $H_{\Lambda_{n+1} \setminus \Lambda_n}$ descreve as interações tanto dos spins em sítios $x, y \in \Lambda_{n+1} \setminus \Lambda_n$ quanto dos spins em sítios $x \in \Lambda_n$ e $y \in \Lambda_{n+1} \setminus \Lambda_n$. Deste modo, associando a $H'(a)$ a correlação auxiliar $\langle \sigma^A \rangle'$ temos:

$$\begin{aligned}\langle \sigma^A \rangle'(1) &= \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_{n+1}} \\ \langle \sigma^A \rangle'(0) &= \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n}.\end{aligned}$$

Mas, pelo teorema fundamental do cálculo:

$$\langle \sigma^A \rangle'(1) - \langle \sigma^A \rangle'(0) = \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_{n+1}} - \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n} = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial a} \langle \sigma^A \rangle'_\Lambda da. \quad (5)$$

De maneira análoga à prova do corolário 2.1, temos

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial a} \langle \sigma^A \rangle'_\Lambda &= \langle \sigma^A H_{\Lambda_{n+1} \setminus \Lambda_n} \rangle'_\Lambda - \langle \sigma^A \rangle'_\Lambda \langle H_{\Lambda_{n+1} \setminus \Lambda_n} \rangle'_\Lambda \\ &= \beta \sum_{\langle x, y \rangle} J_{xy} [\langle \sigma^A \sigma_x \sigma_y \rangle'_\Lambda - \langle \sigma^A \rangle'_\Lambda \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_\Lambda] \\ &\geq 0\end{aligned}$$

e por conseguinte a integral presente na equação (5) é não negativa. Portanto $\langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_{n+1}} \geq \langle \sigma^A \rangle_{\Lambda_n}$. □

Observação: O teorema acima nos permite obter uma medida de probabilidade sobre o espaço das configurações $\Omega \equiv \{-1, 1\}^\infty$. Por simplicidade, considere condições de contorno livres e seja A um subconjunto finito qualquer da rede Z^d . Considere uma seqüência crescente de volumes $\Lambda_{n+1} \supset \Lambda_n$, $n = 1, 2, \dots$, todos contendo o subconjunto A . Como o limite quando $n \rightarrow \infty$ de $\langle \sigma_A \rangle_n$ existe, o mesmo limite também existe para o valor esperado de qualquer função contínua com suporte em A . Portanto, este limite estabelece um funcional linear limitado $\mathcal{F}(\cdot)$ sobre o espaço das funções contínuas com suporte em A . Pelo lema de representação de Riez, existe de uma medida (de probabilidade, no nosso caso) μ sobre Ω tal que

$$\mathcal{F}(f) = \int_{\Omega} f d\mu.$$

Se o limite for tomado no sentido de Van Hove (veja por exemplo [2]), então a medida μ é invariante por translações. Neste caso, μ é chamada de “medida de Gibbs”.

A construção do limite termodinâmico descrita acima vale para outras condições de contorno. A seguir provamos um resultado necessário para que esta construção seja realizada com condições de contorno positivas.

Corolário 2.2 *A correlação entre spins é função decrescente com o volume da rede Λ se as condições de contorno forem positivas.*

Prova: Dado Λ_1 , seja Λ_2 tal que $\Lambda_1 \equiv \Lambda_2 \cup \{z\}$ e imponha condições de contorno positivas em ambos os volumes. Se Λ_1 e Λ_2 diferem por mais de um ponto, então basta aplicar o argumento que se segue iterativamente. Suponhamos que um campo magnético externo h seja aplicado no sítio z e nessas condições denotemos a correlação spin-spin por $\langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1}$. Pela monotonicidade das correlações com o campo magnético externo temos:

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda_1, +} \leq \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +} \leq \lim_{h \rightarrow \infty} \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +}. \quad (6)$$

Concentremos nossa atenção em $\langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +}$. Denotando por $\sum_{\{\sigma\}}^{\pm}$ a soma das configurações nas quais $\sigma_z = \pm 1$ podemos escrever que:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +} &= \frac{e^h \sum_{\{\sigma\}}^+ \sigma_x \sigma_y e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}} + e^{-h} \sum_{\{\sigma\}}^- \sigma_x \sigma_y e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}}}{e^h \sum_{\{\sigma\}}^+ e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}} + e^{-h} \sum_{\{\sigma\}}^- e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}}} \\ \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +} &= \frac{\sum_{\{\sigma\}}^+ \sigma_x \sigma_y e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}} + e^{-2h} \sum_{\{\sigma\}}^- \sigma_x \sigma_y e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}}}{\sum_{\{\sigma\}}^+ e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}} + e^{-2h} \sum_{\{\sigma\}}^- e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}}} \end{aligned}$$

Tomando o limite quando $h \rightarrow \infty$ temos:

$$\lim_{h \rightarrow \infty} \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +} = \frac{\sum_{\{\sigma\}}^+ \sigma_x \sigma_y e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}}}{\sum_{\{\sigma\}}^+ e^{-\beta H_{\Lambda_1, +}}} = \frac{\sum_{\{\sigma\}} \sigma_x \sigma_y e^{-\beta H_{\Lambda_2, +}}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{\Lambda_2, +}}},$$

ou seja,

$$\lim_{h \rightarrow \infty} \langle \sigma_x \sigma_y \rangle'_{\Lambda_1, +} = \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda_2, +} \quad (7)$$

Por fim, conectando (6) e (7) concluímos que:

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda_1, +} \leq \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda_2, +}.$$

A seguir, enunciamos um outro corolário da segunda desigualdade de Griffiths que nos será útil na próxima seção. □

Corolário 2.3 *Supondo válida a segunda desigualdade de Griffiths, então Para x, y, z sítios quaisquer da rede Λ temos:*

$$\langle \sigma_x \sigma_z \rangle_{\Lambda, cc} \geq \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, cc} \langle \sigma_y \sigma_z \rangle_{\Lambda, cc} \quad \forall x, y, z \in \Lambda. \quad (8)$$

Prova: De acordo com a segunda desigualdade de Griffiths:

$$\langle \sigma_x \sigma_z \rangle_{\Lambda, cc} = \langle \sigma_x \sigma_y \sigma_y \sigma_z \rangle_{\Lambda, cc} \geq \langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda, cc} \langle \sigma_y \sigma_z \rangle_{\Lambda, cc}$$

□

3 Decaimento exponencial da correlação spin-spin em altas temperaturas

Nesta seção visamos obter cotas inferior e superior para a função correlação $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda$ com condições de contorno livres, sem campo externo e com constantes de acoplamento invariantes por translação, isto é, $J_{xy} = J(\|x - y\|)$. Nosso argumento baseia-se no trabalho [4]. Como veremos, tais cotas podem ser relacionadas com a distância entre os spins interagentes e o inverso da temperatura β . Concluiremos que, para valores pequenos de β , a função correlação decai para zero a uma taxa exponencial com a distância.

Teorema 3.1 *Considere o modelo de Ising d -dimensional ferromagnético com Hamiltoniano dado por (1), sem campo magnético externo e invariante por translações, e com condições de contorno livres. Se as constantes de acoplamento forem estitivamente positivas e se $0 < \beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) < 1$, então existem constantes positivas \bar{m} e \underline{m} tais que:*

$$e^{-\bar{m}\|x\|} \leq \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda \leq e^{-\underline{m}\|x\|}. \quad (9)$$

Prova: Consideremos as correlações entre o spin situado na origem 0 e seus respectivos primeiros vizinhos (sítios z tais que $\|z - 0\| = 1$). Nesse contexto, é conveniente introduzir um parâmetro a (tal que $0 \leq a \leq 1$) capaz de “incorporar” (quando $a = 1$) ou “ignorar” (quando $a = 0$) as interações $J_{0z}\sigma_0\sigma_z$. Assim, o Hamiltoniano para o sistema pode ser escrito como:

$$H'_\Lambda(a) = -a \sum_{z:\|z-0\|=1} J_{0z}\sigma_0\sigma_z - \sum_{\langle x,y \rangle: x,y \neq 0} J_{xy}\sigma_x\sigma_y.$$

Associando a tal Hamiltoniano a correlação $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda(a)$ temos:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda(1) &= \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda \\ \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda(0) &= 0. \end{aligned}$$

Mas, pelo teorema fundamental do cálculo:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda(1) - \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda(0) = \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial a} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda da. \quad (10)$$

Por outro lado:

$$\frac{\partial}{\partial a} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda = \beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) [\langle \sigma_0 \sigma_x \sigma_0 \sigma_z \rangle'_\Lambda - \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle'_\Lambda]$$

$$\leq \beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) \langle \sigma_x \sigma_z \rangle'_\Lambda,$$

sendo que a desigualdade acima é consequência do corolário 2.2. Além disto, pelo corolário 2.1 temos $\langle \sigma_x \sigma_z \rangle'_\Lambda(a) \leq \langle \sigma_x \sigma_z \rangle'_\Lambda(1) = \langle \sigma_x \sigma_z \rangle_\Lambda$. Logo:

$$\frac{\partial}{\partial a} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle'_\Lambda \leq \beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) \langle \sigma_x \sigma_z \rangle_\Lambda. \quad (11)$$

Logo, substituindo (11) na (10) temos:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda \leq \beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) \langle \sigma_x \sigma_z \rangle_\Lambda. \quad (12)$$

Agora, dentre os sítios z selecionemos um tal que a correlação com x seja máxima, ou seja:

$$z_1 : \langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle_\Lambda = \max\{\langle \sigma_z \sigma_x \rangle_\Lambda : \|z - 0\| = 1\}.$$

Assim, utilizando $\langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle_\Lambda$ como cota superior para as $2d$ parcelas da soma presente em (12) temos:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda \leq \left[\beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) \right] \langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle_\Lambda.$$

Contudo, como o sistema é invariante por translações, podemos utilizar o mesmo raciocínio iterativamente para mostrar que a maior cota superior para $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda$ é obtida quando o total de iterações é da ordem de $\|x\|$ e por conseguinte:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda \leq \left[\beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|) \right]^{\|x\|}.$$

Em particular, se β é escolhido de modo que $0 < [\beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|)] < 1$, então basta tomar $\underline{m} > 0$ como sendo tal que $(\beta \sum_{z:\|z-0\|=1} J(\|z\|)) = e^{-\underline{m}}$.

Por outro lado, o corolário 2.1 nos permite comparar correlações em diferentes dimensões espaciais. Em particular, $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda(d=1) \leq \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda(d \geq 2)$, onde a correlação unidimensional é tomada sobre um caminho que minimiza a distância entre 0 e x . Essa correlação pode ser explicitamente calculada:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda(d=1) = \prod_{i=0}^{\|x\|-1} \tanh(\beta J_{i,i+1}).$$

Como o sistema é estritamente ferromagnético, então $J_{xy} > 0$ para todo par $\langle x, y \rangle$ e por isto existe um valor $J > 0$ tal que $J_{i,i+1} > J$ para todo $i = 0, 1, \dots, \|x\| - 1$. Então $[\tanh(\beta J)]^{\|x\|} \leq \prod_{i=0}^{\|x\|-1} \tanh(\beta J_{i,i+1})$, e basta tomar $\bar{m} > 0$ tal que $\tanh(\beta J) = e^{-\bar{m}}$.

Pelo exposto, concluímos que se β é escolhido de modo que

$$0 < [\beta \sum_{z:\|z\|=1} J(\|z\|)] < 1,$$

então existem constantes estritamente positivas \bar{m} e \underline{m} tais que:

$$e^{-\bar{m}\|x\|} \leq \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_\Lambda \leq e^{-\underline{m}\|x\|}.$$

□

O resultado expresso em (9) sugere que o seguinte limite exista:

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\|x\|} \ln \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \right].$$

Provaremos a seguir que tal limite existe para pontos x ao longo de um dos eixos coordenados, digamos $x = n\vec{e}_1 = (n, 0, \dots, 0)$.

4 O inverso do comprimento de correlação

O corolário 2.3 é particularmente interessante quando consideramos, por exemplo, a origem como um dos sítios em questão:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \geq \langle \sigma_0 \sigma_y \rangle \langle \sigma_y \sigma_x \rangle.$$

Além disso, lembremos que também estamos assumindo que o sistema ferromagnético possui invariância translacional. Isto significa que as constantes de acoplamento dependem apenas da posição relativa dos spins interagentes. Logo, segue que:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \geq \langle \sigma_0 \sigma_y \rangle \langle \sigma_0 \sigma_{x-y} \rangle. \quad (13)$$

Considerando pontos x ao longo de um dos eixos coordenados, digamos $x = n\vec{e}_1 = (n, 0, \dots, 0)$, seja $f(n)$ a função:

$$f(n) = -\ln \langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle.$$

De (13) podemos concluir que $f(n)$ é subaditiva (para maiores informações acerca de subaditividade consulte o apêndice). Logo, segue da proposição 8.1 que o limite

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\|x\|} \ln \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \right]$$

existe, para qualquer $\beta > 0$, e é dado pelo ínfimo

$$\inf_n \left\{ -\frac{1}{n} \ln \langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle \right\} \equiv m(\beta). \quad (14)$$

$m(\beta)$ é chamado de inverso do comprimento de correlação. Nesse contexto, convém observar que se $\beta > 0$, então $0 < \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq 1$ e por conseguinte segue de (14) que $m(\beta) \geq 0$. Além disso, o teorema 3.1 nos garante que $m(\beta)$ é estritamente positivo para valores pequenos de β . Na seção 7.1 provaremos que $m(\beta) > 0 \forall \beta < \beta_c$, onde β_c é o ponto crítico, a ser definido na seção 6. A seguir provaremos que $m(\beta)$ é uma função contínua à esquerda. Este resultado será usado na seção 7 para provarmos que $m(\beta)$ se anula sobre o ponto crítico.

Proposição 4.1 *$m(\beta)$ é uma função contínua à esquerda para todo $\beta \geq 0$.*

Prova: Para cada n inteiro não negativo, definimos a função $m_n(\beta) = -\frac{1}{n} \ln \langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle$. Fixado n , a função $m_n(\beta)$ é positiva pois, pela primeira desigualdade de Griffiths, $0 \leq \langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle \leq 1$. Além disto, $m_n(\beta)$ é decrescente em β pois, pela segunda desigualdade de Griffiths, o valor esperado $\langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle$ é crescente em β . Então, se provarmos que $m_n(\beta)$ é uma função contínua à esquerda, o mesmo será verdadeiro para $m(\beta)$ pois, já que $m(\beta) = \inf_n m_n(\beta)$, basta aplicarmos a proposição 8.3 do apêndice. A seguir, provaremos que $m_n(\beta)$ é uma função contínua à esquerda. Seja Λ_k uma seqüência encaixante de volumes tal que $\langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle = \lim_{k \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle_{\Lambda_k}$. Defina $m_n^{(k)} \equiv -\ln \frac{1}{n} \langle \sigma_0 \sigma_{n\vec{e}_1} \rangle_{\Lambda_k}$, tal que Λ_k seja suficientemente grande de forma a conter os pontos 0 e $x = n\vec{e}_1 = (n, 0, \dots, 0)$. Mas, de novo, fixado k , $m_n^{(k)}(\beta)$ é não negativa, contínua e decrescente em β , e fixado β , a seqüência $\{m_n^{(k)}(\beta)\}$, $k = 1, 2, \dots$ é decrescente em k . Sendo assim, podemos novamente usar a proposição 8.3 para concluir que $m_n(\beta)$ é uma função contínua à esquerda. \square

5 A magnetização

A magnetização por unidade de volume é dada por:

$$M_{\Lambda, cc}(\beta, h) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda, cc}. \quad (15)$$

No caso de um sistema magnético com invariância translacional e para o qual o limite termodinâmico exista, temos que $\langle \sigma_x \rangle_{cc}$ independe do sítio x . Mais

que isso, podemos afirmar que

$$M_{cc}(\beta, h) \equiv \lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} M_{\Lambda, cc}(\beta, h) = \langle \sigma_0 \rangle_{cc}.$$

Nesse contexto, podemos investigar alguns efeitos das condições de contorno sobre a magnetização.

Proposição 5.1 $M(\beta, h = 0) = 0 \forall \beta \geq 0$ se as condições de contorno são livres.

Prova: Como $H_{\Lambda}(\{\sigma\}) = H_{\Lambda}(-\{\sigma\})$ segue-se que as parcelas $\sigma_0 e^{-\beta H(\{\sigma\})}$ e $-\sigma_0 e^{-\beta H(-\{\sigma\})}$ cancelam-se mutuamente quando somadas todas as configurações. Logo, o valor esperado $\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda} = 0$.

□

O resultado da proposição acima continua válido para qualquer condição de contorno desde que β seja suficientemente pequeno. Para valores grandes de β , existe um resultado (que será fornecido sem provas) que assegura a positividade estrita da magnetização com condições de contorno positivas.

Teorema 5.1 (O argumento de Peierls) *Se as condições de contorno são positivas então existe um número $\beta_0(d) > 0$ tal que $M_+(\beta, h = 0) > 0 \forall \beta > \beta_0(d)$.*

Fixadas condições de contorno positivas, podemos aplicar os corolários 2.1 e 2.2, para deduzir que a magnetização $M_+(\beta, h)$ é uma função com as seguintes propriedades: crescente com respeito ao campo magnético externo h ; decrescente com respeito ao volume da rede Λ ; crescente com respeito ao inverso da temperatura β ; $M_+(\beta, h = 0)$ é contínua à direita com respeito a β . As três primeiras propriedades são conseqüências diretas do fato de que as mesmas afirmações são verdadeiras a volume finito. A última propriedade pode ser estabelecida mediante a proposição 8.2, pois de fato a seqüência $\Lambda \mapsto M_{\Lambda,+}(\beta)$ é decrescente e cada $M_{\Lambda,+}(\beta)$ é contínua e crescente com β .

6 A susceptibilidade magnética

6.1 Duas definições de ponto crítico

A seguir daremos duas definições plausíveis para ponto crítico. Como observado no final desta seção, pode-se mostrar que, para sistemas ferromagnéticos, estas definições coincidem.

Definição 6.1 *Considere o modelo de Ising definido em uma rede $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ com Hamiltoniano $H_{\Lambda,cc}$ dado por (1) e com campo magnético externo uniforme. Fixado o inverso da temperatura β , a susceptibilidade magnética a volume finito é definida por:*

$$\chi_{\Lambda,cc}(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial h} M_{\Lambda,cc}.$$

Da definição dada para M_{Λ} , obtemos que:

$$\chi_{\Lambda,cc}(\beta, h) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \sum_{y \in \Lambda} [\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\Lambda,cc} - \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda,cc} \langle \sigma_y \rangle_{\Lambda,cc}].$$

Além disto, se as constantes de acoplamento são invariantes por translação, então a susceptibilidade a volume infinito pode ser definida como o limite das susceptibilidades a volume finito e será dada por:

$$\chi_{cc}(\beta, h) = \beta \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} [\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_{\Lambda,cc} - \langle \sigma_x \rangle_{\Lambda,cc} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda,cc}].$$

No caso de condições de contorno livres sabemos que $\langle \sigma_x \rangle = 0$, $\forall x$. Logo:

$$\chi(\beta, h) = \beta \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle. \quad (16)$$

Assim, é notável a conexão entre a susceptibilidade magnética e todas as correlações ao longo da rede \mathbb{Z}^d . Tal conexão sugere que a partir do comportamento da susceptibilidade podemos extrair “algo” sobre o comportamento das correlações e vice-versa (conforme será exposto no estudo do decaimento exponencial das correlações na fase desordenada). Antes de desenvolvermos com rigor esse estudo, façamos uma brevíssima digressão acerca de *pontos críticos*.

É natural considerar o comportamento da magnetização $M_+(\beta)$ como indicador da transição de fase [2]. De fato, $M_+(\beta) = 0$ em altas temperaturas enquanto que $M_+(\beta) > 0$ em baixas temperaturas (veja a observação após a proposição 5.1 e veja também o teorema 5.1). Nesse contexto, define-se o ponto crítico β_c como sendo:

$$\beta_c = \inf\{\beta : M_+ > 0\}.$$

Numa abordagem mais sutil, analisa-se o comportamento da susceptibilidade magnética $\chi(\beta, h)$ como indicador da transição de fase. Para tanto, define-se o ponto crítico π_c como sendo:

$$\pi_c = \sup\{\beta : \chi < \infty\}.$$

Observe que $\pi_c \leq \beta_c$, pois se $\beta > \beta_c$ então $M_+(\beta) > 0$ e por conseguinte $\chi = \sum \langle \sigma_x \sigma_y \rangle \geq \sum \langle \sigma_x \rangle^2 = \infty$.

No caso de π_c ser estritamente menor que β_c , surge uma questão interessante: existe uma fase intermediária entre π_c e β_c ? Segundo Aizenman [1], em modelos ferromagnéticos β_c e π_c coincidem (i.e., $\pi_c = \beta_c$). Admitindo tal resultado, quando no presente trabalho nos referirmos à fase desordenada esta deve ser entendida de forma precisa, sem qualquer margem a ambiguidades - a fase desordenada corresponde ao intervalo $0 \leq \beta < \beta_c$ no qual a magnetização é nula e a susceptibilidade é finita.

A seguir, iniciaremos a caracterização da fase desordenada do modelo de Ising (na ausência de campo magnético externo) estudando a susceptibilidade magnética.

6.2 A susceptibilidade magnética na fase desordenada

Em estudos da fase desordenada é útil reescrever a expressão (16) de modo mais conveniente. Para tanto, considere a seqüência de volumes $n \mapsto \Lambda_n$ cujo termo geral é da forma:

$$\Lambda_n = [-n, n] \times \dots \times [-n, n] \cap \mathbb{Z}^d.$$

Além disso, seja $\partial\Lambda_n$ a fronteira do volume Λ_n . Nesse contexto, a soma $\sum_{x \in \mathbb{Z}^d}$ pode ser reescrita como $\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{x \in \partial\Lambda_n}$ e por conseguinte:

$$\chi(\beta) = \beta \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{x \in \partial\Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle = \beta \sum_{n=1}^{\infty} c_n, \quad (17)$$

onde

$$c_n = \sum_{x \in \partial\Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle.$$

Assim

$$\chi(\beta) < \infty \iff \sum_{n=1}^{\infty} c_n < \infty.$$

Em termos matematicamente precisos, a convergência de tal série pode ser expressa como:

$$\forall \alpha > 0, \exists N \in \mathbb{N} : n > N \implies c_n < e^{-\alpha}.$$

De modo equivalente:

$$\forall \alpha > 0, \exists \Lambda_N \subset \mathbb{Z}^d : \Lambda_n \supset \Lambda_N \implies \sum_{x \in \partial\Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle < e^{-\alpha}. \quad (18)$$

A plena compreensão do raciocínio codificado por (18) será fundamental nos próximos desenvolvimentos, de modo que talvez seja útil expressá-lo em palavras da seguinte forma:

“Se a susceptibilidade magnética é finita, então podemos considerar um hipercubo Λ_L com volume suficientemente grande, tal que a soma das correlações entre o spin localizado no centro de Λ_L e os spins da fronteira $\partial\Lambda_L$ é inferior a $e^{-\alpha}$, para qualquer α real positivo.”

7 Caracterização da fase desordenada

Esta seção se baseia nos trabalhos de Simon [10] e Chayes e Chayes [5]. Dada a desigualdade de Simon-Lieb, provaremos a equivalência entre a finitude de χ com a condição $\beta < \beta_c$.

7.1 A desigualdade de Simon-Lieb

A conexão entre a condição “ $\beta < \beta_c$ ” e a taxa de decaimento da função correlação $\langle\sigma_0\sigma_x\rangle$ será estabelecida via desigualdade de Simon-Lieb [9,10], que enunciamos sem apresentação da prova.

Teorema 7.1 (Desigualdade de Simon-Lieb) *Suponha dado o modelo de Ising d -dimensional com interação de primeiros vizinhos e com Hamiltoniano dado por (1), sem campo magnético externo e com condições de contorno livres. Sejam x e y sítios quaisquer da rede \mathbb{Z}^d e seja Λ um subconjunto finito de \mathbb{Z}^d , cuja fronteira $\partial\Lambda$ separa x e y (i.e. qualquer caminho desde x até y deve passar por $\partial\Lambda$). Então*

$$\langle\sigma_x\sigma_y\rangle \leq \sum_{z \in \partial\Lambda} \langle\sigma_x\sigma_z\rangle_{\Lambda} \langle\sigma_z\sigma_y\rangle. \quad (19)$$

De posse do teorema acima, obteremos na seção 7.2 que a susceptibilidade é finita se e somente se a correlação decai exponencialmente. Na seção 7.3 provaremos que o inverso do comprimento de correlação se anula no ponto π_c . Como corolário dos resultados descritos acima, obteremos que a susceptibilidade é finita se e somente se $\beta < \pi_c$ ou, equivalentemente, que a correlação decai exponencialmente se e somente se $\beta < \pi_c$.

7.2 Decaimento exponencial da função correlação na fase desordenada

Teorema 7.2 *A correlação spin spin decai exponencialmente se, e somente se, a susceptibilidade magnética é finita.*

Prova:

$$\boxed{\text{Parte 1}} \quad \chi < \infty \Rightarrow \exists m > 0 : \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq e^{-m\|x\|}$$

Como por hipótese $\chi(\beta) < \infty$, então podemos considerar um hipercubo Λ^0 centrado na origem, compatível com (18) e com volume tal que $x \notin \Lambda^0$. Partindo desse fato, podemos construir um processo iterativo (já apresentado na seção 3 de forma rudimentar) capaz de descrever o decaimento exponencial da correlação $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle$. Para tanto, vamos enumerar (em estrutura algorítmica) os procedimentos a serem desenvolvidos:

1. Aplicar a desigualdade de Simon-Lieb à correlação $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle$, considerando o volume Λ^0 e sua respectiva fronteira $\partial\Lambda^0$:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq \sum_{z \in \partial\Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{\Lambda^0} \langle \sigma_z \sigma_x \rangle \quad (20)$$

2. Dentre os sítios da fronteira de Λ^0 selecionar um (a ser denotado por z_1) cuja correlação $\langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle$ seja máxima:

$$z_1 \in \partial\Lambda^0 : \langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle = \max\{\langle \sigma_z \sigma_x \rangle : z \in \partial\Lambda^0\} \quad (21)$$

3. Utilizar a correlação máxima descrita em (21) como cota superior para cada parcela do membro da direita da desigualdade (20):

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq \langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle \sum_{z \in \partial\Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{\Lambda^0} \quad (22)$$

4. Cotar superiormente a soma das correlações da fronteira $\partial\Lambda^0$ (conforme (18))

$$\sum_{z \in \partial\Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle_{\Lambda^0} \leq \sum_{z \in \partial\Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_z \rangle < e^{-\alpha} \quad (23)$$

5. Substituir (23) na (22):

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq e^{-\alpha} \langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle \quad (24)$$

6. Focalizar agora a correlação $\langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle$.
7. Transladar rigidamente Λ^0 de modo a centralizá-lo em z_1 e denotar o hipercubo resultante por Λ^1 , i.e.:

$$\Lambda^1 = \Lambda^0 + z_1$$

8. Se $x \notin \Lambda^1$, então repetir o processo para $\langle \sigma_{z_1} \sigma_x \rangle$ considerando Λ^1 e sua respectiva fronteira $\partial\Lambda^1$.

Na figura 2, ilustramos a idéia do processo iterativo descrito acima.

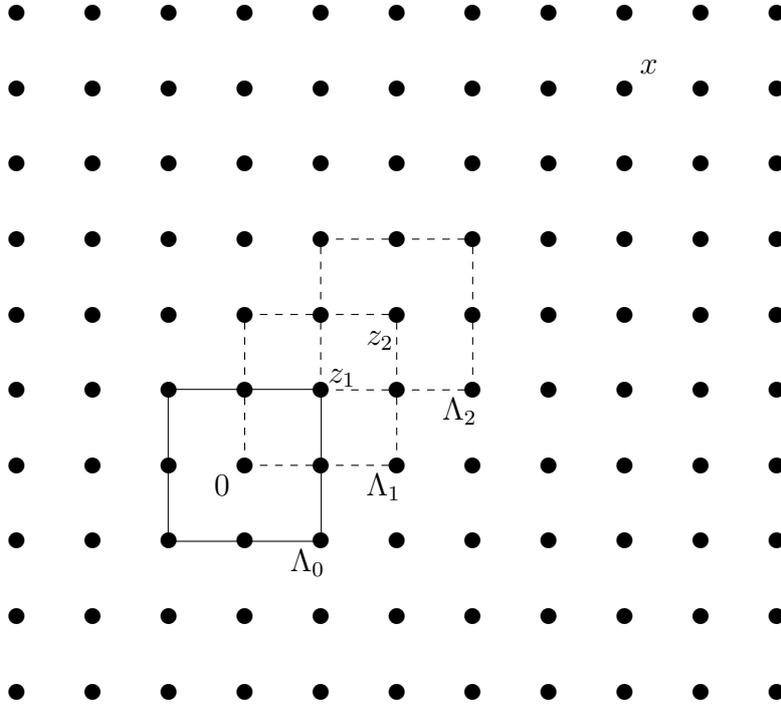


Figura 2: Exemplo de uma possível seqüência de volumes, após 3 aplicações sucessivas da desigualdade de Simon-Lieb.

Pelo exposto, a maior cota superior no formato exponencial para $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle$ ocorre quando o número de iterações é mínimo – da ordem da parte inteira de $\frac{\|x\|}{\text{diam}(\Lambda)}$. Logo:

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq \exp \left(\frac{-\alpha}{\text{diam}(\Lambda)} \|x\| \right) \quad (25)$$

Parte 2 $\exists m > 0 : \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq e^{-m\|x\|} \Rightarrow \chi < \infty$ □

Lembremos que a susceptibilidade pode ser reescrita como:

$$\chi(\beta) = \beta \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{x \in \partial \Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \quad (26)$$

Inicialmente, concentremos nossa atenção no somatório $\sum_{x \in \partial \Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle$:

- Por hipótese $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq e^{-m\|x\|}$. Logo:

$$\sum_{x \in \partial \Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq \sum_{x \in \partial \Lambda_n} e^{-m\|x\|}$$

- Para cada $n \in \mathbb{N}$ temos que $x \in \partial \Lambda_n \Rightarrow \|x\| \geq n \Rightarrow e^{-m\|x\|} \leq e^{-mn}$. Logo:

$$\sum_{x \in \partial \Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq \sum_{x \in \partial \Lambda_n} e^{-m\|x\|} \leq \sum_{x \in \partial \Lambda_n} e^{-mn}$$

- Já a soma $\sum_{x \in \Lambda_n} e^{-mn}$ pode ser relacionada com $|\partial \Lambda_n|$, i.e., o total de sítios da fronteira de Λ_n .

$$\sum_{x \in \partial \Lambda_n} e^{-mn} \leq |\partial \Lambda_n| e^{-mn}$$

Contudo, lembremos que a área da fronteira de um hipercubo Λ_n centrado na origem e de lado $2n$ pode ser cotada superiormente, por exemplo, pela área da fronteira de uma hiperesfera centrada na origem e de raio $2n$, i.e., $|\partial \Lambda_n| \leq a_d (2n)^{d-1}$, em que a_d é um parâmetro real positivo dependente da dimensão d . Logo:

$$\sum_{x \in \partial \Lambda_n} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \leq a_d (2n)^{d-1} e^{-mn} \quad (27)$$

Conectando (27) e (26) podemos inferir que:

$$\chi(\beta) \leq a_d 2^{d-1} \beta \sum_{n=1}^{\infty} n^{d-1} e^{-mn}$$

Mediante o teste da raiz podemos mostrar que a série $\sum_{n=1}^{\infty} n^{d-1} e^{-mn}$ é convergente. Logo, $\chi(\beta) < \infty$. □

7.3 O inverso do comprimento de correlação $m(\beta)$ no ponto crítico π_c

O próximo resultado indica que a transição de fase do modelo de Ising é de segunda ordem, isto é, o comprimento de correlação é infinito exatamente sobre o ponto crítico π_c .

Teorema 7.3 $\lim_{\beta \rightarrow \pi_c^-} m(\beta) = 0$.

Demonstração: Como $m(\beta)$ é contínua à esquerda (veja proposição 4.1) segue-se que:

$$\lim_{\beta \rightarrow \pi_c^-} m(\beta) = m(\pi_c)$$

Lembrando que $m(\beta) \geq 0$ para qualquer $\beta \geq 0$ vamos supor $m(\pi_c) > 0$ (veremos que tal suposição nos leva a um resultado absurdo).

$$m(\pi_c) > 0 \Rightarrow \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle(\pi_c) \leq c.e^{-m(\pi_c)\|x\|} \Rightarrow \chi(\pi_c) < \infty.$$

Por outro lado, $\chi(\pi_c) < \infty$ significa que podemos considerar um hipercubo Λ^0 compatível com (18). Assim:

$$\sum_{x \in \partial \Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_{\Lambda^0}(\pi_c) \leq \sum_{x \in \partial \Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle(\pi_c) < e^{-\alpha}.$$

Ora, sabemos que em volume finito cada função $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_{\Lambda^0}(\beta)$ é analítica para qualquer $\beta \geq 0$ e que a soma finita das mesmas também resulta em uma função analítica. Logo, existe $\delta > 0$ suficientemente pequeno tal que $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_{\Lambda^0}(\pi_c + \delta)$ contínua e:

$$\sum_{x \in \partial \Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_{\Lambda^0}(\pi_c + \delta) \leq e^{-\alpha}.$$

Consideremos agora um sítio $y \notin \Lambda^0$ e a correlação $\langle \sigma_0 \sigma_y \rangle(\pi_c + \delta)$. Nessas condições, podemos aplicar a desigualdade de Simon-Lieb

$$\langle \sigma_0 \sigma_y \rangle(\beta + \delta) \leq \sum_{x \in \partial \Lambda^0} \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle_{\Lambda^0}(\beta + \delta) \langle \sigma_x \sigma_y \rangle(\beta + \delta)$$

e iniciar um processo iterativo idêntico ao descrito na demonstração da proposição (7.2), em especial na parte 1. Desenvolvido o processo, vamos concluir que $\langle \sigma_0 \sigma_y \rangle(\pi_c + \delta)$ decai exponencialmente, implicando que $\chi(\pi_c + \delta) < \infty$, conforme a proposição (7.2). Ora, $\chi(\pi_c + \delta) < \infty$ contraria a definição de ponto crítico e por conseguinte a suposição $m(\pi_c) > 0$ é absurda. Portanto, concluímos que $m(\pi_c) = 0$. □

Os resultados desta seção podem ser assim resumidos:

Teorema 7.4 *As seguintes afirmações são equivalentes:*

1. $\beta < \pi_c$.
2. A função correlação spin-spin $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle(\beta)$, com condições de contorno livres, decai exponencialmente com a distância $\|x\|$.
3. A susceptibilidade magnética $\chi(\beta)$, com condições de contorno livres, é finita.

8 Apêndice

8.1 Subaditividade

Definição 8.1 *Uma função $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada subaditiva se, e somente se, $f(n + m) \leq f(n) + f(m)$.*

O resultado que apresentamos a seguir foi retirado do livro de B. Simon [11].

Proposição 8.1 *Se f é uma função subaditiva, então existe o limite*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} f(n)$$

e o mesmo é igual a $\inf_n \left\{ \frac{1}{n} f(n) \right\}$.

Prova: Fixado a seja $b = na + r$, em que $0 \leq r < a$. Sendo $f(0) = 0$, temos por indução e pela relação de subaditividade que:

$$\begin{aligned} f(b) &\leq n f(a) + f(r) \\ \frac{1}{b} f(b) &\leq \frac{n}{b} f(a) + \frac{1}{b} f(r). \end{aligned}$$

Como $\frac{n}{b} \rightarrow \frac{1}{a}$ quando $b \rightarrow \infty$ e $\sup_{r=0,1,\dots,a-1} \{|f(r)|\} < \infty$ concluímos que:

$$\limsup \frac{1}{b} f(b) \leq \frac{1}{a} f(a)$$

para qualquer a . Assim:

$$\limsup \left\{ \frac{1}{b} f(b) \right\} \leq \inf_a \left\{ \frac{1}{a} f(a) \right\} \leq \liminf \left\{ \frac{1}{b} f(b) \right\}.$$

□

8.2 Limite de seqüências de funções monótonas

Proposição 8.2 *Seja $\{f_n(x)\}$ uma seqüência decrescente de funções e seja $f(x)$ o seu limite pontual. Se cada $f_n(x)$ é crescente e contínua à direita, então $f(x)$ é contínua à direita.*

Prova: Inicialmente, notemos que:

1. f é crescente, pois $f(x) \leq f_n(x) \leq f_n(y)$ para todo $y > x$. Tomando o limite quando $n \rightarrow \infty$ temos $f(x) \leq f(y)$,
2. existe o limite de $f(x)$ quando x tende a x_0 pela direita, a que chamaremos de L , pois para qualquer seqüência x_n tendendo a x pela direita, a seqüência $f(x_n)$ é limitada por baixo por $f(x_0)$ (esta afirmação também é verdadeira para o limite à esquerda e ela, quando usada com a primeira afirmação, nos diz que uma função monótona, em geral, quando tem descontinuidades, as mesmas só podem ser do tipo salto),
3. $f(x_0) \leq L$, pois $f(x_0) \leq f(x) \quad \forall x > x_0$ e L é o limite de $f(x)$ pela direita.

Vamos provar que $L = f(x_0)$, o que será suficiente para concluirmos a continuidade à direita de f no ponto x_0 . A prova é por contradição. Suponha que $L - f(x_0) \geq r > 0$ (a diferença é estritamente maior que zero). Como $f_n(x_0)$ decresce para $f(x_0)$, escolha $n = k$ grande o bastante de maneira que $f_k(x_0) - f(x_0)$ seja menor do que $r/2$. Então teremos que $L - f_k(x_0) > r/2$. Agora, se x_m decresce para x_0 , por hipótese, teremos que as seguintes desigualdades são verdadeiras:

$$f_k(x_m) - f_k(x_0) \geq f(x_m) - f_k(x_0) \geq L - f_k(x_0).$$

Concluimos que

$$f_k(x_m) - f_k(x_0) > r/2$$

para x_m tão próximo quanto se queira de x_0 , o que contradiz a hipótese de continuidade de f_k à direita. □

Proposição 8.3 *Seja $\{f_n(x)\}$ uma seqüência decrescente de funções e seja $f(x) = \inf\{f_n(x)\}$ o seu limite pontual. Se cada $f_n(x)$ é decrescente e contínua à esquerda, então $f(x)$ é contínua à esquerda.*

Prova De maneira similar à demonstração da proposição 8.2, também prova-se a proposição acima. □

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo apoio financeiro.

Referências

1. M. Aizenman, *Absence of an intermediate phase for a general class of one-component ferromagnetic models*, Phys. Rev. Lett., **54**, 839-842, (1985).
2. G. A. Braga e F.F. Araújo Jr., *O limite termodinâmico e independência das condições de contorno para o modelo de Ising d -dimensional*, trabalho submetido à Revista Matemática Universitária, (2001).
3. G. A. Braga e M. M. Oliveira, *Um estudo da fase desordenada do modelo de elos independentes na rede hipercúbica d -dimensional*, trabalho apresentado na I Semana do Conhecimento da UFMG, de 18 a 23 de Setembro de 2000.
4. G. A. Braga, S. J. Ferreira and F. C. Sá Barreto, *Upper Bounds on the Critical Temperature for the Two-Dimensional Blume-Emery-Griffiths Model*, J. Stat. Phys., **76**, 815, (1994).
5. J. Chayes and L. Chayes, *Percolation and Random Media*, in Critical Phenomena, random systems, gauge theories; K. Osterwalder and R. Stora, eds.; Les Houches, Session XLIII, 1984; Elsevier Science Publishers B.V. (1986).
6. J. Glimm and A. Jaffe, *Quantum Physics: A Functional Integral Point of View*, Second Edition, Springer-Verlag, New York, (1987).
7. R. B. Griffiths, *Correlations in Ising Ferromagnets I*, J. Math. Phys., **8**, 478-483, (1967).
8. R. B. Griffiths, *Correlations in Ising Ferromagnets. II. External Magnetic Fields*, J. Math. Phys., **8**, 484-489, (1967).
9. E. H. Lieb, *A Refinement of Simon's Correlation Inequality*, Commun. Math. Phys., **77**, 127-135, (1980).
10. B. Simon, *Correlation Inequalities and the Decay of Correlations in Ferromagnets*, Commun. Math. Phys., **77**, 111-126, (1980).

11. B. Simon, *The Statistical Mechanics of Lattice Gases*, Volume 1 Princeton University Press, Princeton, (1993).
12. H. Von Dreifus, *Mecânica Estatística de Modelos Ferromagnéticos*, 19^o Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, Rio de Janeiro (1993).