

O Limite Termodinâmico e Independência das Condições de Contorno para o Modelo de Ising d -Dimensional¹

Gastão A. Braga

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

Francisco Fontenele Araujo Jr.

Departamento de Física da UFMG
ffaraujo@fisica.ufmg.br

Resumo

Neste trabalho provaremos que a energia livre do modelo de Ising d -dimensional, definida como o limite pontual da seqüência das energias livres tomadas sobre hipercubos de aresta 2^{n+1} , $n = 1, 2, \dots$ e com condições de contorno livres, está bem definida para todos os valores não negativos da temperatura T , das constantes de acoplamento J_{ij} e do campo magnético externo h_i . Mostraremos também que este limite independe da seqüência de volumes e das condições de contorno impostas ao sistema desde que o limite seja tomado no sentido de Van Hove. Estes resultados serão obtidos como aplicação da primeira desigualdade de Griffiths, cuja prova também apresentamos.

¹Projeto apoiado pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG). Versão modificada do trabalho *O limite termodinâmico e independência das condições de contorno em altas temperaturas para o modelo de Ising em dimensão arbitrária*, premiado na VIII Semana de Iniciação Científica da UFMG, de 13 a 18 de setembro de 1999.

1 Introdução

Materiais magnéticos possuem ampla aplicação tecnológica, estando presentes em diversos objetos do nosso cotidiano, desde simples geladeiras até os mais sofisticados computadores. Nesse contexto, uma classe particularmente importante é a dos materiais ferromagnéticos, cujo representante mais popular é o ímã. No presente trabalho, focalizaremos tal classe segundo um tratamento físico-matemático elementar. Para tanto, vamos considerar inicialmente algumas propriedades características dos sistemas ferromagnéticos estudando, por simplicidade, um ímã em barra.

Macroscopicamente, um ímã em barra é um dipolo magnético formado por um pólo norte em uma extremidade e um pólo sul na outra. A orientação sul-norte do campo magnético gerado espontaneamente no interior do ímã pode ser representada por um vetor \vec{M} chamado *momento de dipolo magnético*. Como o vetor \vec{M} tem somente duas orientações preferenciais (norte e sul), é comum representá-lo pelo escalar M , a *magnetização*, convencionando-se que $M > 0$ indica a direção norte e $M < 0$ indica a direção sul.

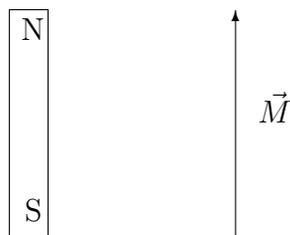


Figura 1: Um ímã em barra e seu momento de dipolo magnético

Microscopicamente, podemos imaginar que o ímã é constituído por dipolos magnéticos microscópicos. De fato, cada átomo possui um momento de dipolo magnético intrínseco \vec{s} , de modo que a magnetização \vec{M} do ímã como um todo pode ser entendida como resultante de uma orientação preferencial dos N momentos de dipolo magnéticos atômicos, ou seja, $\vec{M} = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i$. Contudo, a magnetização M do ímã é influenciada por dois fatores: a temperatura T e o campo magnético externo h aplicado.

Experimentalmente, observa-se a existência de uma temperatura crítica T_c , que define as duas fases do sistema: a fase *ordenada*, onde $M \neq 0$, observada no intervalo de temperaturas $0 \leq T < T_c$; a fase *desordenada*, onde $M = 0$, observada no intervalo de temperaturas $T > T_c$. A utilização dos adjetivos *ordenada* e *desordenada* na classificação das fases fica clara sob o ponto de vista microscópico. Quando $T < T_c$, a orientação de cada dipolo

atômico é determinada essencialmente pelas interações com seus dipolos vizinhos, que influenciam-se mutuamente rumo à mesma orientação. Tal efeito cooperativo define um ordenamento dos dipolos e conseqüentemente uma magnetização não nula. Por outro lado, quando $T > T_c$, a agitação térmica aleatória torna arbitrárias as orientações dos dipolos atômicos, de modo que o sistema fica desordenado e a magnetização é nula.

Ainda experimentalmente, podemos submeter uma liga de ferro (ou o imã desmagnetizado) a um campo magnético externo h . Nesse caso, observa-se que a baixas temperaturas ($T < T_c$), a liga de ferro apresenta uma magnetização residual mesmo após desligado o campo externo, enquanto que isto não ocorre se a temperatura for alta ($T > T_c$). Como resultado dos experimentos apresentados, veja na figura 2 os gráficos da magnetização *versus* temperatura e da magnetização *versus* campo magnético externo.

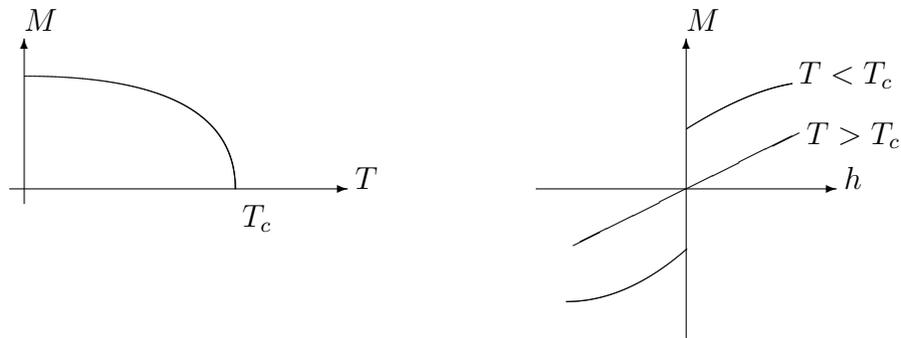


Figura 2: Comportamento da magnetização M com a temperatura T e com o campo magnético externo h

É claro que a descrição qualitativa dada acima é muito simples e desprovida do devido rigor matemático. Contudo, a partir dos gráficos da figura 2 observamos que a derivada da magnetização com respeito a T deve ser descontínua em $T = T_c$ e que a derivada da magnetização com respeito a h deve ser contínua em altas temperaturas e descontínua em baixas temperaturas. Sem dúvida tais fatos sugerem algo, mas ainda devemos considerar questões básicas como:

1. Quais aspectos microscópicos são relevantes no tratamento físico-matemático do fenômeno de transição de fase?
2. Como estabelecer a conexão entre o tratamento microscópico e a termodinâmica?

3. É possível construir de forma matematicamente rigorosa uma função termodinâmica capaz de descrever as propriedades do sistema físico? Caso afirmativo, qual o comportamento de tal função e de suas derivadas no ponto de transição de fase? Enfim, o que é uma transição de fase sob o ponto de vista matemático?

Façamos alguns comentários acerca das questões 1 e 2. Uma análise profunda dos aspectos microscópicos do sistema nos conduz a um problema de alta complexidade, pois em um sólido como o imã o número de átomos é descomunal (da ordem de 10^{23}) e isso inviabiliza a solução das equações diferenciais acopladas resultantes da aplicação das leis da mecânica (clássica e/ou quântica) em cada átomo. Assim, ao invés de considerar o comportamento individual detalhado de cada componente microscópico, fixamos a atenção apenas em um pequeno número de parâmetros macroscópicos que caracterizam o imã, como por exemplo, a temperatura, a magnetização e o campo magnético externo. Portanto, para estabelecer uma conexão entre a descrição microscópica e a termodinâmica utilizamos a teoria da probabilidade e isso nos conduz à chamada mecânica estatística do equilíbrio.

No que se refere à questão 3, trataremos neste trabalho acerca da existência de uma função termodinâmica chamada *energia livre*. O mecanismo de construção de tal função é chamado de *limite termodinâmico*, e nesse limite podemos identificar um ponto de transição de fase como sendo um ponto de não-analiticidade da energia livre. Assim, em termos matemáticos um ponto de transição de fase é aquele em torno do qual a energia livre não possui expansão convergente em série de Taylor.

Por fim, apresentemos um breve roteiro do que será exposto a seguir. Neste trabalho provamos, de maneira elementar e acessível a alunos de graduação, a existência da energia livre e a sua independência das condições de fronteira. A seção 2 foi retirada das referências [1, 7 e 8]. Nela, introduzimos o modelo de Ising e fornecemos algumas definições que nos serão úteis posteriormente. Na seção 3, enunciemos e provamos a primeira desigualdade de Griffiths, originalmente estabelecida por R. Griffiths [2], em 1967, e fomos guiados por [8] e [1]. Na seção 4, utilizamos tal desigualdade para provar a existência do limite termodinâmico para a energia livre considerando apenas seqüências definidas em hipercubos e o nosso argumento se assemelha ao de Thompson [7], embora ele não use a desigualdade de Griffiths. Inspirados pelo argumento de Griffiths [3] para seqüências de quadrados, na seção 5 provamos a existência do limite termodinâmico no sentido de Van Hove, cuja definição retiramos de [5]. Finalmente, na última seção, provamos a independência do limite termodinâmico com respeito às condições de contorno. Cumpre notar que os resultados enunciados neste trabalho podem ser obtidos

com toda a generalidade usando-se ou argumentos de convexidade, como em [4], ou a expansão em polímeros, como em [1 e 6]. O livro de R. A. Minlos [9] é uma referência de caráter geral.

2 O modelo de Ising

Fisicamente, um sistema magnético 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 $i = (i_1, i_2, \dots, i_d)$, que em mecânica estatística é denominado *sítio* i . No presente trabalho, consideraremos um tipo simples de rede com estrutura regular dada por $\Lambda \equiv [-L, L] \times \dots \times [-L, L] \cap \mathbb{Z}^d$, em que L é um número inteiro positivo. Ademais, denotaremos o número de sítios em Λ por $|\Lambda|$. Tipicamente, uma rede em $d = 2$ com $|\Lambda| = 16$ possui uma estrutura tal como a ilustrada na figura 3.

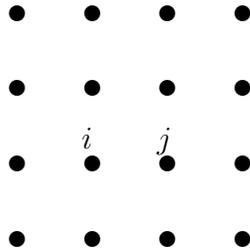


Figura 3: Rede bidimensional com condições de contorno livres

Segundo as propriedades magnéticas da matéria, cada átomo da rede Λ produz um momento de dipolo magnético intrínseco² ao qual associa-se um vetor denominado *spin*. Nos casos mais simples, considera-se que cada spin pode assumir apenas duas orientações. Deste modo, associamos a cada sítio i da rede uma variável aleatória σ_i tal que $\sigma_i = +1$ (spin orientado para “cima”) ou $\sigma_i = -1$ (spin orientado para “baixo”). Uma interação entre spins fica caracterizada associando-se ao par $\sigma_i \sigma_j$ uma constante J_{ij} que informa o *acoplamento* entre as orientações dos spins interagentes. Sob o ponto de vista fenomenológico, um acoplamento positivo $J_{ij} \geq 0$ favorece orientações iguais para os spins, descrevendo um comportamento ferromagnético, cuja evidência macroscópica (em baixas temperaturas) é uma magnetização espontânea não nula. Por outro lado, um acoplamento negativo $J_{ij} \leq 0$ favorece orientações contrárias para os spins, descrevendo um comportamento

²De origem quântica.

antiferromagnético. No presente trabalho, focalizamos exclusivamente os sistemas ferromagnéticos.

A 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 $\|x - y\| \equiv \max |x_i - y_i|$, onde $i = 1, 2, \dots, d$. Dessa maneira, denotamos por $\partial\Lambda$ à fronteira (externa) de Λ , isto é, ao conjunto dos pontos $i \notin \Lambda$ cuja distância a Λ é igual a 1. Condições de contorno, *cc*, também podem ser impostas ao sistema. Elas resultam da prescrição de uma configuração de spins $\{\mu\}$ na fronteira $\partial\Lambda$, e que interagem com os spins mais internos da rede. Por exemplo, condições de contorno positivas são obtidas fixando-se como +1 o estado de cada spin μ da fronteira da rede, i.e., $\mu_i = +1, \forall i \in \partial\Lambda$. Analogamente, condições de contorno negativas correspondem à imposição $\mu_i = -1, \forall i \in \partial\Lambda$. Além das condições de contorno descritas acima, 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.

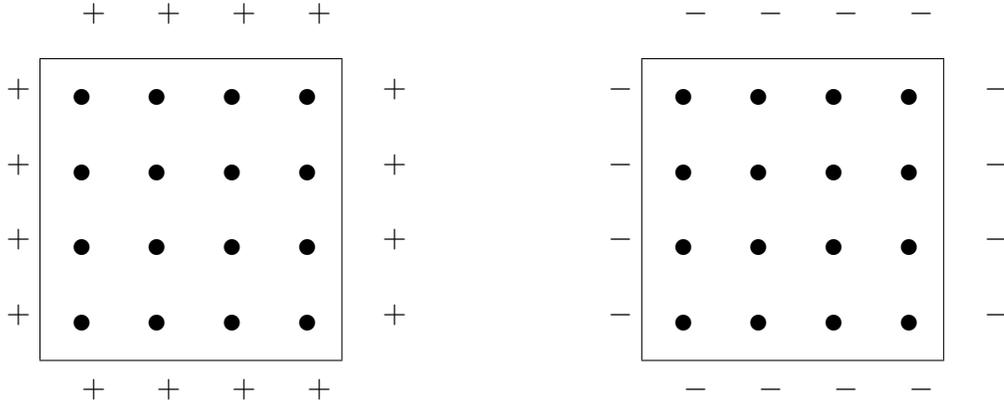


Figura 4: Imposição de condições de contorno

Como cada variável de spin em Λ pode assumir apenas dois valores (+1 ou -1) é conveniente considerar o número n_+ de spins com valor +1 e o número n_- de spins com valor -1 (evidentemente $n_+ + n_- = |\Lambda|$). Assim, a magnetização M pode ser escrita simplesmente como $M = n_+ - n_-$. Contudo, convém observar que fixado n_+ , por exemplo, podemos ter diversas *configurações microscópicas* $\{\sigma\}$ compatíveis com n_+ e M . Assim, torna-se plausível considerar um *espaço de configurações* Ω cujo número de elementos $|\Omega|$ é dado por

$$|\Omega| = \sum_{n_+=0}^{|\Lambda|} \frac{|\Lambda|!}{n_+! (|\Lambda| - n_+)!} = 2^{|\Lambda|}.$$

Em termos matematicamente mais refinados, uma configuração $\{\sigma\}$ em Λ é uma função $\{\sigma\} : \Lambda \rightarrow \Omega$, em que $\Omega = \{-1, 1\}^{|\Lambda|}$.

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

$$H_{\Lambda,cc}(\{\sigma\}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in \Lambda} h_i \sigma_i - \sum_{\langle i,j \rangle: i \in \Lambda, j \in \partial \Lambda} J_{ij} \sigma_i \mu_j \quad (1)$$

onde a primeira soma descreve as interações ferromagnéticas entre pares *não ordenados* de sítios vizinhos $\langle i, j \rangle \in \Lambda$, i.e., para os quais $\|i - j\| = 1$; a segunda soma descreve as interações dos spins da rede Λ com o campo magnético externo h_i em cada sítio $i \in \Lambda$ e a terceira soma descreve interações devidas às condições de contorno (veja a figura 4 para exemplos de condições de contorno positivas e negativas).

Definido o Hamiltoniano do sistema, o próximo passo consiste em iniciar o tratamento probabilístico do sistema, considerando as $2^{|\Lambda|}$ configurações de spin possíveis, dado que $|\Lambda|$ é o número de sítios da rede Λ . Para tanto, definimos a *função partição* $Z_{\Lambda,cc}$ a volume Λ e condições de contorno cc como

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

em que $\sum_{\{\sigma\}}$ denota a soma sobre todas as $2^{|\Lambda|}$ configurações possíveis, $\beta = 1/kT$ é o inverso da temperatura (k denota a constante de Boltzmann) e $\exp[-\beta H_{\Lambda,cc}(\{\sigma\})]$ é o fator de Boltzmann, tradicional em mecânica estatística.

A partir de (1) e (2) podemos construir os potenciais termodinâmicos (cujas derivadas geram grandezas físicas) a volume finito ou calcular o valor esperado de certas grandezas de interesse. Para tanto, consideremos as seguintes definições.

Definição 2.1 (Energia livre) *A energia livre a volume finito Λ e com condições de contorno cc , prescritas pela configuração $\{\mu\}$, é definida por*

$$f_{\Lambda,cc} \equiv -\frac{1}{\beta} \frac{\ln(Z_{\Lambda,cc})}{|\Lambda|}.$$

Observação A grandeza

$$p_{\Lambda,cc} \equiv \frac{\ln(Z_{\Lambda,cc})}{|\Lambda|}$$

é chamada de *pressão* a volume finito e com condições de contorno cc e ela será objeto do nosso estudo.

A energia livre é um dos objetos centrais da mecânica estatística. Sua construção considera aspectos das estruturas microscópica e probabilística do sistema, ambas contidas na função partição. Além disso, a energia livre é uma relação termodinâmica fundamental e por conseguinte ela é capaz de fornecer grandezas macroscópicas de interesse (a volume finito), tais como a magnetização $M_{\Lambda,cc} = -\frac{\partial f_{\Lambda,cc}}{\partial h}$ e a susceptibilidade magnética $\chi_{\Lambda,cc} = \frac{\partial M_{\Lambda,cc}}{\partial h} = -\frac{\partial^2 f_{\Lambda,cc}}{\partial h^2}$.

As duas definições dadas a seguir referem-se ao postulado de Gibbs-Boltzmann, segundo o qual um sistema em equilíbrio tem a distribuição de probabilidade prescrita pela definição (2.2), de forma que as grandezas macroscópicas são valores médios segundo tal distribuição.

Definição 2.2 (Distribuição canônica de Gibbs) *A probabilidade associada à configuração $\{\sigma\}$ é definida por*

$$P(\{\sigma\}) = \frac{\exp[-\beta H_{\Lambda,cc}(\{\sigma\})]}{Z_{\Lambda,cc}}.$$

Definição 2.3 (Valor esperado) *O valor esperado de uma função $\varphi(\{\sigma\})$ das configurações $\{\sigma\}$ a volume finito Λ e condições de contorno cc , prescritas por $\{\mu\}$, é definido por*

$$\langle \varphi(\{\sigma\}) \rangle_{\Lambda,cc} = \frac{1}{Z_{\Lambda,cc}} \sum_{\{\sigma\}} \varphi(\{\sigma\}) \exp(-\beta H_{\Lambda,cc}). \quad (3)$$

Se $\varphi(\{\sigma\}) = \prod_{k=1}^n \sigma_{i_k}$, então o valor esperado $\langle \prod_{k=1}^n \sigma_{i_k} \rangle_{\Lambda}$ é denominado de *função correlação* dos n spins $\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2}, \dots, \sigma_{i_n}$. Em particular, se $n = 1$, esse valor esperado é chamado de *magnetização* e se $n = 2$, o mesmo é chamado de *correlação spin-spin*. No presente trabalho, vamos provar, entre outras coisas, a primeira desigualdade de Griffiths, isto é, vamos provar que a função correlação de n spins é não negativa se o modelo em estudo for ferromagnético.

Fixadas a condição de contorno e o volume, todas as grandezas definidas acima são funções dos parâmetros do modelo, a saber: β , h_i e J_{ij} . Grandezas tais como $\ln(Z_{\Lambda,cc})$ são analíticas para valores reais dos parâmetros e suas derivadas podem ser calculadas. Por exemplo,

$$\frac{\partial \ln(Z_{\Lambda,cc})}{\partial h_i} = \beta \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda,cc}$$

e

$$\frac{\partial^2 \ln(Z_{\Lambda,cc})}{\partial h_i \partial h_j} = \beta^2 (\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda,cc} - \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda,cc} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda,cc}),$$

e ambas são funções analíticas. Portanto, se quisermos estudar as descontinuidades observadas experimentalmente como mostram os gráficos da figura (2), temos que tomar o limite $|\Lambda| \rightarrow \infty$. A esse limite chamamos de *limite termodinâmico*. Neste trabalho, vamos mostrar que o limite termodinâmico (tomado no sentido de Van Hove) para a energia livre do modelo de Ising com condições de contorno *cc* existe e é igual ao limite obtido com condições livres. Provaremos este resultado como conseqüência da primeira desigualdade de Griffiths.

3 A primeira desigualdade de Griffiths

Em sistemas ferromagnéticos a interação entre dois spins vizinhos σ_i e σ_j é relevante tanto para os próprios interagentes quanto para os demais spins da Λ , afinal $J_{ij} \geq 0, \forall \langle i, j \rangle \in \Lambda$. Assim, no ferromagnetismo o estado $\sigma_i = \sigma_j$ (spins paralelos) é *mais provável* do que o estado $\sigma_i = -\sigma_j$ (spins antiparalelos), de modo que o *valor esperado* para o produto $\sigma_i \sigma_j$ deve ser não negativo. Colocado de modo mais preciso, a correlação deve ser não-negativa, isto é, $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda \geq 0$. Tal raciocínio constitui a essência da primeira desigualdade de Griffiths, enunciada e provada a seguir.

Definição 3.1 *Sejam Λ um subconjunto finito qualquer de \mathbb{Z}^d , $A \subset \Lambda$ e $n_i \in \mathbb{N}$ para cada $i \in A$. Então definimos σ^A como:*

$$\sigma^A = \prod_{i \in A} \sigma_i^{n_i}.$$

Teorema 3.1 (Primeira desigualdade de Griffiths) *Considere o modelo de Ising d -dimensional com Hamiltoniano ferromagnético (1) e condições de contorno livres, ou positivas, ou periódicas ou uma combinação destas. Então, para qualquer subconjunto $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, temos que:*

$$\langle \sigma^A \rangle_\Lambda \geq 0$$

para qualquer $A \subset \Lambda$ e para qualquer $\beta \geq 0$.

Prova: A seguir, apresentaremos a prova para condições de contorno livres (uma indicação para o caso não livre será citada oportunamente ao longo da prova.)

Como a função partição é uma soma de parcelas positivas, isto é, como $Z_\Lambda > 0$, basta mostrar que:

$$\sum_{\{\sigma\}} \sigma^A \exp(-\beta H_\Lambda) \geq 0. \quad (4)$$

Para tanto, vamos concentrar nossa atenção no fator de Boltzmann:

$$\exp(-\beta H_\Lambda) = \prod_{i \in \Lambda} e^{\beta h_i \sigma_i} \prod_{\langle i, j \rangle} \underbrace{\exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j)}_{\text{expandir}}. \quad (5)$$

Expandindo $\exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j)$ em série de Taylor obtemos:

$$\exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j) = 1 + \frac{\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j}{1!} + \frac{(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j)^2}{2!} + \frac{(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j)^3}{3!} + \dots$$

Mas, como $\sigma_i = \pm 1$, $\forall i \in \Lambda$ segue-se que:

$$(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j)^k = \begin{cases} (\beta J_{ij})^k & \text{se } k \text{ é par} \\ (\beta J_{ij})^k \sigma_i \sigma_j & \text{se } k \text{ é ímpar} \end{cases}$$

Logo, agrupando os termos de expoentes pares separadamente dos de expoentes ímpares podemos deduzir que:

$$\begin{aligned} \exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j) &= \cosh(\beta J_{ij}) + \sinh(\beta J_{ij}) \sigma_i \sigma_j \\ &= \cosh(\beta J_{ij}) [1 + \tanh(\beta J_{ij}) \sigma_i \sigma_j] \end{aligned} \quad (6)$$

Agora, substituindo (6) na (5) o fator de Boltzmann pode ser reescrito como³

$$\exp(-\beta H_\Lambda) = \left[\prod_{\langle i, j \rangle} \cosh(\beta J_{ij}) [1 + \tanh(\beta J_{ij}) \sigma_i \sigma_j] \right] \prod_{i \in \Lambda} e^{\beta h_i \sigma_i}, \quad (7)$$

em que o produtório entre colchetes deve ser desenvolvido entre pares de primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$. Deste modo, substituindo (7) em (4) obtemos:

$$\sum_{\{\sigma\}} \sigma^A \exp(-\beta H_\Lambda) = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i \in \Lambda} e^{\beta h_i \sigma_i} \prod_{\langle i, j \rangle} \cosh(\beta J_{ij}) [\sigma^A + \tanh(\beta J_{ij}) \sigma_i \sigma_j \sigma^A]$$

Desenvolvendo inicialmente os produtórios da expressão acima obtemos uma soma $\sum_m c_m P_m$, na qual cada termo é constituído de um produto envolvendo variáveis de spin

$$P_m = \sigma_{i_1}^{n_{i_1}} \dots \sigma_{i_m}^{n_{i_m}} \prod_{i \in \Lambda} e^{\beta h_i \sigma_i}$$

e de um prefator da forma c_m envolvendo produtos de funções hiperbólicas, ora $\cosh(\beta J_{ij})$, ora $\cosh(\beta J_{ij}) \tanh(\beta J_{ij})$. Logo:

$$\sum_{\{\sigma\}} \sigma^A \exp(-\beta H_\Lambda) = \sum_{\{\sigma\}} \sum_m c_m P_m = \sum_m c_m \sum_{\{\sigma\}} P_m.$$

³Para outras condições de contorno basta incluir na eq. (7) um fator $\prod \exp(\beta J_{ij} \sigma_i \mu_j)$ e desenvolver uma análise análoga à apresentada na prova do caso livre.

Observemos agora que cada $c_m \geq 0$, pois $\cosh(\beta J_{ij}) > 0$ e $\tanh(\beta J_{ij}) \geq 0$ para $J_{ij} \geq 0$, $\forall \langle i, j \rangle \in \Lambda$. Por outro lado, caso todos os expoentes n_i definidos em P_m sejam pares temos que $P_m = \prod_{i \in \Lambda} e^{\beta h_i \sigma_i}$ e por conseguinte a soma das configurações é positiva, pois

$$\sum_{\{\sigma\}} \prod_{i \in \Lambda} \exp(\beta h_i \sigma_i) > 0.$$

Além disso, a ocorrência de pelo menos um expoente n_j ímpar em P_m nos fornece $P_m = \sigma_j^{n_j} \prod_{i \in \Lambda} e^{\beta h_i \sigma_i}$ e por conseguinte a soma das configurações é positiva, pois para h_j não negativo temos

$$\sum_{\sigma_j = \pm 1} \sigma_j e^{\beta h_j \sigma_j} = 2 \sinh(\beta h_j) > 0.$$

Utilizando tais argumentos, podemos concluir que:

$$\sum_{\{\sigma\}} \sigma^A \exp(-\beta H_\Lambda) \geq 0,$$

como queríamos demonstrar. □

Corolário 3.1 *Sob as hipóteses do teorema (3.1), $Z_\Lambda(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})$ é uma função crescente com respeito a β , J_{ij} e h_i .*

Prova: Basta observar que a derivada parcial de Z_Λ com respeito a qualquer uma de suas variáveis será sempre um múltiplo positivo do valor esperado de um produto de variáveis de spin, este por sua vez também positivo pela primeira desigualdade de Griffiths. □

4 O limite termodinâmico via hipercubos

Nesta seção, utilizamos a primeira desigualdade de Griffiths para provar a existência do limite termodinâmico para a energia livre do modelo de Ising com condições de contorno livres. Em particular, tomaremos uma seqüência de hipercubos com dimensão linear da forma $L_n = 2^{n+1}$, em que $n = 1, 2, \dots$.

Proposição 4.1 *Considere o modelo de Ising d -dimensional com Hamiltoniano ferromagnético (1) e com constantes de acoplamento J_{ij} e campo*

magnético externo h_i uniformemente limitados por J e h , respectivamente. Se Λ é um subconjunto finito qualquer da rede \mathbb{Z}^d , então

$$p_{\Lambda, cc}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\}) \leq \ln(2d\beta J + h) + \ln 2 + \beta J \frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|}.$$

Prova: Lembrando que o Hamiltoniano ferromagnético (1) envolve somente interações de primeiros vizinhos, podemos escrever o fator de Boltzmann como:

$$\exp(-\beta H_{\Lambda, cc}) = \left[\prod_{i \in \Lambda} e^{h_i \sigma_i} \prod_{j \in \Lambda: \|j-i\|=1} \exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j) \right] \prod_{\langle i, j \rangle, i \in \Lambda, j \in \Lambda^c} \exp(\beta J_{ij} \sigma_i \mu_j).$$

Inicialmente, notemos que $\sigma_i \sigma_j \leq 1$ para cada par de sítios da rede e que para interações ferromagnéticas uniformemente limitadas

$$\exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j) \leq \exp(\beta J). \quad (8)$$

Observemos agora que, para cada sítio $i \in \Lambda$, existem, no máximo, $2d$ (d =dimensão espacial da rede) sítios j com os quais o sítio fixado i interage. Logo, para cada sítio $i \in \Lambda$ fixado, o produtório envolvendo os sítios

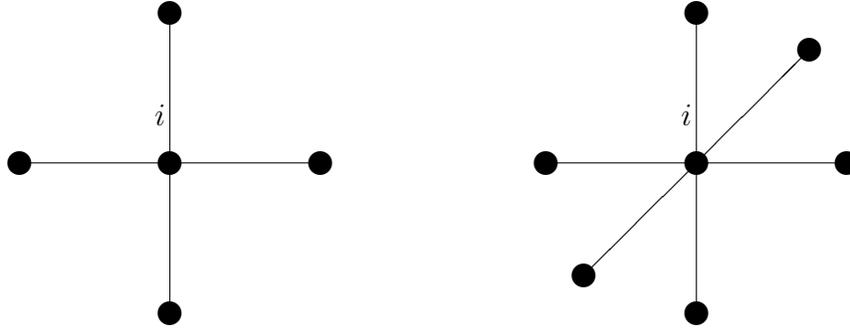


Figura 5: Número de primeiros vizinhos em $d = 2$ e $d = 3$

vizinhos j possui, no máximo, $2d$ fatores. Consequentemente, se utilizarmos a cota superior (8) em cada fator do produtório em j , com $\|j - i\| = 1$, então poderemos deduzir que:

$$\prod_{j: \|j-i\|=1} \exp(\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j) \leq \underbrace{\exp(\beta J) \exp(\beta J) \dots \exp(\beta J)}_{2d \text{ fatores}} = \exp(2d\beta J).$$

Logo:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta H_{\Lambda, cc}) &\leq \left[\prod_{i \in \Lambda} e^{h_i} \exp(2d\beta J) \right] \left[\prod_{\langle ij \rangle, i \in \Lambda, j \in \Lambda^c} \exp(\beta J_{ij}) \right] \\ &\leq [\exp(2d\beta J + h)]^{|\Lambda|} [\exp(\beta J)]^{|\partial\Lambda|}. \end{aligned}$$

Usamos esta última desigualdade para obter uma cota superior, exponencial na área superficial e no volume da rede Λ , para a função partição:

$$Z_{\Lambda} \leq [2 \exp(2d\beta J + h)]^{|\Lambda|} [\exp(\beta J)]^{|\partial\Lambda|}.$$

Segue desta última desigualdade que

$$p_{\Lambda, cc}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\}) \leq \ln(2d\beta J + h) + \ln 2 + \beta J \frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|}.$$

□

Observação As hipóteses da proposição (4.1) são satisfeitas se os supremos $\sup_i \{\sum_j J_{ij}\}$ e $\sup_i \{\sum_i h_i\}$ são ambos finitos. Dentro desta classe de modelos estão aqueles ferromagnéticos invariantes por translação com interações de longo alcance somáveis, isto é, aqueles sistemas tais que $0 \leq J_{ij} = J(\|i - j\|)$ $\forall i, j$, $0 \leq h_i = h < \infty \forall i$ e $\sum_i J_{\|i\|} < \infty$.

A seguir, tomaremos uma seqüência de hipercubos encaixantes da forma:

$$\Lambda_n \equiv [-2^n, 2^n] \times \cdots \times [-2^n, 2^n] \bigcap \mathbb{Z}^d, \quad (9)$$

onde $n = 1, 2, \dots$. Mostraremos, na próxima proposição, que com condições de contorno livres, a seqüência de funções $\{p_{\Lambda_n}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})\}$, $n = 1, 2, \dots$, é monótona crescente.

Proposição 4.2 *Considere o modelo de Ising d -dimensional com Hamiltoniano ferromagnético (1) e condições de contorno livres e seja Λ_n o hipercubo definido por (9). Então:*

$$p_{\Lambda_n}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\}) \leq p_{\Lambda_{n+1}}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\}) \quad \forall n = 1, 2, \dots$$

Prova: Vamos assumir que a dimensão espacial do modelo de Ising é $d = 2$. Isto facilitará a exposição, embora os mesmos argumentos sejam válidos para qualquer dimensão. Inicialmente, observemos que como a rede Λ_{n+1} é definida por:

$$\Lambda_{n+1} \equiv [-2^{n+1}, 2^{n+1}] \times [-2^{n+1}, 2^{n+1}] \bigcap \mathbb{Z}^2,$$

podemos reescreve-la como a união de quatro volumes disjuntos $\Lambda_n^{(k)}$, $k = 1, \dots, 4$, que são translações rígidas de Λ_n :

$$\Lambda_{n+1} = \bigcup_{k=1}^4 \Lambda_n^{(k)} \Rightarrow |\Lambda_{n+1}| = |\Lambda_n^{(1)}| + |\Lambda_n^{(2)}| + |\Lambda_n^{(3)}| + |\Lambda_n^{(4)}| = 4|\Lambda_n|$$

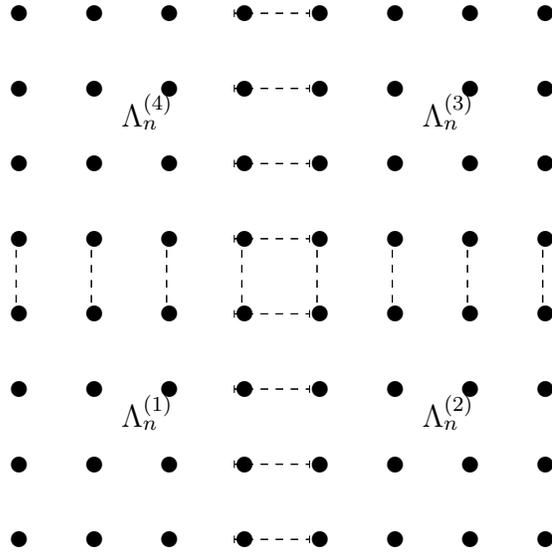


Figura 6: Rede Λ_{n+1}

Vamos agora redefinir o Hamiltoniano para a rede Λ_{n+1} , introduzindo um parâmetro a capaz de incorporar (ou ignorar) as interações entre os spins situados nas fronteiras das regiões $\Lambda_n^{(k)}$:

$$\tilde{H}(a) = H_{\Lambda_n^{(1)}} + H_{\Lambda_n^{(2)}} + H_{\Lambda_n^{(3)}} + H_{\Lambda_n^{(4)}} - a \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j,$$

em que a última soma é realizada sobre pares de sítios vizinhos i, j localizados em volumes $\Lambda_n^{(k)}$ diferentes, como mostra a figura 6. Observe que atribuir o valor $a = 1$ ao parâmetro significa incorporar todas as interações entre os spins das fronteiras dos volumes elementares $\Lambda_n^{(k)}$, $k = 1, \dots, 4$ de modo que $\tilde{H}(1) = H_{\Lambda_{n+1}}$. Por outro lado, se tomarmos $a = 0$, então $\tilde{H}(0) = H_{\Lambda_n^{(1)}} + H_{\Lambda_n^{(2)}} + H_{\Lambda_n^{(3)}} + H_{\Lambda_n^{(4)}}$. Em termos da função partição⁴ com parâmetro

⁴a notação $\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}$ foi utilizada para enfatizar que a soma deve ser realizada sobre todas as configurações da rede Λ_{n+1} .

a , definida por

$$\tilde{Z}(a) = \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}} \exp[-\beta\tilde{H}(a)],$$

é possível deduzir que:

$$\tilde{Z}(1) = Z_{\Lambda_{n+1}} \quad (10)$$

$$\tilde{Z}(0) = Z_{\Lambda_n}^4 \quad (11)$$

pois:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(0) &= \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}} \exp[-\beta\tilde{H}(0)] = \\ &= \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}} \exp[-\beta(H_{\Lambda_n^{(1)}} + H_{\Lambda_n^{(2)}} + H_{\Lambda_n^{(3)}} + H_{\Lambda_n^{(4)}})] = \\ &= \prod_{i=1}^4 \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_n^{(i)}}} \exp(-\beta H_{\Lambda_n^{(i)}}) = Z_{\Lambda_n}^4. \end{aligned}$$

Considerando ainda a expressão paramétrica da função partição, podemos invocar o *teorema fundamental do cálculo* para estabelecer que:

$$\tilde{Z}(1) - \tilde{Z}(0) = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial a} \tilde{Z}(a) da. \quad (12)$$

Mas, substituindo (10) e (11) em (12) tem-se:

$$Z_{\Lambda_{n+1}} = Z_{\Lambda_n}^4 + \int_0^1 \frac{\partial}{\partial a} \tilde{Z}(a) da. \quad (13)$$

Estudemos, pois, a integral $\int_0^1 \frac{\partial}{\partial a} \tilde{Z}(a) da$, concentrando nossa atenção no integrando:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a} \tilde{Z}(a) &= \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}} \beta \left(\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \right) \exp[-\beta\tilde{H}(a)] \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} \beta J_{ij} \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}} \sigma_i \sigma_j \exp[-\beta\tilde{H}(a)]. \end{aligned}$$

Mas, para cada par $\langle i, j \rangle$, temos:

$$J_{ij} \sum_{\{\sigma\}_{\Lambda_{n+1}}} \sigma_i \sigma_j \exp[-\beta\tilde{H}(a)] = J_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_{n+1}} \tilde{Z}(a),$$

que é não negativa, pois pela primeira desigualdade de Griffiths, sabemos que $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_{n+1}} \geq 0$. Além disto, $J_{ij} \geq 0$ para interações ferromagnéticas e $\tilde{Z}(a) > 0$, pois $\tilde{Z}(a)$ é uma soma de parcelas positivas. Portanto, o integrando é uma soma de parcelas positivas e então

$$\int_0^1 \frac{\partial}{\partial a} \tilde{Z}(a) da \geq 0. \quad (14)$$

Ora, substituindo (14) na (13), podemos deduzir a seguinte desigualdade:

$$Z_{\Lambda_{n+1}} \geq Z_{\Lambda_n}^4.$$

Conseqüentemente:

$$\ln(Z_{\Lambda_{n+1}}) \geq \ln(Z_{\Lambda_n}^4) \Rightarrow \ln(Z_{\Lambda_{n+1}}) \geq 4 \ln(Z_{\Lambda_n}).$$

Considerando agora $p_{\Lambda_{n+1}}$:

$$\frac{\ln(Z_{\Lambda_{n+1}})}{|\Lambda_{n+1}|} = \frac{\ln(Z_{\Lambda_{n+1}})}{4|\Lambda_n|} \Rightarrow \frac{\ln(Z_{\Lambda_{n+1}})}{|\Lambda_{n+1}|} \geq \frac{\ln(Z_{\Lambda_n})}{|\Lambda_n|} \Rightarrow p_{\Lambda_{n+1}} \geq p_{\Lambda_n}.$$

Ou seja, $\{p_{\Lambda_n}\}$ é uma seqüência monótona crescente com respeito a Λ_n . □

Proposição 4.3 *Considere o modelo de Ising d -dimensional com Hamiltoniano ferromagnético (1) e condições de contorno livres e seja Λ_n o hipercubo definido por (9). Então a seqüência $\{p_{\Lambda_n}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})\}$ converge pontualmente quando $n \rightarrow \infty$.*

Prova: A área do hipercubo d -dimensional Λ_n , definido pela equação (9), é $2d \times (2 \times 2^n)^{d-1}$ enquanto que o seu volume é $(2 \times 2^n)^d$. Portanto, a razão da sua área pelo seu volume é igual a $d/2^n$, não ultrapassando o valor $d/2$, para $n \geq 1$. Segue da proposição (4.1) que a seqüência das pressões $\{p_{\Lambda_n}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})\}$ é uniformemente limitada em n . Como, pela proposição (4.2), esta seqüência é monótona crescente, então ela é necessariamente convergente, o que prova a afirmação. □

Denotemos por $p = p(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})$ ao limite

$$p(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\}) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} p_{\Lambda_n}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\}), \quad (15)$$

onde Λ_n é o hipercubo de aresta 2^{n+1} centrado na origem. Ao processo de limite descrito acima, chamamos de *limite termodinâmico*.

5 O limite no sentido de Van Hove

Uma das questões básicas da mecânica estatística do equilíbrio é determinar para que Hamiltonianos, para que condições de contorno e para que seqüências de volumes somos capazes de mostrar a *existência* do limite termodinâmico. A proposição (4.3) estabelece a existência desse limite para o modelo de Ising com condições de contorno livres e quando os volumes são hipercubos da forma (9). A seguir, generalizamos a seqüência de volumes para a qual o limite termodinâmico do modelo de Ising deve existir. Elas são chamadas de seqüências de Van Hove e apresentaremos a definição das mesmas seguindo a exposição realizada em [5].

Seja $a = (a_1, \dots, a_d) \in \mathbb{Z}^d$. Se $a_1 > 0, \dots, a_d > 0$, então definimos:

$$\Lambda(a) = \{x \in \mathbb{Z}^d : 0 \leq x_k < a_k, k = 1, \dots, d\}.$$

Se $\Lambda(a)$ é transladado por um vetor $ta = (t_1 a_1, \dots, t_d a_d)$, em que $t \in \mathbb{Z}^d$, o resultado é o conjunto

$$\Lambda^t = \Lambda(a) + ta$$

e a família $(\Lambda^t)_{t \in \mathbb{Z}^d}$ forma uma partição de \mathbb{Z}^d .

Dado $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, sejam $N_a^+(\Lambda)$ o número de conjuntos Λ^t tais que $\Lambda^t \cap \Lambda \neq \emptyset$ e $N_a^-(\Lambda)$ o número de conjuntos Λ^t tais que $\Lambda^t \subset \Lambda$.

Definição 5.1 *Uma seqüência de conjuntos $\{\Lambda_n\}$ tende a infinito no sentido de Van Hove se*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} N_a^-(\Lambda_n) = +\infty \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_a^+(\Lambda_n)}{N_a^-(\Lambda_n)} = 1$$

para todo a .

Definição 5.2 *Dois hipercubos $q_1, q_2 \subset \mathbb{R}^d$ são ditos conexos se eles têm uma face $d-1$ dimensional em comum. Caso contrário, eles são desconexos.*

Observação: De maneira similar define-se conexidade de cubos em \mathbb{Z}^d e é neste sentido que a conexidade será usada abaixo. Observe que, em duas dimensões, dois quadrados são desconexos mesmo que eles tenham um vértice em comum ou que, em três dimensões, dois cubos são desconexos mesmo que eles tenham um vértice ou uma aresta em comum.

Antes de enunciar e provar o teorema desta seção, vamos estabelecer uma proposição que nos será útil a seguir.

Proposição 5.1 *Sob as hipóteses do teorema (3.1), se $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$ então $Z_{\Lambda_1} \leq Z_{\Lambda_2}$.*

Prova: Basta aplicar o teorema fundamental do cálculo como feito na prova da proposição 4.2, em particular veja a equação 12. O integrando é a função partição Z_{Λ_2} e a interpolação é feita para os pares de primeiros vizinhos em $\Lambda_2 - \Lambda_1$. □

Teorema 5.1 *Considere o modelo de Ising d -dimensional com Hamiltoniano ferromagnético invariante por translações (1). Suponha condições de contorno livres e seja $\{\Lambda_n\}$ uma seqüência de Van Hove. Então a seqüência de pressões $\{p_{\Lambda_n}(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})\}$ converge pontualmente, quando $n \rightarrow \infty$, para a função $p(\beta, \{J_{ij}\}, \{h_i\})$ definida pela equação (15).*

Prova: Fixe um número inteiro positivo k e seja a o vetor de entradas $a_i = 2^k \forall i = 1, 2, \dots, d$. Representemos por q_a ao cubo de vértice na origem e de lado 2^k e representemos por q_a^t ao cubo transladado de ta . Se t é um vetor de entradas nulas, exceto pela i -ésima entrada cujo valor é 1, então $q_a \cup q_a^t$ é conexo. Notando agora que na face comum aos hipercubos há interações entre sítios vizinhos $i \in q_a$ e $j \in q_a^t$, podemos relacionar as funções de partição Z_{q_a} , $Z_{q_a^t}$ e $Z_{q_a \cup q_a^t}$ utilizando o argumento apresentado na prova da proposição 4.2. Assim, deduzimos que:

$$Z_{q_a} \times Z_{q_a^t} \leq Z_{q_a \cup q_a^t}.$$

Como a seqüência $\{\Lambda_n\}$ é de Van Hove, existe um inteiro n_0 a partir do qual $N_a^-(\Lambda_n) \geq 1 \forall n \geq n_0$. Representemos por r_n à união (conexa) de todos os hipercubos q_a^t , $t \in \mathbb{Z}_+^d$, contidos em Λ_n e representemos por R_n à união (conexa) dos mesmos hipercubos que interceptam Λ_n . Assim, invocando a proposição 5.1 temos:

$$Z_{r_n} \leq Z_{\Lambda_n} \leq Z_{R_n}. \quad (16)$$

Analisemos então Z_{r_n} e Z_{R_n} . Utilizando mais uma vez o argumento apresentado na proposição 4.2 podemos deduzir que:

$$\prod_{i=1}^{N_a^-(\Lambda_n)} Z_{q_a^{t_i}} \leq Z_{r_n} \quad (17)$$

Por outro lado, afirmamos que:

$$Z_{R_n} \leq \exp[\beta J 2^{(d-1)k} (2d)^2 N_a^+(\Lambda_n)] \prod_{i=1}^{N_a^+(\Lambda_n)} Z_{q_a^{t_i}}. \quad (18)$$

Para estabelecer tal desigualdade, consideremos separadamente as interações nas faces comuns aos hipercubos componentes de R_n e o respectivo fator

de Boltzmann associado às mesmas. Inicialmente, notemos que cada face comum a dois hipercubos conexos tem $2^{(d-1)k}$ sítios e que cada sítio tem no máximo $2d$ vizinhos. Assim, o número máximo de interações em uma face comum é $2^{(d-1)k} \times 2d$. Por outro lado, cada hipercubo possui no máximo $2d$ hipercubos vizinhos, de modo que o o número total de interações nas faces de *um* hipercubo é $2^{(d-1)k} \times 2d \times 2d$ e o fator de Boltzmann associado é $\exp[\beta J 2^{(d-1)k} 2d 2d]$. Por fim, lembrando que o número de hipercubos em R_n é exatamente $N_a^+(\Lambda_n)$ temos que o fator de Boltzmann associado a todas interações nas faces comuns aos hipercubos componentes de R_n é no máximo $\exp[\beta J 2^{(d-1)k} 2d 2d N_a^+(\Lambda_n)]$. Tal resultado nos conduz a (18). Conectando (16),(17) e (18) temos

$$\prod_{i=1}^{N_a^-(\Lambda_n)} Z_{q_a^{t_i}} \leq Z_{\Lambda_n} \leq \exp[\beta J 2^{(d-1)k} (2d)^2 N_a^+(\Lambda_n)] \prod_{i=1}^{N_a^+(\Lambda_n)} Z_{q_a^{t_i}}.$$

De posse da última desigualdade e usando a invariância translacional⁵ dos volumes e da função partição ($Z_{q_a} = Z_{q_a^{t_i}} \forall i$), concluímos que:

$$Z_{q_a}^{N_a^-(\Lambda_n)} \leq Z_{\Lambda_n} \leq \exp[\beta J 2^{(d-1)k} (2d)^2 N_a^+(\Lambda_n)] Z_{q_a}^{N_a^+(\Lambda_n)}.$$

Tomando o logaritmo da desigualdade acima e depois dividindo por $|\Lambda_n|$ temos:

$$\begin{aligned} & \frac{|q_a| N_a^-(\Lambda_n)}{|\Lambda_n|} \frac{1}{|q_a|} \ln Z_{q_a} \\ & \leq \frac{1}{|\Lambda_n|} \ln Z_{\Lambda_n} \leq \\ & \frac{|q_a| N_a^+(\Lambda_n)}{|\Lambda_n|} \frac{1}{|q_a|} \ln Z_{q_a} + \frac{\beta J 2^{(d-1)k} (2d)^2 N_a^+(\Lambda_n)}{|\Lambda_n|}. \end{aligned}$$

Como a seqüência é de Van Hove, temos que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|q_a| N_a^\pm(\Lambda_n)}{|\Lambda_n|} = 1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2^{(d-1)k} N_a^+(\Lambda_n)}{|\Lambda_n|} = \frac{1}{2^k}.$$

Finalmente, tomando o $\limsup_{n \rightarrow \infty}$ e o $\liminf_{n \rightarrow \infty}$, obtemos:

$$p_{q_a} \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \ln Z_{\Lambda_n} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \ln Z_{\Lambda_n} \leq p_{q_a} + \frac{\beta J (2d)^2}{2^k}.$$

⁵Significa que as constantes de acoplamento J_{ij} dependem apenas das posições relativas dos sítios e não das posições absolutas dos mesmos na rede. Assim, cada cubo q_a^t pode ser obtido pela translação rígida (sem rotação) do cubo q_a com vértice na origem.

Como o inteiro k é arbitrário, podemos tomá-lo tão grande quanto se queira. O resultado segue então da desigualdade acima, da proposição (4.3) e da definição (15), pois

$$p \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \ln Z_{\Lambda_n} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \ln Z_{\Lambda_n} \leq p.$$

□

6 Independência das condições de contorno

Por fim, provamos abaixo que a energia livre do modelo de Ising independe da condição de contorno se o limite for tomado sobre seqüências de Van Hove.

Teorema 6.1 *Considere o modelo de Ising d -dimensional com condição de contorno arbitrária, definido pelo Hamiltoniano ferromagnético invariante por translações (1), e seja $\{\Lambda_n\}$ uma seqüência de Van Hove. Então o limite termodinâmico para a energia livre independe da condição de contorno.*

Prova: Fixemos inicialmente um volume $\Lambda_n \equiv \Lambda$. O Hamiltoniano $H_{\Lambda, \mu}$ do sistema de spins com condição de contorno arbitrária $\{\mu\}$ pode ser escrito como

$$H_{\Lambda, \mu} = H_{\Lambda} - \sum_{i \in \Lambda, j \in \partial \Lambda} J_{ij} \sigma_i \mu_j,$$

em que H_{Λ} denota o Hamiltoniano do sistema com contorno livre e $-\sum J_{ij} \sigma_i \mu_j$ denota as interações devidas à condição de contorno $\{\mu\}$. Nesse contexto, a função partição é dada por

$$Z_{\Lambda, \mu} = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta H_{\Lambda}) \exp\left(\beta \sum_{i \in \Lambda, j \in \partial \Lambda} J_{ij} \sigma_i \mu_j\right). \quad (19)$$

Para relacionar (19) e a função partição Z_{Λ} associada ao sistema com contorno livre vamos nos concentrar no fator de Boltzmann $\exp(\beta \sum J_{ij} \sigma_i \mu_j)$. Inicialmente, observemos que se $|\partial \Lambda|$ denota o número de sítios da fronteira $\partial \Lambda$, então

$$-J|\partial \Lambda| \leq \sum_{i \in \Lambda, j \in \partial \Lambda} J_{ij} \sigma_i \mu_j \leq +J|\partial \Lambda|,$$

pois $\sigma = \pm 1$ e $\mu = \pm 1$. Ademais, como $\beta \geq 0$ temos

$$\exp(-\beta J |\partial \Lambda|) \leq \exp\left(\beta \sum_{i \in \Lambda, j \in \partial \Lambda} J_{ij} \sigma_i \mu_j\right) \leq \exp(\beta J |\partial \Lambda|). \quad (20)$$

Logo, conectando (20) e (19) podemos deduzir que

$$\exp(-\beta J |\partial\Lambda|) Z_\Lambda \leq Z_{\Lambda,\mu} \leq \exp(+\beta J |\partial\Lambda|) Z_\Lambda.$$

Tomando o logaritmo da expressão anterior e depois dividindo por $|\Lambda|$ temos

$$-\beta J \frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|} + p_\Lambda \leq p_{\Lambda,\mu} \leq +\beta J \frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|} + p_\Lambda,$$

ou seja,

$$|p_{\Lambda,\mu} - p_\Lambda| \leq \beta J \frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|}.$$

Mas, como por hipótese $\{\Lambda_n\}$ tende a infinito no sentido de Van Hove, então $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\partial\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} = 0$ e por conseguinte $\lim_{n \rightarrow \infty} |p_{\Lambda_n,\mu} - p_{\Lambda_n}| = 0$ para qualquer condição de contorno $\{\mu\}$. Usando o resultado do teorema (5.1), podemos então concluir a que o limite independe das condições de contorno. □

Agradecimentos

F. F. Araujo Jr. agradece ao professor Michel Spira pelo incentivo na publicação deste trabalho. Os dois autores agradecem ao professor Bernardo N. B. Lima e ao referee anônimo pelas correções e sugestões feitas neste trabalho, e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo apoio financeiro.

Referências

1. J. Glimm, A. Jaffe, *Quantum Physics: A Functional Integral Point of View*, Springer-Verlag, New York, (1987).
2. R. B. Griffiths, *Correlations in Ising Ferromagnets I*, J. Math. Phys., **8**, 478-483, (1967).
3. R. B. Griffiths, *Rigorous Results and Theorems*, in Phase Transitions and Critical Phenomena - Volume 1; C. Domb, M.S. Green (editors). Academic Press, London, (1972).
4. R. B. Israel, *Convexity in the Theory of Lattice Gases*, Princeton University Press, Princeton, N.J., (1979).
5. D. Ruelle, *Statistical Mechanics: Rigorous Results*. W. A. Benjamin Inc., New York, (1969).

6. B. Simon, *The Statistical Mechanics of Lattice Gases*, Volume 1, Princeton University Press, Princeton, (1993).
7. C. J. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, (1972).
8. C. J. Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, (1988).
9. R. A. Minlos, *Introduction to Mathematical Statistical Physics*. American Mathematical Society, Rhode Island, (2000).
10. G. E. Uhlenbeck, G. W. Ford, *Lectures in Statistical Mechanics*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, (1963).