e.1

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**FLUTUAÇÕES EM MODELOS DE CURIE-WEISS:
SISTEMAS CLÁSSICOS DESORDENADOS E
QUÂNTICOS**

SBI-IFUSP

305M810T1447

JOÃO MANUEL GONÇALVES AMARO DE MATOS

**Tese apresentada ao Instituto
de Física da Universidade de
São Paulo para obtenção do
título de doutor.**

Defesa em 12/09/88

São Paulo
1988

530.155352

M 433 f

D

e. 1

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

FLUTUAÇÕES EM MODELOS DE CURIE-WEISS:
SISTEMAS CLÁSSICOS DESORDENADOS E
QUÂNTICOS

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Matos, João Manuel Gonçalves Amaro de
Flutuações em modelos de Curie-Weiss: sistemas
clássicos desordenados e quânticos. São Paulo, 1988.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Ins-
tituto de Física. Departamento de Física Matemática.
Área de Concentração: Física de Partículas Elemen-
tares.

Orientador: Prof. Dr. José Fernando Perez

Unitermos: 1.Flutuações; 2.Curie-Weiss; 3.Distri-
buição assintótica; 4.Sistemas clássicos desordena-
dos; 5.Sistemas quânticos.

USP/IF/SBI - 33/88

"...pois nenhuma viagem é ela sô, cada viagem contém uma pluralidade de viagens, e se, aparentemente, uma delas parece apresentar tão pouco sentido que nos sentimos autorizados a sentenciar, Não valeu a pena, mandaria o senso comum, se por preconceito e preguiça o não obliterássemos tantas vezes, que verificássemos se as viagens de que aquela foi conteúdo ou continente não serão valiosas bastante para terem, afinal, valido a pena e as penas."

José Saramago, A Jangada de Pedra

AGRADECIMENTOS

Gostaria de deixar registrado meus reconhecimentos pela ajuda inestimável de várias pessoas durante o período de maturação desta tese.

Agradeço em particular ao Prof. Dr. José Fernando Perez pela orientação criteriosa e persistência de sua confiança em mim; ao Prof. Dr. Walter F. Wreszinski, pelo interesse demonstrado no decorrer deste trabalho; aos Marcelos, ao Manuel e à Tuca, pela leitura crítica de parte da tese, que embora sem a necessária severidade contribuíram para várias correções relevantes; às minhas várias famílias e aos meus amigos que em grande parte das vezes se confundem com elas; à Izabel, pela competência e paciência no infindável trabalho de datilografia; aos colegas da USP; e finalmente à FAPESP, pelo auxílio financeiro.

RESUMO

São estudadas flutuações de variáveis spin de bloco em alguns modelos de Curie-Weiss. É descrito rigorosamente o comportamento assintótico de suas distribuições de probabilidade no limite termodinâmico, mantendo constante a razão entre o tamanho do sistema e o tamanho do bloco.

São considerados o modelo de Ising com campo aleatório e o antiferromagneto diluído. Os seguintes fatos sobre flutuações nestes modelos são provados:

- a) Elas não são auto-mediantes;
- b) Fora da criticalidade têm distribuição Gaussiana com contribuições vindas de flutuações térmicas e de flutuações devidas aos parâmetros aleatórios;
- c) Na criticalidade a sua distribuição é não mais Gaussiana e as flutuações das impurezas dominam as flutuações térmicas.

Como sub-produto desta análise mostra-se que as flutuações destes dois modelos não são equivalentes sob o mapeamento que estabelece a sua equivalência termodinâmica.

Também é descrita a aplicação do método ao vidro de spin de van Hemmen, sem provas, levando a resultados similares.

Finalmente mostra-se que o método é problemático quando aplicado a sistemas quânticos. Embora a sua termodinâmica possa ser bem descrita, aparecem alguns problemas matemáticos, ainda por resolver, no estudo das suas flutuações.

ABSTRACT

Fluctuations of block spin variables in some Curie-Weiss models are studied. The asymptotic behavior of their probability distributions in the thermodynamic limit is rigorously described, keeping constant the ratio between the size of the system and the size of the block.

The Ising model with random field and the dilute anti-ferromagnet with uniform field are considered. The following facts about fluctuations in these models are proved:

- a) They are not self-averaging;
- b) Out of criticality they have a Gaussian distribution with contributions coming both from thermal fluctuations and from those fluctuations due to the random parameters;
- c) At criticality their distribution is no longer Gaussian and the fluctuation of impurities dominate thermal fluctuations.

As a by-product of this analysis, the fluctuations of these two models are shown to be non-equivalent under the mapping which establishes their thermodynamical equivalence.

It is also described the application of the method to the van Hemmen spin-glass model, without proofs, leading to similar results.

Finally the method is shown to be problematic when applied to quantum systems. Although their thermodynamics can be well described, some mathematical problems, yet to be solved, appear in the study of their fluctuations.

ÍNDICE

0. INTRODUÇÃO.....	0.1
1. FLUTUAÇÕES EM MODELOS CLÁSSICOS DE CURIE-WEISS	
1.1. Introdução.....	1.1
1.2. Dependência Fraca e Forte.....	1.2
1.3. Teoremas Limites e o Grupo de Renormalização.....	1.7
1.4. O Trabalho de Ellis e Newman.....	1.12
2. SISTEMAS DESORDENADOS	
2.1. Introdução.....	2.1
2.2. O Modelo de Ising com Campo Aleatório.....	2.3
Termodinâmica.....	2.4
Flutuações.....	2.23
2.3. O Antiferromagneto Diluído com Campo Uniforme....	2.32
Termodinâmica.....	2.33
Flutuações.....	2.39
2.4. O Modelo de Vidro de Spin de van Hemmen.....	2.45
Termodinâmica.....	2.46
Flutuações.....	2.51
3. SISTEMAS QUÂNTICOS	
3.1. Introdução.....	3.1
3.2. O Modelo de Ising com Campo Transverso: Termodinâmica	3.3
3.3. O Modelo de Ising com Campo Transverso: Flutuações...	3.10
3.4. Extensões, Problemas e Reflexões.....	3.12
4. APÊNDICE A	
A Lei dos Grandes Números.....	A.1
5. APÊNDICE B	
O Problema Central do Limite e Leis Estáveis.....	B.1
6. REFERÊNCIAS.....	R.1

INTRODUÇÃO

*Que outrem possa louvar esforço alheio,
Cousa é que se costuma e se deseja;
Mas louvar os meus próprios, arreceio
Que louvor tão suspeito mal me esteja;
E, para dizer tudo temo e creio
Que qualquer longo tempo curto seja;
Mas pois o mandas tudo se te deve;
Irei contra o que devo e serei breve.*

L. Camões, Os Lusíadas, Canto III

Como o próprio nome revela, a Mecânica Estatística ocupa-se da descrição de propriedades estatísticas de sistemas de muitas ($\sim 10^{23}$) variáveis interagentes. Dessas propriedades deve decorrer a verificação das leis termodinâmicas que regem tais sistemas a nível macroscópico.

Para que essa verificação ocorra, é necessário tomar o chamado limite termodinâmico (ou limite de volume infinito), seja por razões de natureza matemática, seja por outras de natureza física.

Por exemplo, sabe-se^[CT,G] que as transições de fase são caracterizadas matematicamente por singularidades de energia livre ou do potencial grã-canônico. Para volumes finitos, no entanto, verifica-se que essas funções são analíticas. Singularidades podem eventualmente ocorrer^[YL,LV] apenas no limite de volume infinito. Logo, uma transição de fase só será possível nesse limite. Também só nesse limite é que os vários ensembles levam a funções termodinâmicas equivalentes por transformadas de Legendre. Portanto, o limite termodinâmico permite uma descri-

ção matemática adequada das transições de fase.

Do lado físico espera-se, por exemplo na verificação experimental da equação de estado de um fluido, que ela independa da quantidade de fluido presente ou da forma do recipiente que o contém. Deve depender, isso sim, de grandezas intensivas como a densidade do fluido e da temperatura. O limite termodinâmico provê justamente condições para uma teoria na qual os efeitos de superfície sejam irrelevantes comparadas às propriedades de volume, e portanto adequada a uma comparação com os dados experimentais.

Há no entanto um pequeno problema com o limite termodinâmico, que é o fato de que, independentemente da amável concessão de físicos e matemáticos, os sistemas reais serem irremediavelmente finitos, ainda que muito grandes.

O estudo de flutuações controla assintoticamente o erro que se faz na determinação das grandezas intensivas ao se aproximar um sistema finito por um outro infinito, quando o primeiro se torna muito grande. O exemplo mais simples que se pode dar é o do Teorema Central do Limite - TCL - (vide apêndice B): suponha-se que o objeto de estudo seja a magnetização média m de um sistema de n spins independentes (sem interação) no limite em que $n \rightarrow \infty$

$$m = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n}$$

onde σ_i ($i = 1, 2, \dots, n$) são as variáveis de spin, supostas independentes e igualmente distribuídas; neste caso, a Lei Forte dos Grandes Números - LFGN - (vide apêndice A) garante a existência do limite acima, ou seja da magnetização do sistema infinito. Já o TCL diz que

$$\frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n} = m + \frac{u}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right), \quad n \rightarrow \infty,$$

onde u é uma variável aleatória com distribuição Gaussiana de média zero e variância igual à da distribuição de cada um dos spins.

Este é um resultado essencialmente matemático. As variáveis consideradas foram chamadas de spin mas na verdade poderiam ter tido qualquer outro nome. A física de fato só entra no jogo, quando se considera uma interação entre as variáveis, descrita por uma hamiltoniana. Nesse caso, não mais serão independentes.

Há ainda um detalhe realmente relevante na maneira como se toma o limite $n \rightarrow \infty$. Acima, foi tomado um bloco de variáveis que coincide com o próprio sistema e o limite no bloco e no sistema foi feito conjuntamente. No entanto, seria possível formar um bloco de n variáveis num sistema infinito *a priori* e tomar o limite em que apenas o bloco cresce ($n \rightarrow \infty$). Os dois tipos de limite serão aqui chamados respectivamente de limite conjunto (do bloco e do sistema) e limite separado (apenas do bloco). No exemplo acima, a LFGN e o TCL garantem que o resultado obtido não é alterado. Naturalmente, pelo exposto anteriormente, o limite que se reveste de maior interesse físico é o limite conjunto.

Ellis e Newman^[EN1,2,3] estudaram este problema para modelos clássicos de Curie-Weiss. Neste caso, os dois tipos de limite levam a resultados diferentes; no limite separado as flutuações serão sempre Gaussianas, do tipo do TCL. Já no limite conjunto, foi provado que fora da criticalidade as correções são similares às do TCL, mas na criticalidade são de ordem $n^{-1/4}$. Resultados nesse sentido haviam sido obtidos anteriormente^[GML,GKn,ML], inclusive para uma classe de modelos mais realistas, sem que no entanto se conseguisse uma análise da criticalidade.

A primeira motivação deste trabalho foi a tentativa de estender os resultados de Ellis e Newman a sistemas quânticos na aproximação de Curie-Weiss. Flutuações em sistemas desse tipo já haviam sido estudadas^[HL,W] sem que no entanto se pudesse abordar satisfatoriamente a criticalidade. A aplicação do método no entanto, traz alguns problemas de natureza matemática que dificulta conclusões satisfatórias.

Por outro lado, são analisados alguns sistemas clássicos desordenados na aproximação de Curie-Weiss para os quais, os resultados, rigorosos, se afastam curiosamente dos de Ellis e Newman, devido à presença de aleatoriedades adicionais. Os modelos estudados são o modelo de Ising com campo aleatório e o anti-ferromagneto diluído. Verifica-se, além disso, a equivalência termodinâmica dos dois modelos e a inequivalência de suas flutuações. Os resultados são estendidos às flutuações no vidro de spin de van Hemmen.

A principal conclusão é que, ao contrário da termodinâmica, as flutuações dependem da configuração das impurezas que caracterizam cada um dos sistemas desordenados considerados. Na verdade, à temperatura crítica, as correções dominantes são devidas exclusivamente às flutuações dessas impurezas, enquanto que fora da criticalidade as flutuações térmicas são da mesma ordem.

O trabalho está organizado da seguinte maneira: no Capítulo 1 são descritos os resultados de Ellis e Newman e o método de análise utilizado é discutido no espírito da técnica de Grupo de Renormalização. No Capítulo 2 são apresentados os sistemas aleatórios e provados os resultados referentes à sua termodinâmica e flutuações. Finalmente, no Capítulo 3 são discutidos os sistemas quânticos. Dois apêndices foram acrescentados, um sobre a LFGN e outro sobre o TCL, elementos básicos de análise no decorrer do trabalho.

CAPÍTULO 1

FLUTUAÇÕES EM MODELOS CLÁSSICOS DE CURIE-WEISS

*Prontos estavam todos escutando
 O que o sublime Gama contaria;
 Quando, depois de um pouco estar cuidando,
 Alevantando o rosto, assim dizia:
 L. Camões, Os Lusíadas, Canto III*

1.1. INTRODUÇÃO

O problema da determinação de distribuições limites para a soma de variáveis aleatórias independentes^[GK] ocupou grandes probabilistas do início deste século, em particular na década de 30. Do ponto de vista da Mecânica Estatística, que usa o aparato probabilístico para descrever sistemas com um número infinito de graus de liberdade, esses resultados são insuficientes na medida em que as variáveis aleatórias aí envolvidas interagem segundo hamiltonianas que caracterizam os vários modelos; trata-se portanto, de variáveis dependentes.

A questão que se coloca neste trabalho é a de se obter distribuições limites para essas variáveis em modelos de Curie-Weiss, tanto em sistemas quânticos quanto em sistemas clássicos desordenados. A motivação primeira foi uma série de trabalhos de Ellis e Newman^[EN1,2,3] onde resultados similares foram discutidos para sistemas ferromagnéticos clássicos.

Deve-se notar no entanto, que até meados da década passada, os resultados em mecânica estatística de transições de fase não faziam relevantes menções à teoria de probabilidades. Desde o final da década de 60, o principal instrumento de análise tem sido a técnica do Grupo de Renormalização (GR).

A partir dos trabalhos bastante técnicos de Bleher e Sinai^[BS1,2], que discutiram o caso especial do modelo hierárquico em termos probabilísticos, uma série de autores^[JL1,2,3; S1,2; CJL1,2; GK_n; GML; CG] desenvolveu alguns aspectos da teoria de fenômenos críticos que encontram paralelos em problemas na teoria de processos estocásticos e provêem uma interpretação em termos probabilísticos da técnica de GR. Os trabalhos de Ellis e Newman, conforme se verá neste capítulo, devem ser compreendidos no contexto dessa interpretação.

Para que possam ser apresentadas as idéias que associam os teoremas limites às técnicas de GR, serão introduzidas na próxima secção noções sobre dependência de variáveis aleatórias.

1.2. DEPENDÊNCIA FRACA E FORTE

Antes de se falar sobre v.a. dependentes, convém verificar o que acontece na situação mais simples de independência. Seja S_i ($i = 1, 2, \dots$) uma sequência de v.a. independentes identicamente distribuídas tais que

$$E(S_i) = 0$$

$$E(S_i^2) = \sigma^2, \quad \forall i,$$

onde $E(\)$ denota o valor esperado. Considerando-se $S(n) = \sum_{i=1}^n S_i$,

que representa o efeito cumulativo de várias contribuições aleatórias, tem-se

$$E(S(n)) = 0$$

$$E(S(n)^2) = \sum_{i=1}^n E(S_i^2) = n \sigma^2 \quad (1.2.1)$$

Tomando-se o desvio-padrão $\sqrt{E(S(n)^2)}$, uma grandeza com a mesma dimensão de $S(n)$, vê-se que ela cresce proporcionalmente a $\sqrt{n}$, mais lentamente portanto do que n , o número de termos em $S(n)$.

Se as variáveis S_i forem dependentes, a expressão (1.2.1) seria modificada de forma simples por:

$$E(S(n)^2) = \sum_{i,j=1}^n E(S_i S_j) = \sum_{i,j=1}^n R(i,j) \quad (1.2.2)$$

onde $R(i,j)$ é chamada de função de correlação da sequência. A propriedade de invariância translacional, muito importante nas aplicações físicas, corresponde a

$$R(i,j) = R(|i-j|) \quad .$$

No caso de ser satisfeita, o que será considerado daqui por diante, (1.2.2) pode ser reescrita como:

$$E(S(n)^2) = nR(0) + 2 \sum_{\ell=1}^n (n-\ell) R(\ell) \quad (1.2.3)$$

onde ℓ é um número inteiro. O primeiro termo corresponde ao

caso de v.a. independentes; quanto ao segundo, várias possibilidades devem ser analisadas:

$$i) \quad \sum_{\ell=1}^n R(\ell) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \bar{R} < \infty ,$$

e no limite $n \rightarrow \infty$ $E(S(n)^2) \sim n$, tendo portanto, um comportamento similar ao de variáveis independentes. Diz-se neste caso que as variáveis são fracamente dependentes.

$$ii) \quad \sum_{\ell=1}^n R(\ell) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$$

e no limite $n \rightarrow \infty$ $E(S(n)^2)/n \rightarrow \infty$. As flutuações são maiores que $\sqrt{n}$ e diz-se então que as variáveis são fortemente dependentes.

$$iii) \quad \sum_{\ell=-n}^n R(\ell) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

o que significa que as flutuações são menores que $\sqrt{n}$. Neste caso, dado o desvio da regra $\sqrt{n}$, diz-se também que as variáveis são fortemente dependentes.

No caso dos sistemas ferromagnéticos em que estamos interessados, S_i são variáveis de spin localizadas em pontos $i \in \mathbb{Z}^d$ numa rede de dimensão d . A condição (ii) pode ser escrita como

$$\sum_{\ell \in \mathbb{Z}^d} R(\ell) \rightarrow \infty$$

o que expressa a divergência da susceptibilidade, caracterizando portanto, o ponto crítico de uma transição de fase de segunda ordem. Logo, embora o sistema possa ser fracamente dependente fora da criticalidade, o ponto crítico é uma situação, do ponto de vista da teoria de flutuações, associada naturalmente a uma de-

pendência forte entre as variáveis de spin.

Até aqui, a distinção entre dependência forte e fraca baseou-se simplesmente no comportamento da função de dois pontos $R(|i-j|)$. Uma definição mais geral e mais adequada pode ser dada^[JL2] a partir do conceito de "strong mixing" (sm).

No espaço-produto das variáveis S_i , os cilindros são conjuntos da forma

$$\left\{ S_{i_1} \in A_1, S_{i_2} \in A_2, \dots, S_{i_k} \in A_k \right\} \quad i_1, i_2, \dots, i_k \in \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$$

onde A_i são conjuntos mensuráveis no espaço das variáveis S_i . Σ_Λ denota a σ -álgebra gerada por tais conjuntos. Dadas duas regiões finitas $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \Lambda$, define-se a distância entre elas como

$$\delta(\Lambda_1, \Lambda_2) = \min_{\substack{i_1 \in \Lambda_1 \\ i_2 \in \Lambda_2}} |i_2 - i_1|$$

onde $|i_1 - i_2|$ é, por exemplo, a distância euclidiana. Define-se também

$$\Delta(\Lambda_1, \Lambda_2) = \sup_{A \in \Sigma_{\Lambda_1}, B \in \Sigma_{\Lambda_2}} |\mu(A \cap B) - \mu(A)\mu(B)|,$$

onde μ é a medida associada a Σ_Λ . Diz-se então que as variáveis S_i são fracamente dependentes ou representam um campo sm se

$$\Delta(\Lambda_1, \Lambda_2) \leq \alpha(\delta(\Lambda_1, \Lambda_2))$$

onde $\alpha(\delta) \rightarrow 0$ quando $\delta \rightarrow \infty$. α é chamado de coeficiente de mistura. Intuitivamente, esta expressão diz que não é possível com

pensar o enfraquecimento da dependência das v.a. com o aumento da distância aumentando o volume dos conjuntos.

Esta situação é típica quando há decaimento exponencial de correlações. Isso pode ser provado^[HN] para uma classe suficientemente abrangente de casos, que inclui sistemas de spin ferromagnéticos fora da criticalidade.

Na criticalidade, o caso é bem outro, pois espera-se decaimento polinomial de $R(\ell)$. O seguinte resultado pode ser provado^[CJL1] neste caso:

Teorema 1.1 .

Um sistema ferromagnético com invariância translacional e interação entre pares tais que

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sum_{L(S^k-1) \leq j^k \leq L(S^k+1)} R(\vec{j})}{\sum_{0 \leq j^k \leq L} R(\vec{j})} \neq 0$$

não satisfaz a condição sm . $\vec{S}$ é um vetor arbitrário na rede com componentes S^k .

Este teorema implica em particular que o modelo de Ising em 2 dimensões viola sm na criticalidade. A violação de sm parece portanto, uma caracterização bastante razoável do tipo de dependência forte encontrada nos fenômenos críticos.

De qualquer maneira, é possível mostrar^[CJL3] que a definição de dependência forte adotada inicialmente implica nesta última, mais geral.

1.3. TEOREMAS LIMITES E O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

Do ponto de vista da teoria de probabilidades, a questão natural que surge é a caracterização da distribuição de probabilidades de $S(n) = \sum_{i=1}^n S_i$. Fossem as variáveis S_i independentes, o Teorema Central de Limite (TCL - vide Apêndice B) garantiria que a probabilidade de que $(S(n)/\sigma\sqrt{n})$ fosse menor que x seria dada por

$$P\left(\frac{S(n)}{\sigma\sqrt{n}} < x\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x ds e^{-\frac{s^2}{2}}. \quad (1.3.1)$$

O termo $\sigma\sqrt{n}$ provê o escalonamento adequado de $S(n)$ de tal maneira que a distribuição não seja concentrada nem na origem nem no infinito.

No caso de um sistema com variáveis não necessariamente independentes, define-se a variável

$$y_n = \frac{S(n)}{B_n}.$$

Se o fator de normalização B_n for escolhido adequadamente, pode ser que y_n tenha para n grande uma distribuição suave, isto é, que não envolva funções δ . Diz-se neste caso que y_n é uma boa variável coletiva. No entanto, o conteúdo desta variável pode ser em certas circunstâncias físicas bem trivial. Se as forças microscópicas forem de curto alcance, as variáveis S_i vão se comportar no limite $n \rightarrow \infty$ como se fossem independentes, levando a uma distribuição do tipo (1.3.1) juntamente com $B_n \sim n^{1/2}$. Trata-se, naturalmente, do caso de variáveis fracamente dependentes.

Na criticalidade, por outro lado, espera-se um com-

portamento bem diferente de B_n devido à forte correlação entre as variáveis de spin S_i ; novas distribuições de probabilidade podem surgir juntamente com escalonamentos do tipo $B_n \sim n^{1-\gamma}$, $\gamma \neq \frac{1}{2}$.

No caso de variáveis fracamente dependentes, o seguinte teorema é conhecido [CJL1]:

Teorema 1.2

Dada uma sequência de v.a. $\{S_i\}_{i=1}^n$ sm e $E(S_i) = 0$, seja $F_n(y)$ a função distribuição de y_n . Se $F_n(y)$ converge fracamente* para $F(y)$, então $F(y)$ é necessariamente estável [GK], isto é,

$$F(a_1 z) * F(a_2 z) = F(az) \quad ,$$

onde a_1, a_2 e a são números positivos. Um dos parâmetros que caracteriza as distribuições estáveis é o seu expoente característico*. Se $F(y)$ tiver expoente α , então

$$B_n = n^{1/\alpha} h(n) \quad ,$$

onde $h(n)$ é uma função que varia lentamente, crescendo no máximo logaritmicamente. └

De fato, dentre as distribuições estáveis apenas a Gaussiana tem interesse físico na medida em que é a única com variância finita*. O valor de α para essa distribuição é $\alpha = 2$. Portanto, sm implica neste contexto no TCL.

No caso da análise de variáveis fortemente dependentes, convém verificar antes, ainda que de forma heurística, como surge a Gaussiana no caso mais simples de variáveis independentes,

*Vide Apêndice B.

de modo a mais facilmente poder identificar as necessárias modificações.

Supondo que a distribuição de $S(n)/\sqrt{n}$ tem densidade $P_n(x)$, pode-se, a partir da convolução de dois blocos de tamanho n , obter a distribuição $P_{2n}(x)$:

$$P_{2n}(x) = \int dx' dx'' P_n(x') P_n(x'') \delta\left(x - \frac{1}{\sqrt{2}} (x' + x'')\right),$$

pois
$$\frac{S(2n)}{\sqrt{2n}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{S'(n)}{\sqrt{n}} + \frac{S''(n)}{\sqrt{n}} \right).$$

Tomando $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$, P_{2n} pode ainda ser reescrita como

$$P_{2n}(x) = a^{-1} \int dx' P_n(x') P_n(a^{-1}x - x'). \quad (1.3.2)$$

Naturalmente, a distribuição limite procurada deve satisfazer, se existir, o limite $n \rightarrow \infty$ da equação acima

$$P_{\infty}(x) = a^{-1} \int dx' P_{\infty}(x') P_{\infty}(a^{-1}x - x'). \quad (1.3.3)$$

Esta equação diz basicamente que a convolução de distribuições de blocos suficientemente grandes leva à mesma distribuição dos blocos. Isto é, a distribuição é invariante por essa operação de associação de blocos, ou seja, é estável.

A Gaussiana é solução de (1.3.3) no caso em que $a = 1/\sqrt{2}$. É importante notar que (1.3.3) pode ter soluções para valores de $a \neq 1/\sqrt{2}$. No entanto, se $P_n(x)$ tiver variância finita, a convergência dessas equações só se dará se $a = 1/\sqrt{2}$. Por outro lado, o fator $\sqrt{2}$ veio do fato de se normalizar a soma

$S(n)$ por $\sqrt{n}$. Então, a análise em mãos poderia ser invertida, determinando-se de forma canhestra, mas nem por isso pior determinada, qual a normalização adequada para $S(n)$ a partir das condições necessárias para a convergência de (1.3.3).

A equação (1.3.3) poderia assim com propriedade ser chamada de "equação mater" do processo de determinação da boa escala de comportamento coletivo, não apenas pelo papel central e centralizador que desempenha mas também - ou até principalmente - pela clareza do conceito probabilístico que espelha e pela compreensão que inspira.

O passo seguinte é a análise do caso de variáveis aleatórias dependentes. Para propósitos ilustrativos será considerada a equação

$$P_{2n}(x) = \int dx' g_n(x, x', a) P_n(x') P_n(a^{-1}x - x')$$

no lugar de (1.3.2), já que a convolução usual não mais será válida. Posteriormente exemplos físicos serão dados em que P_{2n} é desta forma. A função $g_n(x, x', a)$ reflete a interação entre os dois blocos.

No bloco de variáveis fracamente dependentes, espera-se que $g_\infty(x, x', a) = \lim_{n \rightarrow \infty} g_n(x, x', a) = a^{-1} = \sqrt{2}$ de tal maneira que decorra o TCL.

Para variáveis fortemente dependentes, a distribuição limite deve satisfazer:

$$P_\infty(x) = \int dx' g_\infty(x, x', a) P_\infty(x') P_\infty(a^{-1}x - x') , \quad (1.3.4)$$

cuja solução será, em geral, não Gaussiana.

Em oposição a (1.3.3), esta poderia não pouco adequadamente ganhar o título de "equação madraster", pois substitui (1.3.3) com a incômoda presença de g_∞ , causador de dificuldades na análise do ponto fixo, sendo portanto bem mais difícil com ela lidar.

De fato, é a familiaridade com (1.3.3) que permite estudar a convergência de $P_n(x)$ neste caso, na linha da análise esboçada anteriormente: a convergência de (1.3.4) deve determinar a escala a ser utilizada em $S(n)$ de tal forma que $P_n(x)$ tenha um bom limite.

Esta idéia está na raiz da técnica de GR. Na verdade, a compreensão dos fenômenos críticos e do escalonamento das variáveis fortemente dependentes está baseada na descrição do comportamento assintótico das funções de correlação $R(|i-j|)$. Os expoentes críticos, em função dos quais a física dos pontos críticos é descrita, dependem desse comportamento. Isso decorre da teoria fenomenológica de escalonamento no ponto crítico, que implica na homogeneidade das funções de correlação, ou seja, num decaimento polinomial do tipo $R(l) \sim l^{-\alpha}$.

A determinação do expoente α determina então o escalonamento de $S(n)$ ou, em outras palavras, da análise da convergência de (1.3.4) deve derivar o comportamento assintótico das funções de correlação.

A técnica do GR lida com transformações no espaço das hamiltonianas no lugar de transformações das distribuições de probabilidade. De acordo com a mecânica estatística a relação entre hamiltonianas e distribuições é da forma

$$H \propto -\ln P$$

de maneira que (1.3.3) e (1.3.4) podem ser associadas às equa-

ções de ponto fixo do GR, e que aqui têm uma interpretação probabilística clara.

Como foi dito atrás, distribuições satisfazendo (1.3.3) são chamadas de estáveis. As distribuições em (1.3.4) são uma generalização delas, às quais Dobrushin e Sinai deram o nome de "autodel" mudando-o posteriormente para "distribuições de escala" [S2]. A escola italiana, já referida anteriormente, preferiu continuar a chamá-la de "estáveis", ainda que em sentido lato.

Independentemente dos nomes usados, o importante é destacar a relação entre o escalonamento adequado de $S(n)$ e a existência de distribuições limites soluções de (1.3.4), a ser vista como uma interpretação probabilística da equação de ponto fixo do GR.

1.4. O TRABALHO DE ELLIS E NEWMAN

Há pouco mais de dez anos Ellis e Newman publicaram uma série de trabalhos sobre teoremas limites para somas de variáveis aleatórias dependentes em mecânica estatística. A classe de modelos estudada é a de Curie-Weiss, caracterizada como se segue:

Seja ρ uma medida de probabilidade em $\mathbb{R}$ que satisfaça

$$\int \exp(x^2/2) d\rho(x) < \infty.$$

Dado ρ considera-se o arranjo triangular de variáveis dependentes $\{X_j^{(n)}(\rho) : j = 1, \dots, n\}$ ($n = 1, 2, \dots$), com distribuição conjunta

$$\frac{1}{Z_n} \exp \left[\frac{(x_1 + \dots + x_n)^2}{2n} \right] \prod_{j=1}^n d\rho(x_j) \quad (1.4.1)$$

onde Z_n é a normalização

$$Z_n = \int_{\mathbb{R}^n} \exp \left[\frac{(x_1 + \dots + x_n)^2}{2n} \right] \prod_{j=1}^n d\rho(x_j) \quad . \quad (1.4.2)$$

Os modelos de Curie-Weiss descrevem sistemas em que as variáveis de spin $X_j^{(n)}(\rho)$ têm distribuição conjunta descrita por (1.4.1-2). O parâmetro β que descreve a temperatura foi aqui embutido na medida ρ . Define-se então a soma $S_n(\rho) = \sum_{j=1}^n X_j^{(n)}(\rho)$. O que se pretende é estudar a distribuição de

$$\frac{S_n(\rho) - nm}{n^{1-\gamma}}$$

onde m é o valor médio de $\frac{S_n}{n}$.

Para isso, algumas definições adicionais são necessárias. Em primeiro lugar, é possível mostrar, como será feito a diante neste trabalho, que

$$f = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{n} \ln Z_n \right)$$

é dado por

$$f = \inf \{ G_\rho(s) : s \in \mathbb{R} \} \quad (1.4.3)$$

onde

$$G_\rho(s) = \frac{s^2}{2} - \ln \int e^{sx} d\rho(x) \quad .$$

Por outro lado, dado α inteiro e os números reais $m_1, \dots, m_\alpha$ e os inteiros $k_1, \dots, k_\alpha$, diz-se que $(m_1, k_1; m_2, k_2; \dots; m_\alpha, k_\alpha)$ é admissível e escreve-se

$$\rho \sim (m_1, k_1; m_2, k_2; \dots; m_\alpha, k_\alpha)$$

se o conjunto dos mínimos globais de G_ρ for dado por $\{m_1, \dots, m_\alpha\}$ e para cada $i = 1, \dots, \alpha$

$$G_\rho(z) = G_\rho(m_i) + \lambda_i \frac{(z-m_i)^{2k_i}}{(2k_i)!} + o\left((z-m_i)^{2k_i}\right), \quad z \rightarrow m_i$$

com $\lambda_i > 0$. k_i é chamado de "tipo" de m_i e λ_i a sua "força". O "tipo maximal" é o maior dos k_i . A medida ρ será dita pura se G tiver um único mínimo global e semipura se tiver um único do tipo maximal.

Define-se então a medida

$$d\tau_\rho(m) = \sum_{j=1}^{\alpha} b_j \delta(m-m_j)$$

onde

$$b_j = \frac{\overline{b_j}}{\sum_{j=1}^{\alpha} \overline{b_j}} \quad e$$

$$\overline{b_j} = \begin{cases} [\lambda(m_j)]^{-\frac{1}{2}k_j} & \text{se } k_j \text{ for do tipo maximal} \\ 0 & \text{de outra forma.} \end{cases}$$

Então, os seguintes teoremas podem ser demonstrados:

Teorema 1.1

Se $\rho \sim (m_1, k_1; \dots; m_\alpha, k_\alpha)$ então

$$\frac{S_n}{n} \longrightarrow d\tau_\rho$$

Teorema 1.2

Se ρ é semipura, centrada em m e do tipo k , então

$$\frac{S_n - nm}{n^{1 - \frac{1}{2}k}} \longrightarrow \begin{cases} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx & \text{se } k = 1 \\ \exp\left(-\lambda(m) \frac{x^{2k}}{(2k)!}\right) dx & \text{se } k \geq 2 \end{cases}$$

onde $\sigma^2 \equiv [\lambda(m)]^{-1} - 1 > 0$.

Teorema 1.3

Se m for um mínimo global (não necessariamente único) ou um mínimo local de G_ρ , então $\exists \varepsilon' > 0$ tal que para todo $0 < \varepsilon < \varepsilon'$

$$\frac{S_n}{n} : \left\{ \frac{S_n}{n} \in [m-\varepsilon, m+\varepsilon] \right\} \longrightarrow \delta(x-m)$$

$$\frac{S_n - nm}{n^{1 - \frac{1}{2}k}} : \left\{ \frac{S_n}{n} \in [m-\varepsilon, m+\varepsilon] \right\} \longrightarrow \begin{cases} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx & \text{se } k = 1 \\ \exp\left(-\frac{\lambda x^{2k}}{(2k)!}\right) dx & \text{se } k \geq 2 \end{cases}$$

onde k é o tipo e λ a força de m , e σ^2 é dado como no teorema anterior.

A leitura destes resultados em termos físicos é bastante simplificada se for atentado que, de (1.4.3), a criticalidade é determinada por $k \geq 2$, onde k indica a ordem da transi

ção. Fora da criticalidade, $k = 1$. Na região $\beta < \beta_c$, de dependência fraca entre os $x_j^{(n)}$ um TCL padrão continua sendo válido para S_n . Para $\beta = \beta_c$ observa-se a existência de distribuições limites não Gaussianas. Para $\beta > \beta_c$ a situação é mais complicada já que as variáveis tendem a agrupar-se em várias componentes ergódicas (degenerescência dos mínimos de G_ρ). No entanto, condicionando-se à vizinhança de uma dessas componentes, é possível verificar novamente a validade do TCL^[GJL].

Deve ser observado ainda que a soma S_n poderia ter sido feita sobre variáveis de spin tomadas num sistema "a priori" infinito

$$S_n(\rho) = \sum_{j=1}^n x_j^{(\infty)}(\rho) \quad .$$

Como se pode verificar^[EN1], essas variáveis $x_j^{(\infty)}$ seriam independentes no sentido de que a sua distribuição conjunta seria dada pelo produto de suas medidas, gerando imediatamente as teoremas limites usuais. A chave da obtenção de distribuições não triviais está no estudo assintótico da distribuição de blocos do tamanho do sistema, fazendo o tamanho de ambos ir para infinito, no melhor espírito da análise das equações de ponto fixo obtidas nas seções anteriores.

A título ilustrativo pode ser descrito como, num caso bastante simples, tal equação pode ser obtida. Dada a hamiltoniana

$$H = - \frac{1}{2n} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j = - \frac{1}{2n} \left(\sum \sigma_i \right)^2 \quad \text{onde} \quad \sigma_i = \pm 1, \quad \forall i \quad (1.4.4)$$

e definindo a variável $Y(n) = \frac{S_n}{n^{1-\gamma}}$, onde $S_n = \sum_{i=1}^n \sigma_i$, obtém-se

de (1.4.4), para n fixo

$$P_n(Y(n) = y) = \frac{1}{Z_n} \binom{n}{m} \exp \left[\frac{\beta}{2} y^2 n^{1-2\gamma} \right]$$

onde

$$Z_n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \exp \left(\frac{\beta}{2n} k^2 \right)$$

e m satisfaz a equação

$$n - 2m = y n^{1-\gamma} .$$

Notando que

$$\binom{n}{m} = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = m}} \binom{n/2}{m_1} \binom{n/2}{m_2}$$

tem-se

$$P_n(m) = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = m}} P_{n/2}(m_1) P_{n/2}(m_2) \exp \left[- \frac{2\beta}{n} (m_1 - m_2)^2 \right] ,$$

e chamando

$$u = \frac{m_1 - m_2}{n^{1-\gamma}} \quad \text{e} \quad y = \frac{n - 2m}{n^{1-\gamma}}$$

$$P_n(y) = \int \sqrt{\frac{n^{1-2\gamma}}{\pi}} \exp \left[- n^{1-2\gamma} u^2 \right] P_{n/2} \left(\frac{y}{2^\gamma} + u \right) P_{n/2} \left(\frac{y}{2^\gamma} - u \right) du .$$

Pode-se aqui facilmente identificar uma equação madrastra do ti-

po de (1.3.4). Felizmente esta ainda é tratável. Fazendo $n \rightarrow \infty$ obtém-se a equação assintótica de ponto fixo

$$P_{\infty}(y) = \left[P_{\infty}(y/2^{\gamma}) \right]^2$$

da qual facilmente se verifica serem soluções funções do tipo

$$\exp \left[- \lambda |y|^{1/\gamma} \right] ,$$

que são funções da mesma natureza das distribuições limites obtidas nos teoremas acima, fazendo-se $\gamma = \frac{1}{2}$ (com $k=1$) fora da criticalidade (gerando uma Gaussiana) e $\gamma = \frac{1}{2k}$ em criticalidade de ordem k . É esse valor de Gama que permite novas flutuações no velho mundo do campo médio e diz como elas se afastam da trivialidade do TCL, apresentando uma riqueza probabilística bem maior do que se pensava.

CAPÍTULO 2

SISTEMAS DESORDENADOS

Porém, para que os homens possam cingir-se à verdade, terão primeiramente de conhecer os erros, E praticá-los, Não saberei responder à pergunta com um simples sim ou um simples não, mas acredito na necessidade do erro.

José Saramago, Memorial do Convento

2. INTRODUÇÃO

Sistemas desordenados diferem dos sistemas de spin usuais pela aleatoriedade de alguns de seus parâmetros. A introdução desses parâmetros aleatórios decorre do estudo de sistemas com defeitos como, por exemplo, soluções diluídas de alguns átomos de metais de transição (Fe, Co, Mn) em paramagnetos (Cu, Au). Neste caso específico, dados dois átomos "defeituosos" nos pontos $\vec{i}$ e $\vec{j}$, a sua energia de interação é da forma

$$J(|\vec{i}-\vec{j}|)\sigma_i\sigma_j, \quad J(r) = (k_F r)^{-3} \cos(2k_F r) \quad (2.1.1)$$

onde $|\vec{i}-\vec{j}|$ denota a distância euclideana entre $\vec{i}$ e $\vec{j}$ e k_F é uma constante. Não é no entanto claro como resolver o problema estatístico associado à hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(|\vec{i}-\vec{j}|)\sigma_i\sigma_j c_i c_j - \tilde{h} \sum_i \sigma_i c_i, \quad (2.1.2)$$

onde c_i é a variável de diluição, indicando a presença de impu

reza no ponto $\vec{i}$ ($c_i = 1$) com probabilidade p ou a sua ausência ($c_i = 0$) com probabilidade $1-p$.

A dificuldade natural do problema é então acrescida da necessidade de se tomar em algum ponto a média sobre as posições dos átomos de impurezas, isto é, sobre as configurações $\{c_i\}$. Nos modelos aqui descritos será provado que a energia livre obtida é a mesma para quase todas as configurações dos parâmetros aleatórios ou seja, é determinada com probabilidade 1. Este resultado permite que se trabalhe com uma configuração fixa dos parâmetros, reproduzindo um procedimento sugerido por Brout^[B] segundo o qual a energia livre deveria ser obtida através da média das energias livres condicionadas a uma dada configuração de impurezas (problema "quenched") ao invés de se tomar o logaritmo de uma função de partição sobre a qual já foi tomada a média (problema "annealed").

Deve-se notar que a interação em (2.1.1) é ora ferro ora antiferromagnética. Foi sugerido^[EA] que (2.1.2) fosse aproximada pela hamiltoniana mais tratável

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum \sigma_i \quad (2.1.3)$$

onde J_{ij} seriam variáveis aleatórias independentes e igualmente distribuídas com distribuição simétrica (Gaussiana) e $\langle J_{ij}^2 \rangle = J^2$, preservando assim a principal propriedade de (2.1.2) - a natureza oscilante de $J(r)$ em (2.1.1).

Também de interesse experimental^[BCSY] são os sistemas estritamente antiferromagnéticos diluídos com campo magnético uniforme, isto é, com J_{ij} em (2.1.3) sendo uma variável aleatória positiva. Esse sistema será aqui estudado na sua versão Curie-Weiss e a sua equivalência termodinâmica a um modelo ferromagnético com campo aleatório (também na versão Curie-Weiss),

determinada por um certo mapeamento ^[PPB,ABP,Ba] entre as energias livres dos dois modelos é provada.

É curioso notar que o interesse em relação a este último modelo, apesar da impossibilidade de se produzir campos aleatórios em laboratório, ultrapassa a sua mímica dos antiferromagnetos diluídos - estes absolutamente acessíveis do ponto de vista experimental, tendo-se tornado palco de discussão de várias idéias teóricas como o truque das réplicas ^[PIM,MP,PWH], redução dimensional ^[Gr,AIM,Y,PS,WP] e supersimetria ^[KW,KLP].

Do ponto de vista de flutuações os resultados são muito mais sutis; será provado que dependem das configurações dos parâmetros aleatórios dos sistemas e, além disso, que o mapeamento que estabelece a equivalência entre eles ao nível termodinâmico não a sustenta ao nível mais delicado das flutuações.

Finalmente, resultados da mesma natureza são obtidos num modelo ^[HEC] em que (2.1.1) é aproximado por

$$J_{ij} = \frac{1}{n} \left[J_0 + J (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) \right]$$

onde $J_0, J > 0$, ξ_i e η_i são variáveis aleatórias independentes que podem assumir os valores $+1$ ou -1 com igual probabilidade e n é o número de variáveis de spin do sistema.

2.2. O MODELO DE ISING COM CAMPO ALEATÓRIO

O modelo é descrito pela hamiltoniana

$$H_n = - \frac{J}{2n} \left(\sum_{i=1} \sigma_i \right)^2 - \sum_{i=1} h_i \sigma_i, \quad (2.2.1)$$

onde os h_i são variáveis aleatórias independentes e igualmente distribuídas com medida $dv(h)$, o que será denotado por

$$h \sim dv(h) \quad .$$

Vários tipos de distribuições de campo podem ser utilizados; por exemplo, a distribuição pode ser par, absolutamente contínua com densidade decrescente em $[0, \infty]$, como uma Gaussiana. Nesse caso, mostra-se^[SW] que não haverá transição de primeira ordem. Outro tipo poderia ser o das distribuições discretas pares, da forma

$$dv(h) = \left\{ C_0 \delta(h) + \sum_i C_i \left[\delta(h-h_i) + \delta(h+h_i) \right] \right\} dh$$

com $C_i \geq 0$ para todo i . Aqui também não haverá transição de primeira ordem^[SW] se $C_0 - \frac{1}{3} \sum_i C_i \geq 0$.

Assim, o método será ilustrado com a densidade

$$dv(h) = \frac{1}{2} [\delta(h-H) + \delta(h+H)] \quad , \quad (2.2.2)$$

que apresenta criticalidade de primeira e segunda ordem^[SW] com a presença de um ponto tricrítico no diagrama de fase.

Termodinâmica

A energia livre é dada por

$$f = \lim_{n \rightarrow \infty} - \frac{1}{n\beta} \ln Z_n \quad (2.2.3)$$

onde β é o inverso da temperatura T e Z_n é a função de partição dada por

$$Z_n = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n} \quad , \quad (2.2.4)$$

onde $\{\sigma\}$ denota todas as possíveis configurações de spin.

Usando a representação integral

$$e^{\eta^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{x^2}{2} + \eta x} dx \quad (2.2.5)$$

e a hamiltoniana dada em (2.2.1), Z_n é reescrita como:

$$\begin{aligned} Z_n &= \sum_{\{\sigma\}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx' \exp \left[\beta \left(\sum_{i=1}^n h_i \sigma_i \right) - \frac{x'^2}{2} + x' \sqrt{\beta J/n} \left(\sum_{i=1}^n \sigma_i \right) \right] = \\ &= 2^n \left(\frac{n}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int dx e^{-n \frac{x^2}{2}} \prod_{i=1}^n \exp \left[\ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) \right] = \\ &= 2^n \left(\frac{n}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int dx \exp \left[-n G_n(x) \right] \quad , \quad (2.2.6) \end{aligned}$$

$$\text{onde} \quad G_n(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) \quad . \quad (2.2.7)$$

Espera-se naturalmente que a termodinâmica seja independente da amostra tomada, ou melhor, da configuração de campos $\{h_i\}$ da qual (2.2.7) depende. De fato, a soma nessa expressão é feita sobre variáveis aleatórias independentes e deve, para cada x fixo, convergir para o valor médio do somando pela LFGN (vide apêndice A).

Em outras palavras, sendo $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), \mu)$ um espaço de probabilidades onde Ω é o espaço-produto no qual as configurações de campos $\{h_i\}_{i=1}^{\infty}$ estão definidas e μ é a medida-produto nele induzida a partir de $dv(h)$, então a LFGN garante que para qualquer x real e fixo,

$$G_n(x) \rightarrow G(x) = \frac{x^2}{2} - \int dv(h) \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h) \quad n \rightarrow \infty \quad \text{q.t.p.}[\mu] . \quad (2.2.8)$$

No caso da densidade $dv(h)$ dada em (2.2.2), ter-se-ia

$$G(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{2} \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta H) - \frac{1}{2} \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x - \beta H) \quad (2.2.9)$$

$$\text{e } \Omega = \{-H, +H\}^{\infty} .$$

A convergência em (2.2.8) dá-se portanto, para cada x fixo, a menos de um conjunto B_x de configurações, eventualmente dependente de x , tal que $\mu(B_x) = 0$.

Dada a representação integral (2.2.6) para Z_n , é necessário então garantir que

$$\mu \left(\bigcup_{x \in \mathbb{R}} B_x \right) = 0 .$$

Isso pode ser garantido pelo seguinte

Teorema 2.2.1

Existe um conjunto A independente de x , $A \in \mathcal{C}(\Omega)$, com $\mu(A) = 1$ tal que $G_n(x) \rightarrow G(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}$ e $\forall \omega \in A$, onde $\mathcal{C}(\Omega)$ é a menor σ -álgebra gerada por cilindros em Ω .

Comentário

Este resultado, sistematicamente abstraído em trabalhos sobre sistemas desordenados^[HEC], é aqui provado de maneira simples e é um passo crucial no tratamento rigoroso deste assunto.

Prova

No caso particular da distribuição dada em (2.2.2), basta escrever

$$G_n(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{H+h_i}{2H} \right) \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta H) -$$

$$- \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{H-h_i}{2H} \right) \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x - \beta H)$$

para notar que a LFGN atua agora sobre as variáveis aleatórias h_i independentemente do valor de x ou seja, que B_x independe de x . Este simples argumento é imediatamente generalizável para o caso em que h_i são variáveis aleatórias discretas que podem assumir um número finito de valores; no caso de variáveis aleatórias contínuas, no entanto, é inadequado e a prova é como segue:

As funções

$$\sigma_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i)$$

formam uma sequência equicontínua de funções, pois

$$|\sigma_n(x) - \sigma_n(y)| \leq |x-y| \cdot \sup_{z \in \mathbb{R}} |\sigma'_n(z)|, \quad ,$$

pelo teorema da média. Ora,

$$\sigma'_n(z) = \frac{\sqrt{\beta J}}{n} \sum_{i=1}^n \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) \quad ,$$

e portanto $|\sigma'_n(z)| \leq \sqrt{\beta J}$. Logo

$$|\sigma_n(x) - \sigma_n(y)| \leq |x-y| \sqrt{\beta J} \quad , \quad \forall n \quad . \quad (2.2.10)$$

Como a intersecção contável de conjuntos de medida 1 (em um espaço de probabilidades) também tem medida 1, é possível escolher $A \subset \Omega$, $\mu(A) = 1$ tal que, se $\omega \in A$

$$\sigma_n(x) \longrightarrow \sigma(x) \quad \text{para todo } x \text{ racional} \quad .$$

Prova-se agora que para todo $\omega \in A$,

$$\sigma_n(x) \longrightarrow \sigma(x) \quad \text{para todo } x \text{ real} \quad .$$

De (2.2.10), dado $\varepsilon > 0$, existe $\delta > 0$ ($\delta = \frac{\varepsilon}{3\sqrt{\beta J}}$) tal que a relação $|x-y| \leq \delta$ implica $|\sigma_n(x) - \sigma_n(y)| \leq \frac{\varepsilon}{3}$ para todo n . Por outro lado, sendo $\mathbb{Q}$ denso em $\mathbb{R}$, $\exists y \in \mathbb{Q}$ tal que $|x-y| \leq \delta$ com $x \in \mathbb{R}$, e $\exists n_0$ tal que $|\sigma_m(y) - \sigma_n(y)| \leq \frac{\varepsilon}{3}$ para $m \geq n_0$ e $n \geq n_0$. Então, para $m \geq n_0$, $n \geq n_0$,

$$|\sigma_m(x) - \sigma_n(x)| \leq |\sigma_m(x) - \sigma_m(y)| + |\sigma_m(y) - \sigma_n(y)| + |\sigma_n(y) - \sigma_n(x)| \leq \varepsilon \quad ,$$

e portanto a sequência converge para todo $x \in \mathbb{R}$ e para todo $\omega \in A$. └

Comentário

Uma versão alternativa do teorema devida a W. Wreszinski, cuja referência lhe é agradecida, define como domínio de $G_n(x)$ o espaço-produto $\mathbb{R} \times \Omega$, usando o teorema de Fubini para obter a afirmação do teorema 2.2.1 apenas para *quase* todo $x \in \mathbb{R}$.

A termodinâmica do modelo fica completamente determinada a partir da energia livre, definida em (2.2.3). Ela é obtida a partir do seguinte

Teorema 2.2.2

$$\text{Se } \int |h| dv(h) < \infty \quad (2.2.11) \quad , \quad \text{então}$$

$$\beta f = \inf\{G(x) \mid x \in \mathbb{R}\} = G(x^*) \quad \text{q.t.p.} [\mu] \quad . \quad (2.2.12)$$

A prova deste teorema requer resultados adicionais que serão o objeto do restante desta seção.

Dado $\omega \in \Omega$, $x \in \mathbb{R}$ e sendo $\{\Gamma_n(\omega, x)\}$ uma família de variáveis aleatórias em Ω com Γ_n infinitamente diferenciável em relação a x , tem-se o importante

Lema 2.2.3

Supondo que existe um conjunto A independente de s de medida 1 ($A \subset \Omega$) tal que

$$1) \quad \Gamma_n^{(j)}(\omega, s) = \frac{\partial^j \Gamma_n(\omega, s)}{\partial s^j} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \Gamma^{(j)}(s) \quad , \quad \forall \omega \in A$$

uniformemente em compactos de $\mathbb{R}$ para $j = 0, 1, 2, \dots$, com $\Gamma^{(0)} = \Gamma$.

2) Existe $C(\omega) > 0$ independente de n tal que

$$e^{-\Gamma_n(\omega, s)} \leq C(\omega) e^{-\frac{s^2}{2} + \sqrt{\beta J} |s|} \quad . \quad (2.2.13)$$

e além disso $\int e^{-\Gamma(\omega, s)} ds < \infty$, $\forall \omega \in A$,

tem-se o seguinte resultado:

Seja

$$g = \inf\{\Gamma(s) | s \in \mathbb{R}\}$$

e V um subconjunto fechado de $\mathbb{R}$, possivelmente ilimitado, que não contenha nenhum mínimo global de $\Gamma(s)$; então, existe $\varepsilon > 0$ tal que

$$e^{ng} \int_V e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds = o(e^{-n\varepsilon}), \quad n \rightarrow \infty.$$

Supondo-se ainda que exista ℓ inteiro positivo, ρ real positivo e uma sequência $\{m_n\}_{n=1}^{\infty}$ tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} m_n = m$, satisfazendo para $j = 1, 2, \dots, 2\ell$

$$\Gamma_n^{(j)}(\omega, m_n) = \frac{\lambda_j(\omega)}{n^{1-\rho \cdot j}} + o\left(\frac{1}{n^{1-\rho \cdot j}}\right), \quad n \rightarrow \infty, \quad (2.2.14)$$

onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2\ell}$ são variáveis aleatórias em Ω com $\lambda_{2\ell} > 0$ e definindo-se agora

$$B_n(\omega, s, m_n) = \Gamma_n(\omega, s+m_n) - \Gamma_n(\omega, m_n),$$

existe então $\delta > 0$ suficientemente pequeno, tal que quando $n \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} nB_n\left(\omega, \frac{s}{n^\rho}, m_n\right) &= \sum_{j=1}^{2\ell} \lambda_j(\omega) \frac{s^j}{j!} + o\left(\frac{|s|^{2\ell+1}}{n^{\rho(2\ell+1)}}\right) + \\ &+ o(1) P_1(s), \quad \text{para } |s| < \delta n^\rho \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

e

$$n B_n \left(\omega, \frac{s}{n^{2\ell}}, m_n \right) \geq \frac{1}{2} \lambda_{2\ell}(\omega) \frac{s^{2\ell}}{(2\ell)!} + P_2(s) \quad \text{para} \quad |s| < \delta n^\rho, \quad (2.2.16)$$

onde P_1 é um polinômio de grau 2ℓ e P_2 de grau $2\ell-1$.

Comentário

Do ponto de vista técnico, este lema é crucial para a termodinâmica e para as flutuações. É a generalização para o caso desordenado de um lema de Ellis e Newman^[EN3], apresentado de forma similar para facilitar comparações. A verificação para G_n das hipóteses feitas sobre Γ_n é o cerne da prova do teorema 2.2.2.

Prova

Da uniformidade na convergência de Γ_n , para n suficientemente grande existe $\varepsilon > 0$ tal que

$$\inf\{\Gamma_n(s) | s \in V\} \geq \inf\{\Gamma(s) | s \in R\} + \varepsilon = g + \varepsilon.$$

Logo

$$\begin{aligned} e^{ng} \int_V e^{-n\Gamma_n(s)} ds &< e^{ng} e^{-(n-1)(g+\varepsilon)} \int_V e^{-\Gamma_n(s)} ds = \\ &= O(e^{-n\varepsilon}), \quad n \rightarrow \infty \end{aligned}$$

pois $\lim_{n \rightarrow \infty} \int e^{-\Gamma_n(s)} ds < \infty$ pela hipótese 2, o que prova a primeira parte do lema.

Da hipótese da uniformidade na convergência de $\Gamma_n^{(j)}$

segue que

$$\left| B_n(\omega, s, m_n) - \sum_{j=1}^{2\ell} \Gamma_n^{(j)}(\omega, m_n) \frac{s^j}{j!} \right| = O(|s|^{2\ell+1}) \quad \text{para } |s| < \delta_1. \quad (2.2.17)$$

De (2.2.14) e (2.2.17) segue imediatamente (2.2.15). Além disso, da igualdade um tanto óbvia

$$\begin{aligned} B_n(\omega, s, m_n) &= \Gamma_n^{(2\ell)}(\omega, m_n) \frac{s^{2\ell}}{(2\ell)!} + \left(B_n(\omega, s, m_n) - \sum_{j=1}^{2\ell} \Gamma_n^{(j)}(\omega, m_n) \frac{s^j}{j!} \right) + \\ &\quad + \sum_{j=1}^{2\ell-1} \Gamma_n^{(j)}(\omega, m_n) \frac{s^j}{j!} \end{aligned}$$

decorre imediatamente a desigualdade

$$\begin{aligned} B_n(\omega, s, m_n) &\geq \Gamma_n^{(2\ell)}(\omega, m_n) \frac{s^{2\ell}}{(2\ell)!} - \left| B_n(\omega, s, m_n) - \sum_{j=1}^{2\ell} \Gamma_n^{(j)}(\omega, m_n) \frac{s^j}{j!} \right| - \\ &\quad - \left| \sum_{j=1}^{2\ell-1} \Gamma_n^{(j)}(\omega, m_n) \frac{s^j}{j!} \right|. \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

Por outro lado

$$O(|s|^{2\ell+1}) \leq \frac{1}{2} \lambda_{2k}(\omega) \frac{s^{2\ell}}{(2\ell)!} \quad \text{para } |s| < \delta_2$$

para δ_2 suficientemente pequeno. A desigualdade (2.2.16) segue então de (2.2.14), (2.2.17) e (2.2.18) com $\delta = \min(\delta_1, \delta_2)$.

Lema 2.2.4

Satisfeitas as hipóteses do lema 2.2.3,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln \int e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds = g \quad \text{q.t.p.}[\mu] \quad (2.2.19)$$

Prova

Supondo-se inicialmente que $\Gamma(s)$ tem um único mínimo global, tome-se m como esse ponto e seja m_n um ponto de mínimo de $\Gamma_n(\omega, s)$ que converge para m para cada ω fixo. Denotando por V_n o conjunto fechado

$$V_n = \mathbb{R} - (m_n - \delta, m_n + \delta) \quad ,$$

onde δ é o mesmo do lema anterior, tem-se

$$\begin{aligned} e^{ng} n^\rho \int_{\mathbb{R}} e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds &= e^{ng} n^\rho \left[\int_{m_n - \delta}^{m_n + \delta} e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds + \int_{V_n} e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds \right] = \\ &= n^\rho e^{q(n)} \int_{-\delta}^{+\delta} e^{-nB_n(\omega, s, m_n)} ds + e^{ng} n^\rho \int_{V_n} e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds = \\ &= e^{q(n)} \left[\int_{-\delta n^\rho}^{\delta n^\rho} e^{-\sum_{j=1}^{2\ell} \lambda_j \frac{s^j}{j!}} ds + o(1) \right] + O(n^\rho e^{-n\varepsilon}) \quad , \quad n \rightarrow \infty \quad (2.2.20) \end{aligned}$$

onde $q(n) = n[g - \Gamma_n(\omega, m_n)] = o(n)$. Na última passagem usou-se a primeira parte do lema 2.2.3, o teorema da convergência dominada, válido devido a (2.2.16) e a igualdade (2.2.15) para B_n . A integral no enunciado do lema pode ser escrita então como

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds = e^{ng} \left\{ n^{-\rho} \left[e^{q(n)} \int e^{-\sum_{j=1}^{2\ell} \lambda_j(\omega) \frac{s^j}{j!}} ds + \right. \right. \\ \left. \left. + o(1) + O(n^\rho e^{-n\varepsilon}) \right] \right\}, \quad n \rightarrow \infty$$

e o limite (2.2.19) decorre imediatamente.

Havendo um número α de mínimos globais, finito e in dependente de n , a prova é alterada tomando-se

$$V_n = \mathbb{R} - \bigcup_{i=1}^{\alpha} \left\{ m_n^{(i)}(\omega) - \delta, m_n^{(i)}(\omega) + \delta \right\}$$

onde $m_n^{(i)}(\omega)$ indica a localização do i -ésimo mínimo de $\Gamma_n(\omega, s)$, para ω fixo, e δ é tomado como

$$0 < \delta < \min\{\delta_1, \delta_2, |m_n^{(i)} - m_n^{(j)}| : 1 \leq i \neq j \leq \alpha\}$$

com δ_1 e δ_2 definidos no lema anterior.

A integral em $\mathbb{R} \setminus V_n$ anterior seria substituída por

$$\sum_{i=1}^{\alpha} n^{\rho_i} \int_{m_n^{(i)} - \delta}^{m_n^{(i)} + \delta} e^{-n\Gamma_n(\omega, s)} ds, \quad ,$$

onde ρ_i seria determinado pela expansão de $\Gamma_n(\omega, s)$ em torno de $s = m_n^{(i)}$. O comportamento assintótico obtido anteriormente para (2.2.19) não seria alterado. $\square$

Com os dois lemas anteriores, a prova do teorema 2.2.2 fica limitada a mostrar que as funções $G_n(x)$ satisfazem as hi-

póteses do lema 2.2.3 com a sequência $\{m_n\}$ escolhida como uma sequência de mínimos de $G_n(x)$.

Prova do teorema 2.2.2

As hipóteses a serem verificadas para $G_n(x)$ são

- (a) $G_n^{(j)}(x) \rightarrow G^{(j)}(x)$ uniformemente em compactos de $\mathbb{R}$, $\forall \omega \in A$, onde A é definido no início do lema 2.2.3.
- (b) Existe uma sequência $\{m_n\}_{n=1}^{\infty}$ tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} m_n = m$ e as derivadas de G_n convergem nesses pontos na forma indicada em (2.2.14).
- (c) Verificar (2.2.13) para $G_n(x)$.

A prova de (a) segue basicamente a linha do teorema 2.2.1. Para $j \neq 0$ o argumento é facilmente generalizável; tomando-se $\sigma_n(x)$ como no teorema 2.2.1, prova-se que $\sigma_n^{(k)}(x) = \frac{d^k \sigma_n}{dx^k}$ é limitada, o que leva à equicontinuidade da família $\{\sigma_n^{(k-1)}\}_{n=1}^{\infty}$. A convergência q.t.p. em conjuntos $A \subset \Omega$ independentes de x decorre como no teorema 2.2.1 e a uniformidade em compactos é imediata. A propriedade da equicontinuidade será usada na prova de (b).

Notando que, para cada k , $k \in \{1, 2, \dots\}$, existem números reais e positivos $A(k)$, $a_j(k)$ e $b_j(k)$, $j \in \{1, 2, \dots, 2^{k-1}\}$, tais que

$$\sigma_n^{(k)}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{p_k(x, h_i) (\beta J)^{k/2}}{[\cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i)]^{2^{k-1}}}, \quad \text{para } n \text{ e } k \in \{1, 2, \dots\}$$

onde

$$p_k(x, h_i) = A(k) + \sum_{j=1}^{2^{k-1}} \left[a_j(k) \sinh^j(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) + b_j(k) \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) \sinh^{j-1}(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) \right],$$

vê-se que $\sigma_n^{(k)}$ é limitada, pois

$$0 \leq \frac{p_k(x, h_i)}{[\cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i)]^{2^{k-1}}} \leq A(k) + \sum_{j=1}^{2^{k-1}} [a_j(k) + b_j(k)]$$

o que, com as observações anteriores, verifica a hipótese (a).

Quanto à hipótese (b), seja x_n^* um mínimo global de $G_n(x)$ e x^* de $G(x)$, que devem satisfazer respectivamente as equações:

$$x_n^* = \sigma_n^{(1)}(x_n^*) = \frac{\sqrt{\beta J}}{n} \sum_{i=1}^n \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x_n^* + \beta h_i) \quad (2.2.21)$$

$$x^* = \sigma^{(1)}(x^*) = \sqrt{\beta J} \int dv(h) \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x^* + \beta h). \quad (2.2.22)$$

Logo

$$|x_n^* - x^*| \leq 2\sqrt{\beta J}$$

e portanto a sequência $\{x_n^*\}$ está contida num compacto, para cada β fixo. Há então (pelo menos) uma subsequência $\{x_{n_j}^*\}_{j=1}^\infty$ que converge. Seja $\bar{x}$ o limite dessa subsequência. Prova-se agora que $G_n(x_n^*) \rightarrow G(\bar{x})$ (e analogamente para a derivada de qual-

quer ordem nesse ponto); da uniformidade da convergência de $G_n \rightarrow G$, dado $\varepsilon > 0$, existe j_0 tal que para todo $n \in \{n_j : j > j_0\}$,

$$\begin{aligned} |G_n(x_n^*) - G(\bar{x})| &\leq |G_n(x_n^*) - G_n(\bar{x})| + |G_n(\bar{x}) - G(\bar{x})| \leq \\ &\leq \sqrt{\beta J} |x_n^* - \bar{x}| + \varepsilon. \end{aligned}$$

Na última passagem foi usada também a equicontinuidade de G_n . Como ε pode ser tomado arbitrariamente pequeno e $x_n^* \rightarrow \bar{x}$ conclui-se que

$$G_n(x_n^*) \rightarrow G(\bar{x}).$$

Como o mesmo acontece com todas as derivadas, então $\bar{x} = x^*$.

O controle da convergência de $G_n \rightarrow G$ de maneira a verificar (2.2.14) é bem mais sutil. Para tal é necessário saber como x_n^* converge para x^* , o que é dado pelo

Lema 2.2.5

Seja k o tipo de x^* (vide capítulo 1); então

$$n^\delta (x_n^* - x^*) = v_k(\omega) + o(1), \quad n \rightarrow \infty \quad (2.2.23)$$

onde $\delta = \frac{1}{2(2k-1)}$ e

$$[v_k(\omega)]^{2k-1} = \frac{(2k-1)! u_1(\omega)}{G^{(2k)}(x^*)}; \quad u_1(\omega) \sim N(0, \sigma^2(1)) \quad (2.2.24)$$

$$\text{com } \sigma^2(1) = \beta J \left\{ \int dv(h) \operatorname{tgh}^2(\sqrt{\beta J} x^* - \beta h) - \left[\int dv(h) \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x^* + \beta h) \right]^2 \right\}$$

$$\text{e portanto } v_k(\omega) \sim x^{2k-2} \exp \left\{ - \left[\frac{G^{(2k)}(x^*)}{(2k-1)! \sigma^{(1)}} \right]^2 \frac{x^{2(2k-1)}}{2} \right\} dx .$$

Prova

De (2.2.21) e (2.2.22) tem-se

$$x_n^* - x^* = \sigma_n^{(1)}(x_n^*) - \sigma^{(1)}(x^*) . \quad (2.2.25)$$

Por outro lado, a função $\sigma_n^{(1)}(x)$ pode ser expandida em torno de x^* :

$$\sigma_n^{(1)}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \sigma_n^{(1+i)}(x^*) \frac{(x-x^*)^i}{i!} .$$

Como existe uma sequência $\{n_j\}_{j=1}^{\infty}$ tal que $x_{n_j}^* \rightarrow x^*$, então dado $\varepsilon > 0$ existe j_0 tal que $|x_{n_j}^* - x^*| < \varepsilon$ para todo $j > j_0$. Fazendo $x = x_n^*$ na expressão acima com $n \in \{n_j : j > j_0\}$, tem-se

$$\sigma_n^{(1)}(x_n^*) = \sum_{i=0}^{2k-1} \sigma_n^{(1+i)}(x^*) \cdot \frac{(x_n^* - x^*)^i}{i!} + O(|x_n^* - x^*|^{2k+1})$$

$$\text{para } |x_n^* - x^*| < \varepsilon .$$

O tipo de x^* ser k significa que a primeira derivada não nula de $G(x)$ no ponto x^* é de ordem $2k$. Usando isso, além do fato de que

$$G_n(x) = \frac{x^2}{2} - \sigma_n(x) .$$

e do Teorema Central do Limite (vide apêndice B) segundo o qual

$$\sigma_n^{(i)}(x^*) = \sigma^{(i)}(x^*) + \frac{u_i(\omega)}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right), \quad n \rightarrow \infty$$

com $u_i(\omega) \sim N(0, \sigma^2(i))$

onde $\sigma^2(i)$ é uma variância bem definida pelo TCL, pode-se introduzir a expansão acima para $\sigma_n^{(1)}(x_n^*)$ na expressão (2.2.25) para se chegar a

$$G^{(2)}(x^*)(x_n^* - x^*) = \frac{u_1(\omega)}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \quad \text{para } k=1, \quad n \rightarrow \infty$$

e

$$0 = \frac{u_1(\omega)}{\sqrt{n}} + \sigma^{(2k)}(x^*) \frac{(x_n^* - x^*)^{2k-1}}{(2k-1)!} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \quad \text{para } k > 1, \quad n \rightarrow \infty.$$

Como, de (2.2.21) e (2.2.22)

$$u_1(\omega) = \sqrt{n} \left[\frac{\sqrt{\beta J}}{n} \sum_{i=1}^n \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x_n^* + \beta h_i) - \sqrt{\beta J} \int dv(h) \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x^* + \beta h) \right],$$

$\sigma^2(1)$ será dado como no enunciado do lema. As três últimas expressões levam a (2.2.23).]

A análise da convergência de $G_n^{(j)}$ é agora mais fácil. Para $j=1$, $G_n^{(1)}(x_n^*) = 0$, $\forall n$, pela definição de x_n^* ; para $j > 1$, tal como no lema acima deve-se expandir $G_n(x)$ em torno de x^* e depois, para n suficientemente grande, calcular a função em $x = x_n^*$. Obtém-se

$$G_n^{(j)}(x_n^*) = \sum_{p=0}^{\infty} G_n^{(j+p)}(x^*) \frac{(x_n^* - x^*)^p}{p!} \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} \begin{cases} \frac{G^{(2k)}(x^*) v_k^{(2k-j)}}{(2k-j)! n^{\delta(2k-j)}} + \frac{u_j}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) & j < 2k \\ \frac{u_j}{\sqrt{n}} + G^{(j)}(x^*) + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) & j \geq 2k \end{cases}$$

onde foi aplicado o lema 2.2.5, o Teorema Central de Limite e k é o tipo de x^* . Tomando-se então em (2.2.14) $\ell = 1$ e

$$\rho \equiv \rho(k) = \frac{k}{2(2k-1)} \quad (2.2.26)$$

tem-se

$$\lambda_1(\omega) = 0 \quad \text{e} \quad \lambda_2(\omega) = \frac{G^{(2k)}(x^*) v_k^{(2k-2)}(\omega)}{(2k-2)!},$$

com v_k definido em (2.2.24), o que verifica completamente a hipótese (b).

Quanto a (c), basta notar que

$$\begin{aligned} \ln \cosh[f(x, h)] &\leq |f(x, h)| \Rightarrow \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h_i) \leq \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\sqrt{\beta J} x + \beta h_i| \leq \sqrt{\beta J} |x| + \beta \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |h_i| \end{aligned} \quad (2.2.27)$$

o que leva a

$$G_n(x) \geq \frac{x^2}{2} - \sqrt{\beta J} |x| - \beta \sup_i \{|h_i(\omega)|\}.$$

Esta desigualdade permite aplicar o teorema da con-

vergência dominada em $\int e^{-G_n(x)} dx$, o que implica, de (2.2.11) e (2.2.27) em

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int e^{-G_n(x)} \leq \exp \left[\beta \int dv(h) |h| \right] \int dx e^{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{\beta J} |x|} < \infty$$

o que verifica completamente (2.2.13) e portanto a hipótese (c).]

Devido a (2.2.12), as propriedades de G correspondem à caracterização termodinâmica do modelo. Por exemplo, a existência de vários mínimos globais corresponde a fases coexistentes cujas magnetizações são as várias posições dos mínimos; mínimos globais não quadráticos ($k > 1$) correspondem a pontos críticos e mínimos locais a fases metaestáveis.

A determinação de x^* - e portanto, da magnetização de equilíbrio - é feita pelo estudo de $G(x)$ e das suas derivadas:

$$G^{(1)}(x) = x - \sqrt{\beta J} \int dv(h) \operatorname{tgh}(\sqrt{\beta J} x + \beta h) \quad (2.2.28)$$

$$G^{(2)}(x) = 1 - \beta J \int dv(h) \cosh^{-2}(\sqrt{\beta J} x + \beta h) .$$

Sendo $dv(h)$ uma distribuição par, $x^* = 0$ será sempre solução de $G^{(1)}(x) = 0$. Será mínimo, pelo menos local, enquanto $G^{(2)}(0) > 0$. Para $\beta = 0$, $x^* = 0$ é o único mínimo; portanto, a menos de transições de primeira ordem, a condição $G^{(2)}(0) = 0$ define uma transição de fase de segunda ordem, a uma tempera

tura $\beta = \beta_c$ dada de (2.2.28) por

$$\beta_c = \left[\int dv(h) \operatorname{sech}^2 \beta_c h \right]^{-1}.$$

Com a medida $dv(h)$ dada em (2.2.2), o diagrama de fase^[SW] é como o apresentado na figura 1, onde (H_t, T_t) é um ponto tricrítico.

Fig. 1 - Diagrama de fase para $dv(h) = \frac{1}{2} [\delta(h-H) + \delta(h+H)]dh$; a linha tracejada indica uma transição de 2ª ordem e a contínua uma de 1ª, separando a região ferromagnética (F) da paramagnética (P).

As transições neste tipo de sistemas têm como parâmetro de ordem a magnetização de equilíbrio μ definida como

$$\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n} \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n}}. \quad (2.2.29)$$

A relação de μ com x^* é imediata; a expressão acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mu &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[-\frac{1}{n\beta} \ln \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n - \beta \alpha \sum_{i=1}^n \sigma_i} \right] \Big|_{\alpha=0} = \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} [\inf \{\tilde{G}(x) | x \in \mathbb{R}\}] \Big|_{\alpha=0} \end{aligned}$$

onde na última passagem foi usado o teorema 2.2.2 e a função $\tilde{G}(x)$, obtida como em (2.2.8), é dada por

$$\tilde{G}(x) = \frac{x^2}{2} - \int dv(h) \ln \cosh[\sqrt{\beta J} x + \beta(h+\alpha)] .$$

Sendo $x^*(\alpha)$ o mínimo de $\tilde{G}(x)$, é evidente que $x^*(0) = x^*$. Então

$$\inf\{\tilde{G}(x) | x \in \mathbb{R}\} = \frac{x^{*2}(\alpha)}{2} - \int dv(h) \ln \cosh[\sqrt{\beta J} x^*(\alpha) + \beta(h+\alpha)]$$

e logo

$$\mu = \frac{1}{\beta} \left\{ x^*(\alpha) \frac{\partial x^*(\alpha)}{\partial \alpha} - \left[\sqrt{\beta J} \frac{\partial x^*(\alpha)}{\partial \alpha} + \beta \right] \int dv(h) \operatorname{tgh}[\sqrt{\beta J} x^*(\alpha) + \beta(h+\alpha)] \right\}_{\alpha=0}$$

$$\text{ou ainda,} \quad \mu = \frac{x^*}{\sqrt{\beta J}} \quad (2.2.30)$$

onde se usou (2.2.22).

Flutuações

Sendo μ o valor de equilíbrio da magnetização, o estudo de flutuações dessa variável refere-se, conforme foi descrito anteriormente, à obtenção da distribuição de probabilidades assintótica da variável

$$y_n = n^\gamma \left[\frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n} - \mu \right] , \quad 0 < \gamma \leq \frac{1}{2} ,$$

no limite em que $n \rightarrow \infty$. Naturalmente, o valor de γ será deter

minado convenientemente de maneira que a distribuição de y_n tenha bom limite, isto é, que não fique concentrada num único ponto ou no infinito.

Os principais resultados podem ser expressos nos dois teoremas seguintes:

Teorema 2.2.6

Sendo $W \sim N(0,1)$ independente de $S_n = \sum_{i=1}^n \sigma_i$, $n \geq 1$, dados a e γ reais tem-se

$$\frac{W}{\sqrt{\beta J} n^{\frac{1}{2}-\gamma}} + \frac{S_n - na}{n^{1-\gamma}} \sim \frac{\exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{s}{n^\gamma} + a \right) \right] \right\} ds}{\int ds \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{s}{n^\gamma} + a \right) \right] \right\}} \quad (2.2.31)$$

Comentários

1) Em (2.1.31) a variável W só contribui no limite $n \rightarrow \infty$ se $\gamma = \frac{1}{2}$.

2) Este teorema relaciona a função G_n introduzida em (2.2.7) cujo mínimo determina a energia livre com a distribuição de probabilidades de y_n .

Teorema 2.2.7

Sendo $\{x_i^*\}_{i=1}^\alpha$ o conjunto de mínimos globais de $G(x)$ e $\int dv(h) |h| < \infty$, tem-se com $\gamma = \frac{1}{2(2k_i-1)}$:

(a) $\alpha = 1$ ($\beta < \beta_c$, na criticalidade de segunda ordem e na tricriticalidade)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \begin{cases} v_k(\omega) \sim x^{2k-2} \exp \left\{ - \frac{x^{2(2k-1)}}{2 \left[\frac{(2k-1)!}{G^{(2k)}(x^*)} \right]^2 \sigma^2(1)} \right\} dx, & h > 1 \\ u \sim N \left(\frac{u_1(\omega)}{G^{(2)}(0)}, \frac{1}{\beta J} \left(\frac{1}{G^{(2)}(0)} - 1 \right) \right), & k = 1 \end{cases}$$

com $v_k(\omega)$ e $u_1(\omega)$ definidos em (2.2.24).

(b) $\alpha > 1$ ($\beta > \beta_c$ e na criticalidade de primeira ordem)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n : \left| \frac{S_n}{n} - \frac{x_i^*}{\sqrt{\beta J}} \right| < \varepsilon = y_i \sim N \left(\frac{u_1(\omega)}{G^{(2)}(x_i^*)}, \frac{1}{\beta J} \left(\frac{1}{G^{(2)}(x_i^*)} - 1 \right) \right), \quad k = 1$$

com $0 < \varepsilon < \min\{|x_i^* - x_j^*| : 1 \leq i \neq j \leq \alpha\}$.

Comentários

1) As duas partes do teorema referem-se respectivamente a situações em que o mínimo global é não-degenerado (uma fase pura) e degenerado (fases coexistentes). Essencialmente, vê-se que o resultado em (b) preserva o resultado em (a), bastando condicionar a magnetização para n finito à vizinhança de um dos valores da magnetização de equilíbrio.

2) Fora da criticalidade deve ser observado que as variáveis de spin têm um comportamento fracamente dependente ($\gamma = \frac{1}{2}$) enquanto que na criticalidade são fortemente dependentes ($\gamma < \frac{1}{2}$) levando a distribuições não-Gaussianas para a variável de flutuação.

3) Em todos os casos a distribuição de y depende de ω , ou seja, da configuração de campos aleatórios. Para $k = 1$, no entanto, apenas a média é aleatória.

4) Deve-se notar que o valor de γ aqui obtido é sempre menor do que no sistema determinístico de Ellis e Newman, onde $\gamma = \frac{1}{2k}$, a menos do caso em que $k = 1$. Quer isto dizer que na criticalidade a dependência entre as variáveis de spin no modelo com campo aleatório é mais forte do que no sistema determinístico.

Prova do Teorema 2.2.6

$$\text{Seja} \quad A_n(a) = \frac{S_n - na}{n^{1-\gamma}} \quad (2.2.32)$$

e $K_n(t)$ a função característica de $A_n(a)$. Então

$$K_n(t) = \langle \exp[i A_n(a) t] \rangle = \frac{1}{Z_n} \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[i \left(\frac{S_n - na}{n^{1-\gamma}} \right) t \right] e^{-\beta H_n}.$$

Usando-se (2.2.1) e (2.2.5) com $\eta = \sqrt{\frac{\beta J}{n}} \left(\sum_{i=1}^n \sigma_i \right)$, vem

$$K_n(t) = \frac{1}{Z_n} \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -n \left[\frac{x^2}{2} - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \ln \cosh \left(\sqrt{\beta J} x + \beta h_j + \frac{it}{n^{1-\gamma}} \right) + \frac{iat}{n^{1-\gamma}} \right] \right\}.$$

Fazendo-se $x = \frac{it}{\sqrt{\beta J} n^{1-\gamma}}$, chega-se a

$$\begin{aligned} K_n(t) \cdot \exp \left[-\frac{t^2}{2\beta J n^{1-2\gamma}} \right] &= \\ &= \frac{1}{Z_n} \int \frac{dm}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[it n^\gamma \left(\frac{m}{\sqrt{\beta J}} - a \right) \right] e^{-n G_n(m)}. \end{aligned}$$

Com a mudança $s = \left(\frac{m}{\sqrt{\beta J}} - a \right) n^\gamma$ e lembrando que todas essas operações podem ser feitas também em Z_n , tem-se

$$K_n(t) \cdot \exp \left[-\frac{t^2}{2\beta J n^{1-2\gamma}} \right] = \frac{\int ds e^{its} \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{s}{n^\gamma} + a \right) \right] \right\}}{\int ds \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{s}{n^\gamma} + a \right) \right] \right\}}$$

o que equivale ao enunciado do teorema.

Finalmente, para se provar o teorema 2.2.7, é necessário o seguinte

Lema 2.2.8

Seja $\{x_i^*\}_{i=1}^\alpha$ o conjunto de mínimos globais de $G(x)$ e $\int dv(h) |h| < \infty$; então, com $\gamma = \frac{k}{2(2k-1)}$, $k \in \{1, 2, \dots\}$,

a) $\alpha = 1$

$$\left. \begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} A_n \left(\frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}} \right) \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} A_n \left(\frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}} \right) : \left| \frac{s_n}{n} - \frac{x_i^*}{\sqrt{\beta J}} \right| < \varepsilon \end{aligned} \right\} \sim \exp \left\{ -\beta J \left[\frac{(2k-2)!}{G^{(2k)}(x^*) v_k^{2k-2}(\omega)} - \delta_{k,1} \right]^{-1} \frac{s^2}{2} \right\} ds$$

(2.2.33)

com $0 < \varepsilon < \min\{|x_i^* - x_j^*| : 1 \leq i \neq j \leq \alpha\}$ e A_n dado em (2.2.32).

Prova

a) $\alpha = 1$

Na prova do teorema 2.2.2 foi mostrado que $G_n(x)$ satisfazia todas as hipóteses feitas sobre $\Gamma_n(\omega, x)$ no lema 2.2.3, tomando-se em (2.2.14) $\ell = 1$,

$$\lambda_1(\omega) = 0, \quad \lambda_2(\omega) = \frac{G^{(2k)}(x^*) v_k^{2k-2}(\omega)}{(2k-2)!}$$

e $\rho \equiv \rho(k)$ dado por (2.2.26).

Em particular, vale a expansão (2.2.15)

$$\begin{aligned} n \left[G_n(\omega, \sqrt{\beta J} \frac{s}{n^\rho} - x_n^*) - G_n(\omega, x_n^*) \right] &= \lambda_2(\omega) \beta J \frac{s^2}{2} + \\ &+ o \left(\frac{|s|^3}{n^{3\rho}} \right) + o(1) P_1(s) \quad \text{para} \quad |s| < \delta \frac{n^\rho}{\sqrt{\beta J}}. \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

Pelo teorema (2.2.6), basta então provar o comporta-

mento assintótico

$$\frac{\int ds t(s) \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{s}{n^\gamma} + \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}} \right) \right] \right\}}{\int ds \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{s}{n^\gamma} + \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}} \right) \right] \right\}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\int ds t(s) \exp \left\{ -\beta J \left[\lambda_2^{-1} - \delta_{k,1} \right]^{-1} \frac{s^2}{2} \right\}}{\int ds \exp \left\{ -\beta J \left[\lambda_2^{-1} - \delta_{k,1} \right]^{-1} \frac{s^2}{2} \right\}} \quad (2.2.35)$$

para qualquer função $t(s)$ limitada e contínua.

Tomando-se δ como em (2.2.15) e (2.2.16) e fazendo-se $\gamma = \rho(k)$ tem-se, da primeira parte do lema (2.2.3) que

$$\begin{aligned} e^{nf} \int_{|s| \geq \delta \frac{n^{\rho(k)}}{\sqrt{\beta J}}} \exp \left[-n G_n \left(\sqrt{\beta J} \frac{s}{n^\rho} + x_n^* \right) \right] t(s) ds &= \\ &= O(n^\rho e^{-n\epsilon}) \quad , \quad n \rightarrow \infty \quad . \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

Como (2.2.16) permite o uso do teorema de convergência dominada, de (2.2.34) vem:

$$\begin{aligned} e^{nf} \int_{|s| < \delta \frac{n^{\rho(k)}}{\sqrt{\beta J}}} \exp \left[-n G_n \left(\sqrt{\beta J} \frac{s}{n^\rho} + x_n^* \right) \right] t(s) ds &= \\ &= e^{q(n)} \left\{ \int_{|s| < \delta \frac{n^{\rho(k)}}{\sqrt{\beta J}}} \exp \left\{ -n \left[G_n \left(\sqrt{\beta J} \frac{s}{n^\rho} + x_n^* \right) - G_n(x_n^*) \right] \right\} t(s) ds \right\} = \\ &= e^{q(n)} \left[\int \exp \left(-\lambda_2(\omega) \frac{s^2}{2} \right) t(s) ds + o(1) \right] \quad , \quad n \rightarrow \infty \quad (2.2.37) \end{aligned}$$

onde $q(n) = n[f - G_n(x_n^*)] = o(n)$. Então (2.2.31), (2.2.36) e (2.2.37) asseguram o comportamento assintótico em (2.2.35), garantindo assim (2.2.33).

b) $\alpha > 1$

No caso de $G(x)$ ter mais de um mínimo global, é sempre possível usar a expansão acima em vizinhanças de cada um dos mínimos como as indicadas no enunciado e à semelhança da prova do teorema 2.2.4, chegando-se ao resultado desejado. $\square$

Os lemas 2.2.8 e 2.2.5 são suficientes para provar o teorema 2.2.7.

Prova do Teorema 2.2.7

A expressão (2.2.33) leva a

$$\frac{S_n}{n} = \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}} + \frac{\bar{u}}{n^{\frac{k}{2(2k-1)}}} + o\left(n^{-\frac{k}{2(2k-1)}}\right), \quad n \rightarrow \infty \quad (2.2.38)$$

com $\bar{u} \sim N\left(0, \frac{1}{\beta J} (\lambda_2^{-1}(\omega) - \delta_{k,1})\right)$.

Por outro lado, de (2.2.33) tem-se que

$$\frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}} = \frac{x^*}{\sqrt{\beta J}} + \frac{v_k(\omega)}{n^{\frac{1}{2(2k-1)}}} + o\left(n^{-\frac{1}{2(2k-1)}}\right), \quad n \rightarrow \infty. \quad (2.2.39)$$

Associando (2.2.30), (2.2.38) e (2.2.39) vem

$$\frac{S_n}{n} - \mu = \frac{\bar{u}}{n^{\frac{k}{2(2k-1)}}} + \frac{v_k(\omega)}{n^{\frac{1}{2(2k-1)}}} + o\left(n^{-\frac{1}{2(2k-1)}}\right), \quad n \rightarrow \infty$$

o que, lembrando de (2.2.24) que $v_1(\omega) = \frac{u_1(\omega)}{G^{(2)}(x^*)}$, assegura o teorema. $\square$

Comentário

É importante notar que na criticalidade as flutuações dominantes são devidas aos campos aleatórios enquanto as flutuações térmicas desempenham um papel subdominante. Fora da criticalidade esses dois tipos de flutuação contribuem em mesma ordem no limite.

Seria relevante, a título de conclusão desta secção e complementando os comentários feitos ao teorema 2.2.7, chamar a atenção para algumas implicações físicas destes resultados.

Em primeiro lugar, uma leitura direta do teorema 2.2.7 diz que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left[\left(\frac{S_n}{n} - \mu \right) n^{\frac{1}{2(2k-1)}} \in [a, b] \right] =$$

$$= \begin{cases} \int_a^b x^{2k-2} \exp \left[- \left(\frac{G^{(2k)}(x^*)}{(2k-1)!} \right)^2 \frac{x^{2(2k-1)}}{2\sigma^2(1)} \right] dx & , \quad k > 1 \\ \int_a^b dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp \left[- \beta J \frac{\left(x - \frac{y}{G^{(2)}(0)} \right)^2}{2 \left(G^{(2)}(0) - 1 \right)} \right] \exp \left[- \frac{y^2}{2\sigma^2(1)} \right] & , \quad k = 1 \end{cases}$$

onde as integrais devem ser naturalmente normalizadas.

Por outro lado, por exemplo a susceptibilidade magnética é dada por

$$\chi = \frac{1}{n} \sum_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{n} \langle S_n^2 \rangle = n^{1 - \frac{1}{2(2k-1)}} \left\langle \left(\frac{S_n}{n^{1 - \frac{1}{2(2k-1)}}} \right)^2 \right\rangle$$

onde o valor esperado $\langle \rangle$ na definição de χ indica a média tér

mica. Para $k > 1$, uma vez que nessa situação as flutuações dos campos dominam as flutuações térmicas, não há dúvida que χ é dada pela variância da distribuição acima a menos de uma potência de n . Já para $\beta < \beta_c$ ($k=1$), como já foi dito, ambos os tipos de flutuação contribuem em mesma ordem, e portanto deve-se tomar para χ a variância apenas da distribuição térmica (de média definida em Ω) ou seja de

$$\exp \left[- \frac{\beta J}{\left(G^{(2)}(0) - 1 \right)} \frac{\left(x - \frac{u_1(\omega)}{G^{(2)}(0)} \right)^2}{2} \right] .$$

Logo, para $\beta < \beta_c$

$$\chi = \frac{1}{\beta J} \left(G^{(2)}(0) - 1 \right) .$$

Vê-se que é uma grandeza finita, independente da configuração de campos aleatórios e que diverge no limite $\beta \rightarrow \beta_c$ em transições de segunda ordem. A potência de n é anulada com o valor de $k=1$. Por outro lado, é possível dizer para $\beta = \beta_c$, com que potência de n a susceptibilidade diverge à medida em que o sistema se torna infinito

$$\begin{aligned} \text{para } k=2 \quad \chi_n(\beta=\beta_c) &\approx n^{2/3} \\ \text{para } k=3 \quad \chi_n(\beta=\beta_c) &\approx n^{4/5} . \end{aligned}$$

No caso dos sistemas determinísticos essas potências seriam respectivamente $\frac{1}{2}$ e $\frac{2}{3}$ para $k=2$ e $k=3$.

Finalmente deve-se observar que os expoentes críticos obtidos coincidem naturalmente com os expoentes críticos das teorias usuais de campo médio (uma vez que a termodinâmica é igual!).

Em particular, com a aplicação de um campo externo α , a magnetização $\mu(\alpha)$ vai a zero quando $\alpha \rightarrow 0$ na forma

$$\mu(\alpha) \approx \alpha^{1/3}$$

o que é facilmente obtido, expandindo-se

$$\mu(\alpha) = \int dv(h) \operatorname{tgh}[\beta J \mu(\alpha) + \beta(h + \alpha)]$$

em torno de $\alpha = 0$.

2.3. O ANTIFERROMAGNETO DILUÍDO COM CAMPO UNIFORME

Dado $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ o sistema é descrito pela hamiltoniana

$$H_n = \frac{2J}{n} \sum_{\substack{i \in \Lambda_e \\ j \in \Lambda_0}} \xi_i \xi_j \sigma_i \sigma_j + h \sum_{i \in \Lambda} \xi_i \sigma_i \quad (2.3.1)$$

onde $\Lambda_e = \Lambda \cap \mathbb{Z}_e^d$, $\Lambda_0 = \Lambda \cap \mathbb{Z}_0^d$ com $\mathbb{Z}_e^d$ ($\mathbb{Z}_0^d$) sendo a subrede de $\mathbb{Z}^d$ na qual a soma das coordenadas é par (ímpar). Como anteriormente $\sigma_i = \pm 1$ são variáveis de spin e n é a cardinalidade de Λ ; neste modelo será tomado $J > 0$ e ξ_i , $i \in \Lambda$, são variáveis aleatórias independentes e igualmente distribuídas, com densidade de probabilidade

$$\xi \sim [p \delta(\xi - 1) + (1 - p) \delta(\xi)] d\xi \quad 1 \geq p \geq 0. \quad (2.3.2)$$

A hamiltoniana descreve interações antiferromagnéticas entre sítios de subredes diferentes, podendo eventualmente alguns não estar ocupados, dependendo do valor que a variável ξ ne

les assumir, por este motivo ξ é chamada de variável de diluição.

Por outro lado, (2.3.1) induz naturalmente uma interação ferromagnética entre spins de uma mesma subrede. Isso vê-se da hamiltoniana em (2.3.1) que, quando $h=0$, é minimizada em configurações que tenham os spins alinhados dentro de cada subrede e opostos em subredes distintas.

Termodinâmica

Definindo-se as magnetizações de subrede

$$S_0(e) = \sum_{i \in \Lambda_0(e)} \xi_i \sigma_i$$

pode-se escrever H_n em (2.3.1) como

$$-\beta H_n = \left[i \sqrt{\frac{\beta J}{n}} (S_0 + S_e) \right]^2 + \left[\sqrt{\frac{\beta J}{n}} (S_0 - S_e) \right]^2 - \beta h (S_0 + S_e) \quad .$$

Aplicando-se (2.2.5) aos termos quadráticos chega-se imediatamente a

$$Z_n = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n} = \frac{2^n n}{2\pi} \int dx dq \exp \left\{ -n \left[\frac{x^2 + q^2}{2} - \varphi_n(x, q) \right] \right\} \quad (2.3.3)$$

onde

$$\begin{aligned} \varphi_n(x, q) = & \frac{1}{n} \sum_{j \in \Lambda_e} \ln \cosh \left[(\sqrt{\beta J} x - i \sqrt{\beta J} q - \beta h) \xi_j \right] + \\ & + \frac{1}{n} \sum_{j \in \Lambda_0} \ln \cosh \left[(\sqrt{\beta J} x + i \sqrt{\beta J} q + \beta h) \xi_j \right] \quad . \end{aligned}$$

Como z_n é por definição real, o objeto de interesse é apenas a parte real do integrando de (2.3.3), dada por

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \exp \left\{ -n \left[\frac{x^2 + q^2}{2} - \varphi_n(x, q) \right] \right\} &= \\ &= \cos \left[n \tilde{\varphi}_n(x, q) \right] \exp \left\{ -n \left[\frac{x^2 + q^2}{2} - \bar{\varphi}_n(x, q) \right] \right\}, \end{aligned}$$

onde $\varphi_n(x, q) = \bar{\varphi}_n(x, q) + i \tilde{\varphi}_n(x, q)$, com

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_n(x, q) &= \frac{1}{2n} \left[\sum_{j \in \Lambda_e} \ell n \cosh^2 \left[(\sqrt{\beta J} x - \beta h) \xi_j \right] + \cos^2 (\sqrt{\beta J} q \xi_j) - 1 \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j \in \Lambda_0} \ell n \left\{ \cosh^2 \left[(\sqrt{\beta J} x + \beta h) \xi_j \right] + \cos^2 (\sqrt{\beta J} q \xi_j) - 1 \right\} \right] \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_n(x, q) &= \frac{1}{n} \left[\sum_{j \in \Lambda_e} \operatorname{tg}^{-1} \left\{ \operatorname{tgh} \left[(\sqrt{\beta J} x - \beta h) \xi_j \right] \operatorname{tg} (-\sqrt{\beta J} q \xi_j) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j \in \Lambda_0} \operatorname{tg}^{-1} \left\{ \operatorname{tgh} \left[(\sqrt{\beta J} x + \beta h) \xi_j \right] \operatorname{tg} (\sqrt{\beta J} q \xi_j) \right\} \right] \end{aligned}$$

e portanto (2.3.3) pode ser reescrita como

$$z_n = \frac{2^n n}{2} \int dx dq \cos (n \tilde{\varphi}_n(x, q)) \exp [-n G_n(x, q)] \quad (2.3.4)$$

onde

$$G_n(x, q) = \frac{x^2 + q^2}{2} - \bar{\varphi}_n(x, q) \quad . \quad (2.3.5)$$

A diferença essencial entre (2.2.6) e (2.3.4) é que a primeira é uma integral em uma única variável enquanto que a última é em duas dimensões. Pode-se mostrar^[H,R] que o método assintótico de Laplace é válido para integrais múltiplas, obtendo-se para o limite (2.2.3), a exemplo de (2.2.12), a expressão

$$\beta f = \inf\{G(x, q) \mid (x, q) \in \mathbb{R}^2\} = G(x^*, q^*) \quad (2.3.6)$$

onde

$$\begin{aligned} G(x, q) &= \lim_{n \rightarrow \infty} G_n(x, q) = \\ &= \frac{x^2 + q^2}{2} - \frac{p}{4} \left\{ \ln \left[\cosh^2(\sqrt{\beta J} x - \beta h) + \cos^2(\sqrt{\beta J} q) - 1 \right] + \right. \\ &\quad \left. + \ln \left[\cosh^2(\sqrt{\beta J} x + \beta h) + \cos^2(\sqrt{\beta J} q) - 1 \right] \right\} \quad . \end{aligned}$$

É bastante simples provar que a energia livre é independente da configuração das variáveis de diluição.

Teorema 2.3.1

Seja $\Omega = \{0, 1\}^\infty$ o espaço-produto onde estão definidas as configurações $\{\xi\}$ das variáveis de diluição e μ a medida induzida nesse espaço por $dv(\xi)$ dado em (2.3.2), então existe um conjunto A independente de x e de q , $A \in \mathcal{C}(\Omega)$, $\mu(A) = 1$, onde $\mathcal{C}(\Omega)$ é a menor σ -álgebra gerada por cilindros em Ω , tal que

$$G_n(x, q) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} G(x, q) \quad , \quad \forall \omega \in A \quad .$$

O mesmo ocorre com qualquer ordem de derivação em relação a x e/ou q .

Prova

Tal como na prova do teorema 2.2.1, basta notar que

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_n(x, q) = \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{\sum_{j \in \Lambda_e} \xi_j}{n} \right] \ln \left[\cosh^2(\sqrt{\beta J} x - \beta h) + \cos^2(\sqrt{\beta J} q) - 1 \right] + \right. \\ \left. + \left[\frac{\sum_{j \in \Lambda_o} \xi_j}{n} \right] \ln \left[\cosh^2(\sqrt{\beta J} x + \beta h) + \cos^2(\sqrt{\beta J} q) - 1 \right] \right\} \end{aligned}$$

e que a LFGN atua sobre as somatórias independentemente de x e q . Para qualquer derivada de G_n , o procedimento é evidentemente o mesmo. $\square$

Mais ainda, notando que para quaisquer n e x fixos

$$\left. \frac{\partial G_n}{\partial q} \right|_{q=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial^2 G_n}{\partial q^2} \right|_{q=0} > 1 \quad \text{e} \quad \cos[n \bar{\varphi}_n(x, 0)] = 1 \quad (2.3.7)$$

tem-se que $q^* = 0$ e toda a termodinâmica é determinada, tal como em (2.2.12), pela minimização da função de uma variável

$$\beta f = \inf_{x \in \mathbb{R}} \{G(x, 0)\}.$$

Da secção anterior sabe-se que a demonstração desta última expressão, que é (2.3.6) com $q^* = 0$, depende profundamente do modo com $G_n(x_n^*, q_n^*) = \inf_{(x, q) \in \mathbb{R}^2} \{G_n(x, q)\}$ converge para $G(x^*, 0)$; ora, de (2.3.7) sabe-se que $q_n^* = 0, \forall n$, ou seja, a localização do mínimo não flutua na direcção q , apenas na x . O problema é, por conseguinte, reduzido de forma lícita ao estudo da convergência da função de uma variável.

$$G_n(x, 0) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{n} \left\{ \sum_{j \in \Lambda_e} \ln \cosh \left[(\sqrt{\beta J} x - \beta h) \xi_j \right] + \right. \\ \left. + \sum_{j \in \Lambda_0} \ln \cosh \left[(\sqrt{\beta J} x + \beta h) \xi_j \right] \right\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} G(x, 0) .$$

A uniformidade em compactos da convergência de $G_n^{(j)}(x, 0) = \frac{\partial^j G_n(x, 0)}{\partial x^j}$ para todo $\omega \in A$, onde A é como no teorema 2.3.1, e a equicontinuidade das famílias $\{G_n^{(j)}(x, 0)\}$, decorrem da forma de $G_n(x, 0)$ e das propriedades da função $\ln \cosh x$, como na prova do teorema 2.2.2. Assim, como lá, é possível provar que existe pelo menos uma subsequência de $\{x_n^*\}_{n=1}^\infty$ que converge para x^* .

O estudo da convergência

$$x_n^* \longrightarrow x^* , \quad n \rightarrow \infty$$

assim como a verificação das outras hipóteses sobre $G_n(x, 0)$ para que o teorema 2.2.2 seja válido, será feito no estudo das flutuações, o que justifica a expressão (2.3.6) com $q^* = 0$.

Comparando agora

$$G(x, 0) = \frac{x^2}{2} - \frac{p}{2} \left\{ \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x - \beta h) + \ln \cosh(\sqrt{\beta J} x + \beta h) \right\} \quad (2.3.8)$$

com $G(x)$ em (2.2.9) tem-se

$$G_{\beta, J}(x, 0) = p G_{\beta, Jp}(x/\sqrt{p}) \quad (2.3.9)$$

o que estabelece a equivalência termodinâmica^[PPB, ABP, Ba] entre os dois modelos. Com base no diagrama de fase da figura 1 da sec-

ção anterior, pode-se inferir que existe uma linha crítica de segunda ordem definida pela equação

$$p \beta_c J = \cosh^2 \beta_c h$$

para $\beta_c \geq \beta_t$, onde $p \beta_t J = \frac{3}{2}$ define um ponto tricrítico. Para $\beta_c < \beta_t$, existe uma linha de transição de primeira ordem.

É bastante simples provar que o parâmetro de ordem desta transição é proporcional à diferença das magnetizações das duas subredes no limite $n \rightarrow \infty$.

De fato, definindo-se

$$H_n(\alpha) = H_n + \alpha (S_0 - S_e)$$

tem-se a semelhança de (2.2.29)

$$\begin{aligned} \mu &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n \left(\frac{S_0 - S_e}{n} \right)}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n}} = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{1}{n\beta} \ln \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n} \right] \bigg|_{\alpha=0} = \\ &= - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\inf \{ G_\alpha(x, 0) \mid x \in \mathbb{R} \} \right] \bigg|_{\alpha=0} \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

onde $G_\alpha(x, q)$ obtida como em (2.3.6) é dada por

$$\begin{aligned} G_\alpha(x, q) &= \frac{x^2 + q^2}{2} - \frac{p}{4} \left\{ \ln \left[\cosh^2(\sqrt{\beta J} x - \beta(h + \alpha)) + \cos^2(\sqrt{\beta J} q) - 1 \right] + \right. \\ &\quad \left. + \ln \left[\cosh^2(\sqrt{\beta J} x + \beta(h + \alpha)) + \cos^2(\sqrt{\beta J} q) - 1 \right] \right\} . \end{aligned}$$

O mínimo de G_α está localizado no ponto $(x^*(\alpha), 0)$,

com $x^*(0) = x^*$. De (2.3.10) tem-se então

$$\mu = \frac{x^*}{\sqrt{\beta J}}. \quad (2.3.11)$$

Flutuações

A variável de flutuação de interesse é portanto

$$Y_n = \frac{(S_0 - S_e) - n \frac{x^*}{\sqrt{\beta J}}}{n^{1-\gamma}}. \quad (2.3.12)$$

A exemplo do teorema (2.2.6) pode aqui ser demonstrado o seguinte

Teorema 2.3.2

Sendo $W \sim N(0,1)$ independente de $(S_0 - S_e)$, dados a e γ reais tem-se

$$\frac{W}{\sqrt{\beta J} n^{\frac{1}{2}-\gamma}} + \frac{(S_0 - S_e) - na}{n^{1-\gamma}} \sim \frac{\int dx \int dq \cos[n \tilde{\varphi}_n(x, q)] \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{x}{n^\gamma} + a \right), q \right] \right\}}{\int dx dq \cos [n \tilde{\varphi}_n(x, q)] \exp \left\{ -n G_n \left[\sqrt{\beta J} \left(\frac{x}{n^\gamma} + a \right), q \right] \right\}}. \quad (2.3.13)$$

Comentário

Tal como na secção anterior, sabe-se que no lado direito de (2.3.13) só irá contribuir o mínimo de G_n , ou seja o ponto $(x_n^*, 0)$, no limite em que $n \rightarrow \infty$. A idéia é, como antes, expandir o exponenciando em torno de $x = 0$ tomando-se $a = \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}}$ pa

ra se obter a distribuição assintótica de $\bar{y}_n = \frac{(S_0 - S_e) - n \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}}}{n^{1-\gamma}}$.

Mais uma vez, o erro cometido ao se aproximar x^* por x_n^* é controlado pelo

Teorema 2.3.3

Seja k o tipo de x^* ; então

$$n^\delta (x_n^* - x^*) = \bar{v}_k(\omega) + o(1) \quad , \quad n \rightarrow \infty \quad (2.3.14)$$

onde $\delta = \frac{1}{2(2k-1)}$ e

$$[\bar{v}_k(\omega)]^{2k-1} = \frac{(2k-1)! \bar{u}_1(\omega)}{G^{(2k)}(x^*, 0)} \quad ; \quad \bar{u}_1(\omega) \sim N(0, \sigma^2(1)) \quad , \quad (2.3.15)$$

com $\sigma^2(1) = \beta J \frac{p(1-p)}{4} [\text{tgh}^2(\sqrt{\beta J} x^* - \beta h) + \text{tgh}^2(\sqrt{\beta J} x^* + \beta h)]$.

Prova do teorema 2.3.2

A prova é análoga à do teorema 2.3.6, partindo-se do cálculo da função característica de $\frac{(S_0 - S_e) - na}{n^{1-\gamma}}$.

Prova do teorema 2.3.3

De (2.3.5), o valor x_n^* que minimiza a função $G_n(x, 0)$ satisfaz

$$x_n^* = \frac{\sqrt{\beta J}}{n} \left\{ \text{tgh}(\sqrt{\beta J} x_n^* - \beta h) \left(\sum_{j \in \Lambda_e} \xi_j \right) + \right. \\ \left. + \text{tgh}(\sqrt{\beta J} x_n^* + \beta h) \left(\sum_{j \in \Lambda_o} \xi_j \right) \right\} .$$

Da expressão acima vê-se que $x_n^* \rightarrow x^*$ q.t.p. $[\mu]$. É possível portanto, expandir $\tanh(\sqrt{\beta J} x \pm \beta h)$ em torno de x^* e depois calculá-las em $x = x_n^*$ como no lema 2.2.5. Obtém-se então

$$(x_n^* - x^*) = \left[1 - G_n^{(2)}(x^*, 0) \right] (x_n^* - x^*) - \sum_{j=2}^{\infty} G_n^{(j+1)}(x^*, 0) \frac{(x_n^* - x^*)^j}{j!},$$

o que, juntamente com o TCL, a definição de k e a observação de que $G^{(j)}(x, 0)$ é uma função ímpar para j ímpar ($G^{(j)}(x^*, 0) = 0$ na criticalidade, pois aí $x^* = 0$), leva como na dedução de (2.2.23) a (2.3.14). $\square$

Para se estar no regime de validade do lema 2.2.3 é necessário ainda verificar que $\int e^{-G(x)} dx < \infty$, o que é imediato, como na parte final da prova do teorema 2.2.2, além da convergência de $G_n(x_n^*, 0)$ na forma de (2.2.14), o que é feito no

Lemma 2.3.4

Seja k o tipo de x^* . Então $G_n^{(j)}(x_n^*, 0)$ satisfaz (2.2.14) com $\ell = 1$, $m_n = x_n^*$, $\rho \equiv \rho(k)$ como em (2.2.26), $\lambda_1(\omega) = 0$ e

$$\lambda_2(\omega) = \frac{G^{(2k)}(x^*, 0) \bar{v}_k^{2k-2}(\omega)}{(2k-2)!}$$

com $\bar{v}_k(\omega)$ definido em (2.3.15).

Prova

Expandi-se $G_n^{(j)}(x_n^*)$ na forma

$$G_n^{(j)}(x_n^*) = \sum_{j=0}^{\infty} G_n^{(j+1)}(x^*, 0) \frac{(x_n^* - x^*)^j}{j!};$$

do TCL

$$G_n^{(j)}(x^*, 0) = G^{(j)}(x^*, 0) + \frac{\bar{u}_j}{\sqrt{n}}, \quad n \rightarrow \infty$$

e portanto

$$G_n^{(j)}(x_n^*) \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} \begin{cases} \frac{G^{(2k)}(x^*, 0) \bar{v}_k^{2k-j}(\omega)}{(2k-j)! n^{\delta(2k-j)}} + \frac{\bar{u}_j}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) & 1 < j < 2k \\ \frac{\bar{u}_j}{\sqrt{n}} + G^{(j)}(x^*, 0) + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) & j \geq 2k \end{cases}$$

O valor de δ , dado em (2.3.14), leva à escolha de $\rho = \frac{k}{2(2k-1)}$ o que implica no enunciado do lema. $\square$

É importante ressaltar mais uma vez, que o fato de G_n ter o mínimo para qualquer n em $q=0$ permite, na análise de distribuições assintóticas, ignorar a integral em dq no lado direito de (2.3.13), calculando o integrando em $q=0$, pelo método assintótico de Laplace. Isso justifica a análise que vem sendo feita para $G_n(x, 0)$, de maneira a enquadrá-la no lema 2.2.3 e 2.2.4. Então é possível provar os seguintes

Teorema 2.3.5

(a) Para $\beta < \beta_c$ e $\beta = \beta_c(h) \leq \beta_t$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(S_0 - S_e) - n \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}}}{n^{1-\gamma}}$$

(b) Para outros valores de β

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(S_0 - S_e) - n \frac{x_n^*}{\sqrt{\beta J}}}{n^{1-\gamma}} : \left| \frac{(S_0 - S_e)}{n} - \frac{x_i^*}{\sqrt{\beta J}} \right| < \epsilon$$

$$\sim \exp \left\{ -\beta J \left[\frac{(2k-2)!}{G^{(2k)}(x^*, 0) \bar{v}_k^{2k-2}(\omega)} - \delta_{k,1} \right]^{-1} \frac{s^2}{2} \right\} ds$$

com $\gamma = \frac{1}{2(2k-1)}$, onde $\{x_i^*\}_{i=1}^\alpha$ são as localizações dos vários mínimos globais de $G(x)$, k é o tipo do mínimo global em torno do qual se estudam as flutuações e ε é tomado como

$$0 < \varepsilon < \min\{|x_i^* - x_j^*| : 1 \leq i \neq j \leq \alpha\}.$$

Prova

A prova é idêntica à do lema 2.2.8. |

Teorema 2.3.6

Sendo $\{x_i^*\}_{i=1}^\alpha$ o conjunto de mínimos globais de $G(x, 0)$ e fazendo $\gamma = \frac{1}{2(2k-1)}$ tem-se

a) $\alpha = 1$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \begin{cases} \bar{v}_k(\omega) & , \quad k > 1 \\ \bar{u} \sim N \left(\frac{\bar{u}_1(\omega)}{G^{(2)}(0, 0)}, \frac{1}{\beta J} \left(\frac{1}{G^{(2)}(0, 0)} - 1 \right) \right) & , \quad k = 1 \end{cases}$$

com $\bar{v}_k$ e $\bar{u}_1$ definidos em (2.3.15).

b) $\alpha > 1$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n : \left| \frac{S_0 - S_e}{n} - \frac{x_i^*}{\sqrt{\beta J}} \right| < \varepsilon = y_i \sim N \left(\frac{u_1(\omega)}{G^{(2)}(x_i^*, 0)}, \frac{1}{\beta J} \left(\frac{1}{G^{(2)}(x_i^*, 0)} - 1 \right) \right),$$

$k = 1$

com $0 < \varepsilon < \min\{|x_i^* - x_j^*| : 1 \leq i \neq j \leq \alpha\} \dots$

Prova

Similar à do teorema 2.2.7. |

Para finalizar, é importante verificar se as flutuações são mapeadas por (2.3.9), que estabelece a equivalência termodinâmica entre os dois modelos estudados.

De acordo com (2.3.9) a variável $y_{AF}(\beta, J)$ de flutuação do antiferromagneto com parâmetros (β, J) é mapeada em $\tilde{y}_{CA}(\beta, pJ) = \frac{y_{CA}(\beta, J)}{\sqrt{p}}$, onde y_{CA} é a variável de flutuação do modelo de Ising com campo aleatório. O objetivo é ver se a distribuição de $\tilde{y}_{CA}(\beta, pJ)$ é mapeada na de $y_{AF}(\beta, J)$. Escrevendo-se então

$$G(x) = \frac{x^2}{2} + \psi(x\sqrt{\beta J}) ,$$

vê-se imediatamente de (2.2.9) e (2.3.8) que

$$G(x, 0) = \frac{x^2}{2} + p \psi(x\sqrt{\beta J}) .$$

Portanto

$$G^{(j)}(x_{CA}^*) = \frac{x_{CA}^{*2}}{2} \delta_{j,0} + (\beta J)^{j/2} (1 - \delta_{j,1}) \psi^{(j)}(x_{CA}^* \sqrt{\beta J}) + \delta_{j,2}$$

e

$$G^{(j)}(x_{AF}^*, 0) = \frac{x_{AF}^{*2}}{2} \delta_{j,0} + (\beta J)^{j/2} p (1 - \delta_{j,1}) \psi^{(j)}(x_{AF}^* \sqrt{\beta J}) + \delta_{j,2}$$

onde x_{CA}^* e x_{AF}^* são os valores de x que minimizam respectivamente (2.2.9) e (2.3.8) e $\psi^{(j)}(x\sqrt{\beta J}) = \frac{d^j \psi(x\sqrt{\beta J})}{dx^j}$.

O mapeamento em (2.3.9) leva a

$$G_{\beta, J}^{(j)}(x_{CA}^*) \longrightarrow p G_{\beta, pJ}^{(j)}\left(\frac{x^*}{\sqrt{p}}\right) = p^{j/2} G_{\beta, J}^{(j)}(x^*, 0) \quad (2.3.17)$$

Desta expressão pode-se notar que as funções $G^{(j)}$ dos

dois modelos só são equivalentes segundo (2.3.9) para $j = 0$.

A distribuição de $\tilde{Y}_{CA}$ é facilmente obtida do teorema 2.2.7. Por simples inspeção, mapeando a expressão assim obtida segundo (2.3.9), isto é, usando (2.3.17) para $j = 2k$ e fazendo $x^* \rightarrow \frac{x^*}{\sqrt{p}}$ e $J \rightarrow Jp$, obtém-se uma distribuição do mesmo tipo da do teorema 2.3.5, mas de variância distinta, o que significa que a equivalência estabelecida entre as termodinâmicas dos dois modelos não é verificada entre as suas flutuações.

2.4. O MODELO DE VIDRO DE SPIN DE VAN HEMMEN

O modelo é descrito pela hamiltoniana

$$H_n = - \frac{J_0}{2n} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \frac{J}{2n} \sum_{i,j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) \sigma_i \sigma_j \quad (2.4.1)$$

onde $i \in \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $i = 1, 2, \dots, n$, $n = |\Lambda|$ é a cardinalidade de Λ e as variáveis aleatórias σ_i , ξ_i e η_i são iguais a ± 1 com igual probabilidade, sendo ξ_i e η_i independentes entre si e de σ_i .

Seja $\Lambda = \Lambda_B \cup \Lambda_R$ onde

$$i \in \Lambda_B \iff \xi_i \eta_i = +1$$

$$i \in \Lambda_R \iff \xi_i \eta_i = -1$$

Então (2.4.1) reescreve-se como

$$H_n = - \frac{J_0}{2n} \left(\sum_{i \in \Lambda} \sigma_i \right)^2 - \frac{J}{n} \left(\sum_{i \in \Lambda_B} \xi_i \sigma_i \right)^2 + \frac{J}{n} \left(\sum_{i \in \Lambda_R} \xi_i \sigma_i \right)^2.$$

Termodinâmica

Fazendo novamente uso da definição (2.2.4) e da identidade (2.2.5), chega-se à representação integral para z_n

$$z_n = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_n} = 2^n \left(\frac{n}{2\pi} \right)^{3/2} \int dx dy dz \exp \left[-n G_n(x, y, z) \right] \quad (2.4.2)$$

onde

$$\begin{aligned} G_n(x, y, z) &= \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} - \varphi_n(x, y, z) \\ e \quad \varphi_n(x, y, z) &= \frac{1}{n} \left\{ \sum_{i \in \Lambda_B} \ln \cosh(\lambda_0 x + \lambda y \xi_i) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j \in \Lambda_R} \ln \cosh(\lambda x + i \lambda z \xi_j) \right\} \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

$$\text{com } \lambda = \sqrt{2\beta J} \quad e \quad \lambda_0 = \sqrt{\beta J_0} \quad .$$

Mais uma vez, pode-se mostrar teoremas equivalentes aos das secções anteriores.

Teorema 2.4.1

Seja μ a medida produto induzida no produto cartesiano $\Omega = \{-1, +1\}^\infty \times \{-1, +1\}^\infty$ das possíveis configurações $(\xi_1, \xi_2, \dots, \eta_1, \eta_2, \dots)$ a partir da medida de ξ e η . Então, existe A independente de x, y e z , $A \in \mathcal{C}(\Omega)$, $\mu(A) = 1$, onde $\mathcal{C}(\Omega)$ é a menor σ -álgebra gerada por cilindros em Ω , tal que

$$\begin{aligned} \varphi_n(x, y, z) \longrightarrow \varphi(x, y, z) &= \frac{1}{4} \left\{ \ln(\cosh^2 \lambda_0 x + \cosh^2 \lambda y - 1) + \right. \\ &\quad \left. + \ln(\cosh^2 \lambda_0 x + \cos^2 \lambda z - 1) \right\} \quad , \quad n \rightarrow \infty \end{aligned}$$

para todo $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, $\forall \omega \in A$.

Prova

Basta escrever

$$\begin{aligned} \varphi_n = & \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(\xi_i \eta_i + 1)}{2} \frac{(\xi_i + 1)}{2} \right] \ln \cosh(\lambda_0 x + \lambda y) + \\ & + \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(\xi_i \eta_i + 1)}{2} \frac{(1 - \xi_i)}{2} \right] \ln \cosh(\lambda_0 x - \lambda y) + \\ & + \left[\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{(1 - \xi_j \eta_j)}{2} \frac{(\xi_j + 1)}{2} \right] \ln \cosh(\lambda_0 x + i \lambda z) + \\ & + \left[\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{(1 - \xi_j \eta_j)}{2} \frac{(1 - \xi_j)}{2} \right] \ln \cosh(\lambda_0 x - i \lambda z) \end{aligned}$$

e aplicar a LFGN.]

Como antes, a energia livre é dada por

$$\beta f = \inf \{ G(x, y, z) \mid (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \}$$

onde

$$\begin{aligned} G(x, y, z) = \lim_{n \rightarrow \infty} G_n(x, y, z) = \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2} - \frac{1}{4} \left[\ln(\cosh^2 \lambda_0 x + \cosh^2 \lambda y - 1) + \right. \\ \left. + \ln(\cosh^2 \lambda_0 x + \cos^2 \lambda z - 1) \right] . \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

A localização do mínimo depende dos parâmetros J_0 , J e β e determina o diagrama de fase dos sistema. Na verdade é fácil provar que os valores de equilíbrio de x , y e z , que serão denotados por x^* , y^* e z^* respectivamente, vão ser proporcionais ao limite termodinâmico de .

co quanto relevante, encontra-se tratado em qualquer livro-texto de teoria de probabilidade. A prova divide-se em partes; primeiramente, a desigualdade de Kolmogorov (uma generalização de (A.3)) é apresentada e permite a demonstração do teorema (também de Kolmogorov) para o caso em que $V(S_n)$ é convergente. Em seguida, prova-se o Lema de Kronecker, que permite ampliar o resultado para o caso em que $V(S_n)$ é divergente, o que é mostrado em dois posteriores teoremas. As hipóteses básicas não incluem sequer a igualdade da distribuição das variáveis aleatórias, mas tão somente a sua independência e $V(X_i) < \infty, \forall i$.

A DESIGUALDADE DE KOLMOGOROV

Sejam $X_1, X_2, \dots, X_n$ v.a. independentes com

$$E(X_i) = 0 \quad \text{e} \quad V(X_i) = v_i < \infty \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad .$$

Então

$$P \left(\max_{i \leq n} |X_1 + \dots + X_i| \geq a \right) \leq \frac{\sum_{i=1}^n v_i}{a^2} \quad .$$

Prova

Sendo $S_i = \sum_{j=1}^i X_j$ e definindo os eventos

$$A = \left\{ \omega : \max_{i \leq n} |S_i| \geq a \right\}$$

e

$$A_j = \left\{ \omega : |S_i| < a \quad \text{para} \quad i < j, \quad |S_j| \geq a \right\} \quad ,$$

então os A_j são disjuntos e claramente

$$A = \bigcup_{j=1}^n A_j .$$

Portanto

$$\sum_{j=1}^n v_j = E(S_n^2) \geq E(S_n^2 \phi_A) = \sum_{j=1}^n E(S_n^2 \phi_{A_j})$$

onde

$$\phi_A = \begin{cases} 1 & \omega \in A \\ 0 & \omega \notin A \end{cases}$$

Mas

$$\begin{aligned} E(S_n^2 \phi_{A_j}) &= E\left(\left[S_j + (S_n - S_j)\right]^2 \phi_{A_j}\right) = \\ &= E(S_j^2 \phi_{A_j}) + 2E\left[S_j (S_n - S_j) \phi_{A_j}\right] + E\left[\phi_{A_j} (S_n - S_j)^2\right]. \end{aligned}$$

Na última expressão, o segundo termo é zero pois $S_j \phi_{A_j}$ e $(S_n - S_j)$ são independentes porque dependem de $(X_1, \dots, X_j)$ e $(X_{j+1}, \dots, X_n)$ respectivamente. O termo final, por outro lado, é positivo, enquanto o primeiro satisfaz

$$E(S_j^2 \phi_{A_j}) \geq a^2 P(A_j) ,$$

pois se $\omega \in A_j$, $S_j^2 \geq a^2$ por definição.

Logo

$$E(S_n^2 \phi_{A_j}) \geq a^2 P(A_j) \implies \sum_{i=1}^n v_i \geq a^2 \sum_{j=1}^n P(A_j) = a^2 P(A)$$

o que prova a desigualdade. $\square$

Teorema A.2 (Kolmogorov)

Se $\sum_i E(X_i)$ e $\sum_i V(X_i)$ são convergentes, então $\sum_i X_i$ é convergente q.t.p.

Prova

Da desigualdade anterior

$$P \left\{ \max_{k=1}^m |S_{n+k} - S_n| > \varepsilon \right\} \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \sum_{k=1}^m v_{n+k}.$$

Como

$$|S_{n+k} - S_{n+\ell}| \leq |S_{n+k} - S_n| + |S_{n+\ell} - S_n|$$

$$\implies \max_{1 \leq k, \ell \leq m} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| \leq 2 \max_{k=1}^m |S_{n+k} - S_n|$$

o que leva a

$$P \left\{ \max_{1 \leq k, \ell \leq m} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| > 2\varepsilon \right\} \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \sum_{k=1}^m v_{n+k}.$$

Quando $m \rightarrow \infty$, o conjunto- ω { } aumenta e converge para

$$\left\{ \sup_{k, \ell} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| > 2\varepsilon \right\}.$$

Daí

$$P \left\{ \sup_{k, \ell} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| > 2\varepsilon \right\} \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \sum_{k=1}^{\infty} v_{n+k} .$$

O supremo em $\{ \}$ decresce à medida que $n \rightarrow \infty$, e

$$P \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} \sup_{k, \ell} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| > 2\varepsilon \right\} \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \sum_{k=1}^{\infty} v_{n+k} \quad n = 1, 2, \dots$$

Como $\sum_{i=1}^{\infty} v_i < \infty$, o lado direito converge para zero quando $n \rightarrow \infty$, o que leva a

$$P \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} \sup_{k, \ell} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| > 2\varepsilon \right\} = 0 .$$

Tomando $\varepsilon \downarrow 0$, obtém-se

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{k, \ell} |S_{n+k} - S_{n+\ell}| = 0 \quad \text{q.t.p.} \quad \square$$

Para chegar a LFGN precisamos ainda de um lema que não é de natureza probabilística:

Lema A.3 (Kronecker)

Seja $\{X_n\}$ uma sequência de números reais e $\{b_n\}$ uma sequência de números positivos tais que $b_n \rightarrow \infty$ quando $n \rightarrow \infty$. Se $\sum \frac{X_n}{b_n}$ for convergente, então

$$\frac{1}{b_n} \sum_{k=1}^n X_k \longrightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty) .$$

Prova

$$\text{Seja } s_n = \sum_{k=1}^n \frac{x_k}{b_k} \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

$$s_0 = 0 \quad \text{e} \quad s_\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} s_n ;$$

$$\text{então} \quad x_n = b_n (s_n - s_{n-1}) \quad \text{e}$$

$$\frac{1}{b_n} \sum_{k=1}^n x_k = \frac{1}{b_n} \sum_{k=1}^n b_k (s_k - s_{k-1}) = s_n - \frac{1}{b_n} \sum_{k=1}^n s_{k-1} (b_k - b_{k-1})$$

$$(b_0 = 0)$$

Das hipóteses $b_k \geq b_{k-1}$; $\sum_{k=1}^n (b_k - b_{k-1}) = b_n \rightarrow \infty$ e $s_n \rightarrow s_\infty$. Portanto

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{b_n} \sum_{k=1}^n x_k = s_\infty - s_\infty = 0 \quad \square$$

Teorema A.4

Suponha que $\{X_i\}$ seja uma sequência de v.a. independentes, $V(X_i) = v_i < \infty \quad \forall i$, $b_n > 0$ e $b_n \uparrow \infty$. Então

$$\sum_n \frac{V(X_n)}{b_n^2} < \infty \implies \frac{S_n - E(S_n)}{b_n} \longrightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty) \quad \text{q.t.p.}$$

Prova

Estudando a variável $X_i - E(X_i)$ ao invés de X_i , o teorema pode ser reduzido ao caso em que $E(X_i) = 0 \implies E(S_n) = 0$.
A sequência

$$Y_n = \frac{X_n}{b_n} \quad n = 1, 2, \dots$$

também é independente e satisfaz

$$E(Y_n) = 0, \quad \sum_n V(Y_n) = \sum_n \frac{V(X_n)}{b_n^2} < \infty$$

Logo, o teorema A.2 garante que $\sum \frac{X_n}{b_n}$ é convergente q.t.p.. Usando o lema A.3, conclui-se que

$$\left\{ \frac{1}{b_n} S_n \right\} \longrightarrow 0 \quad \text{q.t.p.} \quad \underline{\hspace{1cm}}$$

Para o caso em que $\sum_i V(X_i)$ for divergente, pode-se demonstrar o seguinte:

Teorema A.5

Seja $\{X_i\}$ uma seqüência de v.a. independentes com $\sum V(X_i)$ divergente e $V(X_i) < \infty, \forall i$. Então

$$\frac{S_n - E(S_n)}{V(S_n)^{\frac{1}{2} + \epsilon}} \longrightarrow 0 \quad \text{q.t.p.}$$

para todo $\epsilon > 0$.

Prova

Como $V(S_n) \rightarrow \infty$, pode ser assumido sem perda de generalidade que $V(S_1) > 0$. Seja $b_n = V(S_n)^{\frac{1}{2} + \epsilon}$. Notando que $V(X_n) = V(S_n) - V(S_{n-1})$, obtém-se

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{V(X_n)}{b_n^2} \leq \sum_{n=2}^{\infty} \int_{V(S_{n-1})}^{V(S_n)} \frac{dx}{x^{1+2\epsilon}} = \int_{V(S_1)}^{\infty} \frac{dx}{x^{1+2\epsilon}} < \infty$$

o que, combinado com o teorema anterior, completa a prova. \underline{\hspace{1cm}}

Como caso particular deste último teorema pode-se obter facilmente o

Teorema A.6 (Lei Forte dos Grandes Números de Kolmogorov)

Seja $\{X_i\}$ uma sequência de v.a. independentes com $V(X_i) < \infty$ e $\{V(X_i)\}$ limitada. Então

$$\frac{S_n - E(S_n)}{n} \longrightarrow 0 \quad \text{q.t.p.}$$

Prova

Se $\sum_i V(X_i) < \infty$, então

$$S_n - E(S_n) \longrightarrow 0 \quad \text{q.t.p.}$$

e a afirmação do teorema é trivial.

Se $\sum V(X_i)$ diverge, então toma-se $\epsilon = \frac{1}{2}$ no teorema A.5 para se obter

$$\frac{S_n - E(S_n)}{V(S_n)} \longrightarrow 0 \quad \text{q.t.p.}$$

Como por hipótese,

$$V(S_n) = \sum_{i=1}^n V(X_i) \leq na \quad (a = \sup V(X_i) < \infty),$$

a afirmação do teorema segue trivialmente. └

APÊNDICE B

O PROBLEMA CENTRAL DO LIMITE E LEIS ESTÁVEIS

O TEOREMA CENTRAL DO LIMITE

Seja $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ uma sequência de variáveis aleatórias independentes definidas no mesmo espaço de probabilidades (Ω, A, P) e seja $S_1, S_2, \dots$ a sequência de somas parciais definidas como

$$S_n = \sum_{i=1}^n X_i .$$

A LGN trata da convergência de $\frac{1}{n} [S_n - E(S_n)]$ quando $n \rightarrow \infty$, mostrando uma tendência da variável S_n/n a se concentrar em torno de $\frac{1}{n} E(S_n)$.

O problema central do limite consiste em controlar as sintoticamente o erro que se faz ao se aproximar, para n finito, S_n/n por $E(S_n)/n$. As primeiras análises nesse sentido foram feitas por de Moivre e Laplace para sequências de eventos de Bernoulli, descritos no início do Apêndice A. Resultados mais gerais foram obtidos por Tshebyshev, Markov e Liapunov, cuja essência pode ser resumida no seguinte

Teorema B.1 (Teorema Central do Limite)

Se as variáveis X_i ($i = 1, 2, \dots$) acima forem identicamente distribuídas, com média $E(X)$ e variância $\sigma^2 = E[(X - E(X))^2] < \infty$, então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left(\frac{S_n - E(S_n)}{\sqrt{n}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{u^2}{2\sigma^2}} du . \quad (B.1)$$

Para demonstrar este teorema é conveniente introduzir o conceito de função característica da variável aleatória X , $\phi_X(\lambda)$, definida como

$$\phi_X(\lambda) = E(e^{i\lambda x}) .$$

Por exemplo, se a variável X tiver distribuição Gaussiana de média zero e variância σ^2 , então

$$\phi_X(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{(i\lambda x - \frac{x^2}{2\sigma^2})} dx = e^{-\sigma^2 \frac{\lambda^2}{2}} . \quad (B.2)$$

Por construção, estas funções têm as seguintes propriedades:

- 1) Se $Y = aX$, então $\phi_Y(\lambda) = \phi_X(a\lambda)$;
- 2) Dada a sequência $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ definida no início no Apêndice,

$$\phi_{S_n}(\lambda) = \prod_{j=1}^n \phi_{X_j}(\lambda) ;$$

- 3) Se $E(|X|^k) < \infty$ para algum valor inteiro de k , então $\phi^{(k)}(\lambda) = \frac{d^k \phi_X(\lambda)}{d\lambda^k}$ é contínuo e

$$\phi^{(k)}(0) = i^k E(X^k) .$$

Para $k=1$ e sendo μ a distribuição de probabilidades de X , basta escrever

$$\phi^{(1)}(\lambda) = \lim_{h \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ihx} - 1}{h} e^{i\lambda x} d\mu(x) .$$

Como $\left| \frac{e^{ihx} - 1}{h} \cdot e^{i\lambda x} \right| < |x|$ e por hipótese $E(|X|) < \infty$, o resultado decorre do Teorema de Convergência Dominada. Para k maiores basta iterar o argumento.

4) Sejam μ_n ($n = 1, 2, \dots$) distribuições de probabilidade em R e ϕ_n as suas funções características. Supondo que para todo $\lambda \in R$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n(\lambda) = \phi(\lambda) \quad \text{exista,}$$

e que ϕ seja contínua em $\lambda = 0$, então existe uma distribuição μ que tem ϕ como função característica, tal que para qualquer função $f: R \rightarrow R$ limitada e contínua

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_R f d\mu_n = \int_R f d\mu.$$

Comentário

A convergência acima, denotada por $\mu_n \Rightarrow \mu$ é conhecida como *convergência fraca* de μ_n para μ . A prova desta propriedade é mais delicada e o leitor é remetido ao livro de Lamperti, sec. 14. ┐

A prova do teorema B.1 é agora imediata:

Prova

Sem perda de generalidade pode-se assumir $E(X) = 0$. Caso isso não seja verdade, pode-se sempre definir a nova variável aleatória $Y = X - E(X)$ para a qual $E(Y) = 0$. Então, sendo ϕ_X a função característica de X_i , tem-se

$$E \left\{ \exp \left[i \lambda \frac{S_n}{\sqrt{n}} \right] \right\} = \phi_X \left(\frac{\lambda}{\sqrt{n}} \right)^n$$

pelas propriedades 1 e 2.

Pela propriedade 3 e usando o fato de que $E(X) = 0$, pode-se escrever a expansão de Taylor para $\phi_X(\lambda)$ como

$$\phi_X(\lambda) = 1 - \frac{\sigma^2 \lambda^2}{2} + o(\lambda^2)$$

tal que, quando $n \rightarrow \infty$

$$\phi_X\left(\frac{\lambda}{\sqrt{n}}\right) = \left[1 - \frac{\sigma^2 \lambda^2}{2n} + o\left(\frac{1}{n}\right)\right]^n \longrightarrow e^{-\sigma^2 \lambda^2 / 2} \quad (\text{B.3})$$

para cada λ fixo. Da equação (B.2), sabe-se que o lado direito de (B.3) é a função característica de uma Gaussiana $N(0, \sigma^2)$; portanto (B.3) juntamente com a propriedade 4 asseguram (B.1). $\square$

Existem inúmeras variações sobre este teorema. Uma das mais naturais é avaliar o que acontece sem a hipótese de que os X_i são igualmente distribuídos. A título de completeza damos aqui um resultado de Lindeberg (1922) nesse sentido.

Teorema B.2 (Lindeberg)

Seja $\{X_k\}_{k=1}^{\infty}$ uma sequência de v.a. independentes com média 0, variâncias $\{\sigma_k^2\}_{k=1}^{\infty}$, distribuições $\{\mu_k\}_{k=1}^{\infty}$, e seja $B_n^2 = \sum_{k=1}^n \sigma_k^2 = \text{var}(S_n)$. Se, para todo $\epsilon > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} B_n^{-2} \sum_{k=1}^n \int_{|x| > \epsilon B_n} x^2 d\mu_k(x) = 0,$$

então a distribuição de S_n/B_n converge fracamente para $N(0, 1)$.

Naturalmente, uma outra modificação desejável seria saber como o resultado seria alterado no caso de dependência das va

riáveis aleatórias. Foi o que se fez neste trabalho para um tipo muito especial de interação entre as variáveis, descrita pelas hamiltonianas de Curie-Weiss.

LEIS ESTÁVEIS

Na verdade, perguntas mais gerais foram feitas ainda no caso de variáveis independentes e igualmente distribuídas. Da uma sequência de variáveis aleatórias $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ independentes e igualmente distribuídas, Paul Levy^[L] levantou o problema de se caracterizar a assíntota da distribuição de probabilidades da variável

$$\overline{S}_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{B_n} - A_n \quad (\text{B.4})$$

com A_n e B_n adequadamente escolhidos.

Serão aqui citados alguns resultados gerais cuja discussão detalhada é feita em [GK]. Esta questão requer a introdução de um novo conceito:

Definição

A distribuição de probabilidades μ é dita *estável* se, para quaisquer $a_1 > 0$, b_1 , $a_2 > 0$, b_2 existirem $a > 0$ e b tais que

$$\mu(a_1 x + b_1) * \mu(a_2 x + b_2) = \mu(ax + b)$$

onde $*$ denota a convolução de distribuições.

Em outras palavras, distribuições estáveis são aquelas que, sob convolução, se reproduzem a si próprias a menos de

transformações lineares dos seus argumentos.

Então, vale o seguinte

Teorema B.3 (Levy)

Se para todo n existirem $B_n > 0$ e A_n e uma medida de probabilidade μ em $\mathbb{R}$ não concentrada em um único ponto, tais que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(\overline{S}_n \leq x) = \int_{-\infty}^x d\mu(s) \quad (\text{B.5})$$

com $\overline{S}_n$ definido em (B.4), então μ é estável.

Diz-se ainda que μ e ρ são do mesmo tipo se existirem constantes a e $b > 0$ tais que

$$\mu(bx + a) = \rho(x) \quad ,$$

para todo x .

Pode-se então dizer que uma distribuição μ é estável se a convolução de duas outras distribuições do seu tipo for novamente do mesmo tipo. De fato, a estabilidade ou é verdadeira para todas as distribuições dentro um tipo ou não é válida para nenhuma.

Um outro resultado importante é o seguinte

Teorema B.4

Se $\phi(\lambda)$ for a função característica de uma distribuição estável simétrica em torno da origem, então existe $c > 0$ e $\alpha \in]0, 2]$ tal que

$$\phi(\lambda) = e^{-c|\lambda|^\alpha} \quad . \quad (\text{B.6})$$

Comentários

1) A recíproca do teorema vale, isto é, dado $c > 0$ e $\alpha \in]0, 2]$, (B.6) é a transformada de Fourier duma distribuição estável e simétrica em torno da origem.

2) Uma descrição mais geral da função característica de uma distribuição estável, sem a restrição da simetria em torno da origem pode ser obtida. Vide [GK].

3) Os intervalos de definição dos parâmetros c e α decorrem de propriedades gerais que (B.6) deve satisfazer como função característica.

De fato, $c \geq 0$ porque $\phi(\lambda)$ deve ser limitada, e $c > 0$ porque caso $c=0$, $\phi(\lambda) = 1$ o que equivaleria a uma distribuição centrada na origem, caso que não interessa.

Já $\alpha > 0$ vem da necessidade da continuidade de $\phi(\lambda)$ na origem e da condição $\phi(0) = 1$. $\alpha > 2$ implicaria $\phi''(0) = 0$, ou seja a distribuição associada a ϕ teria variância nula (pela propriedade 3 das funções características), e seria portanto uma distribuição concentrada na origem. Mas uma distribuição concentrada na origem não tem (B.6) com função característica. Portanto, se $\alpha > 2$, (B.6) não é uma função característica. Logo $\alpha \in]0, 2]$.

4) O caso $\alpha=2$ é evidentemente o de uma Gaussiana centrada na origem; o valor de c determina a variância.

5) O parâmetro α é conhecido como *expoente característico* da distribuição estável.

A escolha dos parâmetros em (B.4) de tal maneira que (B.5) seja verdade, depende de α .

Teorema B.5

Se (B.5) for válido para $\overline{S}_n$ dado em (B.4), então $B_n = a n^{1/\alpha}$, $a > 0$, onde α é o expoente característico de μ .

Um último conceito relevante é o de *domínio de atração*. A questão que se coloca é a de saber se a distribuição estável μ que se obtém em (B.5) depende ou não das distribuições das variáveis X_i em (B.4).

Definição

Seja ρ a distribuição de probabilidades de cada um dos X_i em (B.4). Se existirem B_n e A_n tais que (B.5) é válido, diz-se que ρ está no *domínio de atração* de μ .

Como exemplo, o Teorema Central do Limite diz que toda a distribuição de variância finita está no domínio de atração da Gaussiana.

Condições gerais que $\rho(x)$ deve satisfazer para estar no domínio de atração de uma distribuição estável de expoente α podem ser obtidas [GK]:

Teorema B.6

$\rho(x)$ está no domínio de atração de uma Gaussiana ($\alpha=2$) se e somente se, quando $X \rightarrow \infty$

$$\frac{X^2 \int_{|x| > X} d\rho(x)}{\int_{|x| < X} x^2 d\rho(x)} \longrightarrow 0 \quad (\text{B.7})$$

Comentário

É fácil verificar que qualquer $\rho(x)$ tal que $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 d\rho(x) < \infty$, satisfaz (B.7).

Teorema B.7

Para que $\rho(x)$ esteja no domínio de atração de uma lei estável de expoente α ($0 < \alpha < 2$), é necessário e suficiente que

$$1) \quad \frac{\int_{-\infty}^{-x} d\rho(s)}{1 - \int_{-\infty}^x d\rho(s)} \longrightarrow \frac{C_1}{C_2} \quad (x \rightarrow \infty) \quad \text{com} \quad C_1, C_2 > 0 .$$

2) para cada constante $k > 0$

$$\frac{1 + \int_{-\infty}^{-x} d\rho(s) - \int_{-\infty}^x d\rho(s)}{1 + \int_{-\infty}^{-kx} d\rho(s) - \int_{-\infty}^{kx} d\rho(s)} \longrightarrow k^\alpha \quad (x \rightarrow \infty) .$$

Finalmente é possível mostrar que os momentos absolutos de ordem δ de uma distribuição estável μ com expoente característico α ($0 < \alpha < 2$) satisfazem

$$\int |x|^\delta d\mu(x) = \begin{cases} \infty & \delta \geq \alpha \\ < \infty & 0 < \delta < \alpha \end{cases} \quad \text{para} \quad 0 < \alpha < 2 .$$

Em particular, conclui-se que a Gaussiana é a única distribuição estável com variância finita. Para $1 < \alpha < 2$ as distribuições estáveis têm média finita mas variância infinita. Para $0 < \alpha \leq 1$ nem a média nem a variância são finitas.

REFERÊNCIAS

- [ABP] - J. Amaro de Matos, J.A. Baêta Segundo e J.F. Perez, pre-print IFUSP/P-709.
- [AIM] - A. Aharony, Y. Imry e S.K. Ma, Phys. Rev. Lett. 37, 1364 (1976).
- [B] - R. Brout, Phys. Rev. 115, 824 (1959).
- [Ba] - J.A. Baêta Segundo, tese em preparação.
- [BCSY]- R.J. Birgeneau, R.A. Cowley, G. Shirane e H. Yoshizawa, J. Stat. Phys. 34, 817 (1984).
- [BS1] - P. Bleher e J. Sinai, Commun. math. Phys. 33, 23 (1973).
- [BS2] - P. Bleher e J. Sinai, Commun. math. Phys. 45, 347 (1975).
- [CG] - M. Cassandro e G. Gallavotti, Il Nuovo Cimento 25B, 691 (1975).
- [CJL1]- M. Cassandro e G. Jona-Lasinio, em New Developments in Quantum Field Theory and Statistical Mechanics, Cargèse Summer School (1976), Plenum Press (1976).
- [CJL2]- M. Cassandro e G. Jona-Lasinio, Adv. in Phys. 27, 913 (1978).
- [CJL3]- M. Cassandro e G. Jona-Lasinio, em Proceedings of the Bielefeld Summer Institute 1976, Plenum Press N.Y. (1978).
- [CT] - C.J. Thompson, Mathematical Statistical Mechanics, MacMillan N.Y. (1976).
- [DLS] - F. Dyson, E. Lieb e B. Simon, J. Stat. Phys. 18, 335 (1978).
- [EA] - S.F. Edwards e P.W. Anderson, J. Phys. F 5, 965 (1975).
- [EN1] - R.S. Ellis e C.M. Newman, J. Stat. Phys. 19, 149 (1978).
- [EN2] - R.S. Ellis e C.M. Newman, Fluctuations in Curie-Weiss Exemplis, vol. 80, Lecture Notes in Physics.
- [EN3] - R.S. Ellis e C.M. Newman, Z. Wahrsch. Theorie und verw. Geb. 44, 117 (1978).

- [F] - W. Feller, An Introduction to Probability Theory and its Applications, vol. II, John Wiley & Sons, N.Y. (1966).
- [FSS] - J. Fröhlich, B. Simon e T. Spencer, Commun. math. Phys. 50, 79 (1976).
- [GJL] - G. Gallavotti e G. Jona-Lasinio, Commun. math. Phys. 41, 301 (1975).
- [GK] - B.V. Gnedenko e A.N. Kolmogorov, Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables, Addison-Wesley Publishing Company, Cambridge (1954).
- [GKn] - G. Gallavotti e H. Knops, Commun. math. Phys. 36, 171 (1974).
- [GML] - G. Gallavotti e A. Martin-Löf, Il Nuovo Cimento 25B, 425 (1974).
- [G] - R.B. Griffiths, em Phase Transitions and Critical Phenomena, vol. I, eds. Domb e Green, Academic Press, N.Y. (1972).
- [Gr] - G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. 37, 944 (1976).
- [H] - L.C. Hsu, Amer. J. Math. 73, 625 (1951).
- [Hi] - T. Hida, Stationary Stochastic Processes, Princeton University Press (1976).
- [HEC] - J.L. van Hemmen, A. van Enter e J. Canisius, Z. Phys. B 50, 311 (1983).
- [HL] - K. Hepp e E. Lieb, Ann. of Phys. 76, 360 (1973).
- [HN] - G. Hegerfeldt e C. Nappi, Commun. math. Phys. 53, 1 (1977).
- [I] - K. Ito, Introduction to Probability Theory, Cambridge University Press, N.Y. (1984).
- [JL1] - G. Jona-Lasinio, Il Nuovo Cimento B26, 9 (1975).
- [JL2] - G. Jona-Lasinio, em New Developments in Quantum Field Theory and Statistical Mechanics, Cargèse Summer School (1976), Plenum Press, N.Y.
- [JL3] - G. Jona-Lasinio, Critical Behaviour of Stationary Random Fields, em Statistical Physics - Proceedings of the International Conference, Budapest, North-Holland Publishing Company (1976).
- [KLP] - A. Klein, L. Landau e J.F. Perez, Comm. math. Phys. 93, 459 (1984).

$$m_n = \frac{1}{n} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$$

$$q_B^{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i \in \Lambda_B} \sigma_i \xi_i$$

$$q_R^{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i \in \Lambda_R} \sigma_i \xi_i \quad .$$

De fato, x^* , y^* e z^* devem satisfazer as equações de otimização

$$x^* - \frac{\lambda_0}{2} \left[\frac{\cosh(\lambda_0 x^*) \cdot \sinh(\lambda_0 x^*)}{(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cosh^2(\lambda y^*) - 1)} + \frac{\cosh(\lambda_0 x^*) \cdot \sinh(\lambda_0 x^*)}{(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cos^2(\lambda z^*) - 1)} \right] = 0 , \quad (2.4.5a)$$

$$y^* - \frac{\lambda}{2} \left[\frac{\cosh(\lambda y^*) \cdot \sinh(\lambda y^*)}{(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cosh^2(\lambda y^*) - 1)} \right] = 0 , \quad (2.4.5b)$$

$$z^* + \frac{\lambda}{2} \left[\frac{\cos(\lambda z^*) \cdot \sin(\lambda z^*)}{(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cos^2(\lambda z^*) - 1)} \right] = 0 , \quad (2.4.5c)$$

e as de estabilidade

$$\begin{aligned} & 1 - \frac{\lambda_0^2}{2(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cosh^2(\lambda y^*) - 1)} \left[2 \cosh^2(\lambda_0 x^*) - \right. \\ & \left. - \frac{2 \cosh^2(\lambda_0 x^*) \sinh^2(\lambda_0 x^*)}{(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cosh^2(\lambda y^*) - 1)} - 1 \right] - \\ & - \frac{\lambda_0^2}{2(\cosh^2(\lambda_0 x^*) + \cos^2(\lambda z^*) - 1)} \left[2 \cosh^2(\lambda_0 x^*) - \right. \end{aligned}$$

$$- \frac{2 \cosh^2 (\lambda_0 x^*) \sinh^2 (\lambda_0 x^*)}{(\cosh^2 (\lambda_0 x^*) + \cos^2 (\lambda z^*) - 1)} - 1 \Bigg] > 0 \quad (2.4.6a)$$

$$1 - \frac{\lambda^2}{2 (\cosh^2 (\lambda_0 x^*) + \cosh^2 (\lambda y^*) - 1)} \left[2 \cosh^2 (\lambda y^*) - \right. \\ \left. - \frac{2 \cosh^2 (\lambda y^*) \sinh^2 (\lambda y^*)}{(\cosh^2 (\lambda_0 x^*) + \cosh^2 (\lambda y^*) - 1)} - 1 \right] > 0 \quad (2.4.6b)$$

$$1 + \frac{\lambda^2}{2 (\cosh^2 (\lambda_0 x^*) + \cos^2 (\lambda z^*) - 1)} \left[2 \cos^2 (\lambda z^*) + \right. \\ \left. + \frac{2 \cos^2 (\lambda z^*) \sin^2 (\lambda z^*)}{(\cosh^2 (\lambda_0 x^*) + \cos^2 (\lambda z^*) - 1)} - 1 \right] > 0 \quad (2.4.6c)$$

Seja

$$m = \lim_{n \rightarrow \infty} m_n$$

$$q_B = \lim_{n \rightarrow \infty} q_B^{(n)}$$

$$e \quad q_R = \lim_{n \rightarrow \infty} q_R^{(n)} .$$

É simples provar que m é proporcional a x^* ; basta adicionar à hamiltoniana (2.4.1) um termo $h \sum_{i=1}^n \sigma_i$ para se obter uma energia livre

$$\bar{F}(h) = \inf_{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3} \left\{ \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} - \bar{\varphi}(x,y,z) \right\} \quad (2.4.7)$$

onde

$$\bar{\varphi}(x,y,z) = \frac{1}{4} \left\{ \ln[\cosh^2 (\lambda_0 x + \beta h) + \cosh^2 (\lambda y) - 1] + \right. \\ \left. + \ln[\cosh^2 (\lambda_0 x + \beta h) + \cos^2 (\lambda z) - 1] \right\} .$$

O mínimo de (2.4.7) estará no ponto $(x^*(h), y^*(h), z^*(h))$ que tende naturalmente a (x^*, y^*, z^*) quando $h \rightarrow 0$. Da expressão

$$m = \left(- \frac{\partial \bar{f}(h)}{\partial h} \right)_{h=0}$$

e da equação de otimização (2.4.5a) vem imediatamente

$$m = \frac{x^*}{\lambda_0} .$$

De maneira similar obtém-se

$$q_B = \frac{y^*}{\lambda} \quad \text{e} \quad q_R = \frac{z^*}{\lambda} .$$

O parâmetro de ordem das transições para a fase "vidro de spin" é dado por

$$q = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{i \in \Lambda} \xi_i \sigma_i \right) = q_B + q_R .$$

Quanto ao diagrama de fases, é fácil identificar imediatamente a solução $x^* = y^* = z^* = 0$. Será mínimo se $T > J_0$ e $T > J$. Nesse caso o sistema estará na fase paramagnética. Se, por outro lado, $T > J_0$ e $T < J$ então, embora $x^* = y^* = 0$ continue sendo solução, deve-se ter $y^* = 0$. É a fase vidro de spin. A equação para y^* (de (2.4.5b)) é

$$y^* = \frac{\lambda}{2} \operatorname{tgh}(\lambda y^*) \quad , \quad \text{com} \quad y^* \neq 0 .$$

Outra possibilidade é que $T < J_0$. Nesse caso, se $y^* = z^* = 0$ ainda forem soluções, então x^* deve satisfazer (de (2.4.5a))

$$x^* - \lambda_0 \operatorname{tgh}(\lambda_0 x^*) = 0 \quad \text{com} \quad x^* \neq 0$$

e (de (2.4.6.))

$$1 - \lambda_0^2 + x^{*2} > 0 \quad .$$

Essa é a fase ferromagnética. Se a condição de estabilidade não puder ser satisfeita, deve ser procurada uma solução com $y^* \neq 0$ e $z^* = 0$ (transição ferro-vidro de spin)^[HEC].

O diagrama tem o seguinte aspecto^[HEC]:

Fig. 2 - Diagrama de fases do modelo.

Flutuações

Nesta secção final sobre sistemas desordenados, serão descritos alguns resultados sobre as flutuações no modelo de van Hemmen. Algumas dificuldades técnicas são adicionadas pelo fato de se trabalhar num espaço de maior número de parâmetros de ordem, o que, não invalidando o método usado, requer uma análise mais cuidadosa do que a apresentada aqui. Provas rigorosas destes resultados serão deixadas para um trabalho posterior.

Considerando-se as três variáveis de flutuação

$$g_1 = n^{\gamma_1} (m_n - a_1)$$

$$g_2 = n^{\gamma_2} (q_B^{(n)} - a_2)$$

$$g_3 = n^{\gamma_3} (q_R^{(n)} - a_3)$$

é possível encontrar a sua distribuição conjunta como descrito no teorema abaixo:

Teorema 2.4.2

Sejam W_1, W_2 e W_3 variáveis aleatórias independentes entre si e de $m_n, q_B^{(n)}$ e $q_R^{(n)}$, $W_i \sim N(0,1)$, $i = 1, 2, 3$. Então

$$\frac{W_1}{\lambda_0 n^{\frac{1}{2}-\gamma_1}} + \frac{W_2}{\lambda n^{\frac{1}{2}-\gamma_2}} + \frac{W_3}{\lambda n^{\frac{1}{2}-\gamma_3}} + g_1 + g_2 + g_3 \sim$$

$$\sim ds_1 ds_2 ds_3 \exp \left\{ -n G_n \left[\lambda_0 \left(\frac{s_1}{n^{\gamma_1}} + a_1 \right), \lambda \left(\frac{s_2}{n^{\gamma_2}} + a_2 \right), \lambda \left(\frac{s_3}{n^{\gamma_3}} + a_3 \right) \right] \right\}.$$

Prova

Como para os modelos anteriores, calcula-se

$$\begin{aligned} \langle \exp i[t_1 g_1 + t_2 g_2 + t_3 g_3] \rangle &= \left(\frac{n}{2\pi} \right)^{3/2} \int dx dy dz \exp \left\{ -n \left[\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2} - \right. \right. \\ &- \varphi_n \left(x + i \frac{n^{\gamma_1-1} t_1}{\lambda_0}, y + i \frac{n^{\gamma_2-1} t_2}{\lambda}, z + i \frac{n^{\gamma_3-1} t_3}{\lambda} \right) \left. \right\} \cdot \\ &\cdot \exp \left[-i(t_1 n^{\gamma_1} a_1 + t_2 n^{\gamma_2} a_2 + t_3 n^{\gamma_3} a_3) \right] = \\ &= \exp \left[\frac{t_1^2}{2n^{1-2\gamma_1} \lambda_0^2} + \frac{t_2^2}{2n^{1-2\gamma_2} \lambda^2} + \frac{t_3^2}{2n^{1-2\gamma_3} \lambda^2} \right]. \end{aligned}$$

$$\cdot \int du_1 du_2 du_3 \exp \left[-n G_n(u_1, u_2, u_3) \right] \exp \left\{ i \left[n^{\gamma_1} t_1 \left(\frac{u_1}{\lambda_0} - a_1 \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + n^{\gamma_2} t_2 \left(\frac{u_2}{\lambda} - a_2 \right) + n^{\gamma_3} t_3 \left(\frac{u_3}{\lambda} - a_3 \right) \right] \right\} .$$

Fazendo-se na última integral as mudanças

$$s_1 = n^{\gamma_1} \left(\frac{u_1}{\lambda_0} - a_1 \right)$$

$$s_2 = n^{\gamma_2} \left(\frac{u_2}{\lambda} - a_2 \right)$$

$$s_3 = n^{\gamma_3} \left(\frac{u_3}{\lambda} - a_3 \right)$$

tem-se

$$\langle \exp [i(t_1 g_1 + t_2 g_2 + t_3 g_3)] \rangle \cdot \exp \left[-\frac{t_1^2}{2n^{1-2\gamma_1}\lambda_0^2} - \frac{t_2^2}{2n^{1-2\gamma_2}\lambda^2} - \frac{t_3^2}{2n^{1-2\gamma_3}\lambda^2} \right] = \\ = \int ds_1 ds_2 ds_3 \exp [i(t_1 s_1 + t_2 s_2 + t_3 s_3)] \cdot \\ \cdot \exp \left\{ -n G_n \left[\lambda_0 \left(\frac{s_1}{n^{\gamma_1}} + a_1 \right), \lambda \left(\frac{s_2}{n^{\gamma_2}} + a_2 \right), \lambda \left(\frac{s_3}{n^{\gamma_3}} + a_3 \right) \right] \right\}$$

o que equivale ao enunciado do teorema.

Como nas secções anteriores, este teorema pode ser usado para calcular a distribuição de probabilidades dos parâmetros de ordem deste modelo. Tome-se como exemplo a transição pa ramagneto-vidro de spin; neste caso o parâmetro de ordem é naturalmente q_B , já que $q_R = 0$ nas duas fases.

Seja $X \in \mathbb{R}^3$ e G_n dada como em (2.4.3) por

$$G_n(X) = \frac{X^2}{2} - \varphi_n(X) .$$

O vetor $a \equiv (a_1, a_2, a_3)$ no teorema 2.4.2 deve ser tomado como $a \equiv (\frac{1}{\lambda_0} X_1^*(n), \frac{1}{\lambda} X_2^*(n), \frac{1}{\lambda} X_3^*(n))$, com $X^*(n)$ definido implicitamente por

$$G'_n(X^*(n)) = 0$$

ou seja

$$X^*(n) = \varphi'_n(X^*(n)) \quad . \quad (2.4.9)$$

Logo,

$$X^*(n) - X^* = \varphi'_n(X^*(n)) - \varphi'(X^*) \quad (2.4.10)$$

onde X^* é o valor limite para o qual $X^*(n)$ converge. Naturalmente $\varphi'_n(X)$ pode ser expandido em torno de X^* , como no teorema 2.2.5:

$$\begin{aligned} \varphi'_n(X) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(X - X^*)^j}{j!} \varphi_n^{(j+1)}(X^*) = \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(X - X^*)^j}{j!} \left[\varphi^{(j+1)}(X^*) + \frac{u_{j+1}(n)}{\sqrt{n}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \right] , \quad n \rightarrow \infty , \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

onde u_j são variáveis aleatórias bem definidas pelo TCL. Calculando (2.4.11) em $X = X^*(n)$ e substituindo a expressão resultante em (2.4.10), tem-se:

$$G^{(2)}(X^*)(X^*(n) - X^*) = \frac{u_1}{\sqrt{n}} + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{(X^*(n) - X^*)^j}{j!} \varphi^{(j+1)}(X^*) + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) , \quad n \rightarrow \infty . \quad (2.4.12)$$

$G^{(2)}(X^*)$ é o Hessiano de G calculado no ponto de mínimo, que se sabe, da termodinâmica, ser diagonal com todos os seus autovalores positivos fora da criticalidade e apenas um autovalor nulo na temperatura crítica, na direção de q_B (os outros continuam positivos). Assim, o vetor $(X^*(n) - X^*)$ tem componentes que vão a zero com $\frac{1}{\sqrt{n}}$ fora da criticalidade:

$$(X^*(n) - X^*)_i = \left[G^{(2)}(X^*) \right]_i^{-1} \frac{u_1(\omega)}{\sqrt{n}}, \quad n \rightarrow \infty, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.4.13)$$

e na criticalidade, uma única componente ($i=2$) não segue (2.4.13)

$$(X^*(n) - X^*)_2 = \frac{v_k}{n^{\frac{1}{2(2k-2)}}} \quad (2.4.14)$$

com
$$[v_k]^{2k-1} = \frac{(2k-1) u_1(\omega)}{[G^{(2k)}(X^*)]_2}.$$

Como no lema 2.2.8, existe $\delta > 0$ tal que é válida a expressão

$$\begin{aligned} n \left[G_n \left(\lambda_0 \frac{s_1}{n^{\gamma_1}} + X_1^*(n), \lambda \frac{s_2}{n^{\gamma_2}} + X_2^*(n), \gamma \frac{s_3}{n^{\gamma_3}} + X_3^*(n) - G_n(X^*(n)) \right) \right] = \\ = \frac{1}{2} \left[\lambda_0^2 \alpha_1 s_1^2 + \lambda^2 \alpha_2 s_2^2 + \lambda^2 \alpha_3 s_3^2 \right] + o \left(\frac{|s_1|^3}{n^{3\gamma_1}} + \frac{|s_2|^3}{n^{3\gamma_2}} + \frac{|s_3|^3}{n^{3\gamma_3}} \right) + o(1) P(s) \end{aligned}$$

para $|s| < \delta \frac{n^{\frac{1}{2}}}{\lambda}$ (2.4.15)

com $\gamma_1 = \gamma_3 = \frac{1}{2}$ e $\gamma_2 = \frac{k}{2(2k-1)}$ onde k é o tipo mínimo na direção de y . Além disso

$$\alpha_i = \left. \frac{\partial^2 G}{\partial X_i^2} \right|_{X=X^*}, \quad i = 1, 3$$

e

$$= \frac{v_k^{2k-2}(\omega)}{(2k-2)!} \left. \frac{\partial^{2k} G}{\partial X_2^{2k}} \right|_{X=X^*}.$$

Finalmente a distribuição de probabilidade de g_2 é simplesmente obtida integrando-se a distribuição conjunta no teorema 2.4.2 em s_1 e s_3 , levando a

$$g_2 \sim ds_2 \exp \left[-\lambda^2 \left(\frac{1}{\alpha_2} - \delta_{k,1} \right)^{-1} \frac{s_2^2}{2} \right], \quad (2.4.16)$$

que é um resultado, como se vê, semelhante ao do lema 2.2.8. Como antes, é necessário corrigir o erro que se faz ao se tomar $X^*(n)$ no lugar de X^* para a variável g_2 ; a conclusão permanece a mesma: de (2.4.13), (2.4.14) e (2.4.15)

$$\frac{1}{n^{2(2k-1)}} \left(q_B^{(n)} - \frac{X_2^*}{\lambda} \right) = \begin{cases} v_2(\omega), & \text{na criticalidade } (k=2) \\ u \sim N \left(\left[G^{(2)}(X^*) \right]^{-1} u_1(\omega), \frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{1}{\alpha^2} - \delta_{k,1} \right) \right), & k=1 \end{cases}$$

o que reproduz o teorema 2.2.7, com as suas naturais consequências e interpretações.

CAPÍTULO 3

SISTEMAS QUÂNTICOS

*Nem sempre sou igual no que digo e escrevo
Mudo, mas não mudo muito.*

Fernando Pessoa, O Guardador de Rebanhos

3.1. INTRODUÇÃO

Uma das questões naturais surgidas após o aparecimento dos trabalhos de Ellis e Newman é a de saber se os resultados seriam ou não válidos para sistemas quânticos.

Será aqui considerado esse problema para alguns modelos na aproximação de Curie-Weiss. Um sistema quântico de spin é definido num volume $\Lambda \subset \mathbb{Z}^v$ se para cada ponto $x \in \Lambda$ houver operadores de spin $S_i(x)$ ($i = 1, 2, 3$), tais que

$$\sum_{i=1}^3 S_i^2(x) = S(S+1)$$

e

$$[S_i(x), S_j(y)] = i \varepsilon_{ijk} S_k(x) \delta(x-y) \quad .$$

Por simplicidade, será apresentado o caso em que $S = \frac{1}{2}$; os operadores de spin serão portanto as matrizes de Pauli σ_1 , σ_2 e σ_3 .

Finalmente, pode-se definir também o operador

$$S_n^1 = \sum_{x=1}^n \sigma_1(x) \quad ,$$

onde n é o número de variáveis de spin em Λ .

Os modelos a serem considerados são o modelo de Ising com campo transversal, cuja hamiltoniana é dada por

$$\begin{aligned} H_n^{\text{Ising}} &= -\frac{1}{2n} \sum_{x,y \in \Lambda} \sigma_3(x) \sigma_3(y) - \alpha \sum_{x \in \Lambda} \sigma_1(x) = \\ &= -\frac{1}{2n} (S_n^3)^2 - \alpha S_n^1 \quad , \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

o modelo XY com campo transversal, com hamiltoniana

$$\begin{aligned} H_n^{\text{XY}} &= -\frac{1}{2n} \sum_{x,y \in \Lambda} \left[\sigma_2(x) \sigma_2(y) + \sigma_1(x) \sigma_1(y) \right] - \alpha \sum_{x \in \Lambda} \sigma_3(x) = \\ &= -\frac{1}{2n} \left[(S_n^1)^2 + (S_n^2)^2 \right] - \alpha S_n^3 \quad , \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

e finalmente o modelo de Heisenberg com campo,

$$\begin{aligned} H_n^{\text{Heisenberg}} &= -\frac{1}{2n} \sum_{x,y \in \Lambda} \left[\sigma_1(x) \sigma_1(y) + \sigma_2(x) \sigma_2(y) + \sigma_3(x) \sigma_3(y) \right] - \alpha \sum_x \sigma_3(x) = \\ &= -\frac{1}{2n} \left[(S_n^1)^2 + (S_n^2)^2 + (S_n^3)^2 \right] - \alpha S_n^3 \quad . \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

O tratamento aqui apresentado, seguindo o espírito do trabalho de Ellis e Newman, supera a dificuldade essencial de se estar trabalhando com sistemas *quânticos*, mapeando o problema

de determinar as flutuações nesses sistemas no estudo de grandes desvios em sistemas *clássicos* de dimensão infinita, por meio de técnicas de integração funcional.

3.2. O MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO: TERMODINÂMICA

Para o modelo de Ising com campo transversal, com hamiltoniana dada em (3.1.1), a função de partição escreve-se como usualmente:

$$\begin{aligned} Z_n &= \text{Tr} e^{-H_n} = \text{Tr} e^{\frac{S_3^2}{2n} + \alpha S_1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr} \left(e^{\frac{S_3^2}{2nk}} e^{\alpha \frac{S_1}{k}} \right)^k = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr} \left(\underbrace{e^{\frac{S_3^2}{2nk}} \cdot e^{\alpha \frac{S_1}{k}} \dots e^{\frac{S_3^2}{2nk}} \cdot e^{\alpha \frac{S_1}{k}}}_{k \text{ vezes}} \right), \end{aligned}$$

onde na última passagem foi aplicada a igualdade de Trotter^[N]. Em cada termo quadrático pode ser aplicada a transformação de Hubbard-Stratonovich usual, chegando-se a

$$\begin{aligned} Z_n &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{2\pi k} \right)^{k/2} \int \prod_{j=0}^{k-1} d\phi_j \exp \left(-\frac{n}{2k} \sum_{i=0}^{k-1} \phi_i^2 \right) \cdot \\ &\cdot \left\{ \text{Tr} \left[e^{\frac{\phi_0}{k} \sigma_3} \cdot e^{\frac{\alpha}{k} \sigma_1} \cdot e^{\frac{\phi_1}{k} \sigma_3} \cdot e^{\frac{\alpha}{k} \sigma_1} \dots e^{\frac{\phi_{k-1}}{k} \sigma_3} \cdot e^{\frac{\alpha}{k} \sigma_1} \right] \right\}^n. \end{aligned}$$

Escrevendo

$$z_k(\phi) = \text{Tr} \left[e^{\frac{\phi_0}{k} \sigma_3} \cdot e^{\frac{\alpha}{k} \sigma_1} \dots e^{\frac{\phi_{k-1}}{k} \sigma_3} \cdot e^{\frac{\alpha}{k} \sigma_1} \right] \quad (3.2.1)$$

onde $\underline{\phi}$ denota uma dada configuração de "campos" $(\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_{k-1})$, $\phi_i \in \mathbb{R}$, $\forall i$, tem-se simplesmente

$$Z_n = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{2\pi k} \right)^{k/2} \int \prod_{j=0}^{k-1} d\phi_k \exp \left\{ -n \left(\frac{\sum_{i=0}^{k-1} \phi_i^2}{2n} - \ln z_k \right) \right\} \quad (3.2.2)$$

É curioso notar que a introdução das k "réplicas" pela fórmula de Trotter leva ao cálculo de z_k que é, no fundo, a função de partição de um modelo de Ising de k spins clássicos com campo variável. De fato, a introdução de bases intermediárias em (3.2.1) que diagonalizam σ_z , leva a

$$z_k(\underline{\phi}) = \sum_{\underline{\rho}} e^{\frac{1}{k} \sum_{j=0}^{k-1} \phi_j \rho_j + R_k \sum_{j=0}^{k-1} \rho_j \rho_{j+1}} \quad (3.2.3)$$

onde $R_k = -\frac{1}{2} \ln \tanh \frac{\alpha}{k}$; $\underline{\rho}$ denota todas as 2^k configurações possíveis $\{\rho\}_{j=0}^{k-1}$ onde $j = 0, 1, \dots, k$, sob a condição de contorno periódica $\rho_k = \rho_0$.

Por outro lado, usando-se estimativas "infravermelhas" [FSS, DLS] tem-se

$$z_k(\underline{\phi}) \leq z_k(\phi \text{'s todos iguais}) = \text{Tr} \left(e^{\frac{\phi}{k} \sigma_3} \cdot e^{\frac{\alpha}{k} \sigma_1} \right)^k.$$

Logo

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} z_k(\underline{\phi}) &\leq \text{Tr} (e^{\phi \sigma_3 + \alpha \sigma_1}) = \\ &= \text{Tr} \left[\cosh \sqrt{\alpha^2 + \phi^2} + \frac{\sinh \sqrt{\alpha^2 + \phi^2}}{\sqrt{\alpha^2 + \phi^2}} (\phi \sigma_3 + \alpha \sigma_1) \right] = 2 \cosh \sqrt{\alpha^2 + \phi^2}. \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Assim, se z_k tiver um bom limite, pode-se escrever que (3.2.2) converge para a integral funcional [Si2, Hi, N]

$$\begin{aligned}
 z_n &= \int \prod_{j=0}^{k-1} d\phi_j \exp \left(-\frac{n}{2k} \sum_{i=1}^{k-1} \phi_i^2 \right) z_k^n(\phi) \longrightarrow \\
 &\longrightarrow \int \mathcal{D}\phi \, e^{-\frac{n}{2} \int_0^1 \phi^2(t) dt} \cdot e^{n \ln z(\phi(t))} \quad , \quad k \rightarrow \infty \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{3.2.5}$$

onde

$$\phi(t) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad \phi\left(\frac{j}{k-1}\right) = \phi_j \quad \text{e} \quad z = \lim z_k \quad .$$

A questão relevante então, é verificar se z_k tem bom limite. Acima, $z_k(\phi)$ foi descrito como a função de partição de um modelo tipo Ising unidimensional. Tome-se o peso de Gibbs associado a essa hamiltoniana *sem* campo ϕ ou seja, apenas $\exp \left[R_k \sum_{j=0}^{k-1} \rho_j \rho_{j+1} \right]$. A ele é associada a probabilidade de uma da configuração ρ . É simples mostrar que a medida de probabilidade associada faz sentido no limite $k \rightarrow \infty$, pois as funções de ℓ pontos $\langle \rho_{t_1} \cdot \rho_{t_2} \dots \rho_{t_\ell} \rangle$ têm bom limite.

De fato, voltando do modelo de Ising para o modelo quântico original, tem-se para o modelo de Ising sem campo ϕ apenas a parte do campo transversal em (3.1.1). A função de ℓ pontos escreve-se então para $0 < t_1 < t_2 \dots < t_\ell < 1$:

$$\begin{aligned}
 \langle \rho_{t_1} \cdot \rho_{t_2} \dots \rho_{t_\ell} \rangle &= \\
 &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{\alpha t_1 \sigma_1 \cdot \sigma_3} \cdot e^{\alpha (t_2 - t_1) \sigma_1 \cdot \sigma_3} \dots \sigma_3 e^{\alpha (1 - t_\ell) \sigma_1} \right] .
 \end{aligned}$$

Seja $|\sigma\rangle$, $\sigma = \pm 1$ a base que diagonaliza σ_3 :

$$\sigma_3 |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle .$$

Então, o traço acima escreve-se

$$\begin{aligned} \langle \rho_{t_1} \cdot \rho_{t_2} \dots \rho_{t_\ell} \rangle &= \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\substack{\sigma(1)=\pm 1 \\ \sigma(2)=\pm 1 \\ \vdots \\ \sigma(\ell)=\pm 1}} \langle \sigma(\ell) | e^{\alpha(1+t_1-t_\ell)\sigma_1} | \sigma(1) \rangle \langle \sigma(1) | e^{\alpha(t_2-t_1)\sigma_1} | \sigma(2) \rangle \dots \\ &\quad \dots \langle \sigma(\ell-1) | e^{\alpha(t_\ell-t_{\ell-1})\sigma_1} | \sigma(\ell) \rangle \sigma(1) \sigma(2) \dots \sigma(\ell) = \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma(1), \sigma(2) \dots \sigma(\ell)} \prod_{i=1}^{\ell} \left[\delta_{\sigma(i), \sigma(i+1)} \cosh \lambda_i + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 - \delta_{\sigma(i), \sigma(i+1)} \right) \sinh \lambda_i \right] \end{aligned}$$

com $\sigma(\ell+1) = \sigma(1)$, onde $\lambda_1 = \alpha(1+t_1-t_\ell)$, $\lambda_i = \alpha(t_i - t_{i-1})$, $i = 2, 3, \dots, \ell$, e

$$Z = \text{Tr } e^{\alpha \sigma_1} = 2 \cosh \alpha .$$

Em particular, a função de dois pontos é dada por

$$\langle \rho_{t_1} \rho_{t_2} \rangle = \frac{\cosh\{\alpha[1-2(t_2-t_1)]\}}{\cosh \alpha} \quad \text{e} \quad \langle \rho_{t_1}^2 \rangle = 1 .$$

Tendo descrito todos os momentos e verificado o seu bom limite quando $k \rightarrow \infty$ (são independentes de k), conclui-se que

$$d\mu(\rho) = \exp\left(R_k \sum_{j=1}^k \rho_j \rho_{j-1}\right) d\rho$$

é uma boa medida de probabilidade no espaço Ω de trajetórias $\rho(t)$, descrito como

$$\Omega = \prod_{0 < t < 1} \{-1, 1\} \quad ; \quad \rho(t) \in \Omega : \rho\left(\frac{j}{k+1}\right) = \rho_j \quad ,$$

onde Ω é dotado de uma topologia produto e é portanto Hausdorff compacto.

Teorema 3.2.1

Existe uma medida de Wiener $d\mu_0(\rho)$ em Ω tal que

$$z = \lim_{k \rightarrow \infty} z_k(\phi) = \int_{\Omega} \bar{\varphi}(\rho) d\mu_0(\rho) \quad (3.2.6)$$

onde

$$\bar{\varphi}(\rho) = \exp \int_0^1 \phi(t) \rho(t) dt \quad . \quad (3.2.7)$$

Comentários

1) A prova aqui apresentada segue em espírito o tratamento padrão^[N] que define a integral de Wiener.

2) A existência da integral limite (3.2.5) em $\mathcal{D}\phi$ é demonstrada de forma análoga.

Prova

Seja $\varphi(\rho)$ um funcional definido em Ω , inicialmente de forma cilíndrica, i.e.

$$\varphi(\rho) = F(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_\ell) \quad , \quad (3.2.8)$$

dependendo apenas de ℓ pontos da trajetória $\rho(t)$. Define-se então

$$I(\varphi) = \sum_{\underline{\rho}} \varphi(\rho) e^{R \sum \rho_j \rho_{j+1}}.$$

Seja $C(\Omega)$ o conjunto de todas as funções contínuas em Ω e $C_{\text{fin}}(\Omega)$ o de todas as da forma (3.2.8) onde F é contínua. Pelo teorema de Stone-Weierstrass, qualquer função em $C(\Omega)$ pode ser uniformemente aproximada por funções em $C_{\text{fin}}(\Omega)$. O mapeamento $\varphi \rightarrow I(\varphi)$ é um funcional linear em $C_{\text{fin}}(\Omega)$, tal que $I(1) = 1$ e $I(\varphi) \geq 0$ sempre que $\varphi \geq 0$. Logo $|I(\varphi)| \leq \sup_{\underline{\rho}} |\varphi(\underline{\rho})|$ e portanto $\varphi \rightarrow I(\varphi)$ tem uma única extensão em $C(\Omega)$. Para todo $\varphi(\rho)$ em $C(\Omega)$ o teorema da representação de Riesz garante a existência da medida regular $d\mu_0$ em (3.2.6). $\square$

O método assintótico de Laplace é aqui válido por uma generalização devida a Donsker e Varadhan^[Si1] para espaços de dimensão infinita. Contribuirá para o logaritmo dessa integral, no limite $n \rightarrow \infty$, apenas a função $\phi(t)$ que minimizar o funcional

$$G(\phi) = \left\{ \frac{1}{2} \int_0^1 \phi^2(t) dt - \ln z(\phi(t)) \right\}. \quad (3.2.9)$$

Definindo-se o produto escalar

$$\langle f(t), g(t) \rangle = \int_0^1 f(t) \cdot g(t) dt \quad e$$

$$\phi_0 = \langle \phi(t), 1 \rangle = \int_0^1 \phi(t) dt.$$

onde $\mathbb{1}$ é o versor do subespaço de funções constantes, tem-se para $\phi(t)$ a decomposição

$$\phi(t) = \phi_0 \mathbb{1} + \hat{\phi}(t) \quad .$$

O fato de que

$$\int_0^1 \phi^2(t) dt = \langle \phi(t), \phi(t) \rangle = \langle \phi_0, \phi_0 \rangle + \langle \hat{\phi}(t), \hat{\phi}(t) \rangle \geq 0$$

associado a (3.2.4), mostra que a função $\phi(t)$ que minimiza (3.2.9) é da forma

$$\phi(t) = \phi_0 \quad ,$$

ou seja $\hat{\phi}(t) = 0$.

A energia livre $f = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln Z_n$, será então dada por:

$$f = \min_{\phi_0} G(\phi_0) \quad (3.2.10)$$

onde
$$G(\phi_0) = \frac{\phi_0^2}{2} - \ln(2 \cosh \sqrt{\alpha^2 + \phi_0^2}) \quad .$$

A introdução da temperatura T através do parâmetro $\beta = \frac{1}{T}$ modifica a expressão acima para

$$G(\phi_0) = \frac{\phi_0^2}{2} - \ln \left(2 \cosh \beta \sqrt{\alpha^2 + \frac{\phi_0^2}{\beta}} \right) \quad . \quad (3.2.11)$$

O mínimo de $G(\phi_0)$ indicado em (3.2.10) é obtido em $\phi_0^* = 0$ se $\beta \leq \beta_c = \frac{\operatorname{tgh}^{-1} \alpha}{\alpha}$ ou em $\frac{\phi_0^*}{\sqrt{\beta}} = \sqrt{\sigma^{*2} - \alpha^2}$ para $\beta \geq \beta_c$, onde σ^* é a única solução positiva de $\sigma^* = \operatorname{tgh} \beta \sigma^*$.

A introdução de um campo externo h na direção z permite, como nos modelos clássicos, associar o valor de ϕ_0 ao parâmetro físico

$$\mu = \left\langle \frac{\sum_{x=1}^n \sigma_3(x)}{n} \right\rangle ,$$

que é, portanto, o parâmetro de ordem da transição de fase. A relação resultante é

$$\mu = \frac{\phi_0^*}{\sqrt{\beta}} .$$

3.3. O MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO: FLUTUAÇÕES

Exatamente como no caso clássico, o interesse aqui é estudar a distribuição assintótica de probabilidades da variável

$$Y_n = \left(\frac{S_n^3}{n} - \mu_n \right) n^\gamma$$

onde

$$\mu_n = \frac{1}{Z_n} \text{Tr} \left(\frac{S_n^3}{n} e^{-\beta H_n} \right) ,$$

com H_n e Z_n dados respectivamente em (3.1.1) e (3.2.5).

Teorema 3.3.1

Seja $\omega \sim N(0,1)$ uma variável aleatória independente de S_n^3 . Então no sentido de Duhamel:

$$\frac{\omega}{\sqrt{\beta} n^{\frac{1}{2}-\gamma}} + Y_n \sim \frac{\exp \left[-n G_n \left(\sqrt{\beta} \left(\frac{\phi_0}{n^\gamma} + \mu_n \right) \right) \right] d\phi_0}{\int d\phi_0 \exp \left[-n G_n \left(\sqrt{\beta} \left(\frac{\phi_0}{n^\gamma} + \mu_n \right) \right) \right]} \quad (3.3.1)$$

onde

$$G_n(\phi_0) = \frac{\phi_0^2}{2} - \ln \left\{ \int \mathcal{D}\hat{\phi} \exp \left[-n \left(\frac{\langle \hat{\phi}, \hat{\phi} \rangle}{2} - \ln \int \exp \langle \phi, \rho \rangle d\mu_0(\rho) \right) \right] \right\}^{1/n} . \quad (3.3.2)$$

Prova

Definindo

$$\bar{H}_n = H_n + i \frac{h}{\beta} \frac{S_n^3 - n \mu_n}{n^{1-\gamma}} ,$$

imediatamente se chega com as técnicas usuais (fórmula de Trotter e transformação de Hubbard-Stratonovich) a

$$\begin{aligned} F_n(h, \alpha) &= \frac{\text{Tr } e^{-\beta \bar{H}_n}}{Z_n} = \\ &= \frac{1}{Z_n} \int \mathcal{D}\phi \, e^{-n \left\{ \frac{1}{2} \langle \phi, \phi \rangle - \ln \int \exp \langle \sqrt{\beta} \phi + \frac{ih}{n^{1-\gamma}} \mathbf{1}, \rho \rangle d\mu_0(\rho) \right\}} e^{-in^{\gamma} \mu_n h} = \\ &= \exp \left(\frac{h^2}{2\beta n^{1-2\gamma}} \right) \frac{1}{Z_n} \int d\phi_0 \exp -n \left\{ \frac{\phi_0^2}{2} - i \frac{h}{n^{1-\gamma}} \left[\frac{\phi_0}{\sqrt{\beta}} - \mu_n \right] - \right. \\ &\quad \left. - \ln \left[\int \mathcal{D}\hat{\phi} \exp \left\{ -n \left(\frac{\langle \hat{\phi}, \hat{\phi} \rangle}{2} - \ln \int e^{\langle \phi, \rho \rangle} d\mu_0(\rho) \right) \right\} \right]^{1/n} \right\} . \end{aligned}$$

Já que $\exp \left(\frac{h^2}{2\beta n^{1-2\gamma}} \right)$ é a função característica de $\frac{\omega}{\sqrt{\beta} n^{\frac{1}{2}-\gamma}}$, a expressão acima pode ser lida como uma reinterpretação do enunciado do teorema, sendo o dêsiderato assim alcançado.

A função $G_n(\phi_0)$ em (3.3.2) tende a $G(\phi_0)$ dada por (3.2.11) pelos mesmos argumentos usados na secção anterior.

A análise feita para as distribuições no capítulo 2 pode ser aqui aplicada levando ao seguinte resultado quando $n \rightarrow \infty$:

Se $\beta < \beta_c$

$$y_n \sim \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx, \quad \text{com } \gamma = \frac{1}{2}, \quad \sigma^2 = \frac{1}{\beta} \left[\left(G^{(2)}(\phi_0^*) \right)^{-1} - 1 \right] > 0;$$

Se $\beta = \beta_c$

$$y_n \sim \exp\left[-\beta^2 G^{(4)}(0) \frac{x^4}{4!}\right] dx, \quad \text{com } \gamma = \frac{1}{4};$$

Se $\beta > \beta_c$, $\exists \epsilon' > 0$ tal que para todo $\epsilon' > \epsilon > 0$:

$$y_n : \left\{ \left| \frac{S_n}{n} - \frac{\phi_0^*}{\sqrt{\beta}} \right| \in [0, \epsilon] \right\} \sim \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx, \quad \text{com } \gamma = \frac{1}{2}.$$

3.4. EXTENSÕES, PROBLEMAS E REFLEXÕES

Em princípio é imediata a extensão deste resultado aos outros modelos considerados no início do capítulo, descritos pelas hamiltonianas (3.1.2) e (3.1.3).

No caso do modelo XY, a sua energia livre será dada por

$$f^{XY} = \inf_{\phi_1, \phi_2} \left\{ \frac{\phi_1^2}{2} + \frac{\phi_2^2}{2} - \ln 2 \cosh \beta \sqrt{\alpha^2 + \frac{\phi_1^2}{\beta} + \frac{\phi_2^2}{\beta}} \right\}.$$

Os valores ϕ_1^* e ϕ_2^* que minimizam o lado direito, estão relacionados com os valores de equilíbrio de $\frac{1}{n} S_n^1$ e $\frac{1}{n} S_n^2$, definidos como μ^1 e μ^2 , pela relação

$$\mu^i = \frac{\phi_i^*}{\sqrt{\beta}}, \quad i = 1, 2.$$

Já no modelo de Heisenberg,

$$f^{\text{Heisenberg}} = \inf_{\phi_1, \phi_2, \phi_3} \left\{ \frac{\phi_1^2}{2} + \frac{\phi_2^2}{2} + \frac{\phi_3^2}{2} - \ln 2 \cosh \beta \sqrt{\alpha^2 + \frac{\phi_1^2}{\beta} + \frac{\phi_2^2}{\beta} + \frac{\phi_3^2}{\beta}} \right\}.$$

Naturalmente, os valores de ϕ_i , $i = 1, 2, 3$ que minimizam o lado direito relacionam-se com os valores de equilíbrio da magnetização do mesmo modo.

Quanto às flutuações, o modo como foram calculadas é evidentemente problemático; no teorema 3.3.1 a expressão "no sentido de Duhamel" significa que foi calculado (na prova do teorema) o valor esperado

$$\langle e^{-\beta H_n + i h y_n} \rangle \quad (3.4.1)$$

ao invés da função característica usual

$$\langle e^{-\beta H_n} \cdot e^{i h y_n} \rangle. \quad (3.4.2)$$

A respeito da função assim obtida algumas questões e observações devem ser colocadas:

1) A função (3.4.1) é a função geradora das funções de correlação de Duhamel [DLS].

2) Será que (3.4.1) é função característica de alguma variável aleatória? A resposta é sim; pelo teorema de Bochner [Si2],

uma função $c(t)$ é função característica se

i) $c(t)$ for contínua

ii) $c(0) = 1$

iii) $c(t)$ for positiva definida, i.e., se para quaisquer $\alpha_1, \dots, \alpha_N \in \mathbb{C}$,
 $t_1, \dots, t_N \in \mathbb{R}$, $N \in \mathbb{N}$,

$$\sum_{\ell, m=1}^N \bar{\alpha}_\ell \alpha_m c(t_\ell - t_m) \geq 0 \quad (3.4.3)$$

As duas primeiras condições são trivialmente satisfeitas por

$$c(t) = \langle e^{-H_n + itY_n} \rangle.$$

Quanto à terceira basta calcular explicitamente (3.4.3) com o auxílio da fórmula de Trotter e a introdução de uma base que diagonalize Y_n no cálculo do traço, o que leva a

$$\begin{aligned} \sum_{\ell, m} \bar{\alpha}_\ell \alpha_m \text{Tr} \left[e^{-H_n + i(t_\ell - t_m)Y_n} \right] &= \lim_k \sum_{\ell, m} \bar{\alpha}_\ell \alpha_m \text{Tr} \left[e^{-\frac{\beta H_n}{k}} e^{i(t_\ell - t_m) \frac{Y_n}{k}} \right]^k = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{\ell, m} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^k \langle \sigma(j-1) | e^{-\frac{\beta H_n}{k}} | \sigma(j) \rangle \langle \sigma(j) | e^{i(t_\ell - t_m) \frac{Y_n}{k}} | \sigma(j) \rangle = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma\}} \left(\sum_{\ell} \bar{\alpha}_\ell e^{it_\ell \sum_{j=1}^k Y_n(\sigma(j))} \right) \left(\sum_m \alpha_m e^{-it_m \sum_{j=1}^k Y_n(\sigma(j))} \right) \times \\ &\times \prod_{j=1}^k \langle \sigma(j-1) | e^{-\frac{\beta H_n}{k}} | \sigma(j) \rangle. \end{aligned}$$

onde $\{\sigma\}$ denota a soma sobre todos $\sigma(i) = \pm 1$, $i = 1, \dots, k$, com $\sigma(0) = \sigma(k)$. Esta forma é evidentemente positiva definida uma vez que, para o operador H_n estudado,

$$\langle \sigma(j) | e^{-\frac{\beta H_n}{k}} | \sigma(j+1) \rangle \geq 0$$

e o produto dos dois primeiros termos na somatória acima é positivo também.

3) Dada a natureza quântica do problema, y_n não comuta com H_n e portanto (3.4.1) e (3.4.2) não geram necessariamente a mesma função característica; pelo menos uma parte das flutuações quânticas do sistema é abstraída em (3.4.1).

Se tivesse sido usada (3.4.2), a função obtida na prova do teorema 3.3.1 teria sido

$$F_n(h, \alpha) = \frac{1}{Z_n} \int \mathcal{D}\phi \, e^{-n \left\{ \frac{1}{2} \langle \phi, \phi \rangle - \ln \int \exp \left[\sqrt{\beta} \phi + i \frac{h}{n^{1-\gamma}} \delta, \rho \right] d\mu_0(\rho) \right\}} \cdot e^{-in^\gamma h \mu_n}$$

o que faz perfeito sentido matemático, na medida em que a integral acima está bem definida para $\phi \in S'$. O problema que surge com a presença do δ está associado à translação de argumento em ϕ sugerida na prova do teorema 3.3.1, pois surgiriam aí objetos extremamente singulares como exponenciais de δ^2 , aos quais nenhum sentido razoável pode ser associado.

A singularidade surgida pode ser melhor controlada num problema mais simples; seja a coleção de osciladores anarmônicos com hamiltoniana com acoplamento tipo Curie-Weiss:

$$H_n = + \frac{1}{2} \sum_{i=1} p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1} P(q_i) - \frac{1}{2n} \sum_{i,j} q_i q_j \quad . \quad (3.4.4)$$

A função característica (3.4.2) calculada para esta hamiltoniana com

$$y_n = \frac{\sum_{i=1}^n q_i}{n^{1-\gamma}}$$

leva a

$$\begin{aligned} \langle e^{-H_n} \cdot e^{i h y_n} \rangle &= \\ &= \int \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^1 d\tau \left[- \sum_{j=1}^n \left(\dot{q}_j^2(\tau) + P(q_j(\tau)) \right) + \frac{1}{n} \left(\sum_{j=1}^n q_j(\tau) \right)^2 \right] \right\} e^{\frac{i t}{n^{1-\gamma}} \sum_{j=1}^n q_j^{(0)}} = \\ &= \int \mathcal{D}s \, e^{-\frac{n}{2} \langle s, s \rangle} \left[\int \mathcal{D}q \, e^{\langle s + \frac{i h}{n^{1-\gamma}} \delta, q \rangle} \cdot e^{-\frac{1}{2} (p(q) + \dot{q}^2)} \right]^n, \quad (3.4.5) \end{aligned}$$

onde na primeira passagem foi usada apenas a fórmula de Trotter e na segunda a transformação de Hubbard-Stratonovich.

No caso em que $P(q_i)$ em (3.4.4) é dado por

$$P(q_i) = q_i^2,$$

a integral em (3.4.5) pode ser formalmente feita $^{[Si2, Hi, N]}$, levando a

$$\begin{aligned} \langle e^{-H_n} \cdot e^{i h y_n} \rangle &= \int \mathcal{D}s \, e^{-\frac{n}{2} \langle s, s \rangle} \int \mathcal{D}q \, e^{\langle s + \frac{i h}{n^{1-\gamma}} \delta, q \rangle} \cdot e^{-\frac{1}{2} \langle q, A q \rangle} = \\ &= \int \mathcal{D}s \, e^{-\frac{n}{2} \langle s, B, s \rangle} \cdot e^{i h n^\gamma \langle s, A^{-1} \delta \rangle} \cdot e^{-\frac{h^2}{2 n^{1-2\gamma}} \langle \delta, A^{-1} \delta \rangle} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= e^{-\frac{h^2}{2n^{1-2\gamma}} \langle \delta, A^{-1} \delta \rangle} \cdot e^{-\frac{h^2}{2} n^{2\gamma} \langle \delta, \frac{1}{n} (ABA)^{-1} \delta \rangle} = \\
&= e^{-\frac{h^2}{2n^{1-2\gamma}} \langle \delta, [A^{-1} + (A^2 + A)^{-1}] \delta \rangle}
\end{aligned}$$

onde A e B são operadores dados por

$$A = \mathbf{1} + \nabla^2, \quad B = \mathbf{1} + A^{-1}$$

e os produtos escalares acima são expressos simplesmente por

$$\langle \delta, A^{-1} \delta \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k^2 + 1} \quad e \quad \langle \delta, (A^2 + A)^{-1} \delta \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k^2 + 1 + (k^2 + 1)^2} .$$

Assim, a singularidade surgida mostra-se de carácter fantasmagórico, isto é, sem real existência no cômputo final da função característica, ao menos no caso em que pode ser calculada explicitamente, levando aí a uma distribuição Gaussiana para y_n . A expectativa que se tem é a de que o comportamento dessa singularidade seja intrinsecamente o mesmo para um $P(q)$ mais geral e também para os modelos de spin.

APÊNDICE A

A LEI DOS GRANDES NÚMEROS

Foi Poisson quem, no seu livro "*Recherches sur la Probabilité des Jugements*", batizou esta lei, que se configurou numa das essenciais da teoria das probabilidades. Ela formaliza a idéia bastante intuitiva de que a média dos valores assumidos por uma certa variável aleatória numa sequência de n eventos independentes converge para o valor esperado dessa variável aleatória; dos jogos de azar, motivo primeiro de todo o desenvolvimento da teoria, pode ser dado um exemplo bem simples: suponha que no lançamento de uma moeda, se sair cara o jogador ganhe uma unidade monetária e se sair coroa perca a mesma quantia. Num jogo desses, se praticado um número razoável de vezes, porquanto ninguém com um mínimo de bom senso e de honestidade pode pensar em dele sair com significativo ganho, não se deveria entrar senão pela verificação de tão fundamental lei. A razão é simples: se a moeda em questão for justa - se caras saírem tão facilmente como coroas - espera-se que após um número grande n de jogadas a diferença entre a frequência de umas e outras não seja significativa em relação a n . É essa expectativa de ganho zero que a lei estabelece na forma do teorema de Bernoulli - que ainda não era lei quando ele o formulou - no qual Poisson se fundamentou para a enunciar.

O resultado de Poisson-Bernoulli pode ser descrito da seguinte forma:

Para cada n , sejam $X_1, \dots, X_n$ variáveis aleatórias independentes num espaço de probabilidades, tais que X_i possa tomar valores 0 ou 1 com probabilidade $(1-p)$ e p respectivamente.

te. Então, dado $\varepsilon > 0$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left(\left| \frac{X_1 + \dots + X_n}{n} - p \right| > \varepsilon \right) = 0 \quad (\text{A.1})$$

onde $P(A)$ denota a probabilidade do evento A .

No caso do jogo descrito anteriormente, por exemplo, o valor 0 poderia ser associado ao fracasso no jogo, e 1 ao sucesso, sendo p a probabilidade de sucesso ou seja, de sair cara; se a moeda for justa, $p = \frac{1}{2}$. Uma leitura imediata de (A.1) diz que se nunca se parar de jogar, vai-se ganhar metade das vezes e perder a outra metade.

Uma prova direta deste resultado pode ser obtida^[F] da distribuição binomial, sabendo-se que

$$P(X_1 + \dots + X_n = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}.$$

Nesse caso, (A.1) poderia ser calculado pelo limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=n(p-\varepsilon)}^{n(p+\varepsilon)} P(X_1 + \dots + X_n = k).$$

No entanto, um método mais simples desenvolvido por Chebyshev permite a demonstração de um teorema bem mais geral, extensível a variáveis aleatórias contínuas. Antes de se chegar ao teorema, é preciso introduzir a chamada "desigualdade de Chebyshev":

Seja X uma v.a. definida num espaço de probabilidades $(\Delta, \mathcal{B}, \rho)$, e f uma função crescente e não negativa no seu domínio. A desigualdade de Chebyshev diz que

$$P(X > a) \leq \frac{E(f(X))}{f(a)}. \quad (\text{A.2})$$

Prova

$$\begin{aligned}
 E(f(X)) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) d\rho(x) \geq \int_a^{\infty} f(x) d\rho(x) \geq f(a) \int_a^{\infty} d\rho(x) = \\
 &= f(a) P(X \geq a)
 \end{aligned}$$

o que prova (A.2). Tomando $f(x) = x^2$ e aplicando (A.2) à variável aleatória $|X - E(X)|$ obtém-se

$$P(|X - E(X)| > a) \leq \frac{V(X)}{a^2}, \quad a > 0 \quad (\text{A.3})$$

onde $V(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - E(x))^2 d\rho(x)$ é a variância de X .

Agora, um teorema bem mais geral do que o resultado (A.1) pode ser provado, considerando-se em (A.3) a variável aleatória X como a soma de outras variáveis aleatórias.

Teorema A.1 (Lei dos Grandes Números)

Para cada n , sejam $X_1, X_2, \dots, X_n$ variáveis aleatórias independentes e igualmente distribuídas com $V(X_1) < \infty$. Seja $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$, então para cada $\epsilon > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\left|\frac{S_n}{n} - E(X_1)\right| \geq \epsilon\right) = 0.$$

Prova

Dada a independência e igual distribuição dos X_i , $E(S_n) = n E(X_1)$ e $V(S_n) = n V(X_1)$, o que aplicado em (A.3) leva imediatamente a

$$P\left(|S_n - n E(X_1)| \geq n\epsilon\right) \leq \frac{n V(X_1)}{(n\epsilon)^2},$$

que no limite $n \rightarrow \infty$ dá o resultado enunciado no teorema. └

A convergência expressa no teorema (A.1) é conhecida como convergência em probabilidade de $\frac{S_n}{n}$ para $E(X_1)$, e a LGN assim formulada, é conhecida também como a Lei Fraca dos Grandes Números.

Um outro tipo de convergência num espaço de probabilidades, mais forte do que a convergência em probabilidade porque nela implica, é a convergência quase por toda a parte; seja $\{Y_n : n = 1, 2, \dots\}$ uma sequência de variáveis aleatórias definidas no espaço de probabilidades $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), \mu)$. Diz-se que Y_n converge quase por toda a parte para Y (escreve-se $Y_n \rightarrow Y$ q.t.p. $[\mu]$) se

$$P \left\{ \omega \in \Omega : \lim_{n \rightarrow \infty} Y_n(\omega) = Y(\omega) \right\} = 1.$$

A variável S_n descrita no teorema A.1 pode ser definida no espaço produto $\Omega = \prod_{i=1}^{\infty} \Delta = \Delta^{\infty}$, ou seja, para cada $\omega \in \Omega$ $\omega = \{X_i(\omega); i=1, 2, \dots\}$ e

$$S_n(\omega) = \sum_{i=1}^n X_i(\omega).$$

É possível, sob certas condições a serem descritas posteriormente, provar que a convergência se dá quase por toda a parte (q.t.p.), isto é, para todo $\omega \in (\Omega - A)$ onde A é tal que $\mu(A) = 0$. Ou seja, para quase todas as sequências $\{X_i\}$, $\frac{S_n}{n}$ convergirá para $E(X_1)$. Esta afirmação contém informação bem mais precisa do que o teorema (A.1) e constitui o que, em oposição a ele, é conhecido como a Lei Forte dos Grandes Números, que será aqui chamada de LFGN para a distinguir da anterior, denotada simplesmente por LGN. A prova que aqui será apresentada foi baseada nos livros de Lamperti^[L] e de K. Ito^[I]. Sendo, no entanto, assunto tão bási

- [KW] - H.S. Kogon e D.J. Wallace, J. Phys. A 14, L527 (1981).
- [L] - J. Lamperti, Probability, Benjamin, N.Y. (1966).
- [LY] - T.D. Lee e C.N. Yang, Phys. Rev. 87, 410 (1952).
- [ML] - A. Martin-Löf, Commun. math. Phys. 32, 75 (1973).
- [MP] - D. Mukamel e E. Pytte, Phys. Rev. B 25, 4779 (1982).
- [N] - E. Nelson, J. Math. Phys. 5, 332 (1964).
- [PIM] - E. Pytte, Y. Imry e D. Mukammel, Phys. Rev. Lett. 46, 1173 (1981).
- [PWH] - J.F. Perez, W.F. Wreszinski e J.L. van Hemmen, J. Stat. Phys. 35, 89 (1984).
- [PPB] - J.F. Perez, L.F. Pontin e J.A. Baêta Segundo, Phys. Lett. A 116, 287 (1986).
- [PS] - G. Parisi e N. Sourlas, Phys. Rev. Lett. 43, 744 (1979) e Nucl. Phys. B 206, 321 (1982).
- [R] - R. Riedel, Z. Angew. Math. Mech. 45, 323 (1965).
- [S1] - J. Sinai, Mathematical Foundations of the Renormalization Group Method in Statistical Physics, vol. 80, Lecture Notes in Physics.
- [S2] - J. Sinai, Some Rigorous Results in the Theory of Phase Transitions, em Statistical Physics - Proceedings of the International Conference, Budapeste, North Holland Publishing Company (1976).
- [Si1] - B. Simon, Functional Integration and Quantum Physics, Academic Press, N.Y. (1979).
- [Si2] - B. Simon, The $P(\phi)_2$ Euclidean (Quantum) Field Theory, Princeton University Press (1974).
- [SW] - S.R. Salinas e W.F. Wreszinski, J. Stat. Phys. 41, 299 (1985).
- [W] - W.F. Wreszinski, Helv. Phys. Acta 46, 844 (1974).
- [WP] - W.F. Wreszinski e J.F. Perez, Rev. Bras. Fís. 13, 477 (1983).
- [Y] - A.P. Young, J. Phys. C 10, L257 (1977).
- [YL] - C.N. Yang e T.D. Lee, Phys. Rev. 87, 404 (1952).