

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

---

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ  
ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

## Πιθανοθεωρητικές Μέθοδοι στη Στατιστική Φυσική

Διπλωματική εργασία

Επιμέλεια: Μάριος Τρύφων Χριστόπουλος

Αριθμός Μητρώου: 09116045

Επιβλέπων Καθηγητής: Μιχαήλ Λουλάκης



## ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

Μιχαήλ Λουλάκης  
Βασίλης Παπανικολάου  
Δημήτρης Χελιώτης



---

# Περιεχόμενα

|  |           |
|--|-----------|
| Πρόλογος   | 1         |
| <b>1 Εισαγωγή</b>  | <b>2</b>  |
| 1.1 Θερμοδυναμική στην Ισορροπία . . . . .   | 2         |
| 1.1.1 Περιγραφή μακροσκοπικών συστημάτων . . . . .   | 2         |
| 1.1.2 Θερμοδυναμική Εντροπία . . . . .   | 4         |
| 1.1.3 Συζυγείς εντατικές ποσότητες και εξισώσεις κατάστασης . . . . .                            | 8         |
| 1.1.4 Πυκνότητες . . . . .   | 9         |
| 1.1.5 Διαφορετικές αναπαραστάσεις, θερμοδυναμικά potentials και η υπόθεση Van der Waals. . . . . | 11        |
| 1.2 Στατιστική Μηχανική . . . . .  | 14        |
| 1.2.1 Το microcanonical ensemble . . . . .   | 15        |
| 1.2.2 Το canonical ensemble . . . . .  | 16        |
| 1.2.3 Το grand canonical ensemble . . . . .  | 19        |
| 1.2.4 Δύο παραδείγματα συστημάτων αερίου . . . . .   | 20        |
| 1.3 Σύνδεση Στατιστικής Μηχανικής με Θερμοδυναμική . . . . .                                     | 24        |
| 1.3.1 Η αρχή του Boltzmann και το θερμοδυναμικό όριο . . . . .                                   | 24        |
| 1.3.2 Η εξίσωση κατάστασης του ιδεατού αερίου . . . . .  | 30        |
| 1.3.3 Η βασική δομή . . . . .  | 31        |
| 1.4 Μαγνητικά συστήματα . . . . .  | 32        |
| 1.4.1 Παραμαγνητικά και Φερομαγνητικά συστήματα . . . . .  | 32        |
| 1.4.2 Το μοντέλο Ising . . . . .   | 34        |
| 1.4.3 Θερμοδυναμική συμπεριφορά . . . . .  | 36        |
| <b>2 Το μοντέλο Curie-Weiss</b>  | <b>42</b> |
| 2.1 Η προσέγγιση mean-field . . . . .  | 42        |
| 2.2 Η συμπεριφορά για μεγάλα $N$ όταν $h = 0$ . . . . .  | 44        |
| 2.3 Η συμπεριφορά για μεγάλα $N$ όταν $h \neq 0$ . . . . .                                       | 49        |
| <b>3 Το μοντέλο Ising</b>  | <b>53</b> |
| 3.1 Πεπερασμένου όγκου κατανομές Gibbs . . . . .   | 53        |
| 3.2 Θερμοδυναμικό όριο, πίεση και μαγνήτιση . . . . .  | 57        |
| 3.2.1 Σύγκλιση υποσυνόλων . . . . .  | 57        |
| 3.2.2 Πίεση . . . . .  | 57        |
| 3.2.3 Μαγνήτιση . . . . .  | 62        |

|   |   |            |
|---|---|------------|
| 3.2.4                                     | Ένας πρώτος ορισμός του phase transition                    | 63         |
| 3.3                                       | Το μοντέλο Ising σε μία διάσταση                            | 64         |
| 3.4                                       | Απείρου όγκου Gibbs states                                  | 69         |
| 3.5                                       | Δύο οικογένειες από Local function                          | 71         |
| 3.6                                       | Ανισότητες συσχέτισης                                       | 72         |
| 3.6.1                                     | Οι ανισότητες GKS   | 72         |
| 3.6.2                                     | Η ανισότητα FKG   | 73         |
| 3.6.3                                     | Συνέπειες   | 74         |
| 3.7                                       | Διαγράμματα φάσης   | 77         |
| 3.7.1                                     | Δύο κριτήρια για μη-μοναδικότητα                            | 79         |
| 3.7.2                                     | Στιγμιαία κατάρρευση της συμμετρίας σε χαμηλές θερμοκρασίες | 83         |
| 3.7.3                                     | Μοναδικότητα σε υψηλές θερμοκρασίες                         | 90         |
| 3.7.4                                     | Μοναδικότητα σε μη-μηδενικό μαγνητικό πεδίο                 | 93         |
| 3.7.5                                     | Συμπεράσματα  | 98         |
| 3.8                                       | Απόδειξη των ανισοτήτων συσχέτισης                          | 99         |
| 3.8.1                                     | Απόδειξη των ανισοτήτων GKS                                 | 99         |
| 3.8.2                                     | Απόδειξη της ανισότητας FKG                                 | 101        |
| <b>A' Τεχνικές αποδείξεις</b>             |   | <b>105</b> |
| A.1                                       | Κεφάλαιο 1  | 105        |
| A.2                                       | Κεφάλαιο 2  | 106        |
| A.3                                       | Κεφάλαιο 3  | 113        |
| <b>B' Μαθηματικά εργαλεία και Ορισμοί</b> |   | <b>121</b> |
| B.1                                       | Κεφάλαιο 1  | 121        |
| B.2                                       | Κεφάλαιο 2  | 121        |
| B.3                                       | Κεφάλαιο 3  | 121        |
| <b>Βιβλιογραφία</b>                       |   | <b>124</b> |

# Πρόλογος

Η παρούσα εργασία αφορά τη μοντελοποίηση φυσικών συστημάτων της στατιστικής φυσικής με χρήση εργαλείων από τη θεωρία πιθανοτήτων και βασίζεται στο βιβλίο του Yvan Velenik [1]. Πιο συγκεκριμένα η εργασία πραγματεύεται τη μοντελοποίηση και ανάλυση του μοντέλου Ising, το οποίο αναπτύχθηκε το 1920 από τους Wilhelm Lenz και Ernst Ising με σκοπό τη θεωρητική κατανόηση του φαινομένου phase transition, δηλαδή της αλλαγής φάσης από φερομαγνητική σε παραμαγνητική συμπεριφορά και το αντίστροφο. Το μοντέλο Ising αποτελεί το πρώτο σύστημα από τοπικά αλληλεπιδρώντα σωματίδια για το οποίο αποδείχθηκε η ύπαρξη του φαινομένου phase transition, γεγονός το οποίο θεμελίωσε τη στατιστική μηχανική στις αρχές του 20ου αιώνα.

Στο κεφάλαιο 1 αναπτύσσεται η θεωρία της *θερμοδυναμικής ισορροπίας*, η οποία θα μας επιτρέψει αρχικά να μοντελοποιήσουμε φυσικά συστήματα που βρίσκονται σε ισορροπία, καθώς και η θεωρία της στατιστικής μηχανικής. Παρουσιάζεται ο λόγος για τον οποίο είναι απαραίτητη η περιγραφή φυσικών συστημάτων υπό τη σκοπιά της στατιστικής μηχανικής αλλά και η σύνδεση μεταξύ των δύο θεωριών. Αναλύεται επίσης η έννοια των *statistical ensemble* και αναπτύσσονται δύο παραδείγματα για ένα απλό μοντέλο αερίου από τα οποία θα εξαχθεί το συμπέρασμα ότι είναι προτιμότερη η μοντελοποίηση σε πλέγμα. Τέλος, γίνεται μια εισαγωγή στα μαγνητικά συστήματα και παρουσιάζεται το μοντέλο Ising.

Στο κεφάλαιο 2 αναλύεται το μοντέλο Curie-Weiss, το οποίο αποτελεί την *mean-field* εκδοχή του μοντέλου Ising. Θα αποδειχθεί ότι το μοντέλο *Curie-Weiss* παρουσιάζει *phase transition* με διαφορετική συμπεριφορά σε υψηλές και χαμηλές θερμοκρασίες. Τα μοντέλα *mean-field* αποτελούν μία προσέγγιση των υπό μελέτη μοντέλων και μας επιτρέπουν να κάνουμε αναλυτικούς υπολογισμούς και προβλέψεις σχετικά με τις ιδιότητες που αναμένεται να εμφανίσει το αρχικό μας μοντέλο.

Στο κεφάλαιο 3 γίνεται εκτενής μελέτη του μοντέλου Ising ξεκινώντας από μία διάσταση και έπειτα η μελέτη συνεχίζεται σε υψηλότερες διαστάσεις. Παρουσιάζονται οι έννοιες των *κατανομών πεπερασμένου όγκου*, των *state απείρου όγκου*, των *ανισοτήτων συσχέτισης* και ο ορισμός του *phase transition*. Έπειτα κατασκευάζεται το *διάγραμμα φάσης* του μοντέλου και παρουσιάζεται το επιχείρημα του Peierls το οποίο αποτελεί θεμέλιο της απόδειξης της ύπαρξης του φαινομένου phase transition.

## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον κο Μιχαήλ Λουλάκη για τη συνεχή υποστήριξη και τη βοήθειά του στην εκπόνηση της διπλωματικής μου εργασίας. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα μέλη της εξεταστικής επιτροπής, κο Βασίλη Παπανικολάου και κο Δημήτρη Χελιώτη, για τον χρόνο που αφιέρωσαν προκειμένου να διαβάσουν και να αξιολογήσουν τη διπλωματική μου εργασία.

# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

Η στατιστική μηχανική αποτελεί ένα κλάδο της φυσικής που έχει ως στόχο να γεφυρώσει τη μικροσκοπική και μακροσκοπική περιγραφή συστημάτων με μεγάλο αριθμό αλληλεπιδρώντων σωματιδίων συνδυάζοντας τις πληροφορίες που παρέχονται από τη μικροσκοπική περιγραφή με χρήση εργαλείων από τη θεωρία πιθανοτήτων. Ο σκοπός είναι η κατανόηση της υπάρχουσας σχέσης μεταξύ των βασικών μακροσκοπικών χαρακτηριστικών (που έχουν παρατηρηθεί) στα συστήματα και των επιμέρους μικροσκοπικών ιδιοτήτων.

Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο αρχικά θα παρουσιάσουμε την πρώτη φυσική θεωρία περιγραφής μακροσκοπικών συστημάτων στην ισορροπία η οποία ονομάζεται Θερμοδυναμική στην ισορροπία και έπειτα θα δείξουμε τη μετάβαση από τη θερμοδυναμική ισορροπία στη στατιστική μηχανική στην ισορροπία καθώς και τη σύνδεση αυτών των δύο. Τέλος θα κάνουμε μία εισαγωγή στα μαγνητικά συστήματα και συγκεκριμένα στο μοντέλο Ising στο οποίο θα επικεντρωθούμε στα επόμενα κεφάλαια.

### 1.1 Θερμοδυναμική στην Ισορροπία

Η θεωρία της Θερμοδυναμικής στην ισορροπία είναι μία φαινομενολογική θεωρία που αναπτύχθηκε κυρίως τον 19ο αιώνα με συντελεστές να αποτελούν ο Carnot, Clausius, Kelvin, Joule, Gibbs και πολλοί άλλοι. Βασίζεται σε κάποιες εμπειρικές αρχές και δεν απαιτεί καμία προϋπόθεση όσον αφορά στη μικροσκοπική δομή των συστημάτων που μελετάμε (η ατομική θεωρία δεν είχε ακόμη καθιερωθεί εκείνη την περίοδο).

#### 1.1.1 Περιγραφή μακροσκοπικών συστημάτων

Τα πιο γνωστά παραδείγματα φυσικών συστημάτων με πολλά σωματίδια είναι τα αέρια, υγρά και στερεά. Για δική μας διευκόλυνση θα θεωρήσουμε ένα σύστημα που αποτελείται από ένα αέριο περιορισμένο σε ένα δοχείο. Έστω ένα ομογενές αέριο σε ένα δοχείο [π.χ. ένα λίτρο *Helium* σε κανονική θερμοκρασία ( $0^{\circ}\text{C}$ ) και πίεση ( $1\text{ atm}$ )]. Τέτοια συστήματα τα συμβολίζουμε με  $\Sigma$ . Η μικροσκοπική κατάσταση (microstate) του αερίου είναι η συνολική μικροσκοπική περιγραφή της κατάστασης του αερίου. Για παράδειγμα, από τη σκοπιά της Νευτώνιας Μηχανικής, το microstate του αερίου ενός μονοατομικού μορίου καθορίζεται από τη θέση και την ορμή κάθε μορίου. Όμως σε ένα αέριο περιέχεται μεγάλος αριθμός σωματιδίων (στην περίπτωση του 1ος



λίτρου *Helium* ο αριθμός είναι της τάξης  $10^{22}$ ). Η ποσότητα πληροφορίας που περιέχεται σε ένα τέτοιο σύστημα είναι τεράστια και αυτό καθιστά τη συνολική περιγραφή αδύνατη. Στη παρούσα μελέτη δεν ενδιαφερόμαστε για τη συνολική πληροφορία που περιέχεται στο microstate, δηλαδή την συμπεριφορά κάθε τέτοιου σωματιδίου.

Έχει παρατηρηθεί (και αποτελεί πλέον ένα εμπειρικό γεγονός) ότι για να περιγράψουμε την κατάσταση ενός αερίου σε μακροσκοπική κλίμακα, απαιτείται ένα μικρό σε πλήθος σύνολο μεταβλητών. Αυτό το γεγονός ισχύει ειδικά άμα το σώμα βρίσκεται σε κατάσταση **ισορροπίας**. Υποθέτουμε ότι το αέριο είναι απομονωμένο και δεν ανταλλάσσει ούτε ύλη ούτε ενέργεια με το εξωτερικό περιβάλλον και έχει μείνει αδιατάρακτο για μεγάλο χρονικό διάστημα. Το σύστημα βρίσκεται σε **θερμοδυναμική ισορροπία** όταν όλες οι μακροσκοπικές ιδιότητες του αερίου παραμένουν αμετάβλητες και δεν υπάρχει μακροσκοπική ροή ενέργειας ή ύλης (παρόλο που η μοριακή δραστηριότητα δεν σταματάει).

Τα απομονωμένα συστήματα έχουν ορισμένες διατηρητέες ποσότητες, ποσότητες που δεν αλλάζουν με την πάροδο του χρόνου. Με χρήση αυτών θα περιγράψουμε τη μακροσκοπική κατάσταση του συστήματος. Για το παραδειγμά του αερίου οι διατηρητέες ποσότητες είναι ο **όγκος**  $V$  του δοχείου<sup>1</sup>, ο **αριθμός των σωματιδίων**  $N$  και η **(εσωτερική) ενέργεια**  $U$ .

Άρα η μακροσκοπική κατάσταση (macrostate) ενός αερίου  $\Sigma$  από εδώ και στο εξής περιγράφεται από την τριάδα

$$\mathbf{X} = (U, V, N).$$

Οι μεταβλητές  $(U, V, N)$  μπορούν να θεωρηθούν ως οι ποσότητες που μπορεί κάποιος να «ελέγχει» ώστε να τροποποιήσει την κατάσταση του αερίου. Για παράδειγμα, το  $U$  μπορεί να επηρεαστεί θερμαίνοντας ή ψύχοντας το σύστημα, το  $V$  με συμπίεση ή εκτόνωση του δοχείου και το  $N$  με εισροή ή εκροή σωματιδίων με αντλία ή κάποια άλλη συσκευή. Αυτές οι μεταβλητές καθορίζουν την κατάσταση του αερίου με τέτοιο τρόπο ώστε αν τους δώσουμε συγκεκριμένες τιμές θα δίνουν πάντα, αφού επικρατήσει η ισορροπία, συστήματα που ταυτίζονται μακροσκοπικά. Άρα μπορούν να αξιοποιηθούν ώστε να αναπαράξουν μία κατάσταση του αερίου. Προφανώς αυτό που αναπαράγεται είναι το macrostate και όχι το microstate, καθώς υπάρχουν άπειρα διαφορετικά microstate που αντιστοιχούν στο ίδιο macrostate.

Έστω ότι χωρίζουμε το σύστημα  $\Sigma$ , σε δύο υποσυστήματα  $\Sigma_1$  και  $\Sigma_2$ , τοποθετώντας ένα τοίχος διαχωρίζοντας το δοχείο. Κάθε υποσύστημα είναι ίδιου τύπου με το αρχικό σύστημα και διαφέρει από αυτό ως προς τις τιμές των μεταβλητών  $(U^m, V^m, N^m)$ ,  $m = 1, 2$ . Παρατηρούμε ότι η συνολική ενέργεια  $U$ , συνολικός όγκος  $V$  και συνολικός αριθμός σωματιδίων  $N$  του συστήματος ικανοποιούν:

$$U = U^1 + U^2, \quad V = V^1 + V^2, \quad N = N^1 + N^2 \quad (1.1)$$

Μεταβλητές με αυτήν την ιδιότητα ονομάζονται **εκτατικές**.<sup>2</sup>

Παρατηρούμε ότι η περιγραφή του συστήματος  $\Sigma$  που αποτελείται από δύο υποσυστήματα  $\Sigma_1$  και  $\Sigma_2$  χρειάζεται 6 μεταβλητές ώστε να περιγραφεί  $(U^1, V^1, N^1, U^2, V^2, N^2)$ . Μαζί με ένα

<sup>1</sup>Υποθέτουμε ότι το δοχείο είναι αρκετά μεγάλο και ότι το σχήμα του είναι «εύκολο» (π.χ. κύβος) ώστε να μην επηρεάζει τη μακροσκοπική συμπεριφορά του αερίου και μπορούμε να αγνοήσουμε τις συνοριακές επιδράσεις.

<sup>2</sup>Η ταυτότητα δεν ισχύει ακριβώς για την ενέργεια και αυτό οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο υποσυστημάτων. Παρόλα αυτά, η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι συνήθως αμελητέα ποσότητα σε σύγκριση με τη συνολική ενέργεια (εξαιρέση γίνεται στην παρουσία *long – range* αλληλεπιδράσεων όπως είναι η βαρυτική δύναμη).

τέτοιο σύστημα θα χρησιμοποιούμε μαζί και το σύνολο των μεταβλητών που απαιτείται για την περιγραφή του, το οποίο δεν είναι μοναδικό.

Μια βασική ιδιότητα της ισορροπίας είναι ότι όταν ένα σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία, κάθε μακροσκοπικό υποσύστημα βρίσκεται και αυτό σε ισορροπία και κάθε υποσύστημα βρίσκεται σε ισορροπία με τα υπόλοιπα. Έστω ότι το σύστημα  $\Sigma$  που αποτελείται από δύο υποσυστήματα  $\Sigma_1$  και  $\Sigma_2$  με όγκους  $V^1$  και  $V^2$ , τότε οι **θερμοδυναμικές ιδιότητες** κάθε υποσυστήματος δεν αλλάζουν με την πάροδο του χρόνου, δηλαδή η ενέργεια και ο αριθμός των σωματιδίων που περιέχουν παραμένουν σταθερά<sup>3</sup>.

Υποθέτουμε ότι τα  $S_1$  και  $S_2$  είναι εξαρχής απομακρυσμένα το ένα από το άλλο (χωρίς καμία επαφή), απομονωμένα και σε ισορροπία. Η αρχική κατάσταση του συστήματος, δηλαδή η ένωση των δύο υποσυστημάτων, αναπαριστάται από  $(X^1, X^2)$  όπου  $X^m = (U^m, V^m, N^m)$  είναι το macrostate του  $\Sigma_m$ ,  $m=1,2$ . Έστω ότι τα υποσυστήματα έρχονται σε επαφή, και ανταλλάσσουν ενέργεια ή σωματίδια ή και τα δύο, ενώ ταυτόχρονα τα κρατάμε σαν σύνολο απομονωμένα από το υπόλοιπο περιβάλλον (συγκεκριμένα με συνολική ενέργεια  $U$ , συνολικό όγκο  $V$  και αριθμό σωματιδίων  $N$  σταθερό). Από τη στιγμή που έρχονται σε επαφή, στο συνολικό σύστημα γίνεται μία ανακατανομή της ενέργειας και του αριθμού των σωματιδίων μεταξύ των υποσυστημάτων και το θεμελιώδες ερώτημα που εμφανίζεται είναι «να προσδιοριστεί ποιο νέο equilibrium macrostate  $(\bar{X}^1, \bar{X}^2)$  πραγματοποιείται και πώς συνδέεται με το αρχικό ζεύγος  $(X^1, X^2)$ »;

Το **θεμελιώδες αξίωμα της Θερμοδυναμικής στην ισορροπία** είναι να θεωρήσουμε την ύπαρξη μια συνάρτησης, συσχετιζόμενη με ένα σύστημα  $\Sigma$ , που περιγράφει πως η νέα κατάσταση στην ισορροπία επιλέγεται ανάμεσα στις *a priori* άπειρες επιλογές. Αυτή η συνάρτηση καλείται **εντροπία**.

## 1.1.2 Θερμοδυναμική Εντροπία

Θεωρούμε  $\Sigma$  ένα σύστημα που αποτελείται από την ένωση δύο υποσυστημάτων  $\Sigma_1, \Sigma_2$  και σε αυτά τα υποσυστήματα έχουμε επιβάλλει κάποιους περιορισμούς τους οποίους μοντελοποιούμε με ένα σύνολο  $\mathbb{X}_c$  με επιτρεπτά ζεύγη  $(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2)$  (που αποτελούν τις αρχικές μακροσκοπικές καταστάσεις των υποσυστημάτων  $\Sigma_1, \Sigma_2$   $X^m = (U^m, V^m, N^m)$   $m = 1, 2$ ). Θεωρούμε επίσης πως το σύστημα διαλέγει ένα ζεύγος  $(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2) \in \mathbb{X}_c$  για να πραγματοποιηθεί η ισορροπία (με κάποιον βέλτιστο τρόπο). Το **βασικό αξίωμα της Θερμοδυναμικής** είναι ότι ο τρόπος επιλογής αυτού του ζεύγους γίνεται ώστε να μεγιστοποιείται η εντροπία.

### Αξίωμα 1.1.1. (Θερμοστατικής)

Σε κάθε σύστημα  $\Sigma$ , που περιγράφεται από ένα σύνολο μεταβλητών  $\mathbf{X}$ , «συσχετίζουμε» μία διαφορίσιμη συνάρτηση  $S^\Sigma(\mathbf{X})$ , η οποία καλείται **(θερμοδυναμική) εντροπία** και είναι συγκεκριμένη για κάθε σύστημα. Η εντροπία ενός συστήματος  $\Sigma$ , που απαρτίζεται από δύο υποσυστήματα  $\Sigma_1, \Sigma_2$  είναι προσθετική:

$$S^\Sigma(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2) = S^{\Sigma_1}(\mathbf{X}^1) + S^{\Sigma_2}(\mathbf{X}^2) \quad (1.2)$$

<sup>3</sup>Αυτό δεν ισχύει για την μικροσκοπική κατάσταση καθώς ο αριθμός σωματιδίων σε κάθε υποσύστημα διακυμάνεται αφού τα σωματίδια πηγαινούν από το ένα υποσύστημα στο άλλο. Όμως αυτές οι διακυμάνσεις είναι μικρής κλίμακας και θεωρούνται αμελητέες στη θερμοδυναμική.

Όταν τα υποσυστήματα βρίσκονται σε επαφή, το ζεύγος  $(\bar{X}^1, \bar{X}^2)$  που πραγματοποιεί την ισορροπία είναι αυτό που μεγιστοποιεί την εντροπία, ανάμεσα σε όλα τα ζεύγη  $(X^1, X^2) \in \mathbb{X}_c$ .

**Σχόλιο 1.1.1.** Έχουμε ότι:

- Η αρχή με την οποία ένα σύστημα (με περιορισμούς) «πραγματοποιεί» την κατάσταση ισορροπίας μέσω της μεγιστοποίησης της εντροπίας καλείται **extremum principle**.
- Η συνάρτηση της εντροπίας είναι χαρακτηριστική του συστήματος που θεωρούμε. Είναι φανερό ότι εξαρτάται από τις μεταβλητές που περιγράφουν το σύστημα (άμα θεωρητικά χωρίσουμε το σύστημα  $\Sigma$  σε  $\Sigma_1, \Sigma_2$  και έχουμε 6 μεταβλητές τότε έχουμε διαφορετικές συναρτήσεις εντροπίας ενώ το φυσικό σύστημα είναι το ίδιο). Όμως άμα θεωρήσουμε δύο συστήματα  $\Sigma_1, \Sigma_2$  του ίδιου τύπου που περιγράφονται από τις ίδιες μεταβλητές (χωρίς να παίρνουν τις ίδιες τιμές) προκύπτει ότι  $S^{\Sigma_1} = S^{\Sigma_2}$ .
- Παρόλο που οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του συστήματος «περιέχονται» εξολοκλήρου στην συνάρτηση εντροπίας, η θερμοδυναμική δεν παρέχει τα εργαλεία ώστε να διευκρινίσουμε ποια είναι η συνάρτηση για κάθε σύστημα (παρόλο που μπορούμε να την υπολογίσουμε εμπειρικά).

Θα χρησιμοποιήσουμε το Αξίωμα και θα ορίσουμε μέσα από κάποια παραδείγματα τις βασικές ποσότητες που εμφανίζονται στην θερμοδυναμική.

**Παράδειγμα 1.1.** Έστω σύστημα  $\Sigma$  χωρισμένο σε δύο υποσυστήματα  $\Sigma_1, \Sigma_2$  με όγκους  $V_1, V_2$ . Αρχικά έχουν ενέργειες  $U_1, U_2$  και σωματίδια  $N_1, N_2$ . Υποθέτουμε ότι τα δύο συστήματα επικοινωνούν με τέτοιο τρόπο ώστε να **ανταλλάσσεται ενέργεια** και όχι σωματίδια (θεωρούμε ότι το τοίχωμα είναι ακίνητο).

**Περιορισμοί:**

- $V_1, V_2$  σταθερά
- $N_1, N_2$  σταθερά
- $U_1, U_2$  (μεταβλητά) τέτοια ώστε  $U = U_1 + U_2$

Άρα το πρόβλημα είναι να προσδιορίσουμε τις τιμές  $(\bar{U}_1, \bar{U}_2)$  της ενέργειας κάθε υποσυστήματος όταν φτάσουμε στην ισορροπία. Αφού  $V_1, V_2, N_1, N_2$  σταθερά από την αρχή, χρησιμοποιώντας το Αξίωμα, οι τιμές  $(\bar{U}_1, \bar{U}_2)$  προκύπτουν από τη μεγιστοποίηση:

$$\begin{aligned} (\bar{U}_1, \bar{U}_2) &\rightarrow S(\bar{U}_1, V_1, N_1) + S(\bar{U}_2, V_2, N_2) \\ &= S(\bar{U}_1, V_1, N_1) + S(U - \bar{U}_1, V_2, N_2). \end{aligned}$$

Άρα η ισορροπία πραγματοποιείται όταν το  $\bar{U}_1$  ικανοποιεί:

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{\partial S}{\partial \bar{U}_1}(\bar{U}_1, V_1, N_1) + \frac{\partial S}{\partial \bar{U}_1}(U - \bar{U}_1, V_2, N_2) \right\} \Big|_{\bar{U}=\bar{u}_1} = 0 \\ \Rightarrow &\frac{\partial S}{\partial \bar{U}_1}(\bar{U}_1, V_1, N_1) + \frac{\partial S}{\partial \bar{U}_1}(U - \bar{U}_1, V_2, N_2) \frac{\partial(U - \bar{U}_1)}{\partial \bar{U}_1} = 0 \\ \Rightarrow &\frac{\partial S}{\partial \bar{U}_1}(\bar{U}_1, V_1, N_1) - \frac{\partial S}{\partial \bar{U}_1}(U - \bar{U}_1, V_2, N_2) = 0 \end{aligned}$$

με  $\tilde{U} = \bar{U}_1$ .

Άρα τα  $\bar{U}_1, \bar{U}_2$  πρέπει να ικανοποιούν

$$\frac{\partial S}{\partial U}(\bar{U}_1, V_1, N_1) = \frac{\partial S}{\partial U}(\bar{U}_2, V_2, N_2)$$

**Ορισμός 1.1.1.** Η ποσότητα

$$\beta \stackrel{def}{=} \left( \frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V,N} \quad (1.3)$$

καλείται *inverse (absolute) temperature*. Η *absolute temperature* καθορίζεται από  $T \stackrel{def}{=} \frac{1}{\beta}$ .

**Παρατήρηση 1.1.** Όταν δύο συστήματα, απομονωμένα με τον εξωτερικό χώρο με τέτοιον τρόπο ώστε να επικοινωνούν μεταξύ τους και να ανταλλάσσουν μόνο ενέργεια, φτάσουν σε ισορροπία οι θερμοκρασίες τους θα είναι ίσες.

**Σχόλιο 1.1.2.** Είναι εμπειρικά επιβεβαιωμένο ότι η θερμοκρασία ορισμένη κατά αυτόν τον τρόπο είναι θετική και άρα η συνάρτηση εντροπίας είναι μία αύξουσα συνάρτηση της ενέργειας<sup>4</sup>. Άρα θεωρούμε από εδώ και πέρα ότι η  $S(U, V, N)$  είναι αύξουσα συνάρτηση ως προς  $U$ :

$$\left( \frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V,N} > 0 \quad (1.4)$$

**Παράδειγμα 1.2.** Θεωρούμε ότι στο προηγούμενο παράδειγμα το διαχωριστικό τοίχωμα μπορεί να κινηθεί. Σε αυτήν την περίπτωση ο αριθμός των σωματιδίων του κάθε υποσυστήματος  $N_1, N_2$  παραμένει σταθερός ενώ ο όγκος μεταβάλλεται.

**Περιορισμοί:**

- $N_1, N_2$  σταθερά
- $V_1, V_2$  (μεταβλητά) τέτοια ώστε  $V = V_1 + V_2$
- $U_1, U_2$  (μεταβλητά) τέτοια ώστε  $U = U_1 + U_2$

Άρα όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα το πρόβλημα είναι να προσδιορίσουμε τις τιμές  $(\bar{U}_1, \bar{U}_2, \bar{V}_1, \bar{V}_2)$  που μεγιστοποιούν τη συνάρτηση εντροπίας.

$$\begin{aligned} (\bar{U}_1, \bar{U}_2) &\rightarrow S(\bar{U}_1, \bar{V}_1, N_1) + S(\bar{U}_2, \bar{V}_2, N_2) \\ &= S(\bar{U}_1, \bar{V}_1, N_1) + S(U - \bar{U}_1, V - \bar{V}_1, N_2) \end{aligned}$$

Όπως και πριν έχουμε:

$$\left. \left\{ \frac{\partial S}{\partial \tilde{U}_1}(\tilde{U}_1, \bar{V}_1, N_1) + \frac{\partial S}{\partial \tilde{U}_1}(U - \tilde{U}_1, V - \bar{V}_1, N_2) \right\} \right|_{\tilde{U}=\bar{U}_1} = 0$$

$$\left. \left\{ \frac{\partial S}{\partial \tilde{U}_1}(\tilde{U}_1, \bar{V}_1, N_1) + \frac{\partial S}{\partial \tilde{U}_1}(U - \tilde{U}_1, V - \bar{V}_1, N_2) \right\} \right|_{\tilde{V}=\bar{V}_1} = 0$$

<sup>4</sup>Υπάρχουν ειδικές περιπτώσεις που η θερμοκρασία μπορεί να πάρει αρνητικές τιμές αλλά δεν θα εξετασθούν στα πλαίσια της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας.

Άρα καταλήγουμε ότι στην ισορροπία ισχύει:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial U}(\bar{U}_1, \bar{V}_1, N_1) &= \frac{\partial S}{\partial U}(\bar{U}_2, \bar{V}_2, N_2) \\ \frac{\partial S}{\partial V}(\bar{U}_1, \bar{V}_1, N_1) &= \frac{\partial S}{\partial V}(\bar{U}_2, \bar{V}_2, N_2)\end{aligned}$$

**Ορισμός 1.1.2.** Η ποσότητα

$$p \stackrel{\text{def}}{=} T \cdot \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_{U,N} \quad (1.5)$$

καλείται **πίεση**.

**Παρατήρηση 1.2.** Όταν δύο συστήματα, απομονωμένα με τον εξωτερικό χώρο με τέτοιο τρόπο ώστε να επικοινωνούν μεταξύ τους και να ανταλλάσσουν ενέργεια και όγκο, φτάσουν σε ισορροπία οι θερμοκρασίες και οι πιέσεις τους θα είναι ίσες.

**Παράδειγμα 1.3.** Για το τρίτο και τελευταίο παράδειγμα υποθέτουμε ότι το σύστημα αποτελείται από δύο υποσυστήματα που χωρίζονται από έναν ανένδοτο ακίνητο τοίχο, και επιτρέπεται η ανταλλαγή ενέργειας και σωματιδίων.

**Περιορισμοί:**

- $N_1, N_2$  σταθερά (μεταβλητά) τέτοια ώστε  $N = N_1 + N_2$
- $V_1, V_2$  σταθερά
- $U_1, U_2$  (μεταβλητά) τέτοια ώστε  $U = U_1 + U_2$

Άρα καταλήγουμε ότι στην ισορροπία τα  $(\bar{U}_1, \bar{U}_2, \bar{N}_1, \bar{N}_2)$  ικανοποιούν:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial U}(\bar{U}_1, V_1, \bar{N}_1) &= \frac{\partial S}{\partial U}(\bar{U}_2, V_2, \bar{N}_2) \\ \frac{\partial S}{\partial V}(\bar{U}_1, V_1, \bar{N}_1) &= \frac{\partial S}{\partial V}(\bar{U}_2, V_2, \bar{N}_2)\end{aligned}$$

**Ορισμός 1.1.3.** Η ποσότητα

$$\mu \stackrel{\text{def}}{=} -T \left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_{U,V} \quad (1.6)$$

καλείται **chemical potential** (το αρνητικό πρόσημο, και το  $T$  στην (1.6) είναι μια σύμβαση).

**Παρατήρηση 1.3.** Όταν δύο συστήματα, απομονωμένα με τον εξωτερικό χώρο με τέτοιο τρόπο ώστε να επικοινωνούν μεταξύ τους και να ανταλλάσσουν ενέργεια και σωματίδια, φτάσουν σε ισορροπία οι θερμοκρασίες και τα chemical potential τους θα είναι ίσα.

**Παρατήρηση 1.4.** Εμείς δείξαμε την αρχή της θερμοστατικής για μια ειδική περίπτωση (ένα αέριο σε ένα δοχείο ή ένα σύστημα χωρισμένο σε δύο υποσυστήματα) αλλά γενικεύεται για οποιοδήποτε θερμοδυναμικό σύστημα. Επίσης παρόλο που ορίσαμε τις (1.3), (1.5), (1.6) μέσα από ειδικές περιπτώσεις, αυτές ισχύουν και αποτελούν τους ορισμούς της θερμοκρασίας, πίεσης και του chemical potential για οποιοδήποτε σύστημα που χαρακτηρίζεται από τις μεταβλητές  $U, V, N$  (και άλλες) και η συνάρτηση εντροπίας είναι γνωστή.

### 1.1.3 Συζυγείς εντατικές ποσότητες και εξισώσεις κατάστασης

Η θερμοκρασία, η πίεση και το chemical potential ορίζονται μέσω μερικής παραγώγου της συνάρτησης εντροπίας  $S$

$$\frac{\partial S}{\partial U}, \frac{\partial S}{\partial V}, \frac{\partial S}{\partial N}$$

αντίστοιχα. Γενικότερα αν  $X_i$  μια εκτατική μεταβλητή που εμφανίζεται στο  $S$ , τότε ορίζουμε την

$$f_i \stackrel{def}{=} \frac{\partial S}{\partial X_i}$$

η οποία καλείται συζυγή μεταβλητή του  $X_i$  (*variable conjugate* του  $X_i$ ).

Η συζυγή μεταβλητή του  $X_i$  σε αντίθεση με τα  $U, V, N$  δεν είναι εκτατική αλλά **εντατική**, δηλαδή παραμένει ίδια παρά την ολική μεταβολή της κλίμακας του συστήματος. Μαθηματικά αυτό το εκφράζουμε ως εξής:  $\forall \lambda > 0$

$$\begin{aligned} T(\lambda U, \lambda V, \lambda N) &= T(U, V, N) \\ p(\lambda U, \lambda V, \lambda N) &= p(U, V, N) \\ \mu(\lambda U, \lambda V, \lambda N) &= \mu(U, V, N) \end{aligned}$$

Δηλαδή τα  $T, p, \mu$  είναι **positively homogeneous of degree 0**.

Παραγωγίζουμε και τα δύο μέλη της σχέσης  $S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N)$  ως προς  $\lambda$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial(\lambda S(U, V, N))}{\partial \lambda} = S(U, V, N) \\ \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial(\lambda U)} \left( \frac{\partial(\lambda U)}{\partial \lambda} \right) \\ &+ \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial(\lambda V)} \left( \frac{\partial(\lambda V)}{\partial \lambda} \right) \\ &+ \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial(\lambda N)} \left( \frac{\partial(\lambda N)}{\partial \lambda} \right) \\ \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial(\lambda U)} (U) \\ &+ \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial(\lambda V)} (V) \\ &+ \frac{\partial S(\lambda U, \lambda V, \lambda N)}{\partial(\lambda N)} (N) \end{aligned}$$

Για  $\lambda=1$  έχουμε:

$$S(U, V, N) = \frac{\partial S(U, V, N)}{\partial(U)}(U) + \frac{\partial S(U, V, N)}{\partial(V)}(V) + \frac{\partial S(U, V, N)}{\partial(N)}(N).$$

Όμως γνωρίζουμε από το κεφάλαιο 1.1.2 ότι  $T = \frac{1}{\beta}$  και

$$\begin{aligned} \beta &= \left( \frac{\partial S(U, V, N)}{\partial(U)} \right)_{V, N} \\ p &= T \left( \frac{\partial S(U, V, N)}{\partial(V)} \right)_{U, N} \\ \mu &= -T \left( \frac{\partial S(U, V, N)}{\partial(N)} \right)_{U, V} \end{aligned}$$

Άρα προκύπτει ότι:

$$S(U, V, N) = \frac{1}{T}U + \frac{p}{T}V - \frac{\mu}{T}N. \quad (1.7)$$

Η εξίσωση (1.7) ονομάζεται **σχέση Euler** και μας δίνει τη δυνατότητα να ανακατασκευάσουμε τη συνάρτηση εντροπίας γνωρίζοντας τη συναρτησιακή εξάρτηση των  $(T, p, \mu)$  από τα  $(U, V, N)$ .

$$T = T(U, V, N) \quad p = p(U, V, N) \quad \mu = \mu(U, V, N) \quad (1.8)$$

Οι σχέσεις που εμφανίζονται στην (1.8) ονομάζονται **εξισώσεις κατάστασης**.

### 1.1.4 Πυκνότητες

Χρησιμοποιώντας την ιδιότητα της ομοιογένειας της συνάρτησης της εντροπίας ( $S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N)$ ) έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{1}{V} &\implies S(U, V, N) = VS \left( \frac{U}{V}, 1, \frac{N}{V} \right) \\ \lambda = \frac{1}{N} &\implies S(U, V, N) = NS \left( \frac{U}{N}, \frac{V}{N}, 1 \right) \end{aligned} \quad (1.9)$$

Παρατηρούμε ότι όταν χρησιμοποιούμε πυκνότητες, η εντροπία μπορεί να θεωρηθεί ως πυκνότητα και ως συνάρτηση δύο μεταβλητών.

Για παράδειγμα αν εισάγουμε τις έννοιες **Energy Density**  $u \stackrel{def}{=} \frac{U}{V}$ , **Particle Density**  $\rho \stackrel{def}{=} \frac{N}{V}$  η πρώτη σχέση της (1.9) γράφεται ως

$$s(u, \rho) \stackrel{def}{=} \frac{1}{V} S(uV, V, \rho V) \quad (1.10)$$

και ονομάζεται **Entropy Density**.

Διαφορετικά χρησιμοποιώντας τις έννοιες **Energy per particle**  $e \stackrel{def}{=} \frac{U}{N}$ , **Volume per particle**  $v \stackrel{def}{=} \frac{V}{N}$  η δεύτερη σχέση της (1.9) γράφεται ως

$$s(e, v) \stackrel{def}{=} \frac{1}{N} S(eN, vN, N)$$

και ονομάζεται **Entropy per particle**. Ειδικότερα η παράγωγος της **Entropy per particle** ικανοποιεί

$$ds = \frac{\partial s}{\partial e} de + \frac{\partial s}{\partial v} dv = \frac{1}{T} de + \frac{p}{T} dv \quad (1.11)$$

Άρα η εντροπία μπορεί να κατασκευαστεί από τη γνώση δύο από των τριών εξισώσεων κατάστασης. (Αυτό μας δείχνει ότι οι εξισώσεις κατάστασης δεν είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους.)

**Παράδειγμα (ιδεατό αέριο)** Έστω ένα αέριο που αποτελείται από  $N$  σωματίδια, με όγκο  $V$  και θερμοκρασία  $T$ . Ένα ιδεατό αέριο είναι ένα αέριο το οποίο στην ισορροπία περιγράφεται από δύο εξισώσεις κατάστασης:

$$pV = RNT$$

$$U = cRNT$$

όπου

- $c$ : σταθερά θερμοχωρητικότητας (εξαρτάται από το αέριο),
- $R$ : universal constant =  $8.3144621 \text{ Jm}^{-1} \text{ K}^{-1}$

Σχόλιο: Το ιδεατό αέριο δεν υπάρχει στην πραγματικότητα, αλλά σχεδόν όλα τα αέρια ικανοποιούν κατά προσέγγιση την πρώτη σχέση κατάστασης όταν:

- η θερμοκρασία δεν είναι τόσο χαμηλή,
- η πυκνότητα των σωματιδίων είναι αρκετά μικρή.

Όταν εκφράσουμε το ιδεατό αέριο ως συνάρτηση του  $v = \frac{V}{N}$ , τότε η πρώτη εξίσωση κατάστασης γράφεται:

$$pv = RT \quad (1.12)$$

Ισοθερμία: Πραγματοποιείται όταν θέσουμε μια τιμή στη θερμοκρασία  $T$  και μελετήσουμε το  $p$  ως συνάρτηση του  $v \implies p = RT \frac{1}{v}$ .

Θα δούμε τώρα πως από τις εξισώσεις κατάστασης μπορούμε να βρούμε τη συνάρτηση της εντροπίας του συστήματος. Αρχικά γράφουμε τις εξισώσεις κατάστασης ως εξής:

$$\frac{p}{T} = R \frac{N}{V} = \frac{R}{v}$$

$$\frac{1}{T} = cR \frac{N}{U} = \frac{cR}{e}$$



Άρα η (1.11) γράφεται:

$$ds = \frac{cR}{e} de + \frac{R}{v} dv$$

Ολοκληρώνοντας την τελευταία έχουμε:

$$\begin{aligned} S(e, v) - S_0 &= cR \left( \log \left( \frac{e}{e_0} \right) \right) + R \log \left( \frac{v}{v_0} \right) \\ S(U, V, N) - NS_0 &= NcR \left( \log \left( \frac{\left( \frac{U}{N} \right)}{\left( \frac{U_0}{N_0} \right)} \right) \right) + NR \left( \log \left( \frac{\left( \frac{V}{N} \right)}{\left( \frac{V_0}{N_0} \right)} \right) \right) \\ S(U, V, N) - NS_0 &= NR \left( \left( \log \left( \frac{U}{U_0} \right)^c \left( \frac{N}{N_0} \right)^{-c} \right) \right) + NR \left( \left( \log \left( \frac{V}{V_0} \right) \left( \frac{N}{N_0} \right)^{-1} \right) \right) \\ S(U, V, N) - NS_0 &= NR \left( \left( \log \left( \frac{U}{U_0} \right)^c \left( \frac{N}{N_0} \right)^{-c} \right) + \left( \log \left( \frac{V}{V_0} \right) \left( \frac{N}{N_0} \right)^{-1} \right) \right) \\ S(U, V, N) &= NS_0 + NR \left( \log \left( \left( \frac{U}{U_0} \right)^c \left( \frac{V}{V_0} \right) \left( \frac{N}{N_0} \right)^{-(c+1)} \right) \right) \end{aligned}$$

όπου  $e_0, v_0$  είναι κάποια σημεία αναφοράς, το  $S_0$  είναι ακαθόριστη σταθερά ολοκλήρωσης.

### Σχόλιο:

- Είναι βολικό να περιγράψουμε συστήματα με τη χρήση συγκεκριμένων μεταβλητών. Στην περίπτωση του αερίου είναι πιο εύκολο να ελέγξουμε την πίεση και τη θερμοκρασία από ότι τον όγκο και την εσωτερική ενέργεια.
- Αργότερα θα καταλήξουμε στην (1.12) χρησιμοποιώντας τον φορμαλισμό της στατιστικής μηχανικής.

## 1.1.5 Διαφορετικές αναπαραστάσεις, θερμοδυναμικά potentials και η υπόθεση Van der Waals.

Θα παρουσιάσουμε πως ένα διαφορετικό σύνολο θερμοδυναμικών μεταβλητών μας δίνει διαφορετική αναπαράσταση του συστήματος. Θα παρουσιάσουμε δύο σύνολα που θα μας φανούν χρήσιμα αργότερα όταν στο προσκήνιο έχουμε την στατιστική μηχανική.

**Οι μεταβλητές  $(\beta, V, N)$ .** Θέλουμε να αναπαραστήσουμε το σύστημα που χαρακτηρίζεται από το σύνολο  $(\beta, V, N)$ , δηλαδή αντικαθιστούμε την ενέργεια  $U$  με τη συζυγή ποσότητα  $\beta$ . Για να έχουμε σταθερή θερμοκρασία πρέπει να επιτρέψουμε στο σύστημα να ανταλλάσσει ενέργεια και άρα δεν βρίσκεται πλέον στην ισορροπία. Δηλαδή θεωρούμε ότι βρίσκεται σε επαφή με ένα θερμικό απόθεμα σταθερής θερμοκρασίας  $1/\beta$  με το οποίο ανταλλάσει μόνο ενέργεια.

Θεωρούμε ότι το σύστημα  $\Sigma$  βρίσκεται σε επαφή με ένα πολύ μεγαλύτερο σύστημα  $\Sigma_R$ , το οποίο αναπαριστά το θερμικό απόθεμα. Άρα και τα δύο συστήματα  $\Sigma$ ,  $\Sigma_R$  έχουν την ίδια αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$ . Το συνολικό σύστημα  $\Sigma_{tot}$ , ενέργειας  $U_{tot}$ , θεωρείται απομονωμένο. Συμβολίζουμε με  $U$  την ενέργεια του  $\Sigma$ , και τετριμμένα η ενέργεια του αποθέματος  $U_{tot} - U$ . Υποθέτουμε ότι το θερμικό απόθεμα είναι πολύ μεγαλύτερο από το  $\Sigma$  ώστε οι εντατικές ποσότητες  $\beta_R = \beta, p_R$  και  $\mu_R$  να παραμένουν σταθερές. Από την σχέση Euler (1.7) προκύπτει ότι η εντροπία του αποθέματος είναι:

$$\Sigma^R(U_{tot} - U) = \beta_R U_R + \beta_R p_R V_R - \beta_R \mu_R N_R = \beta(U_{tot} - U) + \beta p_R V_R - \beta \mu_R N_R.$$

Είναι φανερό πως ο μόνος όρος της παράστασης που εξαρτάται από το  $\Sigma$  είναι το  $-\beta U$ .

Για να βρούμε την τιμή  $\bar{U}$  για την οποία έχουμε ισορροπία, πρέπει να μεγιστοποιήσουμε την ολική εντροπία. Συμβολίζουμε μόνο την εξάρτηση της εντροπίας από το  $U$  καθώς οι υπόλοιπες ποσότητες είναι σταθερές.

$$S^{tot}(U_{tot}, \bar{U}) = \sup_U \{S^\Sigma(U) + S^R(U_{tot} - U)\}$$

το οποίο είναι ισοδύναμο με την αναζήτηση της τιμής  $\hat{U}$  που πραγματοποιεί το infimum

$$\hat{F}^\Sigma(\beta) \stackrel{def}{=} \inf_U \{\beta U - S^\Sigma(U)\}.$$

Άρα μπορούμε γενικεύοντας να θεωρήσουμε ότι η

$$\hat{F}(\beta, V, N) \stackrel{def}{=} \inf_{U, V, N} \{\beta U - S(U, V, N)\} \quad (1.13)$$

έχει ανάλογο ρόλο με αυτόν της εντροπίας όταν η θερμοκρασία είναι σταθερή. Το θερμοδυναμικό potential  $F(T, V, N) \stackrel{def}{=} T\hat{F}(1/T, V, N)$  καλείται **Helmholtz free energy**.

**Οι μεταβλητές**  $(\beta, V, \mu)$ . Με ανάλογο τρόπο αναλύουμε το σύστημα που χαρακτηρίζεται από τις μεταβλητές  $(\beta, V, \mu)$ . Ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να ανταλλάσει και ενέργεια και σωματίδια με το απόθεμα. Το θερμοδυναμικό potential που αντιστοιχεί στις μεταβλητές  $\beta, V, \hat{\mu} \stackrel{def}{=} -\frac{\mu}{T}$  ορίζεται ως

$$\hat{\Phi}_G(\beta, V, \hat{\mu}) \stackrel{def}{=} \inf_{U, N} \{\beta U + \hat{\mu} N - S(U, V, N)\} \quad (1.14)$$

όπου η συνάρτηση  $\hat{\Phi}_G(\frac{1}{T}, V, -\frac{\mu}{T})$  καλείται grand potential. Γράφουμε

$$\Phi_G = U - \mu N - TS \quad (1.15)$$

Χρησιμοποιούμε την εξίσωση Euler  $TS = U + pV - \mu N$  και γράφουμε:

$$\Phi_G = -pV \quad (1.16)$$

και παρατηρούμε ότι η  $-\Phi_G/V$  συμπίπτει με την πίεση του μοντέλου, ως συνάρτηση του  $(T, V, \mu)$ .

Πρέπει να τονίσουμε ότι η περιγραφή ενός συστήματος δεδομένου ενός συνόλου μεταβλητών που δίνουν διαφορετικές αναπαραστάσεις, μας δίνει το ίδιο αποτέλεσμα στην ισορροπία. Αν δηλαδή περιγράψουμε το microstate με την χρήση των μεταβλητών  $(U, V, N)$  και υπολογίσουμε την τιμή του  $\beta$  στην ισορροπία, τότε για το macrostate  $(\beta, V, N)$  (για την παραπάνω τιμή  $\beta$ ) αν υπολογίσουμε την τιμή της ενέργειας θα είναι  $U$ .

Ο Van der Waals κατάφερε να κατασκευάσει μια νέα εξίσωση κατάστασης που παρουσιάζει σημαντικές αποκλίσεις από την κατάσταση του ιδανικού αερίου και περιγράφει ικανοποιητικά την συμπεριφορά του αερίου στην περίπτωση όπου το σύστημα είναι ομογενές. Αυτό έγινε εφικτό με την υπόθεση που έκανε για τη μικροσκοπική δομή του συστήματος, δηλαδή:

- Το αέριο αποτελείται από μικροσκοπικά συστατικά, τα σωματίδια. Τα σωματίδια βρίσκονται τοποθετημένα στο χώρο και σε μικρές αποστάσεις, τα σωματίδια απωθούν το ένα το άλλο.
- Σε μεγάλες αποστάσεις, τα σωματίδια προκαλούν έλξη το ένα στο άλλο.

Παρόλο που η περιγραφή αυτή αποτυγχάνει να περιγράψει τη συμπεριφορά του αερίου στην περίπτωση που το σύστημα δεν είναι ομογενές, η υπόθεση που έκανε ο Van der Waals θα μας φανεί χρήσιμη στη μοντελοποίηση του μοντέλου Ising όπως θα δούμε αργότερα.

## 1.2 Στατιστική Μηχανική

Το βασικό αντικείμενο της στατιστικής μηχανικής, όπως και της θερμοδυναμικής, είναι η περιγραφή μακροσκοπικών συστημάτων. Όμως η διαφορά τους έγκειται στο γεγονός ότι η στατιστική μηχανική βασίζεται σε αναγωγικές μεθόδους που έχουν ως σκοπό να εξάγουν τις μακροσκοπικές ιδιότητες του συστήματος από τις μικροσκοπικές περιγραφές που δίνονται από τους βασικούς νόμους της φυσικής. Η στατιστική μηχανική ξεκίνησε στο δεύτερο μισό του 19ου αιώνα με βασικούς συντελεστές τον Gibbs (με την διάσημη εργασία του που δημοσιεύτηκε το 1902 [2]), τον Maxwell και Boltzmann.

Λόγω του μεγάλου αριθμού παραμέτρων, στη μικροσκοπική κατάσταση, που χρειάζονται για την περιγραφή ενός συστήματος, η προσέγγιση από τη μεριά της στατιστικής μηχανικής γίνεται με τη χρήση εργαλείων από τη θεωρία πιθανοτήτων. Πιο συγκεκριμένα εγκαταλείπουμε την προσπάθεια ντετερμινιστικής περιγραφής του συστήματος και αναζητούμε μια κατανομή πιθανότητας στο σύνολο όλων των μικροκαταστάσεων, που μας δίνει τα ίδια αποτελέσματα με αυτά που έχουν παρατηρηθεί στη μακροκατάσταση. Ουσιαστικά αυτή η κατανομή μας δίνει την δυνατότητα να υπολογίσουμε την πιθανότητα ενδεχομένων που μας ενδιαφέρουν και αφορούν διάφορες ιδιότητες του φυσικού συστήματος που μελετάμε.

Η προσέγγιση αυτή βασίζεται στο γεγονός ότι η μόνη πληροφορία που έχουμε για ένα μακροσκοπικό σύστημα (στην ισορροπία) είναι η μικροσκοπική του περιγραφή, συγκεκριμένα γνωρίζουμε το σύνολο των μικροκαταστάσεων (microstate), πως να υπολογίσουμε την ενέργεια του κάθε microstate και μερικές μεταβλητές του μακροσκοπικού συστήματος (είναι οι ίδιες με αυτές που χρησιμοποιήσαμε στο κεφάλαιο της θερμοδυναμικής στην ισορροπία).

Βασίζόμενοι σε αυτή την πληροφορία προκύπτουν ορισμένα ερωτήματα σχετικά με τα microstate:

- Ποια κατανομή πιθανότητας πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για να περιγράψουμε μεγάλα συστήματα στην ισορροπία;
- Με την κατάλληλη κατανομή πιθανότητας, τι μπορεί να υποθεί για τις υπόλοιπες μακροσκοπικές μεταβλητές. Είναι πιθανό οι κατανομές τους να συγκεντρώνονται στην πιο πιθανή τιμή, και όταν το σύστημα γίνει αρκετά μεγάλο έχουμε ντετερμινιστική συμπεριφορά για αυτές τις ποσότητες;
- Μπορεί αυτή η περιγραφή να συσχετιστεί με αυτή της θερμοδυναμικής;
- Πως μπορούμε να περιγράψουμε το φαινόμενο phase transition με αυτό τον τρόπο;

Θεωρούμε ότι μας δίνονται τα βασικά στοιχεία που περιγράφουν τα χαρακτηριστικά του μικροσκοπικού συστήματος:

1. Το σύνολο  $\Omega$  των microstate, για το οποίο θεωρούμε ότι ισχύει:

$$|\Omega| < \infty \quad (1.17)$$

2. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των μικροσκοπικών συστατικών υπό τη μορφή ενέργειας  $\mathcal{H}(w)$  που εξαρτάται από ένα *microstate*  $w \in \Omega$

$$\mathcal{H} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

καλείται **Χαμιλτονιανή** του συστήματος. Ορίζουμε επίσης  $\mathcal{U} \stackrel{def}{=} \{U = \mathcal{H}(w) : w \in \Omega\}$ .

Το σύνολο των κατανομών πιθανότητας στο  $\Omega$  το αναπαριστάμε με  $\mathcal{M}_1(\Omega)$ . Αφού υποθέσαμε ότι το  $\Omega$  είναι πεπερασμένο, μία κατανομή  $\mu \in \mathcal{M}_1(\Omega)$  χαρακτηρίζεται από τη συλλογή  $(\mu(\{w\}))_{w \in \Omega}$  των πιθανοτήτων κάθε *microstate*  $w \in \Omega$  και θα θεωρούμε τη σύμβαση  $\mu(\{w\}) = \mu(w)$ .

Εξ'ορισμού αφού το  $\mu$  είναι μέτρο πιθανότητας ισχύει:

1.  $\mu(w) \geq 0 \forall w \in \Omega$
2.  $\sum_{w \in \Omega} \mu(w) = 1$ .

Καλούμε **observable** το αποτέλεσμα κάποιας μέτρησης στο σύστημα. Μαθηματικά αυτό εκφράζεται ως μία τυχαία μεταβλητή  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  και η μέση τιμή ενός observable υπό το μέτρο  $\mu(w) \in \mathcal{M}_1(\Omega)$  συμβολίζεται ως

$$\langle f \rangle_\mu \stackrel{def}{=} \sum_{w \in \Omega} f(w) \mu(w).$$

### 1.2.1 Το microcanonical ensemble

Η χρήση του όρου ensemble καθιερώθηκε για πρώτη φορά από τον Gibbs. Θεωρούμε ότι είναι συνώνυμο με την έννοια χώρου πιθανότητας. Στο υποκεφάλαιο 1.1.1 περιγράψαμε απομονωμένα συστήματα στην ισορροπία με τη χρήση εκτατικών μεταβλητών ως μακροσκοπικές μεταβλητές, όπως  $(U, V, N)$ .

Ξεκινάμε την περιγραφή (από την σκοπιά της στατιστικής μηχανικής) ενός απομονωμένου συστήματος με παρόμοιο τρόπο, θεωρώντας δηλαδή ότι οι σχετικές (διατηρητέες) ποσότητες εξαρτώνται από το σύστημα, αλλά πάντα περιέχουν την ενέργεια στην περιγραφή τους και ποσότητες όπως ο αριθμός των σωματιδίων και ο όγκος περιέχονται ήδη στο σύνολο των *microstate*.

Συμβολίζουμε με  $\Omega_{\Lambda;N}$  το σύνολο των *microstate* που περιγράφουν το σύστημα που αποτελείται από  $N$  σωματίδια μέσα σε ένα χωρίο  $\Lambda$  όγκου  $V = |\Lambda|$  και η μόνη άλλη διατηρητέα ποσότητα είναι η ενέργεια.

Θεωρούμε ότι η ενέργεια του συστήματος έχει μία σταθερή τιμή  $U$ . Αναζητούμε μία κατανομή πιθανότητας στο  $\Omega_{\Lambda;N}$  δηλαδή στο σύνολο όλων των *microstate* συμβατά με τον περιορισμό, το οποίο ονομάζουμε **energy shell**

$$\Omega_{\Lambda;U;N} \stackrel{def}{=} \{w \in \Omega_{\Lambda;N} : \mathcal{H}(w) = U\}.$$

Αν θεωρήσουμε ότι μόνο αυτές τις πληροφορίες έχουμε για το σύστημα τότε με χρήση του **Laplace's Principle of Insufficient Reason**<sup>5</sup> είναι φυσικό να καταλήξουμε στο συμπέρασμα

<sup>5</sup> Αρχή ανεπαρκούς αιτιολόγησης: Ίσες πιθανότητες πρέπει να αποδοθούν σε κάθε "ανταγωνιστική" υπόθεση αν δεν υπάρχει ισχυρισμός που να τις διαφοροποιεί ως προς την πιθανότητα.

ότι όλα τα microstate  $\omega \in \Omega_{\Lambda;U;N}$  έχουν την ίδια πιθανότητα και η ομοιόμορφη κατανομή είναι η κατάλληλη να περιγράψει την πληροφορία που έχουμε για το σύστημα.

**Ορισμός 1.2.1.** Έστω  $U \in \mathcal{U}$ . Η *microcanonical distribution* (με ενέργεια  $U$ ),  $\nu_{\Lambda;U;N}^{Mic}$ , που αφορά στο σύστημα που αποτελείται από  $N$  σωματίδια σε ένα χωρίο  $\Lambda$  είναι η ομοιόμορφη κατανομή πιθανότητας συγκεντρωμένη στο  $\Omega_{\Lambda;U;N}$

$$\nu_{\Lambda;U;N}^{Mic}(\omega) \stackrel{def}{=} \begin{cases} \frac{1}{|\Omega_{\Lambda;U;N}|} & \text{αν } \omega \in \Omega_{\Lambda;U;N} \\ 0 & \text{αλλιού.} \end{cases} \quad (1.18)$$

**Σχόλιο 1.2.1.** Παρόλο που η κατανομή αυτή έχει το θετικό ότι είναι η φυσική περιγραφή του συστήματος και είναι εύκολα κατασκευάσιμη, αποτελεί πρόβλημα συνδυαστικής να μετρήσουμε όλα τα microstate. Επίσης ενδιαφερόμαστε περισσότερο για συστήματα με σταθερή θερμοκρασία παρά ενέργεια.

## 1.2.2 Το canonical ensemble

Ο στόχος μας είναι να κατασκευάσουμε τη σχετική κατανομή πιθανότητας για να περιγράψουμε ένα μακροσκοπικό σύστημα στην ισορροπία με συγκεκριμένη θερμοκρασία. Ένα τέτοιο σύστημα δεν είναι απομονωμένο αλλά σε επαφή με ένα θερμικό απόθεμα με το οποίο μπορεί να ανταλλάσσει ενέργεια. Αυτό θα επιτευχθεί με τη γενίκευση της κατασκευής της microcanonical κατανομής.

Το ομοιόμορφο μέτρο πιθανότητας ήταν κατάλληλο για να περιγράψουμε τα χαρακτηριστικά για το σύστημα όταν η μόνη πληροφορία που είχαμε ήταν η συνολική ενέργεια. Το πρόβλημα είναι ότι η θερμοκρασία είναι ποσότητα για την οποία ισχύει:  $\nexists \omega \mapsto T(\omega)$ , άρα δεν μπορούμε να περιοριστούμε στον  $\Omega_{\Lambda;N}$  με σταθερή θερμοκρασία. Παρόλο που η ενέργεια του συστήματος δεν είναι σταθερή πια, μπορούμε να μετρήσουμε το μέσο όρο, τον οποίο συμβολίζουμε με  $U$ . Άρα επεκτείνουμε την μέθοδο που κάναμε στο microcanonical ensemble και ψάχνουμε κατανομές  $\mu \in \mathcal{M}_1(\Omega_{\Lambda;N})$  που περιγράφουν με τον βέλτιστο τρόπο ότι η μόνη πληροφορία που έχουμε για το σύστημα είναι  $\langle \mathcal{H} \rangle_{\mu} = U$ .

**The Maximum Entropy Principle.** Τα αποτελέσματα ενός τυχαίου πειράματος του οποίου η κατανομή είναι η ομοιόμορφη είναι τα λιγότερα προβλέψιμα. Δηλαδή στην περίπτωση του microcanonical ensemble επιλέξαμε την λιγότερο προβλέψιμη κατανομή για τα configurations με σταθερή ενέργεια.

Έστω  $\Omega$  αυθαίρετο πεπερασμένο σύνολο microstate. Ένας βολικός τρόπος να ποσοτικοποιήσουμε την τυχαιότητα των ενδεχομένων μια κατανομής  $\mu$  στο  $\Omega$  είναι να χρησιμοποιήσουμε την έννοια της εντροπίας ως πληροφορία: **εντροπία Shannon** [3].

**Ορισμός 1.2.2.** Η *εντροπία Shannon* του  $\mu \in \mathcal{M}_1(\Omega)$  ορίζεται ως:

$$\mathcal{S}_{sh}(\mu) \stackrel{def}{=} - \sum_{\omega \in \Omega} \mu(\omega) \log \mu(\omega) \quad (1.19)$$

Η εντροπία Shannon χαρακτηρίζει την ομοιόμορφη κατανομή ως εξής:

**Λήμμα 1.1.** Η ομοιόμορφη κατανομή στο  $\Omega$ ,  $\nu^{unif}(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{1}{|\Omega|}$  είναι η μοναδική κατανομή κατά την οποία η  $\mathcal{S}_{sh}$  παρουσιάζει μέγιστο:

$$\mathcal{S}_{sh}(\nu^{unif}) = \sup_{\mu \in \mathcal{M}_1(\Omega)} \mathcal{S}_{sh}(\mu) \quad (1.20)$$

Απόδειξη. Έστω  $\psi(x) = -x \log x$ , η οποία είναι κοίλη. Με την χρήση της ανισότητας Jensen  $\phi(E[X]) \geq E[\phi(x)]$  έχουμε

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_{sh}(\mu) &= -\sum_{\omega \in \Omega} \mu(\omega) \log \mu(\omega) \\
&= \frac{|\Omega|}{|\Omega|} \sum_{\omega \in \Omega} \psi(\mu(\omega)) \\
&= |\Omega| \sum_{\omega \in \Omega} \frac{1}{|\Omega|} \psi(\mu(\omega)) \\
&\leq |\Omega| \psi\left(\sum_{\omega \in \Omega} \frac{1}{|\Omega|} \mu(\omega)\right) \\
&= |\Omega| \psi\left(\frac{1}{|\Omega|}\right) \\
&= -|\Omega| \frac{1}{|\Omega|} \log \frac{1}{|\Omega|} \\
&= \log |\Omega| \\
&= \mathcal{S}_{sh}(\nu^{unif})
\end{aligned}$$

όπου η ισότητα πραγματοποιείται όταν  $\mu(\cdot)$  είναι σταθερό δηλαδή  $\mu = \nu^{unif}$ .  $\square$

Αφού η εντροπία Shannon είναι κοίλη, με μοναδικό μέγιστο στο  $\nu^{unif}$ , μας δείχνει πόσο απέχει μία κατανομή από το να είναι ομοιόμορφη. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, θα χρησιμοποιήσουμε την εντροπία Shannon ώστε να επιλέξουμε ανάμεσα σε όλες τις κατανομές σε ένα σύνολο, εκείνη που είναι πιο κοντά στην ομοιόμορφη.

Έστω ο χώρος των κατανομών  $\mathcal{M}'_1(\Omega) \subset \mathcal{M}_1(\Omega)$  που αναπαριστά όλες τις κατανομές που συμπίπτουν με τις πληροφορίες που διαθέτουμε. Η κατανομή που περιγράφει με βέλτιστο τρόπο την πληροφορία είναι αυτή που μεγιστοποιεί την εντροπία Shannon και ο τρόπος επιλογής μίας τέτοιας κατανομής ονομάζεται **Maximum Entropy Principle**. Η εφαρμογή του Maximum Entropy Principle στη στατιστική μηχανική αποτελεί μία προέκταση της Αρχής ανεπαρκούς αιτιολόγησης και καθιερώθηκε από τον Jaynes [4].

**Παράδειγμα 1.4.** Η *microcanonical* κατανομή  $\nu_{\Lambda;U;N}^{Mic}$  έχει μέγιστη εντροπία ανάμεσα σε όλες τις κατανομές στο *energy shell*  $\Omega(U)$

$$\mathcal{S}_{sh}(\nu_{\Lambda;U;N}^{Mic}) = \sup_{\mu \in \mathcal{M}_1(\Omega_{\Lambda;N})} \mathcal{S}_{sh}(\mu).$$

**Canonical Gibbs distribution.** Εφαρμόζουμε την αρχή μέγιστης εντροπίας για να βρούμε την  $\mu \in \mathcal{M}_1(\Omega_{\Lambda;N})$  που μεγιστοποιεί την  $\mathcal{S}_{sh}$  υπο τον περιορισμό  $\langle \mathcal{H} \rangle_{\mu} = U$ .

Η συλλογή  $(\mu(\omega))_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}}$  μη αρνητικών πραγματικών αριθμών ικανοποιεί το πρόβλημα

$$\text{Ελαχιστοποίηση της } \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) \log \mu(\omega) \text{ όταν } \begin{cases} \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) = 1, \\ \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) \mathcal{H}(\omega) = U. \end{cases}$$

Για να έχει λύση απαιτούμε  $U \in [U_{min}, U_{max}] \implies$

- $U_{min} = \inf_{\omega} \mathcal{H}(\omega)$

- $U_{max} = \sup_{\omega} \mathcal{H}(\omega)$

Τέτοια προβλήματα αντιμετωπίζονται με τη μέθοδο **Lagrange multipliers**. Αφού έχουμε δύο περιορισμούς τότε θεωρούμε δύο Lagrange multipliers  $\lambda$ ,  $\beta$  και ορίζουμε τη συνάρτηση *Lagrange*

$$L(\mu) \stackrel{def}{=} \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) \log \mu(\omega) + \lambda \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) + \beta \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) \mathcal{H}(\omega).$$

Έτσι αυτό το πρόβλημα βελτιστοποίησης μετατρέπεται σε αναλυτική μελέτη του συστήματος  $|\Omega_{\Lambda;N}| + 2$  περιορισμών:

$$\begin{cases} \nabla L = 0, \\ \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) = 1, \\ \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu(\omega) \mathcal{H}(\omega) = U, \end{cases}$$

Όπου  $\nabla$  είναι το *gradient* ως προς  $\mu(\omega)$ ,  $\omega \in \Omega_{\Lambda;N}$ .

Η απαίτηση  $\nabla L = 0$  μας οδηγεί στο

$$\frac{\partial L}{\partial \mu(\omega)} = \log(\mu(\omega)) + 1 + \lambda + \beta \mathcal{H}(\omega) = 0, \forall \omega \in \Omega_{\Lambda;N}.$$

της οποίας η λύση είναι της μορφής  $\mu(\omega) = e^{-\beta \mathcal{H}(\omega) - 1 - \lambda}$ . Ο περιορισμός  $\sum \mu(\omega) = 1$  υποδηλώνει ότι  $e^{1+\lambda} = \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta \mathcal{H}(\omega)}$

Άρα η κατανομή που ψάχνουμε είναι της μορφής

$$\mu_{\beta}(\omega) = \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}(\omega))}}{\sum_{\omega' \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta(\mathcal{H}(\omega'))}},$$

με τον πολλαπλασιαστή *Lagrange*  $\beta$  να ικανοποιεί

$$\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} \mu_{\beta}(\omega) \mathcal{H}(\omega) = U. \quad (1.21)$$

Η εξίσωση αυτή έχει πάντα μία λύση  $\beta = \beta(U)$  όταν  $U \in (U_{min}, U_{max})$ .

**Σχόλιο 1.2.2.** Αφού το  $\beta$  επιλέγεται με τέτοιο τρόπο ώστε ο μέσος όρος της ενέργειας να έχει μία συγκεκριμένη τιμή, θα αποτελεί την φυσική παράμετρο για την *canonical distribution*. Συμπεραίνουμε ότι η κατανομή που περιγράφει ένα σύστημα στην ισορροπία που ανταλλάσει ενέργεια με το περιβάλλον και έχει μία μέση ενέργεια είναι της μορφής του παρακάτω ορισμού.

**Ορισμός 1.2.3.** Η *canonical Gibbs distribution* με παράμετρο  $\beta$ , που αφορά το σύστημα που αποτελείται από  $N$  σωματίδια σε ένα χωρίο  $\Lambda$  είναι η κατανομή πιθανότητας στο  $\Omega_{\Lambda;N}$

$$\mu_{\Lambda;\beta;N}(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}(\omega))}}{\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta;N}}. \quad (1.22)$$



Ο εκθετικός όρος  $e^{-\beta(\mathcal{H}(\omega))}$  καλείται **Boltzmann weight** και το κανονικοποιημένο άθροισμα

$$Z_{\Lambda;\beta,N} = \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta(\mathcal{H}(\omega))}$$

καλείται **canonical partition function**.

Θα δούμε στο υποκεφάλαιο 1.3 ότι η παράμετρο  $\beta$  ταυτίζεται με αυτό που ορίσαμε στη θερμοδυναμική ως inverse temperature.

### 1.2.3 Το grand canonical ensemble

Γενικεύουμε την προηγούμενη περίπτωση (canonical ensemble) ώστε το σύστημα στην ισορροπία να ανταλλάσσει και ενέργεια και σωματίδια. Από την πλευρά της θερμοδυναμικής ένα τέτοιο σύστημα χαρακτηρίζεται από την θερμοκρασία και το chemical potential, όπως θα διαπιστώσουμε παρακάτω.

Εφαρμόζοντας το **Maximum Entropy Principle** στο σύνολο όλων των κατανομών με την προδιαγραφόμενη μέση τιμή ενέργειας και μέση τιμή σωματιδίων. Συμβολίζουμε με  $\Omega_{\Lambda} \stackrel{def}{=} \cup_{N \geq 0} \Omega_{\Lambda;N}$  το σύνολο όλων των microstates με ένα αυθαίρετο αριθμό σωματιδίων μέσα στο χωρίο  $\Lambda$ . Επαναλαμβάνοντας την ίδια μέθοδο του προηγούμενου ensemble (μέθοδο Lagrange multipliers)  $(\beta, \hat{\mu})$  παρατηρούμε ότι η κατανομή που προκύπτει έχει την εξής μορφή (όπου  $\hat{\mu} = -\beta\mu$ ):

**Ορισμός 1.2.4.** Η **grand canonical Gibbs distribution** με παραμέτρους  $\beta$  και  $\mu$ , που αφορά το σύστημα που αποτελείται από  $N$  σωματίδια σε ένα χωρίο  $\Lambda$  είναι η κατανομή πιθανότητας στο  $\Omega_{\Lambda}$

$$\nu_{\Lambda;\beta,\mu}(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}(\omega) - \mu N)}}{Z_{\Lambda;\beta,\mu}}, \quad \text{αν } \omega \in \Omega_{\Lambda;N}. \quad (1.23)$$

Το κανονικοποιημένο άθροισμα

$$Z_{\Lambda;\beta,\mu} \stackrel{def}{=} \sum_N e^{\beta\mu N} \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta\mathcal{H}(\omega)}$$

καλείται **grand canonical partition function**.

Θα δούμε στο υποκεφάλαιο 1.3 ότι η παράμετρο  $\beta, \mu$  ταυτίζονται με το inverse temperature και chemical potential αντίστοιχα.

## 1.2.4 Δύο παραδείγματα συστημάτων αερίου

Παρουσιάζουμε δύο παραδείγματα συστημάτων αερίου με χρήση στατιστικής μηχανικής. Το πρώτο ονομάζεται συνεχές αέριο (θα το περιγράψουμε με τη βοήθεια εργαλείων από την Χαμιλτονιανή μηχανική) και παρόλο που δεν αποτελεί το βασικό αντικείμενο της συγκεκριμένης διπλωματικής αξίζει να το παρουσιάσουμε για να διαπιστώσουμε δυσκολίες που προκύπτουν στη μοντελοποίηση του συστήματος. Το δεύτερο είναι το αέριο σε πλέγμα (lattice) και αποτελεί το βασικό σύστημα αυτής της διπλωματικής.

### Συνεχές αέριο

Έστω αέριο που αποτελείται από  $N$  σωματίδια περιορισμένο σε ένα δοχείο που αναπαριστά ένα φραγμένο υποσύνολο  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ . Από την σκοπιά της Χαμιλτονιανής μηχανικής ένα τέτοιο σύστημα αποτελείται από την συλλογή  $(p_k, q_k)_{k=1, \dots, N}$  όπου  $p_k \in \mathbb{R}^d$  (momentum) είναι η ορμή και  $q_k \in \Lambda$  είναι η θέση κάθε σωματιδίου. Ορίζουμε το σύνολο των microstate

$$\Omega_{\Lambda;N} = (\mathbb{R}^d \times \Lambda)^N$$

Η Χαμιλτονιανή παίρνει την μορφή αθροίσματος της κινητικής και δυναμικής ενέργειας:

$$\mathcal{H}(p_1, q_1, \dots, p_N, q_N) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^N \frac{\|p_k\|_2^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)$$

όπου:

- $m$  μάζα
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^N x_i^2}$
- $\phi$ : το δυναμικό (potential) περιγράφει την συνεισφορά στην ολική ενέργεια που προέρχεται από την αλληλεπίδραση του  $i$ -οστού,  $j$ -οστού σωματιδίου, που υποθέτουμε ότι εξετάται μόνο από τις αποστάσεις  $\|q_j - q_i\|_2$ .

Θα ορίσουμε την canonical κατανομή τέτοιου συστήματος. Η πιθανότητα ενός ενδεχομένου  $B$ , υπό την canonical κατανομή με αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$  ορίζεται με χρήση του βάρους Boltzmann.

$$\mu_{\Lambda;\beta;N}(B) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{Z_{\Lambda;\beta;N}} \int_{\Omega_{\Lambda;N}} \mathbb{1}_B e^{-\beta \mathcal{H}((p_1, q_1), \dots, (p_N, q_N))} dp_1 dq_1 \dots dp_N dq_N$$

$$\mu \mathbb{1}_B = \mathbb{1}_B((p_1, q_1), \dots, (p_N, q_N)) = \begin{cases} 1 & x \in B \\ 0 & x \notin B \end{cases} \text{ και}$$

$$Z_{\Lambda;\beta;N} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta \mathcal{H}((p_1, q_1), \dots, (p_N, q_N))} dp_1 dq_1 \dots dp_N dq_N$$

Δεν μπορούμε να αποδώσουμε πιθανότητα μεμονωμένα σε κάθε microstate, καθώς αυτή είναι μηδέν. Λόγω της μορφής της Χαμιλτονιανής, η ολοκλήρωση των ορμών γίνεται αναλυτικά:

$$\begin{aligned}
Z_{\Lambda;\beta,N} &= \int_{\Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta\left(\sum_{k=1}^N \frac{\|p_k\|_2^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dp_1 dq_1 \dots dp_N dq_N \\
&= \int_{\mathbb{R}^{dN}} e^{-\beta\left(\sum_{k=1}^N \frac{\|p_k\|_2^2}{2m}\right)} dp_1 \dots dp_N \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N \\
&= \int_{\mathbb{R}^{dN}} \prod_{k=1}^N e^{-\beta\left(\frac{\|p_k\|_2^2}{2m}\right)} dp_1 \dots dp_N \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N \\
&= \left(\prod_{k=1}^N \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\beta\left(\frac{\|p_k\|_2^2}{2m}\right)} dp_k\right) \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N \\
&= \left(\prod_{k=1}^N \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\beta\left(\frac{\sum_{i=1}^d p_{k,i}^2}{2m}\right)} dp_k\right) \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N \\
&= \left(\prod_{k=1}^N \int_{\mathbb{R}^d} \prod_{i=1}^d e^{-\beta\left(\frac{p_{k,i}^2}{2m}\right)} dp_k\right) \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N \\
&= \left(\prod_{k=1}^N \prod_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\beta\left(\frac{p_{k,i}^2}{2m}\right)} dp_{k,i}\right) \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{-\beta}{2m} p^2} dp\right)^{dN} \int_{\Lambda^N} e^{-\beta\left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)} dq_1 \dots dq_N.
\end{aligned}$$

Μελετάμε μεμονωμένα το ολοκλήρωμα  $\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{-\beta}{2m} p^2} dp$ .

Θέτουμε  $u = \sqrt{\frac{\beta}{2m}} p \implies \frac{du}{dp} = \sqrt{\frac{\beta}{2m}} \implies dp = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} du$  Άρα το ολοκλήρωμα παίρνει την εξής μορφή:

$$\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{-\beta}{2m} p^2} dp = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{-\beta}{2m} p^2} du = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \int_{\mathbb{R}} e^{-u^2} du.$$

Υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα προκύπτει ότι  $\int_{\mathbb{R}} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$  Έτσι προκύπτει ότι:

$$\sqrt{\frac{2m}{\beta}} \int_{\mathbb{R}} e^{-u^2} du = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}}.$$

Άρα καταλήγουμε στο

$$Z_{\Lambda;\beta,N} = \left(\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{-\beta}{2m} p^2} dp\right)^{dN} \int_{\Lambda^N} e^{-\beta \mathcal{H}^{conf}(q_1, \dots, q_N)} dq_1 \dots dq_N = \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{dN}{2}} Z_{\Lambda;\beta,N}^{conf}$$

όπου η ποσότητα  $Z_{\Lambda;\beta,N}^{conf} = \int_{\Lambda^N} e^{-\beta \mathcal{H}^{conf}(q_1, \dots, q_N)} dq_1 \dots dq_N$  ονομάζεται **configuration integral** με  $\mathcal{H}^{conf}(q_1, \dots, q_N) = \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(\|q_j - q_i\|_2)\right)$ .

Όταν ένα ενδεχόμενο  $B$  εξαρτάται μόνο από τη θέση των σωματιδίων τότε οι συντελεστές που προέρχονται από την ολοκλήρωση των ορμών απαλείφονται από τον παρονομαστή και αριθμητή δίνοντας:

$$\mu_{\Lambda;\beta,N}(B) = \frac{1}{Z_{\Lambda;\beta,N}^{conf}} \int_{\Omega_{\Lambda;N}} 1_B e^{-\beta \mathcal{H}^{conf}(q_1, \dots, q_N)} dq_1 \dots dq_N$$

Είναι φανερό, αναλύοντας το συγκεκριμένο μοντέλο, οι δυσκολίες που προκύπτουν, δηλαδή ότι:

- η ορμή δεν έχει επιρροή στην πιθανότητα των ενδεχομένων που εξαρτώνται μόνο από τη θέση.
- είναι δύσκολο να διαχειριστούμε την υπόλοιπη παράσταση που εξαρτάται από την θέση όταν το interaction potential  $\phi$  είναι σύνθετο.

Συνήθως η  $\phi$  περιέχει δύο όρους, που αναπαριστούν το short και long interaction

$$\phi(x) = \phi_{short}(x) + \phi_{long}(x).$$

Αν υποθέσαμε ότι τα σωματίδια αναπαριστούνται με μικρές σφαίρες ακτίνας  $r_0 > 0$  τότε το  $\phi_{short}$  έχει τη λεγόμενη μορφή **hard-core interaction**:

$$\phi_{short} \stackrel{def}{=} \begin{cases} +\infty & |x| \leq 2r_0 \\ 0 & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Το  $\phi_{long}$  μπορεί να πάρει πολλές μορφές, υποθέτουμε ότι σε μεγάλες αποστάσεις εξασθενεί

$$\phi_{long}(x) \rightarrow 0 \text{ όταν } |x| \rightarrow \infty$$

Το decay στο  $+\infty$  πρέπει να είναι αρκετά γρήγορο ώστε να εξασφαλίζει την ύπαρξη του  $Z_{\Lambda;\beta,N}^{conf}$ .

Ακόμα και σε ισχυρές υποθέσεις για την  $\phi$  η ανάλυση τέτοιου συστήματος και ειδικότερα ο υπολογισμός του  $Z_{\Lambda;\beta,N}^{conf}$  είναι δύσκολος. Γι' αυτό είναι απαραίτητο να «διακριτοποιήσουμε» το σύστημα και να το μοντελοποιήσουμε με βάση τις υποθέσεις του **Van Der Waal** για τις αλληλεπιδράσεις, δηλαδή:

- short range repulsion
- long range attraction.

## Αέριο σε πλέγμα

Το **Lattice gas** δημιουργείται αν:

- αγνοήσουμε την ορμή (για τους λόγους που αναφέραμε παραπάνω),
- υποθέτουμε ότι οι θέσεις των σωματιδίων περιορίζονται σε ένα διακριτό υποσύνολο του  $\mathbb{R}^d$ .

Το υποσύνολο αυτό ονομάζεται  $d$ -διάστατο κυβικό πλέγμα:

$$\mathbb{Z}^d \stackrel{def}{=} \{i = (i_1, \dots, i_d) \in \mathbb{R}^d : i_k \in \mathbb{Z} \forall k \in (1, \dots, d)\}.$$

Φανταζόμαστε ότι  $\mathbb{R}^d$  αποτελείται από «μικρα κελιά» και κάθε κελί μπορεί να χωρέσει το πολύ ένα σωματίδιο. Για να περιγράψουμε τα microstate αυτού του μοντέλου θεωρούμε ένα πεπερασμένο υποσύνολο  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  που αναπαριστά το δοχείο και έστω ένας αριθμός  $\eta_i$  με τιμές 0,1 που μας δείχνει αν στο κελί  $i \in \Lambda$  υπάρχει σωματίδιο:

$$\eta_i = \begin{cases} 0 & , \text{το κελί είναι άδειο} \\ 1 & , \text{υπάρχει σωματίδιο} \end{cases}$$

Άρα το σύνολο των microstate είναι το  $\Omega_\Lambda \stackrel{def}{=} \{0,1\}^\Lambda$ . Αυτός ο τρόπος μοντελοποίησης αυτόματα περιέχει το short range repulsion μεταξύ των σωματιδίων, αφού δύο σωματίδια δεν μπορούν να βρίσκονται στο ίδιο κελί. Το long range attraction περιέχεται στην Χαμιλτονιανή:  $\forall \eta = (\eta_i)_{i \in \Lambda} \in \Omega_\Lambda$

$$\mathcal{H}(\eta) \stackrel{def}{=} \sum_{\{i,j\} \subset \Lambda} J(j-i)\eta_i\eta_j,$$

Η οποία ταυτίζεται με την  $\mathcal{H}^{conf}(q_1, \dots, q_N)$  παραπάνω. Η  $J : \mathbb{Z}^d \rightarrow \mathbb{R}$  παίζει τον ρόλο της  $\phi_{long}$ . Η συνεισφορά του ζεύγους  $\{i, j\}$  είναι μηδέν αν ένα από τα δύο κελιά δεν περιέχει σωματίδιο.

Ο αριθμός σωματιδίων στο  $\Lambda$  δίνεται από:

$$N_\Lambda(\eta) \stackrel{def}{=} \sum_{i \in \Lambda} \eta_i.$$

Είναι χρήσιμο να διαχωρίσουμε τις συναρτήσεις επιμερισμού (**partition function**) στα διαφορετικά ensemble. Το canonical partition function συμβολίζεται ως

$$Q_{\Lambda;\beta,\mu} = \sum_{\eta \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta \mathcal{H}(\eta)},$$

με  $\Omega_{\Lambda;N} \stackrel{def}{=} \{\eta \in \Omega_\Lambda : N_\Lambda(\eta) = N\}$ , και η grand canonical συμβολίζεται ως εξής:

$$\Theta_{\Lambda;\beta,\mu} = \sum_N e^{-\beta \mu N} \sum_{\eta \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\beta \mathcal{H}(\eta)}.$$

**Παράδειγμα 1.5.** Η πιο απλή περίπτωση **Lattice gas** δημιουργείται αν θεωρήσουμε  $J \equiv 0$ . Τότε η Χαμιλτονιανή είναι μηδέν και τα σωματίδια αλληλεπιδρούν μόνο από short-range repulsion, και το μοντέλο ονομάζεται **hard-core lattice gas**.

## 1.3 Σύνδεση Στατιστικής Μηχανικής με Θερμοδυναμική

Μέχρι στιγμής έχουμε όρισει τις βασικές κατανομές πιθανότητας της στατιστικής μηχανικής. Α-μα κάποιος θέλει να δημιουργήσει μια σύνδεση με τη θερμοδυναμική τότε πρέπει να προσδιορίσει τα αντικείμενα στη στατιστική μηχανική που αντιστοιχούν στις ποσότητες στη θερμοδυναμική που δεν είναι observable, δηλαδή δεν είναι συναρτήσεις του microstate, όπως η εντροπία ή η θερμοκρασία.

Αυτό θα επιτευχθεί με την βοήθεια της Αρχής του Boltzmann και με μερικές αναλογίες με τη θερμοδυναμική. Καθώς όσο αναφερθήκαμε στη θερμοδυναμική χρησιμοποιούσαμε σαν παράδειγμα ένα σύστημα αερίου, είναι πιο εύκολο να συνεχίσουμε την ανάλυσή μας σε ένα μοντέλο αερίου σε πλέγμα. Όλα τα συμπεράσματα που προκύπτουν από την ανάλυσή μας επεκτείνονται σε πιο γενικά συστήματα.

### 1.3.1 Η αρχή του Boltzmann και το θερμοδυναμικό όριο

Έστω ένα αέριο σε πλέγμα σε μία περιοχή  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  με  $|\Lambda| = V$ , που αποτελείται από  $N$  σωματίδια με συνολική ενέργεια  $U$ . Ένα ερώτημα που έρχεται στο προσκήνιο είναι το εξής: «Ποια είναι η μορφή που πρέπει να έχει η εντροπία, συνάρτηση του macrostate  $(U, V, N)$ ;» Δηλαδή αναζητάμε μία προσθετική συνάρτηση, όπως και στην περίπτωση (1.2), που να ικανοποιεί το extremum principle που καθορίζει την ισορροπία.

Αρχικά γενικεύουμε την έννοια του **energy shell** και θεωρούμε ότι για κάθε macrostate  $(U, V, N)$  το σύνολο όλων των microstate συμβατά με το  $(U, V, N)$ :

$$\Omega_{\Lambda;U,N} \stackrel{def}{=} \{\eta \in \Omega_{\Lambda} : \mathcal{H}(\eta) = U, N_{\Lambda}(\eta) = N\}$$

όπου

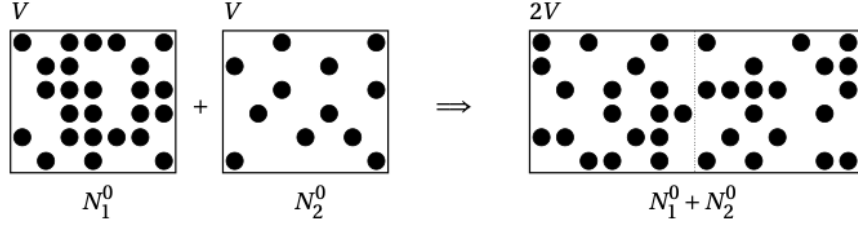
- $\eta = (\eta_i)_{i \in \Lambda} \in \Omega_{\Lambda}$  (occupational number)
- $\mathcal{H}(\eta) = \sum_{\{i,j\} \subset \Lambda} J(j-i)\eta_i\eta_j$
- $N_{\Lambda}(\eta) = \sum_{i \in \Lambda} \eta_i$

**Ορισμός 1.3.1.** Η εντροπία Boltzmann που αφορά ένα σύστημα με  $N$  σωματίδια σε ένα χωρίο  $\Lambda$  με συνολική ενέργεια  $U$  ορίζεται ως

$$S_{Boltz}(\Lambda;U, N) \stackrel{def}{=} \log|\Omega_{\Lambda;U,N}|.$$

Θεωρούμε τώρα δύο αέρια σε πλέγμα στην ισορροπία με ίσους όγκους  $|\Lambda_1| = |\Lambda_2| = V$  σε ξεχωριστά δοχεία με  $N_1^0, N_2^0$  σωματίδια αντίστοιχα. Θεωρούμε ότι τα σωματίδια αλληλεπιδρούν μόνο με hard-core repulsion ( $\mathcal{H} \equiv 0$ ) και  $N \stackrel{def}{=} N_1^0 + N_2^0$  είναι άρτιος αριθμός.

Φέρνουμε τα δύο δοχεία σε επαφή ώστε να ανταλλάσσουν σωματίδια. Για να υπάρχει ισορροπία τα  $N$  σωματίδια ανακατανέμονται μέσα στα δύο δοχεία.



Με βάση την αρχή της θερμοστατικής, ισορροπία επέρχεται όταν το ζεύγος των αριθμών σωματιδίων  $(N_1, N_2)$  μεγιστοποιεί το άθροισμα των συναρτήσεων εντροπίας κάθε δοχείου με τον περιορισμό  $N_1^0 + N_2^0 = N$ . Θα δούμε γιατί ο ορισμός της εντροπίας Boltzmann είναι η φυσική επιλογή για τη συνάρτηση που περιγράφει το extremum principle στη συγκεκριμένη περίπτωση.

Από τη σκοπιά της στατιστικής μηχανικής, από τη στιγμή που τα δοχεία έχουν έρθει σε επαφή τότε το συνολικό σύστημα περιγράφεται από  $\nu_{\Lambda; N_1+N_2}^{Mic}$ , με  $\Lambda \stackrel{def}{=} \Lambda_1 \cup \Lambda_2$ , όπου η πιθανότητα στο  $\Lambda_1$  να έχω  $N_1$  σωματίδια άρα  $N_2 = N - N_1$  στο  $\Lambda_2$  είναι:

$$\frac{\binom{V}{N_1} \binom{V}{N_2}}{\binom{2V}{N}}.$$

Ενδιαφερόμαστε για το ζεύγος  $(N_1, N_2)$  που μεγιστοποιεί την πιθανότητα υπό τον περιορισμό  $N_1 + N_2 = N$ . Μόνο ο αριθμητής στην προηγούμενη σχέση εξαρτάται από τα  $(N_1, N_2)$  με  $|\Omega_{\Lambda; N_k}| = \binom{V}{N_k}$ . Αποδυναμείται (ως τεχνική απόδειξη στο Appendix) ότι:

$$\max_{N_1, N_2; N_1+N_2=N} \binom{V}{N_1} \binom{V}{N_2} = \binom{V}{\frac{N}{2}} \binom{V}{\frac{N}{2}} \quad (1.24)$$

που σημαίνει ότι το πιο πιθανό configuration είναι αυτό στο οποίο σε κάθε δοχείο έχουμε  $\frac{N}{2}$  σωματίδια. Ως προς την εντροπία Boltzmann η σχέση (1.24) εκφράζεται ως:

$$\max_{N_1, N_2; N_1+N_2=N} \{S_{Boltz}(\Lambda_1; N_1) + S_{Boltz}(\Lambda_2; N_2)\} \leq \max_{N_1} \{S_{Boltz}(\Lambda_1; N_1)\} + \max_{N_2} \{S_{Boltz}(\Lambda_2; N_2)\}.$$

Για  $N_1 = \frac{N}{2}, N_2 = \frac{N}{2}$  έχουμε

$$\max_{N_1, N_2; N_1+N_2=N} \{S_{Boltz}(\Lambda_1; N_1) + S_{Boltz}(\Lambda_2; N_2)\} = S_{Boltz}\left(\Lambda_1; \frac{N}{2}\right) + S_{Boltz}\left(\Lambda_2; \frac{N}{2}\right) \quad (1.25)$$

και επειδή είναι η διακριτή μορφή της αρχής της Θερμοστατικής, η  $S_{Boltz}$  είναι η φυσική επιλογή για την εντροπία αυτού του συστήματος.

Παρόλα αυτά ο ορισμός αυτός παρουσιάζει πρόβλημα. Αν το σύστημα είναι μεγάλο, παρόλο που το ενδεχόμενο  $(N_1, N_2) = \left(\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right)$  είναι πιο πιθανό από κάθε άλλη εκδοχή  $(N'_1, N'_2)$ , είναι και πάλι ενδεχόμενο με μικρή πιθανότητα, συγκεκριμένα με πιθανότητα  $\frac{1}{\sqrt{N}}$ . Κάθε άλλο ζευγάρι  $(N'_1, N'_2)$  τέτοιο ώστε

$$N'_1 + N'_2 = N, \quad |N'_1 - \frac{N}{2}| \ll N^{1/2}, \quad |N'_2 - \frac{N}{2}| \ll N^{1/2}$$

έχει την ίδια πιθανότητα να συμβεί.

Για να έχουμε ντετερμινιστική συμπεριφορά πρέπει να συμπεριλάβουμε την πυκνότητα και όχι τον αριθμό σωματιδίων σε κάθε δοχείο. Με

$$\rho_{\Lambda_1} \stackrel{def}{=} \frac{N_{\Lambda_1}}{V} \quad \rho_{\Lambda_2} \stackrel{def}{=} \frac{N_{\Lambda_2}}{V}$$

συμβολίζουμε τις τυχαίες μεταβλητές που δίνουν το particle density σε κάθε δοχείο. Ο περιορισμός  $N_1 + N_2 = N$  μεταφράζεται ως:

$$\frac{\rho_{\Lambda_1} + \rho_{\Lambda_2}}{2} = \frac{N}{2V} \stackrel{def}{=} \bar{\rho}$$

που είναι η συνολική πυκνότητα του συστήματος.

Για μεγάλα συστήματα, τα  $\rho_{\Lambda_1}, \rho_{\Lambda_2}$  είναι κοντά στο  $\bar{\rho}$  αλλά πάντα έχουν μικροσκοπικές διακυμάνσεις γύρω από το  $\bar{\rho}$ : η πιθανότητα παρατήρησης μίας διακύμανσης μεγέθους  $\epsilon > 0$ ,  $\nu_{\Lambda;U,N}^{Mic}(|\rho_{\Lambda_1} - \bar{\rho}| \geq \epsilon)$ , είναι πάντα θετική, παρόλο που μπορεί να είναι αρκετά μικρή σαν πιθανότητα.

Άμα αναζητούμε ένα μακροσκοπικό συμπέρασμα της μορφής: «Στην ισορροπία, οι πυκνότητες των δύο δοχείων είναι (ακριβώς) ίσες με  $\bar{\rho}$ », τότε χρειαζόμαστε τη χρήση ορίου, παρόμοια με αυτή του Νόμου Μεγάλων αριθμών.

Έστω ένα μεγάλο σύστημα με σταθερή πυκνότητα. Έστω  $\bar{\rho}$  ότι είναι η συνολική πυκνότητα του συστήματος. Θα επιτρέψουμε στο μέγεθος του συστήματος  $|\Lambda| = V$  να αυξάνεται επ'άπειρο,  $V \rightarrow \infty$  όπως και ο αριθμός των σωματιδίων  $N \rightarrow \infty$  με τέτοιο τρόπο ώστε

$$\frac{N}{2V} \rightarrow \bar{\rho}$$

Αυτή η διαδικασία ονομάζεται **Θερμοδυναμικό όριο**. Θα δείξουμε ότι οι πυκνότητες των δύο υποσυστημάτων συγκεντρώνονται στο  $\bar{\rho}$

$$\nu_{\Lambda;N}^{Mic}(|\rho_{\Lambda_1} - \bar{\rho}| \geq \epsilon) = \nu_{\Lambda;N}^{Mic}(|\rho_{\Lambda_2} - \bar{\rho}| \geq \epsilon) \rightarrow 0, \quad \forall \epsilon > 0$$

και θα δούμε πως αυτό σχετίζεται με τον ορισμό της εντροπίας Boltzmann. Θυμόμαστε ότι  $N_2 = N - N_1$ ,

$$\begin{aligned} \nu_{\Lambda;N}^{Mic}(|\rho_{\Lambda_1} - \bar{\rho}| \geq \epsilon) &= \sum_{N_1: |\frac{N_1}{V} - \bar{\rho}| \geq \epsilon} \frac{|\Omega_{\Lambda_1, N_1}| |\Omega_{\Lambda_2, N_2}|}{|\Omega_{\Lambda, N}|} \\ &= \sum_{N_1: |\frac{N_1}{V} - \bar{\rho}| \geq \epsilon} \exp(S_{Boltz}(\Lambda_1; N_1) + S_{Boltz}(\Lambda_2; N_2) - S_{Boltz}(\Lambda; N)). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Στην περίπτωση του hard-core αερίου, η εντροπία Boltzmann έχει καλά ορισμένη πυκνότητα στο θερμοδυναμικό όριο. Χρησιμοποιώντας την φόρμουλα Stirling και  $|\Omega_{\Lambda;N}| = \binom{2V}{N}$ ,

$$\lim_{\frac{1}{V}} \mathbf{S}_{Boltz}(\Lambda; N) \stackrel{def}{=} \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho) = -\rho \log \rho - (1 - \rho) \log 1 - \rho.$$



Θα χρησιμοποιήσουμε την εντροπία πυκνότητας  $\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\cdot)$  σε κάθε όρο του εκθετικού (1.26). Θέτουμε  $\rho_k \stackrel{def}{=} \frac{N_k}{V}$  και θυμόμαστε ότι  $\frac{\rho_1 + \rho_2}{2} = \bar{\rho}$

$$\nu_{\Lambda;N}^{Mic}(|\rho_{\Lambda_1} - \bar{\rho}| \geq \epsilon) = e^{o(1)V} \sum_{N_1:|\rho_1 - \bar{\rho}| \geq \epsilon} \exp\{(\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_1) + \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_2) - 2\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\bar{\rho}))V\}$$

με  $o(1) \rightarrow 0$  στο θερμοδυναμικό όριο. Η  $\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}$  είναι κοίλη και άρα ισχύει:

$$\frac{\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_1) + \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_2)}{2} \leq \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\bar{\rho})$$

Επειδή είναι αυστηρά κοίλη,  $\exists c(\epsilon) > 0$ , τέτοιο ώστε

$$\inf\{\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\bar{\rho}) - \frac{\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_1) + \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_2)}{2} : \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} = \bar{\rho}, |\rho_1 - \bar{\rho}| \geq \epsilon\} = c(\epsilon)$$

Επειδή όλος ο αριθμός των συντελεστών στο άθροισμα φράσσεται από πάνω από το  $V$ , τότε προκύπτει:

$$\nu_{\Lambda;U,N}^{Mic}(|\rho_1 - \bar{\rho}| \geq \epsilon) \leq V e^{-(2c(\epsilon) - o(1))V}$$

όπου για  $V \rightarrow \infty$  η ποσότητα  $V e^{-(2c(\epsilon) - o(1))V} \rightarrow 0$ ,  $\forall \epsilon > 0$ . Άρα οι πυκνότητες κάθε υποσυστήματος τείνουν στο  $\bar{\rho}$  για  $V \rightarrow \infty$ .

Αποδείξαμε ότι στο θερμοδυναμικό όριο, οι πυκνότητες δύο δοχείων γίνονται ίσες με  $\rho$ . Είναι οι μοναδικές πυκνότητες που πραγματοποιούν το supremum

$$\sup_{\rho_1, \rho_2: \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} = \bar{\rho}} \{\mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_1) + \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\rho_2)\} = \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\bar{\rho}) + \mathbf{s}_{Boltz}^{hard}(\bar{\rho}).$$

Παρόλο που περιοριστήκαμε στο hard-core lattice αέριο είδαμε ότι ενώ η εντροπία Boltzmann  $\mathbf{S}_{Boltz}$  δεν καλύπτει όλα μας τα προβλήματα, η πυκνότητα της στο θερμοδυναμικό όριο ορίζει μια συνάρτηση που περιγράφει πλήρως τις τιμές στην ισορροπία των θερμοδυναμικών παραμέτρων, όπου η συνάρτηση αυτή αποτελεί μοναδική λύση του extremum principle.

Θεωρούμε τώρα μια γενική κατάσταση ενός συστήματος με macrostate  $(U, V, N)$ . Για να εξετάσουμε συστήματα πέρα από το hard-core lattice αέριο, πρέπει στο θερμοδυναμικό όριο να συμπεριλάβουμε το όριο  $U \rightarrow \infty$  με  $\frac{U}{V} \rightarrow u$ .

**Ορισμός 1.3.2.** Έστω  $u, \rho$ . Θεωρούμε το θερμοδυναμικό όριο,  $U \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty$ , τέτοιο ώστε  $\frac{U}{V} \rightarrow u$  και  $\frac{N}{V} \rightarrow \rho$  και  $\Lambda$  το χωρίο που αυξάνεται έτσι ώστε  $|\Lambda| = V$ . Η εντροπία πυκνότητας Boltzmann με πυκνότητα ενέργειας  $u$  και σωματιδίων  $\rho$  ορίζεται από το παρακάτω όριο, όταν αυτό υπάρχει:

$$\mathbf{s}_{Boltz}(u, \rho) \stackrel{def}{=} \lim \frac{1}{V} \mathbf{S}_{Boltz}(\Lambda, U, N).$$

**Σχόλιο 1.3.1.** Σε αυτόν τον ορισμό υπάρχουν κρυμμένοι δύο μη τετριμμένοι ισχυρισμοί:

- Η ύπαρξη του ορίου.
- Η ανεξαρτησία του ορίου από την επιλογή ακολουθίας συνόλων  $\Lambda$ .

**Παρατήρηση 1.5.** Είναι φυσικό να θεωρήσουμε την πυκνότητα εντροπία Boltzmann ως το ανάλογο της θερμοδυναμικής εντροπίας πυκνότητας  $s(u, \rho) = \frac{1}{V} S(U, V, N)$ .

**Ορισμός 1.3.3. Boltzmann's Principle.** Η θερμοδυναμική εντροπία πυκνότητας που αφορά το macrostate  $(U, V, N)$  και τις πυκνότητες  $u = \frac{U}{V}$ ,  $\rho = \frac{N}{V}$  θα ταυτίζεται με την εντροπία πυκνότητας Boltzmann:

$$s(u, \rho) \leftrightarrow \mathbf{S}_{Boltz}(u, \rho).$$

Θα δείξουμε τώρα πως η  $\mathbf{S}_{Boltz}(u, \rho)$  είναι κοίλη, όπως και η αντίστοιχη εντροπία που ορίσαμε στην θερμοδυναμική.

Έστω αέριο  $\Sigma$  σε κυβικό σύνολο  $\Lambda$  με παράμετρους  $V = |\Lambda|, U, N$ . και ορίζουμε  $u = \frac{U}{V}$ ,  $\rho = \frac{N}{V}$ . Έστω  $a \in (0, 1)$  και θεωρούμε  $u_1, u_2$  και  $\rho_1, \rho_2$  τέτοιο ώστε

$$u = au_1 + (1 - a)u_2 \text{ και } \rho = a\rho_1 + (1 - a)\rho_2.$$

Θεωρούμε ότι το  $\Sigma$  αποτελείται από μεγάλο αριθμό υποσυστημάτων  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_M$  που περιέχονται σε υπο-κύβο όγκου  $V' = \frac{V}{M}$ . Άμα αγνοήσουμε την ενέργεια που οφείλεται στην αλληλεπίδραση των υποσυστημάτων (αυτό μπορούμε να το πετύχουμε άμα υποθέσουμε ότι τα υποσυστήματα είναι αρκετά μεγάλα), τότε ένας τρόπος να έχουμε πυκνότητες ενέργειας και σωματιδίων  $u, \rho$  στο  $\Sigma$  είναι να έχουμε πυκνότητες ενέργειας και σωματιδίων  $u_1, \rho_1$  σε ένα κλάσμα  $a$  των υποσυστημάτων του  $\Sigma$  και πυκνότητες ενέργειας και σωματιδίων  $u_2, \rho_2$  στο υπόλοιπο.

Τότε έχουμε

$$|\Omega_{\Lambda;U,N}| \geq |\Omega_{\Lambda';u_1V',\rho_1V'}|^{aM} |\Omega_{\Lambda';u_2V',\rho_2V'}|^{(1-a)M}$$

όπου  $\Lambda'$  συμβολίζει κύβο με όγκο  $V'$ . Προκύπτει ότι

$$\frac{1}{V} \log |\Omega_{\Lambda;U,N}| \geq \frac{a}{V'} \log |\Omega_{\Lambda';u_1V',\rho_1V'}| + \frac{(1-a)}{V'} \log |\Omega_{\Lambda';u_2V',\rho_2V'}|$$

Αρχικά για  $M \rightarrow \infty$  και μετά για το θερμοδυναμικό όριο  $V' \rightarrow \infty$  έχουμε

$$\mathbf{S}_{Boltz}(au_1 + (1 - a)u_2, a\rho_1 + (1 - a)\rho_2) \geq a\mathbf{S}_{Boltz}(u_1, \rho_1) + (1 - a)\mathbf{S}_{Boltz}(u_2, \rho_2)$$

ότι η  $\mathbf{S}_{Boltz}(u, \rho)$  είναι κοίλη.

Υποθέτοντας ότι η  $\mathbf{S}_{Boltz}(u, \rho)$  υπάρχει και ικανοποιεί τις ιδιότητες που είδαμε στη θερμοδυναμική, χρησιμοποιώντας την Αρχή του Boltzmann θα δώσουμε τον ορισμό των θερμοδυναμικών δυναμικών που εμφανίζονται στα canonical και grand canonical ensembles της στατιστικής μηχανικής, την *free energy* και *πίεση*.

### Canonical ensemble

Παρατηρούμε ότι η canonical συνάρτηση επιμερισμού με παραμέτρους  $\beta$  του αερίου σε πλέγμα με  $N$  σωματίδια σε δοχείο όγκου  $|\Lambda| = V$  γράφεται ως

$$\mathbf{Q}_{\Lambda;\beta,N} = \sum_{U \in \mathcal{U}} e^{-\beta U} |\Omega_{\Lambda;U,N}| = \sum_{U \in \mathcal{U}} e^{-\beta U + \mathbf{S}_{Boltz}(\Lambda, U, N)} = e^{o(1)V} \sum_{U \in \mathcal{U}} e^{-\{\beta u - s(u, \rho)\}V}$$

όπου εισάγαμε τις ποσότητες  $u \stackrel{def}{=} \frac{U}{V}$ ,  $\rho \stackrel{def}{=} \frac{N}{V}$  και τον ορισμό της πυκνότητας εντροπίας Boltzmann:

$$\mathbf{S}_{Boltz}(\Lambda; U, N) = (s_{Boltz}(u, \rho) + o(1))V$$

Μπορούμε να φράξουμε το άθροισμα κρατώντας μόνο την μεγαλύτερη τιμή

$$e^{-V \inf_u \{\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)\}} \leq \sum_{U \in \mathcal{U}} e^{-\{\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)\}V} \leq |\mathcal{U}| e^{-V \inf_u \{\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)\}}. \quad (1.27)$$

Θεωρούμε ότι το αέριο σε πλέγμα έχει **finite-range interactions**, δηλαδή  $J(j - i) = 0$  για  $\|j - i\|_2 > C$ ,  $C$  σταθερά. Σε αυτή την περίπτωση, το  $|\mathcal{U}|$  είναι φραγμένο από  $kV$ , όπου  $k$  μία σταθερά που μας δίνει  $\frac{1}{V} \log |\mathcal{U}| \rightarrow 0$ . Άρα στο θερμοδυναμικό όριο ( $N, V \rightarrow \infty, \frac{N}{V} \rightarrow \rho$ ), έχουμε

$$\lim \frac{1}{V} \log \mathbf{Q}_{\Lambda; \beta, N} = -\inf_u \{\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)\} \stackrel{def}{=} -\hat{f}(\beta, \rho). \quad (1.28)$$

Πρέπει να τονίσουμε ότι υπό την canonical Gibbs κατανομή, η πυκνότητα ενέργειας του συστήματος συγκεντρώνεται, στο θερμοδυναμικό όριο, στην τιμή  $\bar{u} = \bar{u}(\beta, \rho)$  που ελαχιστοποιεί το  $\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)$ . Για  $\epsilon > 0$ , ορίζουμε

$$\mathcal{U}_\epsilon \stackrel{def}{=} \left\{ U \in \mathcal{U} : |\{\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)\} - \{\beta \bar{u} - s_{Boltz}(\bar{u}, \rho)\}| \leq \epsilon \right\}$$

το σύνολο των ενεργειών για τις οποίες η ποσότητα  $\beta u - s_{Boltz}(u, \rho)$  διαφέρει από το minimum κατά  $\epsilon$ .

Χρησιμοποιώντας την σχέση (1.27) με το άθροισμα να παίρνει τιμές  $U \in \mathcal{U} \setminus \mathcal{U}_\epsilon$

$$\begin{aligned} \mu_{\Lambda; \beta, N} \left( \frac{\mathcal{H}}{V} \notin \mathcal{U}_\epsilon \right) &= \frac{\sum_{U \in \mathcal{U} \setminus \mathcal{U}_\epsilon} e^{-\beta U + \mathbf{s}_{Boltz}(\Lambda, U, N)}}{\mathbf{Q}_{\Lambda; \beta, N}} \\ &\leq \frac{|\mathcal{U}| e^{-V \{\beta \bar{u} - s_{Boltz}(\bar{u}, \rho) + \epsilon\}}}{e^{-V \{\beta \bar{u} - s_{Boltz}(\bar{u}, \rho)\}}} e^{o(1)V} \leq e^{-(\epsilon - o(1))V} \end{aligned}$$

το οποίο τείνει στο 0 καθώς  $V \rightarrow \infty \forall \epsilon > 0$ .

Θα χρησιμοποιήσουμε την Αρχή του Boltzmann ώστε να συσχετίσουμε ορισμένες ποσότητες με τα θερμοδυναμικά τους αντίστοιχα.

Αφού η πυκνότητα ενέργειας συγκεντρώνεται στην τιμή  $\bar{u}$  είναι φυσικό να συσχετίσουμε την τιμή αυτή με την ενέργεια πυκνότητα στη θερμοδυναμική ισορροπία. Θεωρούμε επίσης ότι η  $\bar{u}$  είναι η τιμή για την οποία ισχύει (θεωρούμε ότι η συνάρτηση είναι διαφορίσιμη)

$$\beta = \frac{\partial \mathbf{s}_{Boltz}}{\partial u}(\bar{u}, \rho). \quad (1.29)$$

Χρησιμοποιούμε την Αρχή του Boltzmann για να συσχετίσουμε το  $\mathbf{s}_{Boltz}$  με την θερμοδυναμική πυκνότητα εντροπίας  $s$  και συγκρίνοντας την (1.27) με το δεξί μέλος της (1.3) παρατηρούμε ότι η παράμετρος  $\beta$  της canonical κατανομής θα πρέπει να ερμηνευτεί ως **αντίστροφη θερμοκρασία**. Συγκρίνοντας τη σχέση (1.28) με την (1.13), παρατηρούμε ότι η  $f(T, \rho) = T \hat{f}(1/T, \rho)$  μπορεί να ταυτοποιηθεί με την **Helmholtz free energy density**. Αν υπάρχει το όριο

$$-\lim \frac{1}{\beta V} \log \mathbf{Q}_{\Lambda; \beta, N} \quad (1.30)$$

τότε αυτό είναι το σχετικό θερμοδυναμικό potential για την περιγραφή του canonical lattice αερίου και θα καλείται **free energy**.

## Grand canonical ensemble

Όμοια με την περίπτωση του canonical ensemble, θεωρούμε την Grand canonical ensemble συνάρτηση επιμερισμού με παραμέτρους  $\beta, \mu$  ενός αερίου σε ένα χωρίο  $|\Lambda| = V$ :

$$\begin{aligned}\Theta_{\Lambda;\beta,\mu} &= \sum_{N,U} e^{\beta\mu N - \beta U} |\Omega_{\Lambda;U,N}| \\ &= \sum_{N,U} e^{\beta\mu N - \beta U + \mathbf{S}_{Boltz}(\Lambda,U,N)} \\ &= e^{o(1)V} \sum_{\rho,u} e^{-\{\beta u - \beta\mu\rho - s(u,\rho)\}V}.\end{aligned}$$

Με την ίδια μεθοδολογία καταλήγουμε ότι στο θερμοδυναμικό όριο  $V \rightarrow \infty$ ,

$$\lim \frac{1}{V} \log \Theta_{\Lambda;\beta,\mu} = -\inf_{u,\rho} \{\beta u - \beta\mu\rho - s(u,\rho)\} \stackrel{def}{=} -\hat{\phi}_G(\beta, -\frac{\mu}{T}). \quad (1.31)$$

Οι πυκνότητες ενέργειας και σωματιδίων  $u, \rho$  συγκεντρώνονται στις τιμές  $\bar{u} = \bar{u}(\beta, \mu)$  και  $\bar{\rho} = \bar{\rho}(\beta, \mu)$  τέτοια ώστε

$$\beta = \frac{\partial s}{\partial u}(\bar{u}, \bar{\rho}), \quad \beta\mu = \frac{\partial s}{\partial \rho}(\bar{u}, \bar{\rho})$$

Συγκρίνοντας αυτές τις σχέσεις με τις (1.3), (1.6), βλέπουμε ότι μπορούμε να ερμηνεύσουμε τις παραμέτρους  $\beta$  και  $\mu$  της grand canonical κατανομής ως την **αντίστροφη θερμοκρασία** και το **chemical potential** αντίστοιχα.

Συγκρίνοντας τη σχέση (1.31) με την (1.14), παρατηρούμε ότι η  $\phi_G(T, \mu) = T\hat{\phi}_G(1/T, -\mu/T)$  μπορεί να ταυτοποιηθεί με το **grand potential**, που είδαμε ότι αντιστοιχεί στην πίεση του μοντέλου. Άρα συμπεραίνουμε ότι όταν το όριο υπάρχει,

$$\lim \frac{1}{\beta V} \log \Theta_{\Lambda;\beta,\mu} \quad (1.32)$$

είναι το σχετικό θερμοδυναμικό δυναμικό για την περιγραφή του grand canonical ensemble και θα καλείται **πίεση**.

### 1.3.2 Η εξίσωση κατάστασης του ιδεατού αερίου

Ο υπολογισμός του **free energy** και της **πίεσης** ενός μοντέλου δεν είναι τετριμμένη υπόθεση. Εμείς θα το υπολογίσουμε για την απλή περίπτωση του **hard-core lattice gas**. Έστω  $\beta > 0$  και  $\mu \in \mathbb{R}$ . Αφού  $\mathcal{H} \equiv 0$  τότε η grand-canonical συνάρτηση επιμερισμού υπολογίζεται

$$\Theta_{\Lambda;\beta,\mu} = \sum_{N=0}^V \binom{V}{N} e^{\beta\mu N} = (1 + e^{\beta\mu})^V$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τον γνωστό τύπο της διωνυμικής σειράς  $\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{n-k} y^k = (x + y)^n$ .

Προκύπτει ότι η πίεση  $\lim \frac{1}{\beta V} \log \Theta_{\Lambda;\beta,\mu}$  στο θερμοδυναμικό όριο  $V \rightarrow \infty$  είναι

$$p(T, \mu) = T \log(1 + e^{\beta\mu}). \quad (1.33)$$

Ο μέσος αριθμός σωματιδίων δίνεται από τον τύπο

$$\langle N_{\Lambda} \rangle_{\nu_{\Lambda}; \beta, \mu} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log \Theta_{\Lambda; \beta, \mu}}{\partial \mu} = \frac{e^{\beta \mu}}{(1 + e^{\beta \mu})} V$$

και στο θερμοδυναμικό όριο  $V \rightarrow \infty$  μας δίνει

$$\rho(\beta, \mu) \stackrel{def}{=} \lim_{V \rightarrow \infty} \langle N_{\Lambda} \rangle_{\nu_{\Lambda}; \beta, \mu} = \frac{e^{\beta \mu}}{(1 + e^{\beta \mu})}.$$

Συνδυάζοντας αυτή τη σχέση με τη σχέση (1.33) προκύπτει η εξίσωση της ισοθερμίας:

$$\begin{aligned} p &= T \log((1 + e^{\beta \mu})) = -T \log\left(\frac{1}{(1 + e^{\beta \mu})}\right) \\ &= -T \log\left(\frac{(1 + e^{\beta \mu}) - e^{\beta \mu}}{(1 + e^{\beta \mu})}\right) \\ &= -T \log(1 - \rho). \end{aligned} \tag{1.34}$$

Για «αραιωμένα» αέρια  $\rho \ll 1$ , το ανάπτυγμα *Taylor* μας δίνει  $-\log(1 - \rho) = \rho + \frac{\rho^2}{2} + \frac{\rho^3}{3} \dots$ ,  $|\rho| < 1$  και άρα προκύπτει  $p = \rho T + O(\rho^2)$  όπου θέτουμε  $\nu = \frac{1}{\rho}$  (specific volume) και μετασχηματίζεται σε

$$p\nu = T + O\left(\frac{1}{\nu}\right)$$

και άρα καταφέραμε να καταλήξουμε στην εξίσωση κατάστασης (1.12) του ιδεατού αερίου.

**Σχόλιο 1.3.2.** Ο λόγος που παρουσιάζονται αποκλίσεις από το ιδεατό αέριο σε υψηλές πυκνότητες (μικρά  $V$ ) είναι οι απωθήσεις μεταξύ των σωματιδίων που προέρχονται από το γεγονός ότι δεν μπορεί να χωράει στο κελί παραπάνω από ένα σωματίδιο.

### 1.3.3 Η βασική δομή

Η βασική δομή που έχουμε εφαρμόσει μέχρι στιγμής στο lattice gas είναι:

1. Περιγράφουμε το  $\Omega$  και βρίσκουμε τη Χαμιλτονιανή.
2. Υπολογίζουμε την κατανομή Gibbs πεπερασμένου όγκου και αν χρειάζεται υπολογίζουμε την πίεση και free energy.
3. Εφαρμόζουμε το θερμοδυναμικό όριο.
4. Με την βοήθεια των προηγούμενων βημάτων είμαστε σε θέση να εξετάσουμε όποιο ερώτημα προκύψει όσον αφορά στις μακροσκοπικές ιδιότητες του συστήματος που θέλουμε να μελετήσουμε αλλά και για το φαινόμενο phase transition.

**Σχόλιο 1.3.3.** Επειδή είναι πιο εύκολο, από την πλευρά των μαθηματικών, και προσεγγίζει μία πιο «πραγματική» κατάσταση συστήματος να εργαστούμε με σταθερές θερμοκρασίες παρά με σταθερές ενέργειες. Άρα τα βασικά μας εργαλεία είναι:

- *Canonical Gibbs* κατανομή
- *Grand Canonical Gibbs* κατανομή

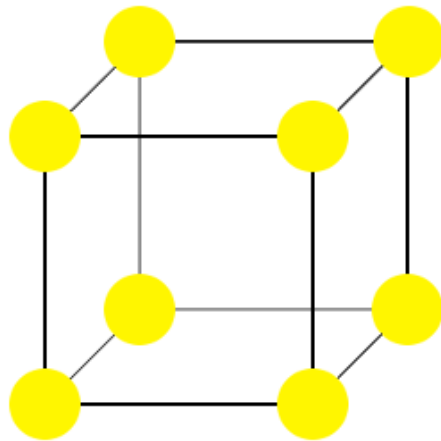
## 1.4 Μαγνητικά συστήματα

Τα μαγνητικά συστήματα είναι μία σημαντική περίπτωση μακροσκοπικών συστημάτων και παρουσιάζουν δύο βασικές συμπεριφορές:

- Παραμαγνητική συμπεριφορά
- Φερομαγνητική συμπεριφορά

### 1.4.1 Παραμαγνητικά και Φερομαγνητικά συστήματα

Έστω ένα δείγμα από ένα υλικό του οποίου τα άτομα είναι ταξινομημένα σε μία χρυσταλλική δομή, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



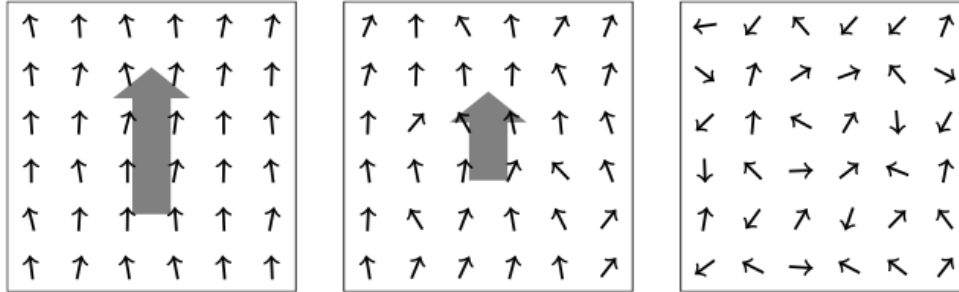
Υποθέτουμε ότι κάθε άτομο φέρει μία **μαγνητική ροπή** (magnetic moment), ας φανταστούμε δηλαδή ότι κάθε άτομο έχει ένα μαγνήτη (μαγνητικό δίπολο), το οποίο ονομάζεται **spin**. Θεωρούμε ότι κάθε spin έχει την τάση να στοιχίζεται με το γειτονικό spin αλλά και με ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Άμα το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο έχει μία συγκεκριμένη προκαθορισμένη κατεύθυνση τότε όλα τα spin είναι ολικά κατανεμημένα, δηλαδή τείνουν να στοιχιστούν με το πεδίο άρα όλα έχουν ένα συγκεκριμένο προσανατολισμό.

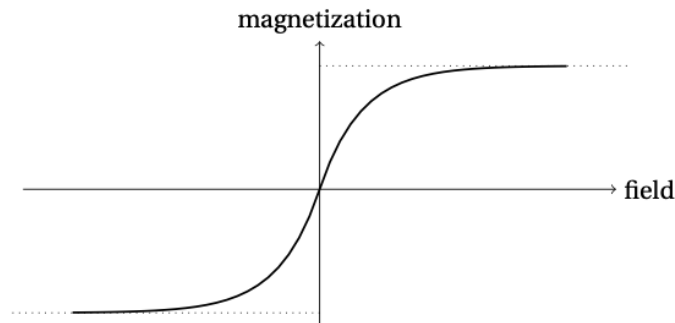
Όταν αρχίσουμε να ελαττώνουμε, με αργό ρυθμό, την ένταση του μαγνητικού πεδίου μέχρι να τη μηδενίσουμε, τότε παρατηρούμε δύο συμπεριφορές.

#### **Παραμαγνητική Συμπεριφορά**

Ονομάζεται η συμπεριφορά κατά την οποία η ολική τάξη χάνεται καθώς η ολική στοίχιση χαλάει λόγω της μείωσης της έντασης του πεδίου.

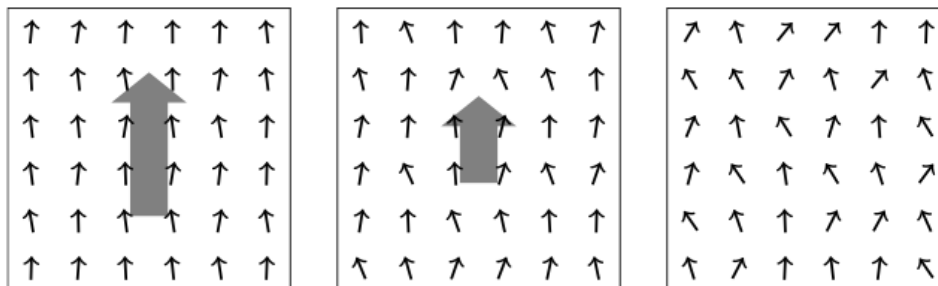


Το φαινόμενο μπορεί να μετρηθεί ποσοτικά με την εισαγωγή της έννοιας της **μαγνήτισης** (*magnetization*), που είναι ο μέσος όρος των spin. Για έναν παραμαγνήτη, όταν το μαγνητικό πεδίο φθίνει από μία θετική τιμή στο μηδέν (διατηρώντας την κατεύθυνση) ή αντίστοιχα αν αυξηθεί από αρνητική τιμή στο μηδέν, η μαγνήτιση τείνει στο μηδέν (θα το διαπιστώσουμε αναλυτικά αργότερα).

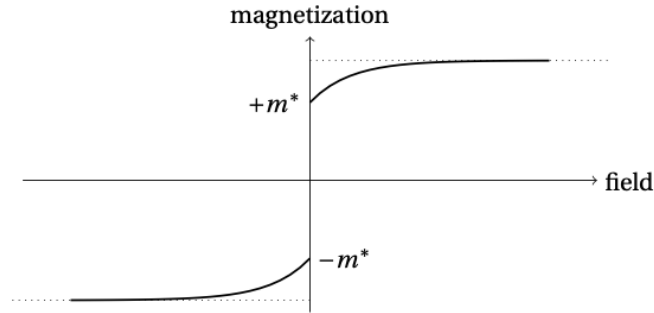


### Φερομαγνητική Συμπεριφορά

Καθώς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο ελαττώνεται, η ολική τάξη χάνεται, αλλά η τοπική αλληλεπίδραση μεταξύ spin είναι αρκετά δυνατή για να διατηρήσει μία ολική μαγνητική κατάσταση ακόμα και όταν το πεδίο μαγνητικό πεδίο έχει εξαφανιστεί. Αυτή η συμπεριφορά ονομάζεται **φερομαγνητική**.



Ένας φερομαγνήτης παρουσιάζει στιγμιαία μαγνήτιση, που ουσιαστικά διατάσσει ολικά τα spin ακόμα και στην απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Η τιμή αυτή,  $\pm m^*$  εξαρτάται από το αν το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο προσεγγίζει το μηδέν από θετικές ή αρνητικές τιμές.



Όταν το πεδίο πάει στο μηδέν, η μαγνήτιση παρουσιάζει ασυνέχεια από  $-m^* \rightleftharpoons +m^*$ . Αυτό ονομάζεται πρώτης τάξης **phase transition**. Η διάκριση μεταξύ των δύο τύπων μαγνητικής συμπεριφοράς έγινε από τον Pierre Curie το 1895, ο οποίος παρατήρησε ότι ένα υλικό μπορεί να αλλάξει από την μία ιδιότητα στην άλλη με βάση την αλλαγή της θερμοκρασίας. Συγκεκριμένα η συμπεριφορά μπορεί στιγμιαία να αλλάξει από φερομαγνητική σε παραμαγνητική αν η θερμοκρασία ξεπεράσει μία συγκεκριμένη (για κάθε υλικό) τιμή, γνωστή και ως **Curie temperature**.

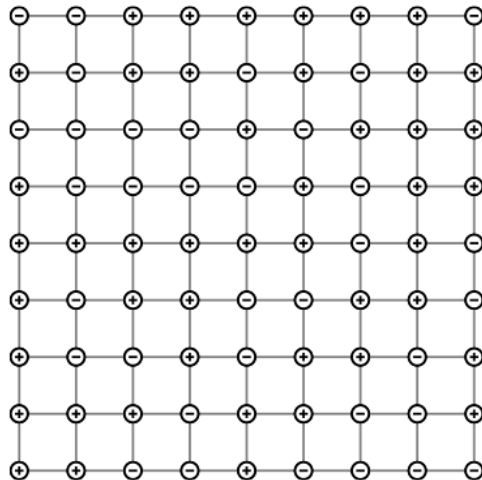
### 1.4.2 Το μοντέλο Ising

Το μοντέλο Ising αναπτύχθηκε από τον Wilhelm Lenz το 1920 [5] με σκοπό την κατανόηση του φαινομένου phase transition. Ονομάστηκε μοντέλο Ising εξαιτίας της διάσημης επιστημονικής εργασίας του Rudolph Peierls [6] που είχε ως αναφορά τη διατριβή του Ising [7] το 1925 υπό την επίβλεψη του Lenz, με θέμα τη μελέτη του συγκεκριμένου μοντέλου σε μία διάσταση.

Το συγκεκριμένο μοντέλο είναι το πρώτο σύστημα με τοπικά αλληλεπιδρόντα σωματίδια για το οποίο αποδεικνύεται η ύπαρξη του φαινομένου phase transition.

Μοντελοποιούμε την regular κρυσταλλική δομή που αντιστοιχεί σε θέσεις ατόμων στο μαγνήτη με ένα πεπερασμένο, μη προσανατολισμένο γράφημα  $G = (\Lambda, \mathcal{E})$ , όπου το σύνολο των κορυφών  $\Lambda$  είναι υποσύνολο του  $\mathbb{Z}^d$ . Ένα τυπικό παράδειγμα που θα χρησιμοποιούμε στα πλαίσια αυτής της εργασίας είναι το λεγόμενο **box of radius n**:

$$B(n) = \{-n, \dots, n\}^d$$





Οι ακμές του γραφήματος θα είναι μεταξύ «κοντινών περιοχών» (nearest neighbours), δηλαδή ζεύγος κορυφών  $i, j \implies \|i - j\|_1 = 1$  όπου  $\|i\|_1 = \sum_{k=1}^d |i_k|$ . Με  $i \sim j$  συμβολίζουμε ότι το  $i$  και το  $j$  είναι γειτονικές κορυφές. Άρα το σύνολο των ακμών στο κουτί  $B(n)$  είναι  $E = \{\{i, j\} \subset B(n) : i \sim j\}$ .

Στο μοντέλο Ising αρχικά υποθέτουμε ότι ένα spin είναι τοποθετημένο σε κάθε κορυφή του γραφήματος  $G = (\Lambda, \mathcal{E})$ . Μια σύμβαση είναι ότι τα spin έχουν μόνο δύο κατευθύνσεις, είτε «πάνω» (+1) είτε «κάτω» (-1). Για να περιγράψουμε το microstate, μία μεταβλητή  $\omega_i$  παίρνει δύο τιμές  $\{-1, +1\}$ , η οποία αντιστοιχεί σε κάθε κορυφή  $i \in \Lambda$ . Αυτή η μεταβλητή θα καλείται spin στο  $i$ .

Ένα microstate του συστήματος, θα καλείται configuration, είναι ένα  $\omega \in \Omega_\Lambda$  με

$$\Omega_\Lambda = \{-1, +1\}^\Lambda.$$

Οι μικροσκοπικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των spin έχουν τα εξής χαρακτηριστικά:

1. Υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ ζεύγος spin σε γειτονικές κορυφές. Τα spin δυο διαφορετικών κορυφών  $\{i, j\} \in \Lambda$  αλληλεπιδρούν αν και μόνο αν το ζεύγος  $\{i, j\}$  είναι μία ακμή του γραφήματος.
2. Η αλληλεπίδραση ευνοεί συμβατά πρόσημα spin . Ένα ζεύγος spin στα άκρα  $i, j$  μιάς ακμής ελαττώνει τη συνολική ενέργεια του configuration αν «συμφωνούν» ( $\omega_i = \omega_j$ ) και την αυξάνουν αν «διαφωνούν» ( $\omega_i \neq \omega_j$ ) . Συγκεκριμένα τα spin στα άκρα της ακμής  $\{i, j\}$  συμβάλλουν στη συνολική ενέργεια κατά

$$-\omega_i \omega_j.$$

Άρα configurations με τα περισσότερα γειτονικά ζεύγη να συμφωνούν έχουν μικρότερη ενέργεια.

3. Τα spin ευθυγραμμίζονται με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Έστω ένα σταθερό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο έντασης  $h \in \mathbb{R}$  δρά στο σύστημα. Η αλληλεπίδραση του με το spin στο  $i$  συνεισφέρει στη συνολική ενέργεια κατά

$$-h\omega_i \omega_j.$$

Άρα αν το μαγνητικό πεδίο είναι θετικό, το configuration με τα περισσότερα spin να είναι +1 είναι αυτό με τη μικρότερη ενέργεια.

Η ενέργεια ενός configuration  $\omega$  είναι ίση με το άθροισμα της αλληλεπίδρασης όλων των ζεύγων μεταξύ τους και με την αλληλεπίδραση κάθε spin με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου Ising είναι:

$$\mathcal{H}_{\Lambda;h}(\omega) = - \sum_{\{i,j\} \in \Lambda, i \sim j} \omega_i \omega_j - h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i, \omega \in \Omega_\Lambda$$

Επειδή όπως βλέπουμε το μοντέλο ευνοεί συμβατά πρόσημα spin, η Χαμιλτονιανή του μοντέλου χαρακτηρίζεται **φερομαγνητική** (χωρίς αυτό να σημαίνει ότι το μοντέλο συμπεριφέρεται φερομαγνητικά).

Η Gibbs κατανομή δίνεται από τον τύπο

$$\mu_{\Lambda;\beta,h}(\omega) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Lambda,h}(\omega)}}{Z_{\Lambda;\beta,h}}$$

όπου  $Z_{\Lambda;\beta,h}$  είναι η συνάρτηση επιμερισμού. Η μέση τιμή ενός observable  $f : \Omega_{\Lambda} \rightarrow \mathbb{R}$  υπό το μέτρο  $\mu_{\Lambda;\beta,h}$  είναι  $\langle f \rangle_{\Lambda;\beta,h}$ .

**Παρατήρηση 1.6.** Υπό την απουσία μαγνητικού πεδίου ( $h = 0$ ) παρόλο την τοπική στοιχίση των spin της Χαμιλτονιανής, καμία από τις κατευθύνσεις  $+1, -1$  δεν είναι πιο πιθανή. Συγκεκριμένα αν  $-\omega$  είναι **spin-flipped configuration**, δηλαδή ισχύει  $(-\omega)_i = -\omega_i$  τότε  $\mathcal{H}_{\Lambda,0}(-\omega) = \mathcal{H}_{\Lambda,0}(\omega)$  από το οποίο συμπεραίνουμε ότι

$$\mu_{\Lambda;\beta,0}(-\omega) = \mu_{\Lambda;\beta,0}(\omega)$$

Άρα το μοντέλο είναι **αναλλοίωτο υπό global spin flip**. Αυτό δεν ισχύει για  $h \neq 0$ .

### 1.4.3 Θερμοδυναμική συμπεριφορά

Ο στόχος μας είναι η μελέτη του μοντέλου Ising σε μία μεγάλη περιοχή  $\Lambda$  και εν τέλη να πάρουμε το θερμοδυναμικό όριο π.χ.  $\Lambda = B(n)$   $n \rightarrow \infty$ .

Για διευκόλυνση αρχικά θα θεωρήσουμε την απουσία μαγνητικού πεδίου  $h = 0$ . Ένα ερώτημα που προκύπτει φυσικά είναι κάτω από ποιές συνθήκες μπορεί η φερομαγνητική φύση του μοντέλου, που έχει την τάση να στοιχίσει τα spin τοπικά, να ορίσει την τάξη σε μακροσκοπική κλίμακα.

Για να απαντήσουμε στο ερώτημα αυτό πρέπει να ποσοτικοποιήσουμε την ολική τάξη. Αυτό γίνεται με την εισαγωγή της ποσότητας που ονομάζεται **ολική μαγνήτιση**

$$M_{\Lambda}(\omega) \stackrel{def}{=} \sum_{i \in \Lambda} \omega_i.$$

Τότε προκύπτει η **πυκνότητα μαγνήτισης**

$$\frac{M_{\Lambda}(\omega)}{|\Lambda|} \in [-1, 1]$$

η οποία μας προσφέρει πληροφορία για την ισορροπία μεταξύ των δύο τιμών spin στο σύστημα.

Όπως αναφέραμε και παραπάνω, η κατανομή Gibbs είναι αναλλοίωτη κάτω από **global spin flip** στο  $h = 0$ . Αυτό έχει ως συνέπεια ότι η μέση τιμή της μαγνήτισης είναι μηδέν σε όλες τις θερμοκρασίες. (Ως τεχνική απόδειξη στο Appendix A)

$$\langle M_{\Lambda} \rangle_{\Lambda;\beta,0} = 0 \tag{1.35}$$

Η σχέση αυτή μας δείχνει ότι κατα μέσο όρο οι πυκνότητες των  $+$  και  $-$  spin είναι ίσες, χωρίς αυτό να σημαίνει ότι οι πυκνότητες των δυο διαφορετικών spin είναι ίσες σε ένα τυπικό configuration του μοντέλου. Θα μελετήσουμε τις διακυμάνσεις του  $M_{\Lambda}$  γύρω από τη μέση τιμή.

Για να κατανοήσουμε την εξάρτηση από τη θερμοκρασία, θα μελετήσουμε τις διακυμάνσεις του  $M_{\Lambda}$  σε δύο οριακές καταστάσεις:

- **infinite temperature** ( $\beta = \frac{1}{T} \downarrow 0$ ),
- **zero temperature** ( $\beta = \frac{1}{T} \uparrow \infty$ ).

Μελετώντας αυτές τις δύο οριακές καταστάσεις θα κατανοήσουμε τι συμβαίνει στις ενδιάμεσες τιμές της θερμοκρασίας στο infinite-volume μοντέλο Ising. Στη μελέτη μας θεωρούμε ότι  $\Lambda = B(n)$ .

### Infinite temperature.

Έστω το μοντέλο στον  $B(n)$  με  $n$  σταθερό. Στο όριο  $\beta \rightarrow 0$ , η κατανομή Gibbs συγκλίνει στην ομοιόμορφη στον  $\Omega_{B(n)} : \forall \omega \in \Omega_{B(n)}$

$$\lim_{\beta \downarrow 0} \mu_{B(n); \beta, 0}(\omega) = \mu_{B(n); 0, 0}(\omega) = \frac{1}{|\Omega_{B(n)}|}. \quad (1.36)$$

Άρα, αφού συμβεί  $\beta \downarrow 0$ , το  $M_{B(n)}$  είναι το άθροισμα **ανεξάρτητων και ισόνομων** τυχαίων μεταβλητών.

Άρα σε περιοχές με μεγάλο μέγεθος χρησιμοποιούμε τα κλασσικά οριακά θεωρήματα της Θεωρίας Πιθανοτήτων. Από τον Νόμο των Μεγάλων Αριθμών έχουμε ότι  $\forall \epsilon > 0$

$$\mu_{B(n); 0, 0} \left( \frac{M_{B(n)}}{|B(n)|} \notin [-\epsilon, \epsilon] \right) \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty \quad (1.37)$$

Ενώ το Κεντρικό Οριακό Θεώρημα μας δίνει  $\forall a < b$

$$\mu_{B(n); 0, 0} \left( \frac{a}{\sqrt{|B(n)|}} \leq \frac{M_{B(n)}}{|B(n)|} \leq \frac{b}{\sqrt{|B(n)|}} \right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} dx. \quad (1.38)$$

### Zero temperature.

Στην αντίθετη κατεύθυνση,  $\beta = \frac{1}{T} \uparrow \infty$  στο κουτί  $B(n)$  (με σταθερό  $n$ ) η κατανομή  $\mu_{B(n); 0, 0}$  συγκεντρώνεται στα configurations που ελαχιστοποιούν τη Χαμιλτονιανή και ονομάζονται **ground states**.

Το μοντέλο Ising στο  $B(n)$  έχει δύο states: σταθερά configurations  $\eta^+, \eta^- \in \Omega_{B(n)}$ , που ορίζονται ως

$$\eta_i^+ = 1 \quad \forall i \in B(n) \quad \eta_i^- = -1 \quad \forall i \in B(n)$$

Έστω  $\omega$  ένα διαφορετικό configuration από τα  $\eta^+, \eta^-$ . Τότε υπάρχει τουλάχιστον ένα ζεύγος (κοντινών γειτόνων)  $\{i, j\} \in B(n)$  με  $\omega_i \neq \omega_j$

$$\mathcal{H}_{B(n)}(\omega) - \mathcal{H}_{\eta^\pm} = - \sum_{i,j \in \Lambda, i \sim j} \omega_i \omega_j - \left( - \sum_{i,j \in \Lambda, i \sim j} 1 \right) = \sum_{i,j \in \Lambda, i \sim j} (1 - (\omega_i \omega_j)) \geq 2. \quad (1.39)$$

Άρα

$$\frac{\mu_{B(n); 0, 0}(\omega)}{\mu_{B(n); 0, 0}(\eta^\pm)} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_{B(n)}(\omega)}}{e^{-\beta \mathcal{H}_{B(n)}(\eta^\pm)}} \leq e^{-2\beta} \quad \beta \uparrow \infty.$$

Επειδή  $\mu_{B(n);0,0}(\eta^-) = \mu_{B(n);0,0}(\eta^+)$ , έχουμε

$$\lim_{\beta \uparrow \infty} \mu_{B(n);0,0}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \omega \in \{\eta^+, \eta^-\} \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

που σημαίνει ότι στο όριο σε χαμηλές θερμοκρασίες η κατανομή Gibbs παγώνει το σύστημα σε ένα από τα δύο ground state.

Οι δύο διαφορετικές συμπεριφορές που παρατηρούμε στα όρια  $\beta = \frac{1}{T} \uparrow \infty, \beta = \frac{1}{T} \downarrow 0$  μας δείχνουν δύο πιθανά σενάρια για τη συμπεριφορά στις χαμηλές και υψηλές θερμοκρασίες του μοντέλου Ising στο κουτί  $B(n)$ , για μεγάλο  $n$ .

1. Όταν το  $\beta$  είναι χαμηλό (υψηλή θερμοκρασία), είδαμε ότι η ολική πυκνότητα μαγνήτισης είναι κοντά στο μηδέν (με υψηλή πιθανότητα)

$$\frac{M_{Bn}}{|B(n)|} \cong 0.$$

Σε αυτό το σενάριο, σε ένα τυπικό configuration, τα + και - είναι ίσα.

2. Όταν το  $\beta$  είναι μεγάλο (χαμηλή θερμοκρασία),  $\mu_{B(n);0,0}$  συγκεντρώνεται στα configuration που συμπίπτουν με τα ground state  $\eta^+, \eta^-$ . Με υψηλή πιθανότητα έχουμε,

$$\frac{M_{Bn}}{|B(n)|} \cong +1 \quad \text{ή} \quad \frac{M_{Bn}}{|B(n)|} \cong -1.$$

γιατί

$$M_{\Lambda}(\omega) = \sum_{i \in \Lambda} \omega_i \quad \text{για} \quad \eta^+, \eta^- \implies M_{\Lambda}(\eta^{\pm}) = \sum_{i \in \Lambda} \eta^{\pm}_i = \sum_{i \in \Lambda} \pm 1 = \pm |\Lambda|.$$

Σε αυτό το σενάριο παρατηρείται **στιγμιαία μαγνήτιση ή ολική τάξη** αφού η πλειοψηφία των spin έχουν το ίδιο σύμβολο. Εδώ ο Νόμος των Μεγάλων Αριθμών δεν ισχύει, γιατί κάθε spin έχει μέση τιμή μηδέν και το observation ενός συστήματος δείχνει ότι  $|B(n)|^{-1} \sum_{i \in B(n)} \omega_i$  δεν είναι κοντά στο 0. Η συμμετρία κάτω από global spin flip στιγμιαία παραβιάζεται με την έννοια ότι στιγμιαία η κατανομή Gibbs δίνει έμφαση σε μία από τις δυο κατηγορίες spin, παρόλο που η κατανομή Gibbs είναι ουδέτερη.

**Σχόλιο 1.4.1.** Εμείς δώσαμε μία τιμή στο  $n$  και παρατηρήσαμε τα ground state για  $\beta = \infty$ .

Όμως εμείς θα θέλαμε να δούμε αν κάποια από τις συμπεριφορές δίνουν τη σωστή περιγραφή του συστήματος για  $0 < \beta < \infty$ . Από φυσικής πλευράς θα θέλαμε να δούμε εάν η ολική διάταξη των spin στο  $\beta = \infty$  «επιβιώνει» ακόμα και για μεγάλα συστήματα, δηλαδή μεγάλες αλλά πεπερασμένες τιμές του  $\beta$ . Θα πάρουμε θερμοδυναμικό όριο σε μία συγκεκριμένη του  $\beta$  (δηλαδή του  $T$ ) και θα αφήσουμε το  $n \rightarrow \infty$ . Θα δούμε ότι τα ground state δεν έχουν μεγάλη πιθανότητα να παρατηρηθούν. Έστω  $\Omega_{B(n)}^k$  το σύνολο των configurations που συμπίπτουν παντού με τα  $\eta^+, \eta^-$  εκτός από ακριβώς  $k$  κορυφές όπου τα spin διαφέρουν με τα ground state. Τέτοιες παραμορφώσεις μακριά από τα ground state ονομάζονται **excitations**. Αυτό σημαίνει ότι  $\forall \omega \in \Omega_{B(n)}^k$

$$\mathcal{H}_{B(n);0}(\omega) - \mathcal{H}_{B(n);0}(\eta^\pm) \leq 4dk.$$

Το φράγμα αυτό επιτυγχάνεται όταν κανένα από τα  $k$  δεν είναι σε κοντινές κορυφές και κανένα δεν είναι κοντά στο σύνορο του  $B(n)$ . Παρατηρούμε ότι  $|\Omega_{B(n)}^k| = \binom{|B(n)|}{k}$  και  $k$  είναι πάντα το πολύ ή ίσο με  $\frac{|B(n)|}{2}$ . Αυτό σημαίνει ότι  $\forall k \geq 1$ .

$$\begin{aligned} \frac{\mu_{B(n);\beta,0}(\Omega_{B(n)}^k)}{\mu_{B(n);\beta,0}(\eta^\pm)} &= \sum_{\omega \in \Omega_{B(n)}^k} e^{(-\beta \mathcal{H}_{B(n);0}(\omega) - \mathcal{H}_{B(n);0}(\eta^\pm))} \\ &\geq \binom{|B(n)|}{k} e^{-4d\beta k} \geq \frac{1}{k!} \left(\frac{1}{2}|B(n)|e^{-4d\beta}\right)^k \gg 1, \end{aligned}$$

για όλα τα  $n$  αρκετά μεγάλα (για σταθερό  $\beta$ ).

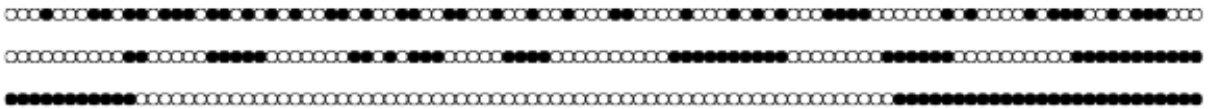
Ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι πιθανό να έχουμε misaligned spin σε μεγάλες περιοχές. Αυτό μας δείχνει ότι υπάρχουν δύο ανταγωνιστικές απόψεις όταν αναλύουμε τυπικά configuration υπό το μέτρο Gibbs σε χαμηλές θερμοκρασίες. Αρχικά configuration με χαμηλή ενέργεια είναι προτιμότερα γιατί έχουν μεγάλη πιθανότητα (**energy part**).

Ο αριθμός των configuration με δεδομένο excitation μεγαλώνει γρήγορα με το μέγεθος του συστήματος και ταχύρρυθμα ξεπερνάει τον αριθμό των ground state (**entropy part**). Αυτός ο ανταγωνισμός ενέργειας-εντροπίας είναι στον «πυρήνα» πολλών φαινομένων που περιγράφονται από τη στατιστική μηχανική στην ισορροπία και συγκεκριμένα στην περίπτωση του φαινομένου phase transition.

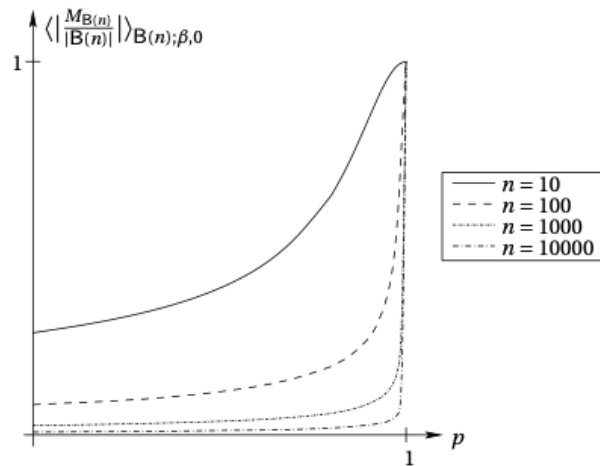
Συμπεριφορά στο  $\mathbb{Z}^d$ .

- Το μοντέλο σε μία διάσταση

Παρουσιάζουμε στην παρακάτω εικόνα προσομοιώσεις που έγιναν σε ένα τυπικό configuration του μονοδιάστατου μοντέλου Ising στο  $B(50)$  για αυξανόμενες τιμές της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta$  (για  $h = 0$ ). Συμβολίζουμε με μαύρο χρώμα τα spin που παίρνουν την τιμή  $+$  και με άσπρο τα spin που παίρνουν την τιμή  $-$ .



Καθώς η τιμή του  $\beta$  αυξάνεται, παρατηρούμε ότι τα spin ταυτίζονται σε μεγάλες περιοχές. Δηλαδή τοπικά επικρατούν τα ground state  $\eta^+, \eta^-$ . Όπως αναφέραμε μπορούμε να ποσοτικοποιήσουμε την ολική τάξη χρησιμοποιώντας την ποσότητα  $\frac{M_{B(n)}}{|B(n)|}$ . Επειδή όμως έχει μέση τιμή μηδέν θα χρησιμοποιήσουμε τη μέση τιμή της  $|\frac{M_{B(n)}}{|B(n)|}|$ .



Η αναμενόμενη τιμή της  $|\frac{M_{B(n)}}{|B(n)|}|$  ως συνάρτηση της  $p = 1 - e^{-2\beta}$ , για το μοντέλο σε μία διάσταση, τείνει στο μηδέν για  $p \in [0, 1)$  καθώς  $n \rightarrow \infty$ .

Άρα οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι για  $d = 1$  το μοντέλο Ising παρουσιάζει παραμαγνητική συμπεριφορά.

- **Το μοντέλο σε δύο διαστάσεις**

Παρουσιάζει φερομαγνητική και παραμαγνητική συμπεριφορά καθώς η θερμοκρασία ξεπερνά μία συγκεκριμένη τιμή, παρόμοια με αυτή την τιμή που παρατήρησε ο Curie στους «πραγματικούς» μαγνήτες.

Το phase transition χαρακτηρίζεται από δύο διαφορετικά καθεστώτα (χαμηλές και υψηλές θερμοκρασίες) στα οποία η συμπεριφορά του συστήματος παρουσιάζει σημαντικές διαφορές που πληθαίνουν καθώς το μέγεθος του συστήματος αυξάνεται.

**Σχόλιο 1.4.2.** Για τη μελέτη του μοντέλου *Ising* όταν το μαγνητικό πεδίο παίρνει μη-μηδενικές τιμές θα χρησιμοποιήσουμε δύο ποσότητες

- Τη μέση τιμή της πυκνότητας μαγνήτισης  $\langle \frac{M_{B(n)}}{|B(n)|} \rangle_{B(n); \beta, h}$ ,
- και την πίεση  $\psi_{B(n)}(\beta, h) \stackrel{def}{=} \frac{1}{\beta |B(n)|} \log \text{foreignlanguageenglish} Z_{B(n); \beta, h}$ .

Ορίζουμε τα εξής (απέριου όγκου) όρια

- $m(\beta, h) \stackrel{def}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \frac{M_{B(n)}}{|B(n)|} \rangle_{B(n); \beta, h}$ ,
- $\psi_{\beta, h} \stackrel{def}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{B(n)}(\beta, h)$ .

Θα δείξουμε στα επόμενα κεφάλαια ότι τα παραπάνω όρια υπάρχουν και θα δείξουμε ότι για κάθε  $h \neq 0$  ισχύει:

$$\frac{\partial \psi(\beta, h)}{\partial h} = m(\beta, h).$$

**Σχόλιο 1.4.3.** Γιατί χρησιμοποιούμε την πίεση για να εξάγουμε πληροφορίες για το σύστημα του μαγνήτη; Μπορούμε να δημιουργήσουμε μία 1-1 απεικόνιση μεταξύ του *microstate* του *lattice gas* και του μοντέλου *Ising* με τη βοήθεια της σχέσης

$$\omega_i \leftrightarrow 2\eta_i - 1.$$

Στο μοντέλο *Ising*, ο αριθμός των *spin* είναι προκαθορισμένος και ίσος με το μέγεθος του χωρίου που ορίζεται. Όμως το πόσα *spin* παίρνουν +1 ή -1 δεν είναι προκαθορισμένος. Άρα και ο αριθμός των σωματιδίων στο *lattice* αέριο δεν είναι προκαθορισμένος. Άρα ανταποκρίνεται στην *grand canonical* περιγραφή όπου το φυσικό θερμοδυναμικό *potential* είναι η πίεση.

# Κεφάλαιο 2

## Το μοντέλο Curie-Weiss

Στη στατιστική μηχανική, η προσέγγιση mean-field χρησιμοποιείται για να προσεγγίσουμε ένα μοντέλο, με τη βοήθεια ενός απλούστερου μοντέλου, του οποίου η ολική συμπεριφορά μπορεί να γίνει κατανοητή με αναλυτικούς υπολογισμούς. Οι πληροφορίες που έχουμε από αυτή τη μέθοδο, μπορούν να αποτελέσουν έναν δείκτη ως προς το ποιές ιδιότητες μπορούμε να αναμένουμε ότι θα εμφανίσει το αρχικό μας σύστημα.

Ουσιαστικά η βασική ιδέα της προσέγγισης mean-field είναι η αντικατάσταση όλων των αλληλεπιδράσεων σε ένα σώμα με μία μέση αλληλεπίδραση. Κατά αυτόν τον τρόπο ελαττώνουμε το many-body πρόβλημα σε one-body πρόβλημα.

Το μοντέλο Ising αποτελεί ένα κλασσικό παράδειγμα μοντέλου το οποίο δεν έχει αναλυτική λύση γενικά (εκτός από το μοντέλο σε μία διάσταση και το διδιάστατο με  $h = 0$ ). Την προσέγγιση mean-field του μοντέλου Ising θα την αναζητήσουμε στη μορφή του μοντέλου Curie-Weiss, όπου μερικοί συντελεστές στην αναπτυξή του συγκεκριμένου μοντέλου αποτελούν οι Temperley [8], Husimi [9] και Kač [10]. Παρόλο που είναι απλούστευση του μοντέλου Ising, το Curie-Weiss παρουσιάζει phase transition και διαφορετική συμπεριφορά σε χαμηλές και υψηλές θερμοκρασίες. Μέσα από αυτό θα δούμε πως η probabilistic συμπεριφορά είναι συνδεδεμένη με τις αναλυτικές ιδιότητες των θερμοδυναμικών potential (free energy και πίεση) του μοντέλου.

### 2.1 Η προσέγγιση mean-field

Έστω ένα σύστημα από Ising spins στο  $\mathbb{Z}^d$  που περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή του μοντέλου του Ising

$$\mathcal{H}_{\Lambda;h}(\omega) \stackrel{def}{=} - \sum_{\{i,j\} \in \Lambda, i \sim j} \omega_i \omega_j - h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i, \quad \omega \in \Omega_{\Lambda}$$

με spin  $\omega_i$  τοποθετημένο στην κορυφή  $i$  το οποίο αλληλεπιδρά με το σύνολο μέσω των γειτονικών spin. Η συνεισφορά του  $\omega_i$  με τα  $2d$  γειτονικά spin (αν θεωρήσουμε το  $B(d)$ ) στην ολική ενέργεια (στο Curie-Weiss) γράφεται ως

$$-\beta \sum_{j:j \sim i} \omega_i \omega_j = -2d\beta\omega_i \cdot \frac{1}{2d} \sum_{j:j \sim i} \omega_j. \quad (2.1)$$



Έτσι μπορούμε να συσχετίσουμε τη συνεισφορά του  $\omega_i$  στην ολική ενέργεια ως την αλληλεπίδραση του  $\omega_i$  με την **τοπική μαγνητική πυκνότητα**, που παράγεται από τον μέσο όρο των  $2d$  κοντινών *spin*

$$\frac{1}{2d} \sum_{j:j \sim i} \omega_j.$$

Όμως αυτή η μαγνητική πυκνότητα είναι τοπική και διαφέρει από περιοχή σε περιοχή.

Η mean-field προσέγγιση αποτελείται από την υπόθεση ότι κάθε τοπική μαγνητική πυκνότητα μπορεί να προσεγγιστεί από την ολική μαγνητική πυκνότητα

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \omega_j$$

όπου  $N$  είναι ο αριθμός των σωματιδίων του συστήματος.

Έρα η προσέγγιση του μοντέλου Ising αλλάζει τη Χαμιλτονιανή κατά μια πολλαπλασιαστική σταθερά που απορροφάται από το  $\beta$

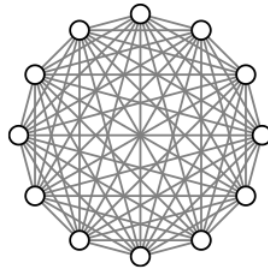
$$\text{αντικαθιστούμε την } -\beta \sum_{i \sim j} \omega_i \omega_j \text{ με } \frac{-d\beta}{N} \sum_{i,j} \omega_i \omega_j$$

ενώ ο όρος που αφορά το μαγνητικό πεδίο παραμένει αμετάβλητος. Έρα οδηγούμαστε στον εξής ορισμό.

**Ορισμός 2.1.1.** Η *Curie-Weiss Χαμιλτονιανή* για τη συλλογή των *spin*  $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_N)$  με αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$  και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $h$  ορίζεται

$$\mathcal{H}_{N;\beta,h}^{CW}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{d\beta}{N} \sum_{i,j} \omega_i \omega_j - h \sum_{i=1}^N \omega_i. \quad (2.2)$$

Σε αντίθεση με το μοντέλο Ising, οι αλληλεπιδράσεις στο μοντέλο Curie-Weiss είναι ολικές (global), δηλαδή κάθε *spin* αλληλεπιδρά με όλα τα άλλα με τον ίδιο τρόπο και οι σχετικές θέσεις των *spin* αγνοούνται. Επειδή υπάρχει αυτή η έλλειψη της γεωμετρίας, μπορούμε να φανταστούμε ότι το μοντέλο αναπαριστά ένα **complete graph** με  $N$  κορυφές, που έχει μια ακμή σε κάθε ζεύγος διαφορετικών κορυφών.



Εικόνα 2.1: Το complete graph με 12 κορυφές.

Συμβολίζουμε με  $\Omega_N \stackrel{\text{def}}{=} \{\pm 1\}^N$  το σύνολο όλων των δυνατών configuration του μοντέλου Curie-Weiss. Η κατανομή Gibbs στον  $\Omega_N$

$$\mu_{N;\beta,h}^{CW}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e^{-\mathcal{H}_{N;\beta,h}^{CW}(\omega)}}{Z_{N;\beta,h}^{CW}}, \text{ με } Z_{N;\beta,h}^{CW} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\omega \in \Omega_N} e^{-\mathcal{H}_{N;\beta,h}^{CW}(\omega)}.$$

Όπως αναφέραμε και στην εισαγωγή, η μέση τιμή ενός observable,  $f : \Omega_N \rightarrow \mathbb{R}$  υπό το μέτρο  $\mu_{N;\beta,h}^{CW}$  συμβολίζεται ως  $\langle f \rangle_{N;\beta,h}^{CW}$ .

Θα δείξουμε ότι το Curie-Weiss παρουσιάζει παραμαγνητική συμπεριφορά σε υψηλές θερμοκρασίες και φερομαγνητική συμπεριφορά σε χαμηλές θερμοκρασίες.

## 2.2 Η συμπεριφορά για μεγάλα $N$ όταν $h = 0$

Αρχικά θα μελετήσουμε το μοντέλο με απουσία μαγνητικού πεδίου. Γνωρίζουμε ότι για  $h = 0$  η Χαμιλτονιανή  $\mathcal{H}_{N;\beta,h}^{CW}$  είναι αναλλοίωτη για global spin flip  $\omega \mapsto -\omega$  (όπου αλλάζει κάθε  $\omega_i$  σε  $-\omega_i$ ). Αυτό έχει ως συνέπεια η μαγνητική πυκνότητα  $m_N = \frac{M_N}{N} = \frac{\sum_{i=1}^N \omega_i}{N}$  να έχει συμμετρική κατανομή  $\mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N = -m) = \mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N = +m)$  και συγκεκριμένα

$$\langle m_N \rangle_{N;\beta,0}^{CW} = 0. \quad (2.3)$$

Όπως είδαμε και στην παράγραφο 1.4.3 για χαμηλή τιμή του  $\beta$  αναμένουμε τα spin να είναι ανεξάρτητα ενώ για μεγάλη τιμή του  $\beta$  το πιο πιθανό configuration έχει τα περισσότερα spin ίσα και θα είναι πιο κοντά σε ένα από τα δύο ground state, στα οποία όλα τα spin είναι ίσα.

**Θεώρημα 2.2.1.** ( $h = 0$ ) Για  $\beta_c = \beta_c(d) \stackrel{def}{=} \frac{1}{2d}$ . Τότε ισχύουν,

1. Όταν  $\beta \leq \beta_c$ , η μαγνήτιση συγκεντρώνεται στο μηδέν:  $\forall \epsilon > 0 \exists c = c(\beta, \epsilon) > 0$  τέτοιο ώστε για αρκετά μεγάλο  $N$ ,

$$\mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in (-\epsilon, \epsilon)) \geq 1 - 2e^{-cN}.$$

2. Όταν  $\beta > \beta_c$ , η μαγνήτιση είναι φραγμένη μακριά από το μηδέν. Συγκεκριμένα,  $\exists m^{*,CW}(\beta) > 0$  που καλείται **στιγμαιαία μαγνήτιση** τέτοια ώστε για όλα τα  $\epsilon > 0$  αρκετα μικρά,  $\exists b = b(\beta, \epsilon) > 0$  τέτοιο ώστε: εάν ορίσουμε

$$J_*(\epsilon) \stackrel{def}{=} (-m^{*,CW}(\beta) - \epsilon, -m^{*,CW}(\beta) + \epsilon) \cup (m^{*,CW}(\beta) - \epsilon, m^{*,CW}(\beta) + \epsilon)$$

τότε, για μεγάλα  $N$  ισχύει

$$\mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in J_*(\epsilon)) \geq 1 - 2e^{-bN}.$$

$\beta_c$  καλείται *inverse critical temperature* ή *inverse Curie temperature*.

Δηλαδή για μεγάλα  $N$ ,

$$\forall \beta \leq \beta_c, \quad m_N \simeq 0 \quad \text{με μεγάλη πιθανότητα}$$

ενώ,

$$\forall \beta > \beta_c, \quad m_N \simeq \begin{cases} +m^{*,CW}(\beta), & \text{με πιθανότητα κοντά στο } \frac{1}{2} \\ -m^{*,CW}(\beta), & \text{με πιθανότητα κοντά στο } \frac{1}{2} \end{cases}$$

Σε υψηλές θερμοκρασίες, η  $m_N$  συγκεντρώνεται στο μηδέν. Σε χαμηλές θερμοκρασίες, η κατανομή γίνεται δικόρυφη με δύο κορυφές  $\pm m^{*,CW}(\beta)$ . Και στις δύο περιπτώσεις ισχύει  $\langle m_N \rangle_{N;\beta,0}^{CW} = 0$ . Το πλάτος των κορυφών τείνει προς το μηδέν για  $N \rightarrow \infty$ , που σημαίνει ότι

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in \cdot) = \begin{cases} \delta_0(\cdot) & \text{αν } \beta \leq \beta_c \\ \frac{1}{2}(\delta_{+m^{*,CW}(\beta)}(\cdot) + \delta_{-m^{*,CW}(\beta)}(\cdot)) & \text{αν } \beta > \beta_c \end{cases}$$

όπου  $\delta_m$  είναι η μάζα Dirac στο  $m$ , δηλαδή το μέτρο πιθανότητας στο  $[-1,1]$  τέτοιο ώστε

$$\delta_m(A) = \begin{cases} 0 & \text{αν } m \notin A \\ 1 & \text{αν } m \in A \end{cases}$$

**Παρατήρηση 2.1.** Πρέπει να τονίσουμε ότι όταν  $\beta > \beta_c$  και  $N$  μεγάλο, από τα αποτελέσματα που παρουσιάσαμε παραπάνω συμπεραίνουμε ότι οι τυπικές τιμές της μαγνήτισης που παρατηρούνται είναι είτε  $+m^{*,CW}(\beta)$  ή  $-m^{*,CW}(\beta)$  (Αυτό δεν αντικρούει το  $\langle m_N \rangle_{N;\beta,0}^{CW} = 0$ ). Αυτό συμβαίνει λόγω του Νόμου των Μεγάλων Αριθμών γιατί για μεγάλο  $N$  παίρνουμε μια άπειρη ακολουθία ανεξάρτητων πυκνοτήτων μαγνήτισης  $m_N^{(1)}, m_N^{(2)}, \dots$  με κατανομή  $\mu_{N;\beta,h}^{CW}$  και επικαλούμαστε τον Ισχυρό Νόμο όπου λέει ότι ο δειγματικός μέσος όρος για τα πρώτα  $n$  δείγματα συγκλίνει στο μηδέν, σχεδόν σίγουρα καθώς  $n \rightarrow \infty$

$$\frac{m_N^{(1)} + m_N^{(2)} + \dots + m_N^{(n)}}{n} \rightarrow \langle m_N \rangle_{N;\beta,0}^{CW} = 0$$

Υπάρχει και άλλη εκδοχή του Νόμου μεγάλων αριθμών. Όταν  $\beta = 0$ , οι τυχαίες μεταβλητές

$$\sigma_i(\omega) \stackrel{def}{=} \omega_i$$

είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές Bernoulli με μέση τιμή 0 που ικανοποιούν το N.M.A.  $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i$  συγκλίνει στο  $\langle \sigma_1 \rangle_{N;0,0}^{CW} = 0$ , in probability. Από το θεώρημα 2.2.1 προκύπτει ότι αυτή η ιδιότητα εξακολουθεί να ισχύει και με την εισαγωγή της αλληλεπίδρασης μεταξύ των spin:  $\beta > 0$  αν και μόνο αν  $\beta \leq \beta_c$ .

Στην **inverse critical temperature**  $\beta_c$  αντιστοιχεί η **critical temperature**  $T_c = \frac{1}{\beta_c}$ . Η περιοχή  $T > T_c$  ( $\beta < \beta_c$ ) καλείται **supercritical regime** ενώ για  $T < T_c$  ( $\beta > \beta_c$ ) καλείται **subcritical regime** (ή αλλιώς **regime of phase coexistence**). Η τιμή  $T = T_c$  καλείται **critical regime**.

Το μοντέλο Curie-Weiss έχει μία ιδιότητα που κάνει την ανάλυση πολύ πιο εύκολη από εκείνη του μοντέλου Ising στο  $\mathbb{Z}^d$

$$\sum_{i,j=1}^N \omega_i \omega_j = \left( \sum_{i=1}^N \omega_i \right)^2 \equiv M_N^2.$$

Άρα η Χαμιλτονιανή  $\mathcal{H}_{N;\beta,0}^{CW}$  μπορεί να υπολογιστεί από την πυκνότητα μαγνήτισης

$$\mathcal{H}_{N;\beta,0}^{CW} = -d\beta m_N^2 N \quad (2.4)$$

Με αυτή την ιδιότητα μπορούμε να υπολογίσουμε αναλυτικά το θερμοδυναμικό potential και άλλες ποσότητες του Curie-Weiss. Το θερμοδυναμικό potential που έχει κυρίαρχο ρόλο στο Curie-Weiss είναι η free energy.

**Ορισμός 2.2.1.** Έστω  $e(m) \stackrel{def}{=} -dm^2$  και

$$s(m) \stackrel{def}{=} -\frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2}.$$

Τότε η ποσότητα

$$f_\beta^{CW}(m) \stackrel{def}{=} \beta e(m) - s(m) \quad (2.5)$$

καλείται *free energy* του μοντέλου *Curie-Weiss*.

Οι ισχυρισμοί του θεωρήματος 2.2.1 προκύπτουν ως άμεση συνέπεια της επόμενης πρότασης, η οποία δείχνει το ρόλο του free energy στην ασυμπτωτική κατανομή της μαγνήτισης.

**Πρόταση 2.2.1.** Για κάθε  $\beta$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N;\beta,0}^{CW} = -\min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m). \quad (2.6)$$

Επιπλέον, για κάθε διάστημα  $J \subset [-1, 1]$ ,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in J) = -\inf_{m \in J} \mathcal{I}_\beta^{CW}(\beta) \quad (2.7)$$

όπου

$$\mathcal{I}_\beta^{CW}(\beta) \stackrel{def}{=} f_\beta^{CW}(m) - \min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(\tilde{m}). \quad (2.8)$$

**Παρατήρηση 2.2.** Μπορούμε να γράψουμε την (2.7) ως εξής

$$\text{Για μεγάλα } N, \mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in J) \simeq \exp(-\{\inf_{m \in J} \mathcal{I}_\beta^{CW}(\beta)\}N).$$

Στην θεωρία των μεγάλων αποκλίσεων η  $\mathcal{I}_\beta^{CW}$  καλείται *rate function*, δηλαδή μια συνάρτηση που ποσοτικοποιεί τις πιθανότητες σπάνιων ενδεχομένων. Παρατηρούμε ότι αν  $\mathcal{I}_\beta^{CW} \geq 0$

$$\min_{m \in [-1,1]} \mathcal{I}_\beta^{CW}(m) = 0.$$

Άρα αν  $J \subset [-1, 1]$  ένα υποσύνολο τέτοιο ώστε το  $\mathcal{I}_\beta^{CW}$  να είναι ομοιόμορφα αυστηρά θετικό στο  $J$ ,

$$\inf_{m \in J} \mathcal{I}_\beta^{CW}(m) > 0$$

τότε το  $\mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in J)$  συγκλίνει στο 0 εκθετικά όταν  $N \rightarrow \infty$ , που σημαίνει ότι η μαγνήτιση είναι πιθανό να παίρνει τιμές εκτός του  $J$ . Αυτό δείχνει ότι οι τυπικές τιμές που παίρνει η μαγνήτιση αντιστοιχούν σε περιοχές όπου το  $\mathcal{I}_\beta^{CW}$  εξαφανίζεται.

*Απόδειξη.* (Πρόταση 2.2.1) Παρατηρούμε ότι για δεδομένο  $N$ , η  $m_N$  είναι μία τυχαία μεταβλητή με τιμές στο σύνολο

$$\mathcal{A}_N \stackrel{def}{=} \left\{ -1 + \frac{2k}{N} : k = 0, \dots, N \right\} \subset [-1, 1].$$

Έστω  $J \subset [-1, 1]$  ένα διάστημα. Τότε,

$$\mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N \in J) = \sum_{m \in J \cap \mathcal{A}_N} \mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N = m)$$

Έστω  $m$  μία τιμή της μαγνήτισης δηλαδή,  $-1 + \frac{2k}{N} = m$  για  $k = 0, \dots, N$ . Τότε έχουμε  $k = \frac{1+m}{2}N$  επιλογές ανάμεσα στα  $N$  configuration, δηλαδή  $\binom{N}{k} = \binom{N}{\frac{1+m}{2}N}$  configuration  $\omega \in \Omega_N$  στα οποία  $m_N(\omega) = m$ . Έτσι μπορούμε να εκφράσουμε αναλυτικά την κατανομή του  $m_N$  χρησιμοποιώντας την (2.4)

$$\mu_{N;\beta,0}^{CW}(m_N = m) = \sum_{\omega \in \Omega_N: m_N(\omega)=m} \frac{e^{-\mathcal{H}_{N;\beta,0}^{CW}(\omega)}}{Z_{N;\beta,h}^{CW}} = \sum_{\omega \in \Omega_N: m_N(\omega)=m} \frac{e^{d\beta m^2 N}}{Z_{N;\beta,0}^{CW}} = \frac{1}{Z_{N;\beta,0}^{CW}} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N}. \quad (2.9)$$

Με τον ίδιο τρόπο,

$$Z_{N;\beta,0}^{CW} = \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}} e^{-\mathcal{H}_{N;\beta,0}^{CW}(\omega)} = \sum_{m \in \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N} \quad (2.10)$$

Αφού μας ενδιαφέρει η συμπεριφορά σε εκθετική κλίμακα και επειδή είναι ένα άθροισμα  $|\mathcal{A}_N| = N + 1$  θετικών όρων, υπολογίζουμε τα  $Z_{N;\beta,0}^{CW}$  μέσω του φράγματος

$$\max_{m \in \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N} \leq Z_{N;\beta,0}^{CW} \leq (N + 1) \max_{m \in \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N}.$$

Για να μελετήσουμε για μεγάλα  $N$  τη συμπεριφορά του διωνυμικού συντελεστή χρησιμοποιούμε την φόρμουλα Stirling, η οποία μας εξασφαλίζει την ύπαρξη δύο σταθερών  $c_-, c_+ > 0$  τέτοιο ώστε  $\forall m \in \mathcal{A}_N$ ,

$$c_- N^{-1/2} e^{Ns(m)} \leq \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} \leq c_+ e^{Ns(m)} \quad (2.11)$$

η απόδειξη της σχέσης αυτής βρίσκεται στο Appendix A ως τεχνική απόδειξη. Άρα μπορούμε να υπολογίσουμε ένα άνω φράγμα ως εξής

$$\begin{aligned} Z_{N;\beta,0}^{CW} &\leq c_+(N + 1) \exp(N \max_{m \in \mathcal{A}_N} \{ d\beta m^2 + s(m) \}) \\ &\leq c_+(N + 1) \exp(-N \min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m)), \end{aligned}$$

όπου δίνει

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sup \frac{1}{N} \log Z_{N;\beta,0}^{CW} \leq -\min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m).$$

Για το κάτω φράγμα, χρησιμοποιούμε αρχικά τη συνέχεια της απεικόνισης  $m \mapsto \{d\beta m^2 + s(m)\}$  στο  $[-1, 1]$  και έστω  $m' \in [-1, 1]$  για το οποίο ισχύει  $f_\beta^{CW}(m') = \min_m f_\beta^{CW}(m)$ . Έστω  $\epsilon > 0$ , επιλέγουμε  $m \in \mathcal{A}_N$  τέτοιο ώστε  $|f_\beta^{CW}(m) - f_\beta^{CW}(m')| \leq \epsilon$ , που επιτυγχάνεται πάντα για  $N$  αρκετά μεγάλο. Τότε έχουμε:

$$Z_{N;\beta,0}^{CW} \geq c_- N^{-1/2} \exp(-N(f_\beta^{CW}(m') + \epsilon)).$$

Άρα προκύπτει:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \inf \frac{1}{N} \log Z_{N;\beta,0}^{CW} \geq -\min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m) - \epsilon.$$

Αφού  $\epsilon$  είναι τυχαίο παίρνουμε:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N;\beta,0}^{CW} = -\min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m).$$

Αντίστοιχοι υπολογισμοί μπορούν να γίνουν για το άθροισμα με δείκτη άθροισης  $m \in J \cap \mathcal{A}_N$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \sum_{m \in J \cap \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N} = -\inf_{m \in J} f_{\beta}^{CW}(m)$$

και προκύπτει η (2.7). □

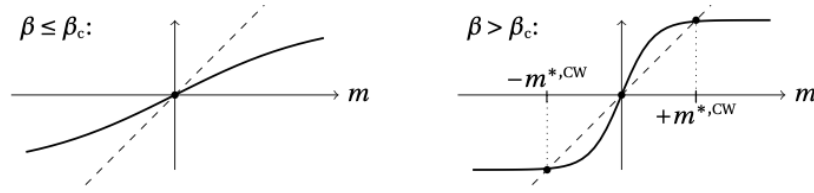
*Απόδειξη.* (Θεωρήματος 2.2) Πρέπει να βρούμε σε ποιά σημεία το  $\mathcal{I}_{\beta}^{CW}$  μηδενίζεται. Αφού το  $\mathcal{I}_{\beta}^{CW}$  είναι ομαλό και  $\mathcal{I}_{\beta}^{CW} \geq 0$ , τότε τα σημεία που αντιστοιχούν στα σημεία μηδενισμού είναι οι λύσεις της  $\frac{\partial \mathcal{I}_{\beta}^{CW}}{\partial m} = 0$  (ο αναλυτικός υπολογισμός βρίσκεται στο Appendix υπό τη μορφή τεχνικής απόδειξης). Αυτή η συνθήκη είναι ισοδύναμη με την **mean-field equation**:

$$\tanh(2d\beta m) = m. \quad (2.12)$$

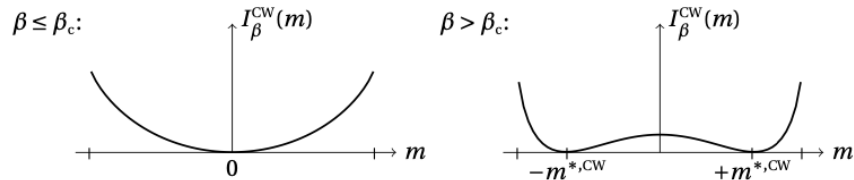
Επειδή  $\lim_{m \rightarrow \pm\infty} \tanh(\beta m) = \pm 1$ , υπάρχει πάντα τουλάχιστον μία λύση και με βάση την ανάλυση της γραφικής παράστασης  $m \mapsto \tanh(\beta m)$ , και ο αριθμός των λύσεων της (2.12) εξαρτάται από το εάν η ποσότητα  $2d\beta$  είναι μεγαλύτερη ή μικρότερη του 1, δηλαδή αν το  $\beta$  είναι μικρότερο ή μεγαλύτερο της  $\beta_c$ .

Όταν  $\beta \leq \beta_c$ , η (2.12) έχει μοναδική λύση την  $m = 0$ .

Όταν  $\beta > \beta_c$ , υπάρχουν επιπλέον 2 μη-τετριμμένες λύσεις  $\pm m^{*,CW}(\beta)$



Η τετριμμένη λύση  $m = 0$  αποτελεί τοπικό μέγιστο του  $\mathcal{I}_{\beta}^{CW}$  ενώ  $\pm m^{*,CW}(\beta)$  είναι ολικά ελάχιστα



Όλα τα παραπάνω σε συνδυασμό με τη σχέση (2.7) μας δίνουν το επιθυμητό αποτέλεσμα. □

**Σχόλιο 2.2.1.** Στην *supercritical* και *critical* περιοχή ( $\beta \leq \beta_c$ ), υπάρχει μοναδικό ολικό ελάχιστο  $m = 0$ . Στην *subcritical* φάση ( $\beta > \beta_c$ ), υπάρχουν δύο μη-μηδενικές τιμές  $\pm m^{*,CW}(\beta) \neq 0$ , δηλαδή **phase transition** στο  $\beta_c$ .

**Παρατήρηση 2.3.** Από τη γραφική παράσταση του  $m^{*,CW}(\beta)$  βλέπουμε ότι

$$m^{*,CW}(\beta) \downarrow 0 \text{ για } \beta \downarrow \beta_c^{CW}. \quad (2.13)$$

Από την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι οι τυπικές τιμές που παίρνει η μαγνήτιση του μοντέλου είναι αυτές για τις οποίες το  $\mathcal{I}_\beta^{CW}(\beta)$  μηδενίζεται. Επειδή το  $\mathcal{I}_\beta^{CW}(\beta)$  διαφέρει από το  $f_\beta^{CW}$  κατά μία σταθερά, οι τυπικές τιμές της μαγνήτισης είναι αυτές που ελαχιστοποιούν το free energy.

Η διακλάδωση των τυπικών τιμών που παίρνει η μαγνήτιση στο μοντέλο Curie-Weiss, σε χαμηλές θερμοκρασίες, οφείλεται στην εμφάνιση των δύο ολικών ελαχίστων της free energy. Από τη μία μεριά έχουμε το  $e(m) = -dm^2$  (**energy density**) που σχετίζεται με τα configuration της πυκνότητας μαγνήτισης  $m$  (το οποίο είναι minimum για  $m = \pm 1$  [all equal spin]). Από την άλλη μεριά  $s(m)$  είναι το **entropy density** το οποίο μετράει τον αριθμό των configuration με πυκνότητας μαγνήτισης  $m$  (μέγιστο στο  $m = 0$  [ίσος αριθμός  $\pm$  spin]). Επειδή  $\beta e(m)$  και  $s(m)$  είναι κοίλες συναρτήσεις, οι κυρτές/κοίλες ιδιότητες της διαφοράς τους εξαρτώνται από τη θερμοκρασία. Για μικρές τιμές  $\beta$ , κυριαρχεί η εντροπία και η  $f_\beta^{CW}(m)$  είναι αυστηρά κυρτή. Για μεγάλες τιμές  $\beta$ , η ενέργεια έχει σημαντικό ρόλο γιατί προτιμάει configuration με χαμηλή ενέργεια,  $f_\beta^{CW}(m)$  δεν είναι κυρτή και έχει δύο ολικά ελάχιστα.

## 2.3 Η συμπεριφορά για μεγάλα $N$ όταν $h \neq 0$

Στην παρουσία του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου  $h$ , η ανάλυση είναι παρόμοια. Το σχετικό θερμοδυναμικό potential που σχετίζεται με το μαγνητικό πεδίο είναι η πίεση.

**Θεώρημα 2.3.1.** *Η πίεση*

$$\psi_\beta^{CW}(h) \stackrel{def}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \log Z_{N;\beta,h}^{CW}.$$

υπάρχει και είναι κυρτή στο  $h$ . Επίσης ισούται με τον μετασχηματισμό Legendre της **free energy**

$$\psi_\beta^{CW}(h) = \max_{m \in [-1,1]} \{hm - f_\beta^{CW}(m)\}. \quad (2.14)$$

Απόδειξη. Ξεκινάμε αναλύοντας τη συνάρτηση επιμερισμού

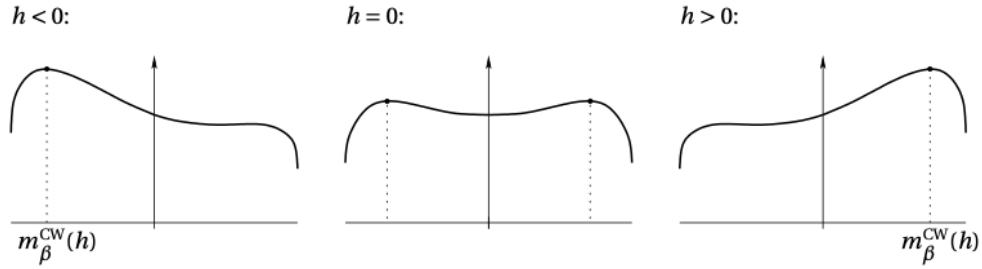
$$Z_{N;\beta,h}^{CW} = \sum_{m \in \mathcal{A}_N} \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda;N}; m_N(\omega)=m} e^{-\mathcal{H}_{N;\beta,h}^{CW}(\omega)} = \sum_{m \in \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{(hm+d\beta m^2)N}$$

Συνεχίζουμε όπως στην απόδειξη του θεωρήματος 2.2.1 και πρότασης 2.2.1 και έχουμε φράγμα

$$Z_{N;\beta,h}^{CW} \leq \frac{c_+(N+1)}{\sqrt{N}} \exp\{N \max_{m \in [-1,1]} \{hm - f_\beta^{CW}(m)\}\}.$$

Ένα κάτω φράγμα του ίδιου τύπου προκύπτει με παρόμοιο τρόπο και με παρόμοια ανάλυση όπως και πριν, στο όριο  $N \rightarrow \infty$  έχουμε την (2.14). Την ιδιότητα της κυρτότητας την έχουμε αποδείξει στο Appendix A και συγκεκριμένα αποδείξαμε την πρόταση ότι όλοι οι μετασχηματισμοί Legendre είναι κυρτοί.  $\square$

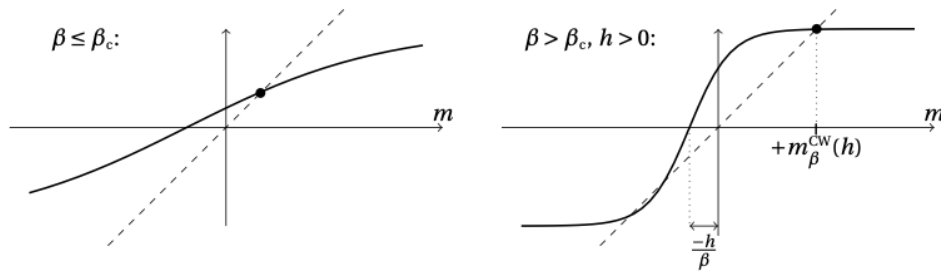
Αρχικά θα μελετήσουμε την πίεση σαν συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου και μετά θα την εφαρμόσουμε στη μελέτη των τιμών της μαγνητικής πυκνότητας. Αφού η  $hm - f_\beta^{CW}(m)$  είναι ομαλή (αναλυτική βασικά) στο  $m$ , μπορούμε να βρούμε το μέγιστο της (2.14) με παραγωγήση. Πριν παραγωγίσουμε, παρουσιάζουμε τη γραφική παράσταση της  $m \rightarrow hm - f_\beta^{CW}(m)$  για διάφορες τιμές της  $h$ .



Όταν  $h \neq 0$  το supremum της  $hm - f_\beta^{CW}(m)$  είναι σε μοναδικό σημείο που το συμβολίζουμε με  $m_\beta^{CW}(h)$ . Το σημείο αυτό υπολογίζεται λύνοντας την  $\frac{\partial \{hm - f_\beta^{CW}(m)\}}{\partial m} = 0$ , που είναι ισοδύναμο με  $\frac{\partial f_\beta^{CW}(m)}{\partial m} = h$ , που είναι η **modified mean-field** εξίσωση:

$$\tanh(2d\beta m + h) = m. \quad (2.15)$$

Όπως και πριν η εξίσωση αυτή έχει τουλάχιστον μια λύση. Όταν  $\beta < \beta_c$ , η λύση της (2.15) είναι μοναδική. Όταν  $\beta > \beta_c$ , υπάρχουν παραπάνω από μία λύσεις, που εξαρτώνται από το  $h$ . Θεωρούμε ότι  $m_\beta^{CW}(h)$  είναι η μεγαλύτερη (αντίστοιχα μικρότερη) εάν  $h > 0$  (αντίστοιχα  $h < 0$ ).

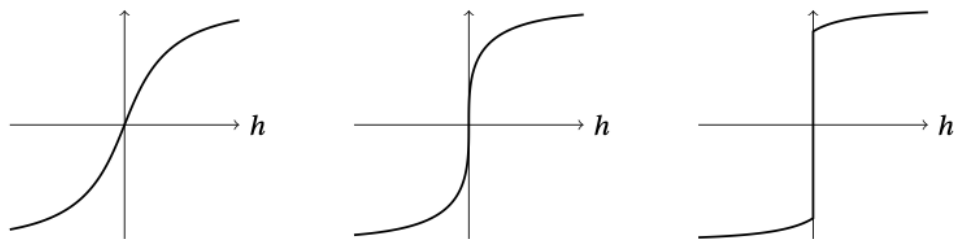


Από τις γραφικές παραστάσεις παρατηρούμε, για  $\beta \leq \beta_c$ ,

$$\lim_{h \uparrow 0} m_\beta^{CW}(h) = \lim_{h \downarrow 0} m_\beta^{CW}(h) = 0. \quad (2.16)$$

Από την άλλη μεριά, για  $\beta > \beta_c$ ,

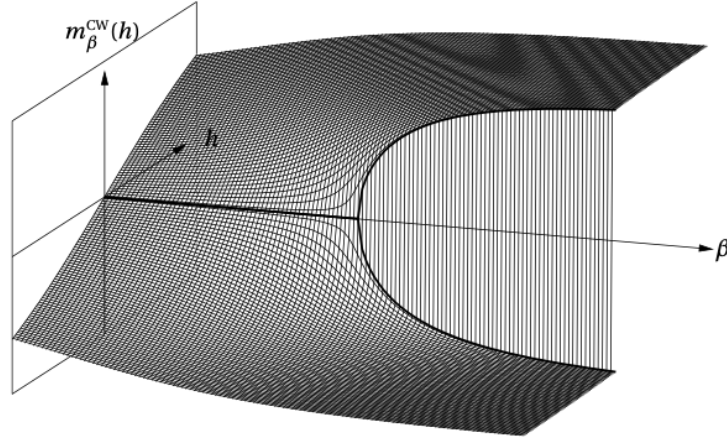
$$\lim_{h \uparrow 0} m_\beta^{CW}(h) = -m^{*,CW}(\beta) < +m^{*,CW}(\beta) = \lim_{h \downarrow 0} m_\beta^{CW}(h). \quad (2.17)$$





Εικόνα 2.5: Η μαγνήτιση  $h \mapsto m_\beta^{CW}(h)$  για  $\beta < \beta_c$  (αριστερά),  $\beta = \beta_c$  (κέντρο) και  $\beta > \beta_c$  (δεξιά). Αυτές οι γραφικές παραστάσεις έγιναν με αριθμητικές μεθόδους στην εξίσωση (2.15).

Παρατηρούμε ότι το μοντέλο Curie-Weiss παρουσιάζει παραμαγνητική συμπεριφορά σε υψηλές θερμοκρασίες και φερομαγνητική συμπεριφορά στις χαμηλές θερμοκρασίες.



Εικόνα 2.6: Η μαγνήτιση  $(\beta, h) \mapsto m_\beta^{CW}(h)$ . Για  $\beta > 0$ , παρατηρούμε τις καμπύλες  $h \mapsto m_\beta^{CW}(h)$  της Εικόνας 2.5, και συγκεκριμένα παρατηρούμε ότι είναι ασυνεχής όταν  $\beta > \beta_c$ .

Θα μελετήσουμε την πίεση με μη μηδενικό μαγνητικό πεδίο  $h \neq 0$ . Εκφράζουμε την  $\psi_\beta^{CW}$  χρησιμοποιώντας το μετασχηματισμό Legendre

$$\psi_\beta^{CW} = h \cdot m_\beta^{CW}(h) - f_\beta^{CW}(m_\beta^{CW}(h)),$$

και από την Άσκηση 2.3 και την αναλυτικότητα  $m \mapsto f_\beta^{CW}(m)$  στο  $(-1,1)$  συμπεραίνουμε ότι  $h \mapsto \psi_\beta^{CW}(h)$  στο  $(-\infty, 0) \cup (0, \infty)$  είναι αναλυτική. Παραγωγίζοντας ως προς  $h$ , όταν  $h \neq 0$

$$\frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h}(h) = m_\beta^{CW}(h). \quad (2.18)$$

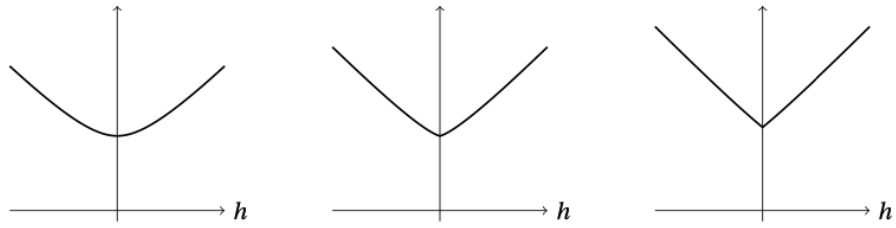
Για να μελετήσουμε τη συμπεριφορά στο  $h = 0$ , παρατηρούμε ότι η  $\psi_\beta^{CW}$  είναι κυρτή, και από το θεώρημα Β'4 εξασφαλίζουμε την ύπαρξη των  $\frac{\partial \psi_\beta}{\partial h^+}|_{h=0}$  και  $\frac{\partial \psi_\beta}{\partial h^-}|_{h=0}$  και ότι είναι δεξιά και αριστερά συνεχής αντίστοιχα. Για  $\beta \leq \beta_c$ , από την (2.16) έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h^-}|_{h=0} &= \lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h} = \lim_{h \rightarrow 0^-} m_\beta^{CW}(h) \\ &= 0 \\ &= \lim_{h \rightarrow 0^+} m_\beta^{CW}(h) = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h} = \frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h^+}|_{h=0}. \end{aligned}$$

Άρα η  $\psi_\beta^{CW}$  είναι διαφορίσιμη στο  $h = 0$ . Για  $\beta > \beta_c$ , από την (2.18) έχουμε

$$\frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h^-}|_{h=0} = -m^{*,CW}(\beta) < 0 < +m^{*,CW}(\beta) = \frac{\partial \psi_\beta^{CW}}{\partial h^+}|_{h=0}$$

και παρατηρούμε ότι η  $\psi_\beta^{CW}$  δεν είναι διαφορίσιμη στο  $h = 0$ .



Εικόνα 2.7: Η πίεση  $\psi_{\beta}^{CW}$  του μοντέλου Curie-Weiss για τις ίδιες τιμές της παραμέτρου  $\beta$  της Εικόνας 2.5.

# Κεφάλαιο 3

## Το μοντέλο Ising

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα μελετήσουμε το μοντέλο Ising στο  $\mathbb{Z}^d$ , που αρχικά παρουσιάσαμε στο υποκεφάλαιο 1.4.2. Παρέχουμε τους ορισμούς και την ανάλυση που αφορούν την ύπαρξη ή όχι του φαινομένου phase transition στο μοντέλο. Συγκεκριμένα,

- Στο υποκεφάλαιο 3.1, θα ορίσουμε το μοντέλο Ising στο  $\mathbb{Z}^d$  και διάφορους ορισμούς συνοριακών συνθηκών.
- Στο υποκεφάλαιο 3.2, θα παρουσιάσουμε βασικούς ορισμούς όπως η έννοια του θερμοδυναμικού ορίου, της πίεσης και της μαγνήτισης. Στο υποκεφάλαιο 3.3 θα παρέχουμε αναλυτικούς υπολογισμούς για την πίεση και μαγνήτιση στην περίπτωση του μοντέλου σε μία διάσταση.
- Στο υποκεφάλαιο 3.4, δίνουμε τον ορισμό του απείρου όγκου Gibbs state και στο 3.6 παρουσιάζουμε τις ανισότητες συσχέτισης που έχουν κεντρικό ρόλο στην ανάλυση των φερομαγνητικών συστημάτων.
- Στο υποκεφάλαιο 3.7, αναλύουμε τα διαγράμματα φάσης του μοντέλου. Συγκεκριμένα στο 3.7.1 παρουσιάζουμε διάφορα κριτήρια που αφορούν την παρουσία πρώτης τάξης phase transition, που βασίζονται στην μαγνήτιση και πίεση του μοντέλου. Έπειτα χρησιμοποιούμε αυτά τα κριτήρια για να αποδείξουμε την ύπαρξη του φαινομένου phase transition όταν  $h = 0$  (υποκεφάλαιο 3.7.2 και 3.7.3) και την απουσία του όταν  $h \neq 0$  (υποκεφάλαιο 3.7.4).

### 3.1 Πεπερασμένου όγκου κατανομές Gibbs

Σε αυτό το κεφάλαιο θα μελετήσουμε αναλυτικότερα το μοντέλο Ising στο  $\mathbb{Z}^d$  και θα αποδείξουμε κάποιες βασικές ιδιότητες του.

**Πεπερασμένοι όγκοι με ελέθλευρες συνοριακές συνθήκες.**

Τα configurations του μοντέλου Ising σε πεπερασμένο όγκο  $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$  με ελέθλευρες συνοριακές συνθήκες είναι στοιχεία του συνόλου

$$\Omega_\Lambda \stackrel{def}{=} \{-1, 1\}^\Lambda.$$

Ένα configurations  $\omega \in \Omega_\Lambda$  είναι της μορφής  $\omega = (\omega_i)_{i \in \Lambda}$ . Η τυχαία μεταβλητή που θεωρούμε στο μοντέλο μας είναι το **spin** στην κορυφή  $i \in \mathbb{Z}^d$ , που είναι η τυχαία μεταβλητή  $\sigma_i : \Omega_\Lambda \rightarrow \{-1, 1\}$  με  $\sigma_i(\omega) = \omega_i$ .

Θα συσχετίζουμε το πεπερασμένο χωρίο  $\Lambda$  με το γράφημα που περιέχει όλες τις ακμές που κατασκευάζονται από ζευγαριών nearest-neighbor του  $\Lambda$ . Δηλαδή συμβολίζουμε το παραπάνω σύμβολο ακμών με

$$\mathcal{E}_\Lambda \stackrel{\text{def}}{=} \{\{i, j\} \subset \Lambda : i \sim j\}.$$

Για κάθε configurations  $\omega \in \Omega_\Lambda$  η **ενέργεια** του δίνεται από τη Χαμιλτονιανή:

$$\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} -\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i(\omega)$$

όπου:

- $\beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$  η αντίστροφη θερμοκρασία
- $h \in \mathbb{R}$  το μαγνητικό πεδίο

Το σύμβολο  $\emptyset$  συμβολίζει ότι το μοντέλο έχει **ελεύθερες συνοριακές συνθήκες**, δηλαδή τα spin στο  $\Lambda$  δεν αλληλεπιδρούν με άλλα spin έξω από το  $\Lambda$ .

**Ορισμός 3.1.1.** Η κατανομή Gibbs του μοντέλου Ising στο  $\Lambda$  με **ελεύθερες συνοριακές συνθήκες** και παραμέτρους  $\beta, h$  είναι η κατανομή στο  $\Omega_\Lambda$

$$\mu_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\mathcal{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset(\omega)).$$

Το κανονικοποιημένο άθροισμα

$$\mathcal{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset(\omega))$$

καλείται **συνάρτηση επιμερισμού** στο  $\Lambda$  με ελεύθερες συνοριακές συνθήκες.

**Πεπερασμένοι όγκοι με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.**

Ορίζουμε το μοντέλο Ising στον τόρο  $\mathbb{T}_n$ . Το σύνολο των κορυφών ορίζεται ως

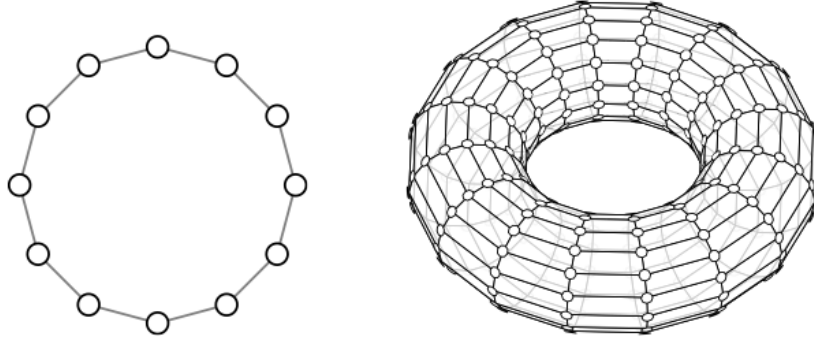
$$V_n \stackrel{\text{def}}{=} \{0, \dots, n-1\}^d,$$

και υπάρχει ακμή μεταξύ κάθε ζεύγους κορυφών  $i, j \in \mathbb{Z}^d$  που ικανοποιούν

$$\sum_{r=1}^d |(i_r - j_r) \bmod n| = 1.$$

Έστω  $\mathcal{E}_{V_n}^{\text{per}}$  το σύνολο των ακμών του  $\mathbb{T}_n$

$$\mathcal{E}_{V_n}^{\text{per}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\{i, j\} \in V_n : \sum_{r=1}^d |(i_r - j_r) \bmod n| = 1\}.$$



Εικόνα 3.1: Ο τόρος  $\mathbb{T}_{12}$  σε μία διάσταση (αριστερά). Ο τόρος  $\mathbb{T}_{16}$  σε δύο διαστάσεις (δεξιά).

Configurations του μοντέλου είναι στοιχεία του  $\Omega_{V_n} = \{-1, 1\}^{V_n}$  και έχουν ενέργεια που δίνεται από τη Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H}_{V_n; \beta, h}^{per}(\omega) \stackrel{def}{=} -\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{V_n}^{per}} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - h \sum_{i \in V_n} \sigma_i(\omega)$$

**Ορισμός 3.1.2.** Η κατανομή Gibbs του μοντέλου Ising στο  $V_n$  με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και παραμέτρους  $\beta, h$  είναι η κατανομή στο  $\{-1, 1\}^{V_n}$

$$\mu_{V_n; \beta, h}^{per}(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{1}{Z_{V_n; \beta, h}^{per}} \exp(-\mathcal{H}_{V_n; \beta, h}^{per}(\omega)).$$

Το κανονικοποιημένο άθροισμα

$$Z_{V_n; \beta, h}^{per} \stackrel{def}{=} \sum_{\omega \in \Omega_{V_n}} \exp(-\mathcal{H}_{V_n; \beta, h}^{per}(\omega))$$

καλείται **συνάρτηση επιμερισμού** στο  $V_n$  με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

### Πεπερασμένοι όγκοι με configurations συνοριακές συνθήκες

Θέλουμε να ορίσουμε τώρα το μοντέλο Ising σε ολοκληρωτο πλέγμα  $\mathbb{Z}^d$  με configurations «παγωμένα» έξω από ένα πεπερασμένο σύνολο.

Έστω configurations του μοντέλου Ising σε ένα άπειρο πλέγμα  $\mathbb{Z}^d$ , δηλαδή στοιχεία του

$$\Omega \stackrel{def}{=} \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}.$$

Θεωρώντας ένα πεπερασμένο  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  και ένα configuration  $\eta \in \Omega$ , ορίζουμε ένα configuration του μοντέλου Ising στο  $\Lambda$  με συνοριακή συνθήκη  $\eta$  ένα στοιχείο του συνόλου

$$\Omega_{\Lambda}^{\eta} \stackrel{def}{=} \{\omega \in \Omega : \omega_i = \eta_i, \forall i \notin \Lambda\}.$$

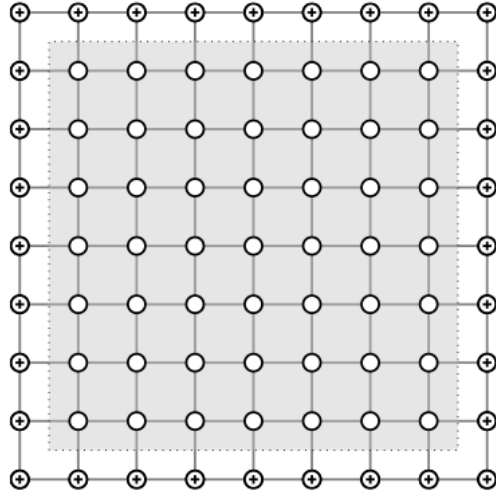
Η **ενέργεια** ενός configuration  $\eta \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}$  ορίζεται από

$$\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega) \stackrel{def}{=} -\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i(\omega). \quad (3.1)$$

όπου

$$\mathcal{E}_{\Lambda}^b \stackrel{def}{=} \{\{i, j\} \subset \mathbb{Z}^d : \{i, j\} \cap \Lambda \neq \emptyset, i \sim j\}. \quad (3.2)$$

Το  $\mathcal{E}_{\Lambda}^b$  διαφέρει από το  $\mathcal{E}_{\Lambda}$  με την προσθήκη ακμών που συνδέουν κορυφές μέσα στο  $\Lambda$  με γειτονικές εκτός του  $\Lambda$ .



Εικόνα 3.2: Το μοντέλο Ising σε μία περιοχή  $\Lambda$  με + συνοριακή συνθήκη.

**Ορισμός 3.1.3.** Η κατανομή Gibbs του μοντέλου Ising στο  $\Lambda$  με **συνοριακή συνθήκη**  $\eta$  και παραμέτρους  $\beta, h$  είναι η κατανομή στο  $\Omega_\Lambda^\eta$

$$\mu_{\Lambda; \beta, h}^\eta(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{1}{Z_{\Lambda; \beta, h}^\eta} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)).$$

Το κανονικοποιημένο άθροισμα

$$Z_{\Lambda; \beta, h}^\eta \stackrel{def}{=} \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega))$$

καλείται **συνάρτηση επιμερισμού** στο  $\Lambda$  με η συνοριακές συνθήκες.

Δύο συνοριακές συνθήκες έχουν σημαντικό ρόλο στην ανάλυση του μοντέλου Ising:

- η + συνοριακή συνθήκη  $\eta^+ \implies \eta_i^+ = 1 \forall i$
- η - συνοριακή συνθήκη  $\eta^- \implies \eta_i^- = -1 \forall i$

και η αντίστοιχη κατανομή Gibbs συμβολίζεται με  $\mu_{\Lambda; \beta, h}^+, \mu_{\Lambda; \beta, h}^-$ .

Σχετικά με τον συμβολισμό που θα χρησιμοποιούμε από αυτό το σημείο και έπειτα. Θα χρησιμοποιούμε το σύμβολο  $\#$  για να δηλώσουμε την ύπαρξη γενικού τύπου συνοριακών συνθηκών. Δηλαδή,  $Z_{\Lambda; \beta, h}^\#$  μπορεί να αντιστοιχεί σε  $Z_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset, Z_{\Lambda; \beta, h}^{per}$  ή  $Z_{\Lambda; \beta, h}^\eta$ . Στην περίπτωση περιοδικών συνθηκών, το  $\Lambda$  θα θεωρούμε ότι είναι κύβος.

Θα συνεχίσουμε να χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό που χρησιμοποιούσαμε και στη στατιστική μηχανική για τη μέση τιμή μιας συνάρτησης  $f$  ως προς το μετρο πιθανότητας  $\mu$ , δηλαδή  $\langle f \rangle_\mu$ . Στην περίπτωση όπου έχουμε το σύμβολο  $\#$ , δηλώνουμε την ύπαρξη συνοριακής συνθήκης και θα το εμφανίζουμε και στα *brackets* της μέσης τιμής. Για παράδειγμα, η μέση τιμή της συνάρτησης  $f$  υπό το μέτρο  $\mu_{\Lambda; \beta, h}^\#$  είναι

$$\langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\# \stackrel{def}{=} \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} f(\omega) \mu_{\Lambda; \beta, h}^\#(\omega).$$

## 3.2 Θερμοδυναμικό όριο, πίεση και μαγνήτιση

### 3.2.1 Σύγκλιση υποσυνόλων

Θέλουμε να περιγράψουμε την κατανομή Gibbs για το μοντέλο Ising σε όλο το  $\mathbb{Z}^d$ . Επειδή αυτό σημαίνει ότι θέλουμε να περιγράψουμε την κατανομή σε ένα άπειρο σύστημα, θα προσεγγίσουμε ένα άπειρο σύστημα με μία αύξουσα ακολουθία συνόλων. Αυτή η διαδικασία, που είναι απαραίτητη για την περιγραφή της θερμοδυναμικής και του phase transition, ονομάζεται **θερμοδυναμικό όριο**.

Για να καθορίσουμε το μοντέλο Ising σε όλο το πλέγμα  $\mathbb{Z}^d$  (αναφέρεται και ως σε «άπειρο όγκο»), το θερμοδυναμικό όριο θα οριστεί από ακολουθίες πεπερασμένων υποσυνόλων  $\Lambda_n \subset \mathbb{Z}^d$  που **συγκλίνουν** στο  $\mathbb{Z}^d$ , και το συμβολίζουμε  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$  με τέτοιο τρόπο ώστε:

1. Η ακολουθία  $\Lambda_n$  είναι αύξουσα:  $\Lambda_n \subset \Lambda_{n+1}$ .
2. Για την ακολουθία  $\Lambda_n$  ισχύει:  $\cup_{n \geq 1} \Lambda_n = \mathbb{Z}^d$ .

Για να έχουμε τον έλεγχο της επιρροής των συνοριακών συνθηκών αλλά και του σχήματος του χωρίου που εξαρτώνται από τις θερμοδυναμικές ποσότητες, είναι απαραίτητο να ορίσουμε μία ρυθμιστική ιδιότητα (regularity property) στην ακολουθία  $\Lambda_n$ . Θα λέμε ότι η ακολουθία  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$  **συγκλίνει στο  $\mathbb{Z}^d$  με την έννοια του Van Hove**, θα το συμβολίζουμε με  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$  αν και μόνο αν

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\partial^{in} \Lambda_n|}{|\Lambda_n|} = 0 \quad (3.3)$$

όπου  $\partial^{in} \Lambda_n \stackrel{def}{=} \{i \in \Lambda : \exists j \notin \Lambda, j \sim i\}$ . Η πιο απλή ακολουθία που ικανοποιεί αυτή τη συνθήκη είναι η

$$B(n) \stackrel{def}{=} \{-n, \dots, n\}^d.$$

(Η απόδειξη αυτού του ισχυρισμού βρίσκεται στο Appendix)

### 3.2.2 Πίεση

Η συνάρτηση επιμερισμού κατέχει πολύ σημαντικό ρόλο στη θεωρία μας γιατί, πέρα από το γεγονός ότι κωδικοποιεί το πώς διαμερίζεται η πιθανότητα ανάμεσα στα microstate με βάση τις μεμονομένες ενέργειες τους, μας βοηθάει να ορίσουμε την πίεση.

**Ορισμός 3.2.1.** Η **πίεση** στο  $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$  με συνοριακή συνθήκη τύπου  $\#$ , ορίζεται από

$$\psi_{\Lambda}^{\#}(\beta, h) = \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_{\Lambda; \beta, h}^{\#}.$$

**Λήμμα 3.1.** Για κάθε τύπο συνοριακής συνθήκης  $\#$ ,  $(\beta, h) \mapsto \psi_{\Lambda}^{\#}(\beta, h)$  είναι κυρτή.

Απόδειξη. Θεωρούμε χ.β.τ.γ.  $\psi_\Lambda^\eta(\beta, h)$  Έστω  $a \in [0, 1]$ . Επειδή η  $\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}$  είναι affine function του ζεύγους  $(\beta, h)$ , χρησιμοποιώντας την ανισότητα Hölder (Appendix) έχουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{\Lambda; a\beta_1 + (1-a)\beta_2, ah_1 + (1-a)h_2}^\eta &= \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-a\mathcal{H}_{\Lambda; \beta_1, h_1}(\omega) - (1-a)\mathcal{H}_{\Lambda; \beta_2, h_2}(\omega)} \\ &\leq \left( \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta_1, h_1}(\omega)} \right)^a \left( \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta_2, h_2}(\omega)} \right)^{(1-a)} \\ &= \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta_1, h_1}^\eta \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta_2, h_2}^\eta. \end{aligned}$$

Άρα η  $\psi_\Lambda^\eta$  είναι κυρτή:

$$\psi_\Lambda^\eta(a\beta_1 + (1-a)\beta_2, ah_1 + (1-a)h_2) \leq a\psi_\Lambda^\eta(\beta_1, h_1) + (1-a)\psi_\Lambda^\eta(\beta_2, h_2).$$

□

Η πεπερασμένου όγκου πίεση  $\psi_\Lambda^\#$  εξαρτάται από το χωρίο  $\Lambda$  και από τις συνοριακές συνθήκες. Θα δούμε στο επόμενο θεώρημα ότι όταν το  $\Lambda$  είναι αρκετά μεγάλο,  $|\Lambda| \gg |\partial\Lambda|$ , η συνοριακή συνθήκη και το σχήμα του  $\Lambda$  μας δίνουν μια αμελητέα διόρθωση:  $\exists \psi(\beta, h)$  τέτοια ώστε

$$\psi_\Lambda^\#(\beta, h) = \psi(\beta, h) + O\left(\frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|}\right).$$

Η  $\psi(\beta, h)$  δίνει μία καλύτερη εκδοχή για το θερμοδυναμικό potential καθώς η  $\psi(\beta, h)$  δεν εξαρτάται από τις λεπτομέρειες του συστήματος, όπως το σχήμα του συστήματος για παράδειγμα.

**Θεώρημα 3.1.** Στο θερμοδυναμικό όριο, η πίεση

$$\psi(\beta, h) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_\Lambda^\#(\beta, h)$$

είναι καλώς ορισμένη και ανεξάρτητη από την ακολουθία  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$  και το είδος συνοριακής συνθήκης. Επιπρόσθετα η  $\psi$  είναι κυρτή (σαν συνάρτηση  $\mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}$ ) και περιττή σαν συνάρτηση του  $h$ .

Απόδειξη. Υπαρξη ορίου

Θα ξεκινήσουμε με το να αποδείξουμε τη σύγκλιση στην περίπτωση των ελεύθερων συνοριακών συνθηκών. Η απόδειξη αυτή θα έχει δύο βήματα.

- Αρχικά δείχνουμε την ύπαρξη του ορίου

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{D_n}^\emptyset(\beta, h)$$

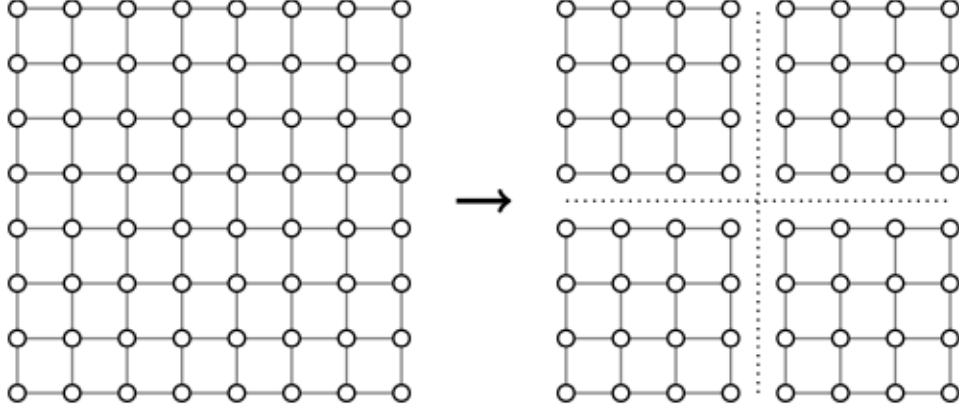
$$\text{με } D_n = \{1, 2, \dots, 2^n\}^d.$$

- Έπειτα, επεκτείνουμε τη σύγκλιση σε κάθε ακολουθία  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ .

Σταθεροποιούμε ένα ζευγάρι  $(\beta, h)$  και θα το παραλείψουμε στον συμβολισμό μέχρι το τέλος της απόδειξης.

Θα δείξουμε ότι η πίεση στο χωρίο  $D_{n+1}$  είναι κοντά με αυτή στο χωρίο  $D_n$ . Διαμερίζουμε το  $D_{n+1}$  σε  $2^d$  ξένα translates του  $D_n$  που τα συμβολίζουμε  $D_n^1, \dots, D_n^{2^d}$ .





Εικόνα 3.3: Ο κύβος  $D_{n+1}$  που διαμερίζεται σε  $2^d$  translates του  $D_n$ . Η αλληλεπίδραση μεταξύ των sub-boxes συμβολίζεται με  $R_n(\omega)$ .

Η ενέργεια του  $\omega$  στο  $D_{n+1}$  γράφεται ως

$$\mathcal{H}_{D_{n+1}}^\emptyset = \sum_{i=1}^{2^d} \mathcal{H}_{D_n^{(i)}}^\emptyset + R_n,$$

όπου η  $R_n$  αναπαριστά την ενέργεια της αλληλεπίδρασης των spin που βρίσκονται σε διαφορετικό υποσύνολο.

Επειδή κάθε πλευρά του  $D_{n+1}$  περιέχει  $(2^{n+1})^{(d-1)}$  σημεία έχουμε  $|R_n(\omega)| \leq \beta d (2^{n+1})^{(d-1)}$ . Για να πάρουμε ένα άνω φράγμα της συνάρτησης επιμερισμού γράφουμε

$$\mathcal{H}_{D_{n+1}}^\emptyset \geq -\beta d (2^{n+1})^{(d-1)} + \sum_{i=1}^{2^d} \mathcal{H}_{D_n^{(i)}}^\emptyset$$

που δίνει

$$\mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\emptyset \leq e^{\beta d (2^{n+1})^{(d-1)}} \sum_{\omega \in \Omega_{D_{n+1}}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp\left(-\mathcal{H}_{D_n^{(i)}}^\emptyset(\omega)\right).$$

Χωρίζουμε το άθροισμα για  $\omega \in D_{n+1}$  σε  $2^d$  αθροίσματα τέτοια ώστε  $\omega^{(i)} \in D_n^{(i)}$ ,

$$\sum_{\omega \in \Omega_{D_{n+1}}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp\left(-\mathcal{H}_{D_n^{(i)}}^\emptyset(\omega)\right) = \prod_{i=1}^{2^d} \sum_{\omega^{(i)} \in \Omega_{D_n^{(i)}}} \exp\left(-\mathcal{H}_{D_n^{(i)}}^\emptyset(\omega^{(i)})\right) = \left(\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset\right)^{2^d}$$

όπου  $\mathbf{Z}_{D_n^{(i)}}^\emptyset = \mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset$ ,  $\forall i$ .

Ένα κάτω φράγμα το λαμβάνουμε με παρόμοιο τρόπο, και καταλήγουμε

$$e^{-\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} \left(\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset\right)^{2^d} \leq \mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\emptyset \leq e^{\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} \left(\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset\right)^{2^d}.$$

Λογαριθμίζουμε και έχουμε

$$-d\beta(2^{n+1})^{d-1} + 2d \log \mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset \leq \log \mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\emptyset \leq d\beta(2^{n+1})^{d-1} + 2d \log \mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset$$

Διαιρούμε με  $|D_{n+1}| = (2^{n+1})^d$

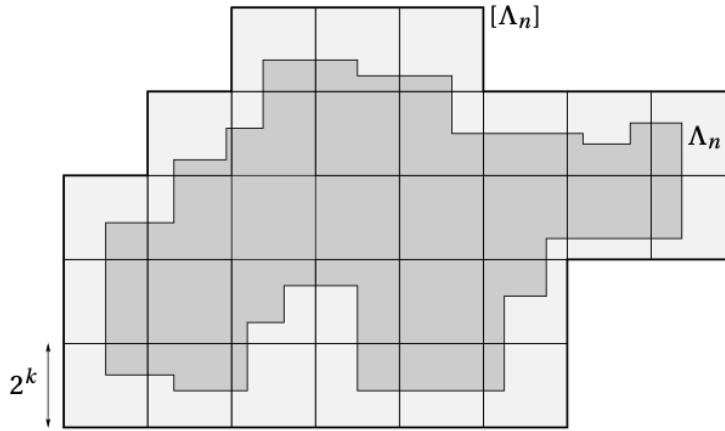
$$\begin{aligned} -\frac{d\beta}{2^{n+1}} + \frac{2d\log\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset}{2^{d^{n+1}}} &\leq \frac{\log\mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\emptyset}{|D_{n+1}|} \leq \frac{d\beta}{2^{n+1}} + \frac{2d\log\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset}{2^{d^{n+1}}} \\ -\frac{d\beta}{2^{n+1}} + \frac{\log\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset}{(2^d)^n} &\leq \psi_{D_{n+1}}^\emptyset \leq \frac{d\beta}{2^{n+1}} + \frac{\log\mathbf{Z}_{D_n}^\emptyset}{(2^d)^n} \\ -\frac{d\beta}{2^{n+1}} + \psi_{D_n}^\emptyset &\leq \psi_{D_{n+1}}^\emptyset \leq \frac{d\beta}{2^{n+1}} + \psi_{D_n}^\emptyset \\ |\psi_{D_{n+1}}^\emptyset - \psi_{D_n}^\emptyset| &\leq \frac{d\beta}{2^{n+1}} \end{aligned}$$

Από το παραπάνω συμπεραίνουμε ότι η  $\psi_{D_n}$  είναι Cauchy ακολουθία:  $\forall n \leq m$

$$|\psi_{D_m}^\emptyset - \psi_{D_n}^\emptyset| \leq \beta d \sum_{k=n+1}^m 2^{-k} = \beta d(2^{-n} - 2^{-m}).$$

Άρα το όριο  $\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{D_n}^\emptyset$  υπάρχει και το συμβολίζουμε με  $\psi$ .

Έστω μία τυχαία ακολουθία  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ . Έστω ένας ακέραιος  $k$  και έστω μία διαμέριση του  $\mathbb{Z}^d$  σε ξένα γειτονικά translates του  $D_k$ . Για κάθε  $n$ , θεωρούμε minimum covering του  $\Lambda_n$  από στοιχεία  $D_k^{(j)}$  της διαμέρισης και  $[\Lambda_n] \stackrel{\text{def}}{=} \cup_j D_k^{(j)}$



Χρησιμοποιούμε

$$\begin{aligned} |\psi_{\Lambda_n}^\emptyset - \psi| &= |\psi_{\Lambda_n}^\emptyset - \psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset + \psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset - \psi_{D_k}^\emptyset + \psi_{D_k}^\emptyset - \psi| \\ &\leq |\psi_{\Lambda_n}^\emptyset - \psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset| + |\psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset - \psi_{D_k}^\emptyset| + |\psi_{D_k}^\emptyset - \psi| \end{aligned} \quad (3.4)$$

Έστω  $\epsilon > 0$ , Επειδή  $\psi_{D_k}^\emptyset \rightarrow \psi$  για  $k \rightarrow \infty$ , υπάρχει  $k_0 = k_0(\beta, \epsilon)$  τέτοιο ώστε

$$|\psi_{D_k}^\emptyset - \psi| \leq \frac{\epsilon}{3}, \quad \forall k \geq k_0.$$

Έπειτα υπολογίζουμε  $\psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset$  ως εξής

$$\mathcal{H}_{[\Lambda_n]}^\emptyset = \sum_j \mathcal{H}_{D_k^j}^\emptyset + W_n,$$

με  $|W_n| \leq \beta \frac{|\Lambda_n|}{|D_k|} d(2^k)^{d-1} = \beta d 2^{-k} |\Lambda_n|$  γιατί  $|D_k| = (2^k)^d$ . Άρα υπάρχει  $k_1 = k_1(\beta, \epsilon)$  τέτοιο ώστε

$$|\psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset - \psi_{D_k}^\emptyset| \leq \beta d 2^{-k} < \frac{\epsilon}{3}, \quad \forall k \geq k_1$$

Σταθεροποιούμε  $k \geq \max\{k_0, k_1\}$ . Γράφουμε  $\Delta_n = [\Lambda_n] \setminus \Lambda_n$ . Παρατηρούμε ότι

$$|\mathcal{H}_{\Lambda_n}^\emptyset - \mathcal{H}_{[\Lambda_n]}^\emptyset| \leq (2d\beta + |h|)|\Delta_n|.$$

Άρα,

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\emptyset &= \sum_{\omega \in \Omega_{[\Lambda_n]}} e^{-\mathcal{H}_{[\Lambda_n]}^\emptyset} \leq \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda_n}^\emptyset} \sum_{\omega \in \Omega_{\Delta_n}} e^{(2d\beta + |h|)|\Delta_n|} \\ &= e^{(2d\beta + |h| + \log 2)|\Delta_n|} \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\emptyset. \end{aligned}$$

(Με το ίδιο σκεπτικό έχουμε το κάτω όριο και παρατηρούμε ότι  $\Delta_n$  περιέχει το πολύ  $|\partial^{in} \Lambda_n| |D_k|$  κορυφές, άρα λογαριθμίζοντας,

$$|\log \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\emptyset - \log \mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\emptyset| \leq |\partial^{in} \Lambda_n| |D_k| (2d\beta + |h| + \log 2). \quad (3.5)$$

Επειδή,

$$1 \leq \frac{[\Lambda_n]}{\Lambda_n} \leq 1 + \frac{|\partial^{in} \Lambda_n| |D_k|}{\Lambda_n}$$

και επειδή η  $\psi_\Lambda^\emptyset$  είναι ομοιόμορφα φραγμένη (αυτό έρχεται από συνέχεια και όριο, για παράδειγμα από  $2d\beta + |h| + \log 2$ ) από (3.3) και (3.5) προκύπτει

$$|\psi_{\Lambda_n}^\emptyset - \psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset| \leq \frac{\epsilon}{3},$$

για όλα τα  $n$  αρκετά μεγάλα. Συνδυάζοντας όλες τις εκτιμήσεις, συμπεραίνουμε από τη σχέση (3.4) ότι όταν το  $n$  είναι αρκετά μεγάλο,

$$|\psi_{\Lambda_n}^\emptyset - \psi| \leq \epsilon.$$

**Ανεξαρτησία από συνοριακές συνθήκες** Έστω  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ ,  $\eta \in \Omega$  και  $\omega \in \Omega_\Lambda$ . Συμβολίζουμε με  $\omega'$  το configuration στο  $\Omega_\Lambda^\eta$  που ταυτίζεται με το  $\omega$  μέσα στο  $\Lambda$ . Τότε,  $|\mathcal{H}_\Lambda(\omega') - \mathcal{H}_\Lambda^\emptyset(\omega)| \leq 2d\beta |\partial^{in} \Lambda|$ . Αυτή η παρατήρηση μας οδηγεί

$$e^{-2d\beta |\partial^{in} \Lambda|} \mathbf{Z}_\Lambda^\emptyset \leq \mathbf{Z}_\Lambda^\eta \leq e^{2d\beta |\partial^{in} \Lambda|} \mathbf{Z}_\Lambda^\emptyset.$$

Χρησιμοποιούμε την ανισότητα αυτή μαζί με τη σύγκλιση Van Howe μας δείχνει ότι  $\lim_{\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_{\Lambda_n}^\eta$  υπάρχει και συμπίπτει με την  $\psi$ . Αντίστοιχα μπορούμε να κάνουμε τις ίδιες υποθέσεις για  $\mathbf{Z}_{V_n}^\emptyset$  και  $\mathbf{Z}_{V_n}^{per}$ .

**Κυρτότητα.** Επειδή  $(\beta, h) \mapsto \psi_\Lambda^\#(\beta, h)$  είναι κυρτή (απο το Λήμμα 3.1), το όριο  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$  είναι κυρτό (Τεχνική απόδειξη Α.3.2. Appendix A)

**Συμμετρία.** Το γεγονός ότι η  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  είναι άρτια είναι άμεσο συμπέρασμα των παραπάνω.  $\square$

### 3.2.3 Μαγνήτιση

Μία πολύ σημαντική ποσότητα, όπως αναφέραμε και στα προηγούμενα κεφάλαια, είναι η **μαγνητική πυκνότητα** στο  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  δηλαδή η τυχαία μεταβλητή

$$m_\Lambda \stackrel{def}{=} \frac{1}{|\Lambda|} M_\Lambda,$$

όπου  $M_\Lambda \stackrel{def}{=} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$  είναι η **ολική μαγνήτιση**. Ορίζουμε επίσης, για οποιοδήποτε  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ ,

$$m_\Lambda^\#(\beta, h) \stackrel{def}{=} \langle m_\Lambda \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\#.$$

με  $\langle m_\Lambda \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\# = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} m_\Lambda(\beta, h) \mu_{\Lambda; \beta, h}^\#(\omega)$ . Εύκολα διαπιστώνουμε ότι

$$m_\Lambda^\#(\beta, h) = \frac{\partial \psi_\Lambda^\#}{\partial h}(\beta, h). \quad (3.6)$$

**Σχόλιο 3.2.1.** Μπορούμε να δείξουμε (Τεχνική απόδειξη A'.3.3. Appendix A) ότι η **cumulant generating function** για την ποσότητα  $M_\Lambda$  μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\log \langle e^{t M_\Lambda} \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\# = |\Lambda| \left( \psi_\Lambda^\#(\beta, h + t) - \psi_\Lambda^\#(\beta, h) \right).$$

Όπως γνωρίζουμε απο τη θεωρία πιθανοτήτων η **cumulant generating function** μίας τυχαίας μεταβλητής κωδικοποιεί την πληροφορία που αφορά την κατανομή. Συμπεραίνουμε ότι η πίεση έχει πληροφορίες για την κατανομή και θα δούμε ότι έχει πληροφορίες και για το φαινόμενο *phase transition*.

Είναι αρκετά σημαντικό να διαπιστώσουμε αν η (3.6) ισχύει στο θερμοδυναμικό όριο. Υπάρχουν δύο προβλήματα:

1. Αρχικά πρέπει να ελέγξουμε αν υπάρχει το όριο  $\lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\partial \psi_\Lambda^\#}{\partial h}$  και αν το όριο εξαρτάται από τις συνοριακές συνθήκες.
2. Το πρόβλημα της εναλλαγής του θερμοδυναμικού ορίου με την παράγωγο ως προς  $h$  δηλαδή,

$$\lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\partial \psi_\Lambda^\#}{\partial h} \stackrel{?}{=} \frac{\partial}{\partial h} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_\Lambda^\# = \frac{\partial \psi}{\partial h}.$$

Τα προβλήματα αυτά συνδέονται με τη διαφορισιμότητα της πίεσης σαν συνάρτηση του  $h$ , το οποίο θα το απαντήσουμε αργότερα. Προς το παρόν χρησιμοποιούμε τις κυρτές ιδιότητες της πίεσης για να εξάγουμε μερικά αποτελέσματα. Οι πλευρικές παράγωγοι του  $h \mapsto \psi(\beta, h)$ ,

$$\frac{\partial \psi_\Lambda}{\partial h^-}(\beta, h) \stackrel{def}{=} \lim_{h' \uparrow h} \frac{\psi_\Lambda(\beta, h') - \psi_\Lambda(\beta, h)}{h' - h}, \quad \frac{\partial \psi_\Lambda}{\partial h^+}(\beta, h) \stackrel{def}{=} \lim_{h' \downarrow h} \frac{\psi_\Lambda(\beta, h') - \psi_\Lambda(\beta, h)}{h' - h}$$

υπάρχουν παντού, και αυτό είναι αποτέλεσμα της πρώτης πρότασης του θεωρήματος B'.3 (Appendix B), και είναι αριστερά και δεξιά συνεχής (πρόταση 5 του ίδιου θεωρήματος). Η πίεση θα

είναι διαφορίσιμη ως προς το  $h$  αν και μόνο αν οι δύο πλευρικές παράγωγοι ταυτίζονται. Είναι φυσικό να ορίσουμε,  $\forall \beta$ , το σύνολο:

$$\begin{aligned}\mathfrak{B}_\beta &\stackrel{def}{=} \{h \in \mathbb{R} : \psi(\beta, \cdot) \text{ δεν είναι διαφορίσιμη στο } h\} \\ &= \{h \in \mathbb{R} : \frac{\partial \psi_\Lambda^\#}{\partial h^-}(\beta, h) \neq \frac{\partial \psi_\Lambda^\#}{\partial h^+}(\beta, h)\}.\end{aligned}$$

Από πρόταση 6 του θεωρήματος  $B'.3$  (Appendix B),  $\forall \beta$ , το σύνολο  $\mathfrak{B}_\beta$  είναι το πολύ αριθμήσιμο.

**Πρόταση 3.2.1.** Για κάθε  $h \notin \mathfrak{B}_\beta$ , η μέση μαγνητική πυκνότητα

$$m(\beta, h) \stackrel{def}{=} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} m_\Lambda^\#(\beta, h)$$

είναι καλώς ορισμένη ποσότητα, ανεξάρτητη από την ακολουθία  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$  και από τις συνοριακές συνθήκες και ικανοποιεί

$$m(\beta, h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h). \quad (3.7)$$

Επίσης η συνάρτηση  $h \mapsto m(\beta, h)$  είναι αύξουσα στο  $\mathbb{R} \setminus \mathfrak{B}_\beta$  και συνεχής  $\forall h \notin \mathfrak{B}_\beta$ . Όμως είναι ασυνεχής  $\forall h \in \mathfrak{B}_\beta$

$$\lim_{h' \downarrow h} m(\beta, h') = \frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h), \quad \lim_{h' \uparrow h} m(\beta, h') = \frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h). \quad (3.8)$$

Ορίζουμε την **στιγμαιαία μαγνήτιση** ως

$$m^*(\beta) \stackrel{def}{=} \lim_{h \downarrow 0} m(\beta, h)$$

η οποία είναι πάντα καλώς ορισμένη ποσότητα.

Απόδειξη. Όταν  $h \notin \mathfrak{B}_\beta$ ,

$$\frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial h} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_\Lambda^\#(\beta, h) = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\partial}{\partial h} \psi_\Lambda^\#(\beta, h) = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} m_\Lambda^\#(\beta, h),$$

που αποδεικνύει την (3.8), την ύπαρξη του θερμοδυναμικού ορίου της μαγνητικής πυκνότητας και ισχύει και η ανεξαρτησία από την ακολουθία συνόλων και συνοριακών συνθηκών. Η δεύτερη ισότητα έρχεται από την πρόταση 7 του θεωρήματος  $B'.3$  και η τρίτη από το (3.7).

Η μονοτονία και η συνέχεια του  $h \mapsto m(\beta, h)$  στον  $\mathbb{R} \setminus \mathfrak{B}_\beta$  έπεται από (3.7) και την πρόταση 4 και 5 του θεωρήματος  $B'.3$ .

Έστω  $h \in \mathfrak{B}_\beta$  και  $(h_k)_{k \geq 1}$  ακολουθία στο  $\mathbb{R} \setminus \mathfrak{B}_\beta$  τέτοια ώστε  $h_k \downarrow h$  (η ύπαρξη της  $h_k$  ισχύει γιατί το  $\mathfrak{B}_\beta$  είναι το πολύ αριθμήσιμο). Από (3.7),  $\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h_k) = m(\beta, h_k) \forall k$ . Ο ισχυρισμός (3.8) έπεται από την (3.7) που έπεται από την πρόταση 5 του θεωρήματος  $B'.3$ .  $\square$

### 3.2.4 Ένας πρώτος ορισμός του phase transition

Από την παραπάνω ανάλυση είδαμε ότι η μέση μαγνητική πυκνότητα είναι ασυνεχής στα σημεία  $h$  στα οποία δεν είναι διαφορίσιμη η πίεση. Αυτή η παρατήρηση μας οδηγεί στον εξής ορισμό.

**Ορισμός 3.2.2.** Η πίεση  $\psi$  παρουσιάζει **first-order phase transition** στο  $(\beta, h)$  αν η απεικόνιση  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  δεν είναι παραγωγίσιμη στο σημείο αυτό.

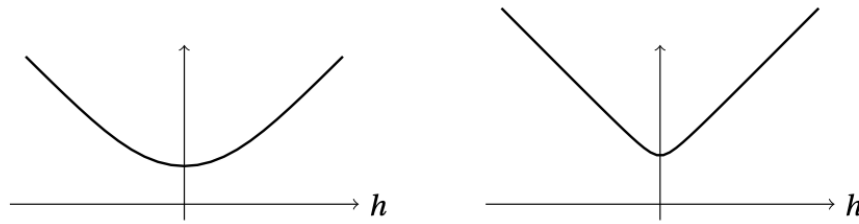
### 3.3 Το μοντέλο Ising σε μία διάσταση

Εδώ παρουσιάζουμε το μοντέλο Ising σε μία διάσταση, στο οποίο μπορούμε να κάνουμε αναλυτικούς υπολογισμούς.

**Θεώρημα 3.2.** ( $d = 1$ ) Για όλα τα  $\beta \geq 0$  και  $h \in \mathbb{R}$ , η πίεση  $\psi(\beta, h)$  του μοντέλου Ising σε μία διάσταση δίνεται από τον τύπο

$$\psi(\beta, h) = \log \left\{ e^\beta \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\}. \quad (3.9)$$

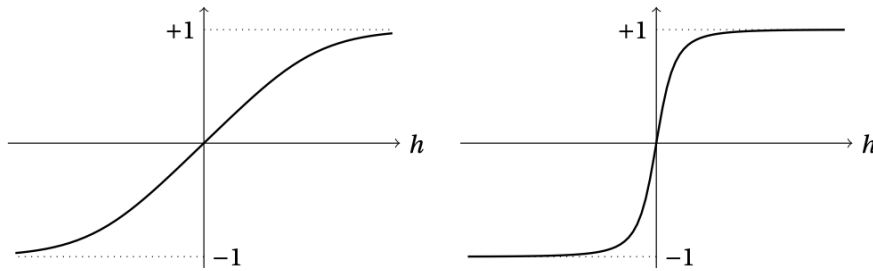
Η (3.9) μας δείχνει ότι η  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  είναι παραγωγίσιμη (συγκεκριμένα είναι αναλυτική) παντού,  $\forall \beta \geq 0$ , άρα για το σύνολο  $\mathfrak{B}_\beta$  ισχύει  $\mathfrak{B}_\beta = \emptyset$  όταν  $d = 1$



Εικόνα 3.4: Η πίεση  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  του μοντέλου Ising σε μία διάσταση, αναλυτική ως προς  $h$  για κάθε θερμοκρασία ( $\beta = 0.8$  αριστερά,  $\beta = 2$  δεξιά).

Όπως είδαμε στην Πρόταση 3.2.1, η μέση μαγνητική πυκνότητα  $m(\beta, h)$  δίνεται από

$$m(\beta, h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h), \quad \forall h \in \mathbb{R}.$$



Εικόνα 3.5: Η μέση μαγνητική πυκνότητα  $m(\beta, h)$  του μοντέλου Ising σε μία διάσταση (για τις ίδιες τιμές του  $\beta$  όπως στην Εικόνα 3.4).

Επειδή η  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  είναι αναλυτική, η παράγωγος  $h \mapsto m(\beta, h)$  είναι επίσης αναλυτική και συγκεκριμένα συνεχής. Άρα  $m^*(\beta) = \lim_{h \downarrow 0} m(\beta, h) = m(\beta, 0)$ . Άλλα επειδή  $\psi(\beta, h) = \psi(\beta, -h)$  έχουμε  $\frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, 0) = 0$ . Από αυτό συμπεραίνουμε ότι η στιγμιαία μαγνητική του μοντέλου Ising σε μία διάσταση είναι 0 σε κάθε θερμοκρασία:

$$m^*(\beta) = 0, \quad \forall \beta > 0.$$

Συγκεκριμένα, το μοντέλο παρουσιάζει παραμαγνητική συμπεριφορά σε όλες τις μη μηδενικές θερμοκρασίες (όπως αναφέραμε και στο υποκεφάλαιο 1.4.3).

Μόνο στο όριο  $\beta \rightarrow \infty$  έχουμε ότι η  $\psi(\beta, h)$  δεν είναι διαφορίσιμη στο  $h = 0$  (όπως βλέπουμε στην τεχνική απόδειξη Α.3.4).

Απόδειξη. (Απόδειξη Θεωρήματος 3.2)

Όπως είδαμε στο θεώρημα 3.1, η πίεση είναι ανεξάρτητη της επιλογής συνοριακών συνθηκών και της ακολουθίας όγκων  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}$ . Η πιο βολική επιλογή να εργαστούμε στον τόρο  $\mathbb{T}_n$ , δηλαδή να χρησιμοποιήσουμε το σύνολο  $V_n = \{0, \dots, n-1\}$  με περιοδικές συνθήκες. Το πλεονέκτημα που μας δίνει αυτή η επιλογή είναι ότι μπορούμε να γράψουμε το  $\mathbf{Z}_{V_n; \beta, h}^{per}$  ως το ίχνος ενός  $2 \times 2$  πίνακα. Για  $\omega_n \equiv \omega_0$ ,

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{V_n; \beta, h}^{per} &= \sum_{\omega \in \Omega_{V_n}} e^{-\mathcal{H}_{V_n; \beta, h}^{per}(\omega)} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{V_n}} e^{-\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{V_n}^{per}} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - h \sum_{i \in V_n} \sigma_i(\omega)\right)} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{V_n}} \prod_{i=0}^{n-1} e^{\beta \omega_i \omega_{i+1} + h \omega_i} \\ &= \sum_{\omega_0 = \pm 1} \cdots \sum_{\omega_{n-1} = \pm 1} \prod_{i=0}^{n-1} e^{\beta \omega_i \omega_{i+1} + h \omega_i} \\ &= \sum_{\omega_0 = \pm 1} \cdots \sum_{\omega_{n-1} = \pm 1} \prod_{i=0}^{n-1} A_{\omega_i \omega_{i+1}}, \end{aligned}$$

όπου οι αριθμοί  $A_{+,+} = e^{\beta+h}$ ,  $A_{+,-} = e^{-\beta+h}$ ,  $A_{-,+} = e^{-\beta-h}$  και  $A_{-,-} = e^{\beta-h}$  διαμορφώνουν ένα πίνακα, ο οποίος καλείται **transfer matrix**:

$$A \stackrel{def}{=} \begin{pmatrix} e^{\beta+h} & e^{-\beta+h} \\ e^{-\beta-h} & e^{\beta-h} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Άρα μπορούμε να γράψουμε το  $\mathbf{Z}_{V_n; \beta, h}^{per}$  ως το ίχνος του  $A$  στην  $n$ -οστή δύναμη.

$$\mathbf{Z}_{V_n; \beta, h}^{per} = \sum_{\omega_0 = \pm 1} (A^n)_{\omega_0, \omega_0} = Tr(A^n).$$

Τώρα θα υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές του πίνακα  $A$

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda \mathcal{I}) &= 0 \\ \implies \begin{vmatrix} e^{\beta+h} - \lambda & e^{-\beta+h} \\ e^{-\beta-h} & e^{\beta-h} - \lambda \end{vmatrix} &= 0 \\ \implies (e^{\beta+h} - \lambda)(e^{\beta-h} - \lambda) - e^{-\beta+h} e^{-\beta-h} &= 0 \\ \implies e^{\beta+h} e^{\beta-h} - \lambda e^{\beta+h} - \lambda e^{\beta-h} + \lambda^2 - e^{2\beta} &= 0 \\ \implies \lambda^2 - \lambda(e^{\beta+h} + e^{\beta-h}) + (e^{2\beta} - e^{-2\beta}) &= 0 \end{aligned}$$

Αναλύουμε το τριώνυμο

$$\begin{aligned}\lambda_{\pm} &= \frac{(e^{\beta+h} + e^{\beta-h}) \pm \sqrt{\Delta}}{2} \\ &= e^{\beta} \frac{(e^h + e^{-h})}{2} \pm \sqrt{\frac{\Delta}{4}}\end{aligned}$$

με διακρίνουσα  $\Delta$

$$\begin{aligned}\Delta &= (e^{\beta+h} + e^{\beta-h})^2 - 4(e^{2\beta} - e^{-2\beta}) \\ &= e^2(\beta + h) + 2e^{\beta+h}e^{\beta-h} + e^2(\beta - h) - 4(e^{2\beta} - e^{-2\beta}) \\ &= e^{2\beta+2h} + 2e^{2\beta} + e^{2\beta-2h} - 4(e^{2\beta} - e^{-2\beta}) \\ &= e^{2\beta}(e^{2h} + e^{-2h}) - 2e^{2\beta} + 4e^{-2\beta}\end{aligned}$$

Άρα η ποσότητα  $\frac{\Delta}{4}$  μας δίνει

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{4} &= e^{2\beta} \frac{(e^{2h} + e^{-2h})}{4} - \frac{2e^{2\beta}}{4} + \frac{4e^{-2\beta}}{4} \\ &= e^{2\beta} \frac{(e^{2h} + e^{-2h})}{4} - \frac{e^{2\beta}}{2} + e^{-2\beta} \pm \frac{e^{2\beta}}{2} \\ &= e^{2\beta} \frac{(e^{2h} + e^{-2h})}{4} + \frac{e^{2\beta}}{2} - 2\left(\frac{e^{2\beta} - e^{-2\beta}}{2}\right) \\ &= e^{2\beta} \frac{(e^{2h} + e^{-2h} + 2)}{4} + \frac{e^{2\beta}}{2} - 2\left(\frac{e^{2\beta} - e^{-2\beta}}{2}\right) \\ &= e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2\sinh(2\beta)\end{aligned}$$

Άρα οι ιδιοτιμές είναι

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta} \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2\sinh(2\beta)}.$$

Γράφουμε τον  $A$  ως  $A = BDB^{-1}$ , όπου  $D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}$ , και χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι  $Tr(GH) = Tr(HG)$  προκύπτει

$$\mathbf{Z}_{V_n; \beta, h}^{per} = Tr(A^n) = Tr(BD^n B^{-1}) = Tr(D^n) = \lambda_+^n + \lambda_-^n.$$

Επειδή  $\lambda_+ > \lambda_-$ , έχουμε  $\psi(\beta, h) = \log \lambda_+$  το οποίο αποδυναμώνει τη σχέση (3.9).  $\square$

Η συνέπεια του επόμενου θεωρήματος είναι ότι η  $m_{\Lambda_n}$  συγκεντρώνεται στο 0 υπό το μέτρο  $\mu_{\Lambda_n; \beta, 0}^{\#}$  καθώς  $n \rightarrow \infty$  για οποιαδήποτε συνοριακή συνθήκη.

**Θεώρημα 3.3.** ( $d = 1$ ) Έστω  $0 < \beta < \infty$  και θεωρούμε μία ακολουθία  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}$  με μία συνοριακή συνθήκη  $\#$ . Τότε  $\forall \epsilon > 0 \exists c = c(\beta, \epsilon) > 0$  τέτοιο ώστε για μεγάλο  $n$  να ισχύει:

$$\mu_{\Lambda_n; \beta, 0}^{\#}(m_{\Lambda_n} \notin (-\epsilon, \epsilon)) \leq e^{-c|\Lambda_n|} \quad (3.11)$$



Απόδειξη. Γράφουμε το  $\mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \notin (-\epsilon, \epsilon))$  ως εξής

$$\mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \notin (-\epsilon, \epsilon)) = \mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon) + \mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \leq -\epsilon),$$

Αυτοί οι δύο όροι μπορούν να μελετηθούν με τον ίδιο τρόπο. Άρα θα μελετήσουμε αρχικά το πρώτο. Με χρήση της ανισότητας Chernov έχουμε ότι  $\forall h \geq 0$ :

$$\mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon) \leq e^{-h\epsilon|\Lambda_n|} \langle e^{hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|} \rangle_{\Lambda_n;\beta,0}^\#.$$

Μπορούμε να εκφράσουμε το  $\langle e^{hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|} \rangle_{\Lambda_n;\beta,0}^\#$  ως εξής:

$$\begin{aligned} \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} e^{hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|} \mu_{\Lambda_n;\beta,0} &= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} e^{hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|} \frac{e^{-\mathcal{H}_{\Lambda_n;\beta,0}}}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} \frac{e^{-\mathcal{H}_{\Lambda_n;\beta,0} + hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|}}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} \frac{e^{-(-\sum_{i,j \in \Lambda} \omega_i \omega_j) + hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|}}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} \frac{e^{-(-\sum_{i,j \in \Lambda} \omega_i \omega_j - hm_{\Lambda_n}|\Lambda_n|)}}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} \frac{e^{-(-\sum_{i,j \in \Lambda} \omega_i \omega_j - hM_{\Lambda_n})}}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#} \\ &= \frac{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda_n;\beta,h}}}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#} \\ &= \frac{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,h}^\#}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#}. \end{aligned}$$

Άρα γράφεται:

$$\mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon) \leq e^{-h\epsilon|\Lambda_n|} \frac{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,h}^\#}{\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,0}^\#}$$

Λογαριθμίζουμε και έχουμε:

$$\frac{1}{|\Lambda_n|} \log \mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon) \leq \left( \psi_{\Lambda_n}^\#(\beta, h) - \psi_{\Lambda_n}^\#(\beta, 0) \right) - h\epsilon = I_\beta(h) - h\epsilon$$

όπου  $I_\beta(h) \stackrel{def}{=} \psi(\beta, h) - \psi(\beta, 0)$ . Με χρήση ορίου για  $n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \log \mu_{\Lambda_n;\beta,0}^\#(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon) &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \psi_{\Lambda_n}^\#(\beta, h) - \psi_{\Lambda_n}^\#(\beta, 0) \right) - h\epsilon \\ &= I_\beta(h) - h\epsilon \end{aligned}$$

Επειδή  $h \geq 0$  είναι αυθαίρετο μπορούμε να το ελαχιστοποιήσουμε

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup \frac{1}{|\Lambda_n|} \log \mu_{\Lambda_n; \beta, 0}^{\#}(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon) \leq -\sup_{h \geq 0} \{h\epsilon - I_{\beta}(h)\} \quad (3.12)$$

Για να δείξουμε ότι το  $\mu_{\Lambda_n; \beta, 0}^{\#}(m_{\Lambda_n} \geq \epsilon)$  εξασθενεί εκθετικά γρήγορα ως προς  $n$  πρέπει να ελέγξουμε ότι το  $\sup_{h \geq 0} \{h\epsilon - I_{\beta}(h)\} > 0$ . Θυμόμαστε από την έκφραση της πίεσης  $\psi$  ότι είναι αναλυτική ως προς  $h$ . Επίσης

$$\begin{aligned} I_{\beta}(0) &= 0 \\ I'_{\beta}(h) &= \frac{\partial}{\partial h} I_{\beta} \implies I'_{\beta}(0) = 0, I'_{\beta} \rightarrow 1. \end{aligned}$$

για  $h \rightarrow \infty$ , που το ξέρουμε από την τεχνική απόδειξη Α'.3.4. στο Appendix Α'.

Άρα για  $0 < \epsilon < 1 \exists h_* > 0$  που εξαρτάται από τα  $\epsilon, \beta$  τέτοιο ώστε  $\sup_{h \geq 0} \{h\epsilon - I_{\beta}(h)\} = h_*\epsilon - I_{\beta}(h_*) > 0$ .  $\square$

Όπως είναι φανερό η πίεση περιέχει πολλές πληροφορίες για τη μαγνητική πυκνότητα. Θα δούμε παρακάτω ότι η ομαλότητα της πίεσης μας εξασφαλίζει μοναδικότητα του infinite-volume Gibbs state. Δυστυχώς ο υπολογισμός της πίεσης γίνεται πολύ δύσκολος (σχεδόν αδύνατος) σε μεγαλύτερες διαστάσεις. Το μόνο γνωστό αποτέλεσμα είναι για το διδιάστατο μοντέλο Ising για  $h = 0$ , συγκεκριμένα ο Onsager βρήκε την αναλυτική έκφραση για την πίεση:

$$\psi(\beta, 0) = \log 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log \{(\cosh(2\beta))^2 - \sinh(2\beta)(\cos\theta_1 + \cos\theta_2)\} d\theta_1 d\theta_2. \quad (3.13)$$

Αμα θέλουμε να κατανοήσουμε τη συμπεριφορά του μοντέλου για  $d \geq 2$  πρέπει να χρησιμοποιήσουμε άλλες μεθόδους. Αυτό θα είναι το βασικό αντικείμενο μελέτης για το υπόλοιπο του κεφαλαίου.

### 3.4 Απείρου όγκου Gibbs states

Η πίεση παρέχει πληροφορίες μόνο για τη θερμοδυναμική συμπεριφορά του συστήματος σε μεγάλους όγκους. Άμα κάποιος ενδιαφέρεται για τις στατιστικές ιδιότητες γενικού περιεχομένου όπως:

- Οι διακυμάνσεις της μαγνητικής πυκνότητας σε ένα πεπερασμένο χωρίο.
- Η συσχέτιση μακρινών spin.

πρέπει να κατανοήσει τη συμπεριφορά της κατανομής Gibbs  $\mu_{\Lambda;\beta,h}^\#$  σε μεγάλους όγκους.

Σε αυτό το κεφάλαιο θα εφαρμόσουμε την εξής προσέγγιση: Ένα state (σε άπειρο όγκο) θα το συσχετίζουμε με μία τοποθέτηση ενός μέσου όρου σε κάθε local function, δηλαδή σε κάθε observable του οποίου η τιμή εξαρτάται μόνο από πεπερασμένο αριθμό spin.

**Ορισμός 3.4.1.** Μία συνάρτηση  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  είναι local αν υπάρχει  $\Delta \subset \mathbb{Z}^d$  τέτοιο ώστε  $f(\omega) = f(\omega')$  όταν το  $\omega$  και το  $\omega'$  ταυτίζονται στο  $\Delta$ . Το μικρότερο τέτοιο σύνολο  $\Delta$  καλείται *support* της  $f$  και συμβολίζεται ως  $\text{supp}(f)$ .

**Ορισμός 3.4.2.** Ένα state απείρου όγκου *infinite-volume state* (ή αλλιώς *state*) είναι μία απεικόνιση μιάς local function  $f$  σε ένα πραγματικό αριθμό  $\langle f \rangle$  που ικανοποιεί:

1. *Normalization* :  $\langle 1 \rangle = 1$ .
2. *Positivity* : Αν  $f \geq 0$ , τότε  $\langle f \rangle \geq 0$ .
3. *Linearity* : Για οποιοδήποτε  $\lambda \in \mathbb{R}$ ,  $\langle f + \lambda g \rangle = \langle f \rangle + \lambda \langle g \rangle$

Ο αριθμός  $\langle f \rangle$  καλείτε ο μέσος όρος της  $f$  στο state  $\langle \cdot \rangle$ .

**Ορισμός 3.4.3.** Έστω  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$  και  $(\#_n)_{n \geq 1}$  μία ακολουθία συνοριακών συνθηκών. Η ακολουθία Gibbs κατανομών  $(\mu_{\Lambda_n;\beta,h}^{\#_n})_{n \geq 1}$  **συγκλίνει στο state  $\langle \cdot \rangle$**  αν και μόνο αν

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n;\beta,h}^{\#_n} = \langle f \rangle,$$

για κάθε local function  $f$ . Το state  $\langle \cdot \rangle$  τότε καλείται **Gibbs state στο  $(\beta, h)$** .

Θα συμβολίζουμε

$$\langle \cdot \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \cdot \rangle_{\Lambda_n;\beta,h}^{\#_n}$$

το γεγονός ότι το  $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_n;\beta,h}^{\#_n}$  συγκλίνει στο  $\langle \cdot \rangle$ .

**Παρατήρηση 3.1.** Η παραπάνω έννοια της σύγκλισης είναι φυσική. Από θερμοδυναμικής πλευράς είναι αναμενόμενο ότι οι ιδιότητες μεγάλων συστημάτων στην ισορροπία θα προσεγγίζονται καλά από τις ιδιότητες των ίδιων σε άπειρο όγκο. Συγκεκριμένα πεπερασμένου μεγέθους επιδράσεις, όπως αυτές που δημιουργούνται από το μακροσκοπικό σχήμα του συστήματος δεν θα επηρεάζουν τα τοπικά observations που γίνονται μακριά από το σύνορο του συστήματος. Αυτό ακριβώς εννοούμε με την παραπάνω έννοια σύγκλισης, ότι η μέτρηση μιάς τοπικής ποσότητας σε ένα μεγάλο σύστημα που αντιστοιχίζεται στην τιμή  $\langle f \rangle_{\Lambda_n;\beta,h}^{\#_n}$  προσεγγίζεται καλά από την αντίστοιχη μέτρηση  $\langle f \rangle$  σε άπειρο σύστημα.

Επειδή τα states είναι καθορισμένα σε ένα άπειρο Lattice, είναι φυσικό να διαχωρίσουμε αυτά που είναι αναλλοίωτα ως προς μεταφορά (**translation invariant**). Το **translation** κατά  $j \in \mathbb{Z}^d$ ,  $\theta_j : \mathbb{Z}^d \rightarrow \mathbb{Z}^d$  ορίζεται ως εξής:

$$\theta_j i \stackrel{\text{def}}{=} i + j$$

Τα **translations** μπορούν να εφαρμοστούν σε configurations, δηλαδή αν  $\omega \in \Omega$  τότε  $\theta_j \omega$  ορίζεται ως

$$(\theta_j \omega)_i \stackrel{\text{def}}{=} \omega_{i-j}. \quad (3.14)$$

**Ορισμός 3.4.4.** Ένα state  $\langle \cdot \rangle$  είναι **translation invariant** αν  $\langle f \circ \theta_j \rangle = \langle f \rangle$  για κάθε local συνάρτηση  $f$  και για όλα τα  $j \in \mathbb{Z}^d$ .

Ένα σημαντικό ερώτημα που έρχεται στην επιφάνεια είναι: **Μπορούμε να κατασκευάσουμε Gibbs state για το μοντέλο Ising με παραμέτρους  $(\beta, h)$** ; Το παρακάτω θεώρημα δείχνει ότι οι συνοριακές συνθήκες  $\eta^+$ ,  $\eta^-$  χρησιμοποιούνται για την κατασκευή δύο τέτοιων state.

**Θεώρημα 3.4.1.** Έστω  $\beta \geq 0$  και  $h \in \mathbb{R}$ . Μαζί με οποιαδήποτε ακολουθία  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$  η πεπερασμένου όγκου κατανομή Gibbs με  $+$ ,  $-$  συνοριακές συνθήκες συγκλίνει στα απείρου όγκου **Gibbs state**:

$$\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+ = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \cdot \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \quad \langle \cdot \rangle_{\beta, h}^- = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \cdot \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^- \quad (3.15)$$

Τα states  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ ,  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$  δεν εξαρτώνται από την ακολουθία  $(\Lambda_n)_{n \geq 1}$  και είναι **translation invariant**.

Η απόδειξη του θεωρήματος θα γίνει στα επόμενα υποκεφάλαια αφού πρώτα παρουσιάσουμε κάποιες βασικές έννοιες.

**Παρατήρηση 3.2.** Το θεώρημα δεν εννοεί ότι τα  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ ,  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$  είναι απαραίτητα δύο διαφορετικά **Gibbs state**. Το να βρούμε τα σύνολα των παραμέτρων  $\beta, h$  για τα οποία ισχύει αυτό είναι το υπόλοιπο υλικό της συγκεκριμένης ενότητας.

### 3.5 Δύο οικογένειες από Local function

Η κατασκευή των Gibbs states αποτελείται από την απόδειξη της ύπαρξης του ορίου

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^{\eta_n}$$

για κάθε local function  $f$ . Θα θέλαμε να τεστάρουμε τη σύγκλιση σε μία περιορισμένη οικογένεια συναρτήσεων. Το επόμενο Λήμμα μας δίνει δύο συγκεκριμένες οικογένειες, που θα μας βοηθήσουν για τη χρήση των ανισοτήτων συσχέτισης στο επόμενο υποκεφάλαιο. Ορίζουμε  $\forall A \subset \mathbb{Z}^d$ ,

$$\sigma_A \stackrel{def}{=} \prod_{j \in A} \sigma_j, \quad n_A \stackrel{def}{=} \prod_{j \in A} n_j$$

όπου  $n_j \stackrel{def}{=} \frac{1}{2}(1 + \sigma_j)$  είναι μεταβλητή απασχόλησης στο  $j$ .

**Λήμμα 3.2.** Έστω  $f$  local function. Τότε υπάρχουν πραγματικοί συντελεστές  $(\hat{f}_A)_{A \subset \text{supp}(f)}$  και  $(\tilde{f}_A)_{A \subset \text{supp}(f)}$  τέτοιοι ώστε να ισχύουν οι επόμενες αναπαραστάσεις:

$$f = \sum_{A \subset \text{supp}(f)} \hat{f}_A \sigma_A, \quad f = \sum_{A \subset \text{supp}(f)} \tilde{f}_A n_A$$

Απόδειξη. Η παραπάνω σχέση ορθογωνιότητας θα αποδειχθεί παρακάτω:  $\forall B \subset \mathbb{Z}^d$  και  $\forall$  configuration  $\omega, \tilde{\omega}$

$$2^{-|B|} \sum_{A \subset B} \sigma_A(\tilde{\omega}) \sigma_A(\omega) = \mathbb{1}_{\{\omega_i = \tilde{\omega}_i \forall i \in B\}} \quad (3.16)$$

Εφαρμόζοντας την (3.16) με  $B = \text{supp}(f)$

$$\begin{aligned} f(\omega) &= \sum_{\omega' \in \Omega_{\text{supp}(f)}} f(\omega') \mathbb{1}_{\{\omega_i = \omega'_i \forall i \in \text{supp}(f)\}} \\ &= \sum_{\omega' \in \Omega_{\text{supp}(f)}} f(\omega') 2^{-|\text{supp}(f)|} \sum_{A \subset \text{supp}(f)} \sigma_A(\omega) \sigma_A(\omega') \\ &= \sum_{A \subset \text{supp}(f)} \{2^{-|\text{supp}(f)|} \sum_{\omega' \in \Omega_{\text{supp}(f)}} f(\omega') \sigma_A(\omega')\} \sigma_A(\omega). \end{aligned}$$

Άρα η πρώτη σχέση ισχύει για

$$\hat{f}_A = 2^{-|\text{supp}(f)|} \sum_{\omega' \in \Omega_{\text{supp}(f)}} f(\omega') \sigma_A(\omega').$$

και επειδή  $\sigma_A = \prod_{i \in A} (2n_i - 1)$  το  $\tilde{f}_A$  έπεται από την πρώτη σχέση. Τώρα θα αποδείξουμε την (3.16):

- Έστω  $\omega_i = \tilde{\omega}_i \forall i \in B$ . Τότε

$$\sigma_A(\tilde{\omega})\sigma_A(\omega) = \prod_{j \in A} \sigma_j(\tilde{\omega}) \prod_{j \in A} \sigma_j(\omega) = \prod_{j \in A} \tilde{\omega}_j \omega_j = 1$$

γιατί  $\tilde{\omega}_j \omega_j = (\tilde{\omega}_j)^2 \forall j \in A \subset B$ . Άρα ισχύει η (3.16).

- Έστω ότι υπάρχει  $i \in B$  τέτοιο ώστε  $\omega_i \neq \tilde{\omega}_i$  (άρα  $\omega_i \tilde{\omega}_i = -1$ ). Τότε

$$\begin{aligned} \sum_{A \subset B} \sigma_A(\tilde{\omega})\sigma_A(\omega) &= \sum_{A \subset B \setminus \{i\}} (\sigma_A(\tilde{\omega})\sigma_A(\omega) + \sigma_{A \cup \{i\}}(\tilde{\omega})\sigma_{A \cup \{i\}}(\omega)) \\ &= \sum_{A \subset B \setminus \{i\}} (\sigma_A(\tilde{\omega})\sigma_A(\omega) + \omega_i \tilde{\omega}_i \sigma_A(\tilde{\omega})\sigma_A(\omega)) \\ &= \sum_{A \subset B \setminus \{i\}} \sigma_A(\tilde{\omega})\sigma_A(\omega)(1 + \omega_i \tilde{\omega}_i) = 0 \end{aligned}$$

□

Με το παραπάνω Λήμμα και σε συνδυασμό με τη γραμμικότητα, η σύγκλιση του  $(\langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^{\eta_n})_{n \geq 1}$   $\forall$  local functions, ελαττώνεται στο να δείξουμε τη σύγκλιση του  $(\langle \sigma_A \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^{\eta_n})_{n \geq 1}$  ή  $(\langle n_A \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^{\eta_n})_{n \geq 1}$  για πεπερασμένο  $A \subset \mathbb{Z}^d$ . Αυτό θα απλοποιηθεί όταν έχουμε τις ανισότητες συσχέτισης για το μοντέλο Ising.

## 3.6 Ανισότητες συσχέτισης

Οι ανισότητες συσχέτισης είναι ένα από τα βασικά εργαλεία στη μαθηματική ανάλυση του μοντέλου Ising. Θα χρησιμοποιήσουμε συγκεκριμένα τις ανισότητες GKS και FKG για τη κατασκευή των  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ ,  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$  αλλά και στη μελέτη άλλων ποσοτήτων.

### 3.6.1 Οι ανισότητες GKS

Έστω ότι έχουμε το μοντέλο Ising με όγκο  $\Lambda$  και + συνοριακή συνθήκη. Λόγω της φερομαγνητικής φύσης του μοντέλου είναι πιθανό ότι η συνοριακή συνθήκη + θα «προτιμήσει» μία μη αρνητική μαγνήτιση μέσα στο χωρίο για όσο ισχύει  $h \geq 0$ . Άρα αν  $i \in \Lambda$  τότε το  $h \geq 0$  εκφράζεται ως

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^+ \geq 0 \quad (3.17)$$

Γνωρίζοντας ότι το *spin* σε μία κορυφή  $j$  παίρνει την τιμή +1 «δεν μειώνει» την πιθανότητα να παρατηρηθεί ένα + *spin* σε κάποια άλλη κορυφή  $i$ , δηλαδή,

$$\mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1 | \sigma_j = 1) \geq \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1),$$

αυτό ισοδυναμεί με

$$\mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1, \sigma_j = 1) \geq \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1) \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_j = 1).$$

Επειδή  $\mathbf{1}_{\{\sigma(i)=1\}} = \frac{1}{2}(\sigma_i + 1)$  αυτό εκφράζεται ως

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^+ \geq \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^+ \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^+ \quad (3.18)$$

Η απόδειξη της σχέσης (3.18) βρίσκεται στο Appendix A υπο την μορφή τεχνικής απόδειξης (τεχνική απόδειξη A.3.5). Αυτό είναι ισοδύναμο με το να ρωτάμε αν τα  $\sigma_i$  και  $\sigma_j$  είναι **θετικά συσχετισμένα** υπό το μέτρο  $\mu_{\Lambda,\beta,h}^+$ .

Οι ανισότητες (3.17) και (3.18) αποτελούν συγκεκριμένες περιπτώσεις των GKS (που πήραν το όνομα τους απο τους Griffiths, Kelly, Sherman [11] [12]) που ισχύουν σε ένα πιο γενικό περιβάλλον.

Έστω  $\mathbf{J} = (J_{i,j})$  μία συλλογή από μη αρνητικούς πραγματικούς αριθμούς με δείκτες  $i, j \in \mathcal{E}_\Lambda^b$  και  $\mathbf{h} = (h_i)_{i \in \Lambda}$  μία συλλογή από αυθαίρετους πραγματικούς αριθμούς με δείκτη κορυφές του  $\Lambda$ . Θεωρούμε ότι  $\mathbf{h} > 0$ , δηλαδή  $h_i > 0$ . Γράφουμε για  $\omega \in \Omega_\Lambda^\eta$

$$\mathcal{H}_{\Lambda,\mathbf{J},\mathbf{h}} \stackrel{def}{=} - \sum_{i,j \in \mathcal{E}_\Lambda^b} J_{i,j} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - \sum_{i \in \Lambda} h_i \sigma_i(\omega). \quad (3.19)$$

Συμβολίζουμε την αντίστοιχη κατανομή Gibbs πεπερασμένου όγκου με  $\mu_{\Lambda,\mathbf{J},\mathbf{h}}^\eta$ . Τα  $h = (h_i)_{i \in \Lambda}$  είναι ακολουθία από τοπικά μαγνητικά πεδία. Μπορούμε να επιστρέψουμε στα  $\mathcal{H}_{\Lambda,\beta,h}$  και  $\mu_{\Lambda,\beta,h}^\eta$  θέτοντας  $J_{i,j} = \beta, \forall i, j \in \mathcal{E}_\Lambda^b$  και  $h_i = h, \forall i \in \Lambda$ .

Οι ανισότητες GKS είναι περιορισμένες στις +, ελεύθερες και περιοδικές συνοριακές συνθήκες και στα μη-αρνητικά μαγνητικά πεδία. Οι ανισότητες αυτές περιέχουν τη μέση τιμή τυχαίων μεταβλητών τύπου  $\sigma_A$  και μας πληροφορούν για τη συσχέτισή τους, ακριβώς αυτό που χρειαζόμαστε για τη μελέτη του θερμοδυναμικού ορίου.

### Θεώρημα 3.4. (Ανισότητα GKS)

Έστω  $\mathbf{J} = (J_{i,j})_{i,j \in \mathcal{E}_\Lambda^b}$  μία συλλογή από μη αρνητικούς πραγματικούς αριθμούς και  $\mathbf{h} = (h_i)_{i \in \Lambda}$  μία συλλογή από αυθαίρετους πραγματικούς αριθμούς. Υποθέτουμε  $\mathbf{h} \geq 0$ . Τότε  $\forall A, B \subset \Lambda$ ,

$$\langle \sigma_A \rangle_{\Lambda,\mathbf{J},\mathbf{h}}^+ \geq 0 \quad (3.20)$$

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle_{\Lambda,\mathbf{J},\mathbf{h}}^+ \geq \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda,\mathbf{J},\mathbf{h}}^+ \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda,\mathbf{J},\mathbf{h}}^+ \quad (3.21)$$

Οι ανισότητες αυτές ισχύουν και για ελεύθερες και περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

## 3.6.2 Η ανισότητα FKG

Η ανισότητα FKG (που πήρε το όνομα της από τους Fortuin, Kasteleyn, Ginibre [13]) αναφέρει ότι ενδεχόμενα που «αυξάνουν» είναι **θετικά συσχετισμένα**.

Η ολική τάξη στο σύνολο  $\{-1, 1\}$  προκαλεί **μερική διάταξη** στο  $\Omega$ :  $\omega \leq \omega'$  αν και μόνο αν  $\omega_i \leq \omega'_i, \forall i \in \mathbb{Z}^d$ . Ένα ενδεχόμενο  $E \subset \Omega$  **αυξάνει** αν για  $\omega \in E$  και  $\omega \leq \omega' \implies \omega' \in E$ . Αν  $E, F$  δυο ενδεχόμενα που αυξάνουν και εξαρτώνται από τα spin μέσα στο  $\Lambda$ , τότε εξαιτίας της φερομαγνητικής φύσης του μοντέλου, αναμένουμε ότι όταν πραγματοποιείται ένα ενδεχόμενο που αυξάνει θα συμβάλλει θετικά στην πιθανότητα ενός άλλου ενδεχομένου να αυξάνει. Αν για το ενδεχόμενο  $F$  ισχύει  $\mu_{\Lambda;\beta,h}^+(F) > 0$  τότε,

$$\mu_{\Lambda;\beta,h}^+(E|F) \geq \mu_{\Lambda;\beta,h}^+(E).$$

Πολλαπλασιάζουμε με  $\mu_{\Lambda;\beta,h}^+(F) > 0$ , και η παραπάνω ανισότητα έχει την εξής μορφή:

$$\mu_{\Lambda;\beta,h}^+(E \cap F) \geq \mu_{\Lambda;\beta,h}^+(E) \mu_{\Lambda;\beta,h}^+(F). \quad (3.22)$$

**Σχόλιο 3.6.1.** • Μία συνάρτηση  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  είναι **αύξουσα** αν και μόνο αν  $\forall \omega \leq \omega' \implies f(\omega) \leq f(\omega')$ .

- Ένα χαρακτηριστικό της ανισότητας FKG είναι ότι ισχύει για κάθε συνοριακή συνθήκη και για αυθαίρετες τιμές του μαγνητικού πεδίου.

**Θεώρημα 3.5.** (Ανισότητα FKG). Έστω  $\mathbf{J} = (J_{i,j})_{i,j \in \mathbb{Z}^d}$  μία συλλογή από μη αρνητικούς πραγματικούς αριθμούς και  $\mathbf{h} = (h_i)_{i \in \Lambda}$  μία συλλογή από αυθαίρετους πραγματικούς αριθμούς. Έστω  $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$  και  $\#$  μία αυθαίρετη συνοριακή συνθήκη. Τότε, για κάθε ζεύγος από αύξουσες συναρτήσεις  $f, g$  ισχύει:

$$\langle fg \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\#} \geq \langle f \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\#} \langle g \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\#}. \quad (3.23)$$

### 3.6.3 Συνέπειες

Πολλές χρήσιμες ιδιότητες των κατανομών Gibbs πεπερασμένου όγκου μπορούν να εξαχθούν από τις ανισότητες συσχέτισης. Η πρώτη ιδιότητα είναι ακριβώς αυτή που χρειαζόμαστε για τη μελέτη του θερμοδυναμικού ορίου.

**Λήμμα 3.3.** Έστω  $f$  μία αύξουσα συνάρτηση και  $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \in \mathbb{Z}^d$ . Τότε, για κάθε  $\beta \geq 0$  και  $h \in \mathbb{R}$ ,

$$\langle f \rangle_{\Lambda_1; \beta, h}^+ \geq \langle f \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+. \quad (3.24)$$

Αυτή η ιδιότητα ισχύει επίσης και για - συνοριακή συνθήκη και φθίνουσες συναρτήσεις.

Πριν αποδείξουμε το παραπάνω Λήμμα θα χρησιμοποιήσουμε μία χωρική ιδιότητα *Markov* που ικανοποιεί η  $\mu_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}$ , της οποίας η απόδειξη υπάρχει στο Appendix A'3 υπό τη μορφή τεχνικής απόδειξης (τεχνική απόδειξη A'.3.6).

(**Χωρική ιδιότητα Markov**):  $\forall \Delta \subset \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  και για κάθε configuration  $\eta \in \Omega$  και  $\omega' \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}$ ,

$$\mu_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}(\cdot | \sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta) = \mu_{\Delta; \beta, h}^{\omega'}(\cdot). \quad (3.25)$$

**Σχόλιο 3.6.2.** Ουσιαστικά η πιθανότητα στο δεξί μέλος της (3.25) εξαρτάται μόνο από το  $\omega'_i$  για  $i \in \partial^{ex} \Delta$ , όπου  $\partial^{ex} \Delta$  είναι το **exterior boundary του  $\Delta$**  και ορίζεται ως:

$$\partial^{ex} \Delta \stackrel{def}{=} \{i \notin \Delta : \exists j \in \Delta, j \sim i\}.$$

Αυτό μας δείχνει ότι

$$\mu_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}(\cdot | \sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta) = \mu_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}(\cdot | \sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \partial^{ex} \Delta),$$

για όλα τα ενδεχόμενα  $A$  που εξαρτώνται μόνο από spins μέσα στο  $\Delta$ . Υπό αυτή την έννοια, η (3.25) είναι χωρική ιδιότητα *Markov*.

Απόδειξη. (Λήμμα 3.3)

Από τη σχέση (3.25) προκύπτει ότι

$$\langle f \rangle_{\Lambda_1; \beta, h}^+ = \langle f | \sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1 \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+.$$



Η συνάρτηση  $\mathbb{1}_{\{\sigma(i)=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}}$  είναι αύξουσα και άρα από τη σχέση (3.25) και την ανισότητα FKG προκύπτει

$$\begin{aligned}
\langle f \rangle_{\Lambda_1; \beta, h}^+ &= \langle f | \sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1 \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+ \\
&= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_2}^+} f(\omega) \mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\omega | \{\sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}) \\
&= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_2}^+} f(\omega) \frac{\mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\omega \cap \{\sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\})}{\mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\{\sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\})} \\
&= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_2}^+} f(\omega) \frac{\mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\omega \cap \{\sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\})}{1 \cdot \mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} = 1) + 0 \cdot \mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} = 0)} \\
&= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_2}^+} f(\omega) \cdot 1 \cdot \frac{\mu_{\Lambda_2; \beta, h}^+(\omega \cap \{\sigma_i = 1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\})}{\langle \mathbb{1}_{\{\sigma_i=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+} \\
&= \frac{\langle f \mathbb{1}_{\{\sigma(i)=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+}{\langle \mathbb{1}_{\{\sigma(i)=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+} \\
&\geq \frac{\langle f \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+ \langle \mathbb{1}_{\{\sigma(i)=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+}{\langle \mathbb{1}_{\{\sigma(i)=1, \forall i \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+} \\
&= \langle f \rangle_{\Lambda_2; \beta, h}^+
\end{aligned}$$

□

Το επόμενο Λήμμα δείχνει ότι η κατανομή Gibbs με + ή - συνοριακές συνθήκες έχει σημαντικό ρόλο καθώς ευνοεί με μέγιστο τρόπο τα + και - spins αντίστοιχα.

**Λήμμα 3.4.** Έστω  $f$  μία αυθαίρετη αύξουσα συνάρτηση. Τότε για κάθε  $\beta \geq 0$  και  $h \in \mathbb{R}$ ,

$$\langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^- \leq \langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\eta \leq \langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+,$$

για κάθε συνοριακή συνθήκη  $\eta \in \Omega$  και  $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$ . Αντίστοιχα, αν  $f$  είναι μία local function με  $\text{supp}(f) \subset \Lambda$  και  $\text{supp}(f) \subset V_N$ , τότε

$$\begin{aligned}
\langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^- &\leq \langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset \leq \langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ \\
\langle f \rangle_{V_{N-1}; \beta, h}^- &\leq \langle f \rangle_{V_N; \beta, h}^{per} \leq \langle f \rangle_{V_{N-1}; \beta, h}^+.
\end{aligned}$$

Απόδειξη. Έστω  $I(\omega) = \exp\{\beta \sum_{i \in \Lambda, j \notin \Lambda} \omega_i (1 - n_j)\}$ . Τότε προκύπτει

$$\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^+} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} I(\omega)$$

Για μία  $f \nearrow$  έχουμε

$$\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^+} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} f(\omega) \leq \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} I(\omega) f(\omega),$$

η ανισότητα προκύπτει γιατί δεν υποθέσαμε  $\text{supp}(f) \subset \Lambda$ .

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ &= \frac{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} f(\omega)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)}} \\ &\geq \frac{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} I(\omega) f(\omega)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}(\omega)} I(\omega)} \\ &= \frac{\langle If \rangle_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}}{\langle I \rangle_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}} \\ &\geq \langle f \rangle_{\Lambda; \beta, h}^{\eta}, \end{aligned}$$

όπου στην τελευταία ανισότητα εφαρμόσαμε την ανισότητα FKG.

Η απόδειξη για την ελεύθερη συνοριακή συνθήκη είναι πανομοιότυπη, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση  $I(\omega) = \exp\{\beta \sum_{i \in \Lambda, j \notin \Lambda, i \sim j} \omega_i\}$ . □

Θα αποδείξουμε τώρα το θεώρημα 3.4.1, δηλαδή θα δείξουμε ύπαρξη και translation invariance των  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+, \langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$ .

*Απόδειξη.* (Απόδειξη θεωρήματος 3.4.1)

Θεωρούμε τη συνοριακή συνθήκη +. Έστω  $f$  μία local συνάρτηση. Από το Λήμμα 3.2 και από γραμμικότητα της μέσης τιμής έχουμε,

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ = \sum_{A \subset \text{supp}(f)} \tilde{f}_A \langle n_A \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+$$

Επειδή  $n_A$  είναι αύξουσα συνάρτηση (η απόδειξη βρίσκεται στο Appendix A.3 υπό τη μορφή τεχνικής απόδειξης A.3.7.) ισχύει

$$\langle n_A \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \geq \langle n_A \rangle_{\Lambda_{n+1}; \beta, h}^+ \quad \forall n \geq 1$$

Επειδή η  $n_A$  είναι μη-αρνητική συνάρτηση, η  $\langle n_A \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+$  συγκλίνει για  $n \rightarrow \infty$ . Άρα υπάρχει το όριο  $\langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+$ , δηλαδή

$$\langle f \rangle_{\beta, h}^+ \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+$$

Επειδή είναι γραμμικό, θετικό και normalized το  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$  είναι Gibbs state.

Ελέγχουμε τώρα την **ανεξαρτησία από ακολουθία**  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ .

Έστω  $\Lambda_n^1 \uparrow \mathbb{Z}^d, \Lambda_n^2 \uparrow \mathbb{Z}^d$  δύο τέτοιες ακολουθίες και  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^{+,1}$  και  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^{+,2}$  τα αντίστοιχα όρια. Επειδή  $\Lambda_n^1 \uparrow \mathbb{Z}^d, \Lambda_n^2 \uparrow \mathbb{Z}^d$ , μπορούμε να βρούμε μία ακολουθία  $(\Delta_n)_{n \geq 1}$  τέτοια ώστε  $\forall k \geq 1$ ,

$$\Delta_{2k-1} \in \{\Lambda_n^1 : n \geq 1\}, \quad \Delta_{2k} \in \{\Lambda_n^2 : n \geq 1\}, \quad \Delta_k \subsetneq \Delta_{k+1}.$$

Προφανώς  $\Delta_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ . Με βάση την παραπάνω συζήτηση που κάναμε το όριο  $\lim_{k \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Delta_k; \beta, h}^+$  υπάρχει  $\forall$  local functions  $f$ . Επειδή η  $(\langle f \rangle_{\Delta_{2k-1}; \beta, h}^+)_{k \geq 1}$  είναι υπακολουθία του  $(\langle f \rangle_{\Lambda_n^1; \beta, h}^+)_{n \geq 1}$  και η  $(\langle f \rangle_{\Delta_{2k}; \beta, h}^+)_{k \geq 1}$  υπακολουθία του  $(\langle f \rangle_{\Lambda_n^2; \beta, h}^+)_{n \geq 1}$ , τότε συμπεραίνουμε ότι

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n^1; \beta, h}^+ = \lim_{k \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Delta_k; \beta, h}^+ = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n^2; \beta, h}^+,$$

$\forall f$  local functions. Αυτό μας δείχνει ότι το state  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$  δεν εξαρτάται από την επιλογή ακολουθίας  $(\Lambda_n)_{n \geq 1}$ .

Τέλος θα δείξουμε το **translation invariant**.

Έστω  $f$  μία local συνάρτηση. Για κάθε  $j \in \mathbb{Z}^d$ , η  $f \circ \theta_j$  είναι local και προφανώς  $\theta_{-j}\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$  ( $\theta_i \Lambda \stackrel{\text{def}}{=} \Lambda + i$ ). Έχουμε

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \rightarrow \langle f \rangle_{\beta, h}^+ \text{ και } \langle f \circ \theta_j \rangle_{\theta_{-j}\Lambda_n; \beta, h}^+ \rightarrow \langle f \circ \theta_j \rangle_{\beta, h}^+.$$

Το αποτέλεσμα προκύπτει από τη μοναδικότητα του ορίου καθώς  $\langle f \circ \theta_j \rangle_{\theta_{-j}\Lambda_n; \beta, h}^+ = \langle f \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+$ .  $\square$

### 3.7 Διαγράμματα φάσης

Αφού είδαμε πως κατασκευάζεται το infinite-volume Gibbs state τώρα το επόμενο βήμα είναι να δούμε εάν για διάφορες τιμές της θερμοκρασίας και του μαγνητικού πεδίου υπάρχει επιρροή της συνοριακής συνθήκης μετά το θερμοδυναμικό όριο που να οδηγεί σε πολλαπλά Gibbs state. Η απάντηση θα δωθεί στα παρακάτω υποκεφάλαια και θα δούμε ότι εξαρτάται από:

- τη διάσταση  $d$ ,
- τις τιμές  $\beta, h$ .

**Σχόλιο 3.7.1.** Η «έλλειψη» μοναδικότητας δεν είναι «σφάλμα» ή αρνητικό χαρακτηριστικό αυτής της μεθόδου, αντιθέτως αποτελεί το **βασικό χαρακτηριστικό** γιατί η έλλειψη μοναδικότητας εκφράζει ότι ακόμα και αν έχουμε πλήρη εικόνα του συστήματος, δηλαδή δώσουμε μία πλήρη μικροσκοπική περιγραφή του συστήματος (συγκεκριμένα αυτό είναι το σύνολο όλων των configurations και τη Χαμιλτονιανή) και εάν έχουμε «δεδομένες» τιμές για τα  $\beta, h$  (δηλαδή τις θερμοδυναμικές παραμέτρους), τότε αυτά δεν είναι αρκετά για να προσδιορίσουμε πλήρως τη μακροσκοπική συμπεριφορά του συστήματος.

**Ορισμός 3.7.1.** Εάν μπορούμε να κατασκευάσουμε τουλάχιστον δύο διαφορετικά Gibbs state για ένα ζεύγος  $(\beta, h)$  τότε λέμε ότι έχουμε **first-order phase transition στο**  $(\beta, h)$ .

**Σχόλιο 3.7.2.** Θα συσχετίσουμε τον probabilistic ορισμό του **first-order phase transition** με τον αναλυτικό που σχετίζεται με την πίεση.

Πριν ξεκινήσουμε την ανάλυση μας παρουσιάζουμε το βασικό αποτέλεσμα (υπό τη μορφή θεωρήματος) αυτού του κεφαλαίου, από το οποίο κατασκευάζουμε το **phase diagram** του μοντέλου Ising, δηλαδή ο προσδιορισμός του ζεύγους  $(\beta, h)$  για τα οποία υπάρχουν διαφορετικά ή μοναδικό Gibbs state.

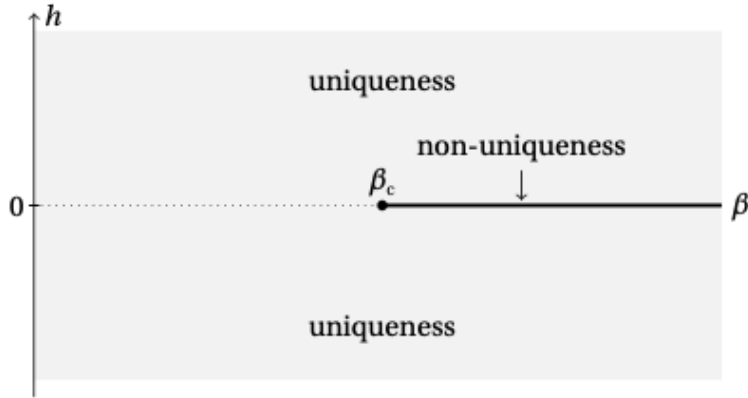
**Θεώρημα 3.6.** Το **βασικό αποτέλεσμα** του κεφαλαίου συνοψίζεται στις παρακάτω περιπτώσεις.

1.  $\forall d \geq 1$ , όταν  $h \neq 0$ ,  $\exists!$  Gibbs state  $\forall \beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ .
2. Για  $d = 1$   $\exists!$  Gibbs state  $\forall (\beta, h) \in \mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}$ .

3. Για  $h = 0$  και  $d \geq 2 \exists \beta_c = \beta_c(d) \in (0, \infty)$  τέτοιο ώστε

- για  $\beta < \beta_c \implies$  το Gibbs state στο  $(\beta, 0)$  είναι μοναδικό,
- για  $\beta > \beta_c \implies$  έχουμε **first-order phase transition** στο  $(\beta, 0)$ :

$$\langle \cdot \rangle_{\beta,0}^+ \neq \langle \cdot \rangle_{\beta,0}^-$$



Εικόνα 3.9: Το phase-diagram του μοντέλου Ising για  $d \geq 2$ . Η γραμμή  $\{(\beta, 0) : \beta > \beta_c\}$  καλείται **γραμμή συνύπαρξης**.

**Σχόλιο 3.7.3.** Η απόδειξη είναι «σκορπισμένη» στα εξής σημεία:

- Η απόδειξη του 1 βρίσκεται στο υποκεφάλαιο 3.7.4 .
- Η απόδειξη του 2 βρίσκεται στο υποκεφάλαιο 3.3 μαζί με το θεώρημα 3.7.2.
- Η απόδειξη του 3 βρίσκεται στο υποκεφάλαιο 3.7.2 και στο 3.7.3 .

### 3.7.1 Δύο κριτήρια για μη-μοναδικότητα

Σε αυτό το υποκεφάλαιο θα συνδέσουμε τις εξής έννοιες:

- μοναδικότητα του Gibbs state,
- μέση μαγνητική πυκνότητα,
- διαφορισιμότητα πίεσης,

και θα τις χρησιμοποιήσουμε για να κατασκευάσουμε διάφορους χαρακτηρισμούς μοναδικότητας των Gibbs state που θα μας βοηθήσουν στην κατασκευή του διαγράμματος φάσης. Επίσης θα συνδέσουμε τον probabilistic ορισμό και τον αναλυτικό ορισμό του **first order phase transition**.

#### Πρώτος χαρακτηρισμός Μοναδικότητας

Ο βασικός ρόλος των state  $\langle \cdot \rangle_{\beta,h}^+$ ,  $\langle \cdot \rangle_{\beta,h}^-$  φαίνεται από το παρακάτω θεώρημα.

**Θεώρημα 3.7.1.** Έστω  $(\beta, h) \in \mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}$ . Τα επόμενα είναι ισοδύναμα:

1. Υπάρχει μοναδικό Gibbs state στο  $(\beta, h)$ .
2.  $\langle \cdot \rangle_{\beta,h}^+ = \langle \cdot \rangle_{\beta,h}^-$ .
3.  $\langle \sigma_0 \rangle_{\beta,h}^+ = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta,h}^-$ .

Απόδειξη. Η κατεύθυνση (1)  $\implies$  (2)  $\implies$  (3) είναι τετριμμένη.

**Θα δείξω την κατεύθυνση (3)  $\implies$  (2)**

Έστω  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$  και  $A \subset \mathbb{Z}^d$ . Επειδή η  $\sum_{i \in A} n_i - n_A$  είναι αύξουσα τότε σε συνδυασμό με το Λήμμα 3.4 έχουμε  $\forall k$ ,

$$\left\langle \sum_{i \in A} n_i - n_A \right\rangle_{\Lambda_k; \beta, h}^- \leq \left\langle \sum_{i \in A} n_i - n_A \right\rangle_{\Lambda_k; \beta, h}^+$$

Από την ιδιότητα της γραμμικότητας για  $k \rightarrow \infty$  με αναδιάταξη προκύπτει

$$\sum_{i \in A} (\langle n_i \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_i \rangle_{\beta, h}^-) \geq \langle n_A \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_A \rangle_{\beta, h}^-.$$

Εάν ισχύει η (3) τότε το αριστερό μέλος εξαφανίζεται. Δηλαδή προκύπτει

$$\langle n_A \rangle_{\beta, h}^+ \leq \langle n_A \rangle_{\beta, h}^-$$

Λόγω της ιδιότητας translation invariant έχουμε

$$\langle n_i \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_i \rangle_{\beta, h}^- = \langle n_0 \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_0 \rangle_{\beta, h}^- = \frac{1}{2} (\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+ - \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^-) = 0$$

Αλλά ξανά από το Λήμμα 3.4, επειδή η  $n_A$  είναι αύξουσα έχουμε  $\langle n_A \rangle_{\beta,h}^+ \geq \langle n_A \rangle_{\beta,h}^-$ . Άρα έχουμε

$$\langle n_A \rangle_{\beta,h}^+ = \langle n_A \rangle_{\beta,h}^-$$

Από το Λήμμα 3.2 προκύπτει άμεσα ότι  $\langle f \rangle_{\beta,h}^+ = \langle f \rangle_{\beta,h}^- \forall f \text{ local}$ .

**Θα δείξω την κατεύθυνση (2)  $\implies$  (1)**

Το Λήμμα 3.4 μας πληροφορεί ότι κάθε Gibbs state στο  $(\beta, h)$  ικανοποιεί:

$$\langle \cdot \rangle_{\beta,h} \implies \langle n_A \rangle_{\beta,h}^- \leq \langle n_A \rangle_{\beta,h} \leq \langle n_A \rangle_{\beta,h}^+$$

Εάν ισχύει η (2) τότε  $\langle n_A \rangle_{\beta,h}^- = \langle n_A \rangle_{\beta,h} = \langle n_A \rangle_{\beta,h}^+$ . Από το Λήμμα 3.2 επεκτείνεται για κάθε local function άρα,

$$\langle \cdot \rangle_{\beta,h}^- = \langle \cdot \rangle_{\beta,h} = \langle \cdot \rangle_{\beta,h}^+$$

□

### Ιδιότητες της μαγνητικής πυκνότητας

Θυμόμαστε ότι η μέση μαγνητική πυκνότητα στο  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  με αυθαίρετη συνοριακή συνθήκη  $\#$  ορίζεται ως  $m^\#(\beta, h) \stackrel{def}{=} \langle m_\Lambda \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\#$ . Το θεώρημα 3.7.1 εκφράστηκε με τη χρήση των  $\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+$ ,  $\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^-$ . Είναι φυσικό να αναρωτηθούμε εάν αυτές οι ποσότητες συνδέονται με τις  $m^+(\beta, h)$ ,  $m^-(\beta, h)$ . Το επόμενο αποτέλεσμα μας δείχνει ότι ταυτίζονται στο θερμοδυναμικό όριο.

**Πρόταση 3.7.1.** Για κάθε ακολουθία  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$ , τα όρια

$$m^+(\beta, h) \stackrel{def}{=} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} m_\Lambda^+(\beta, h), \quad m^-(\beta, h) \stackrel{def}{=} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} m_\Lambda^-(\beta, h)$$

υπάρχουν και

$$m^+(\beta, h) = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+, \quad m^-(\beta, h) = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^-.$$

Επίσης η  $h \mapsto m^+(\beta, h)$  είναι δεξιά συνεχής ενώ η  $h \mapsto m^-(\beta, h)$  είναι αριστερά συνεχής.

Απόδειξη. Έστω  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ . Από translation invariance του  $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$  και Λήμμα 3.3

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+ &= \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\beta, h}^+ \leq \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \\ \implies \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+ &\leq \liminf_n \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \end{aligned}$$

Για το άλλο φράγμα, έστω  $k \geq 1$  και έστω  $i \in \Lambda_n$ .

Όταν  $i + B(k) \subset \Lambda_n$  το Λήμμα 3.3 μας δίνει

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \leq \langle \sigma_i \rangle_{i+B(k); \beta, h}^+ = \langle \sigma_0 \rangle_{B(k); \beta, h}^+$$

Από την άλλη πλευρά, εάν  $i + B(k) \not\subset \Lambda_n$ , τότε το κουτί  $i + B(k)$  τέμνει το  $\partial^{in} \Lambda_n$ . Άρα

$$\begin{aligned} \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ &= \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{i \in \Lambda_n, i+B(k) \subset \Lambda_n} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ + \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{i \in \Lambda_n, i+B(k) \not\subset \Lambda_n} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \\ &\leq \langle \sigma_0 \rangle_{B(k); \beta, h}^+ + 2 \frac{|B(k)| |\partial^{in} \Lambda_n|}{|\Lambda_n|} \end{aligned}$$

επειδή  $|\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+| \leq 1$ . Άρα  $\forall k \geq 1 \limsup_n \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ \leq \langle \sigma_0 \rangle_{B(k); \beta, h}^+$  και επειδή  $\lim_{k \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{B(k); \beta, h}^+ = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+$  έχουμε το ζητούμενο αποτέλεσμα. Η δεξιά και αριστερή συνέχεια των  $m^+(\beta, h)$  και  $m^-(\beta, h)$  προκύπτει από το Λήμμα 3.5. □

**Λήμμα 3.5.** *Ισχύει ότι*

1. Για όλα τα  $\beta \geq 0$ , η  $h \mapsto \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+$  είναι αύξουσα και δεξιά συνεχής και η  $h \mapsto \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^-$  είναι φθίνουσα και αριστερά συνεχής.
2. Για όλα τα  $h \geq 0$ , η  $\beta \mapsto \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+$  είναι αύξουσα και η  $\beta \mapsto \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^-$  είναι φθίνουσα.

Απόδειξη. Αποδεικνύουμε για  $\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+$  και λόγω συμμετρίας ισχύει για  $\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^-$ .

1. Έστω  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ . Από την ανισότητα FKG έχουμε

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \beta} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ &= \frac{\partial}{\partial h} \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\sigma} \sigma_0 \exp(\beta \sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j + h \sum_{j \in \Lambda} \sigma_j) \\
&= \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\sigma} \sigma_0 \left( \sum_j \sigma_j \right) e^{-\mathcal{H}} \\
&\quad - \frac{1}{\mathbf{Z}^2} \sum_{\sigma} \left( \sigma_0 e^{-\mathcal{H}} \sum_{\sigma'} \left( \sum_j \sigma_j \right) e^{-\mathcal{H}'} \right) \\
&= \langle \sigma_0 \sum_j \sigma_j \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ - \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ \langle \sum_j \sigma_j \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ \\
&= \sum_{i \in \Lambda} (\langle \sigma_0 \sigma_i \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ - \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+) \geq 0.
\end{aligned}$$

Άρα για αυθαίρετο  $\Lambda$   $h \mapsto \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+$  είναι αύξουσα. Αυτή η μονοτονία διατηρείται και στο θερμοδυναμικό όριο.

Έστω  $(h_m)_{m \geq 1}$  ακολουθία πραγματικών αριθμών τέτοια ώστε  $h_m \downarrow h$  και  $(\Lambda_n)_{n \geq 1}$  ακολουθία τέτοια ώστε  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ . Από το Λήμμα 3.3 έχουμε ότι η διπλή ακολουθία είναι αύξουσα και φραγμένη. Από Λήμμα (B.1) (Appendix) έχουμε

$$\begin{aligned}
\lim_{m \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h_m}^+ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda_n; \beta, h_m}^+ \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda_n; \beta, h_m}^+ = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda_n; \beta, h}^+ = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+
\end{aligned}$$

2. Όπως και πριν και σε συνδυασμό με το θεώρημα 3.4 με  $A = \{0\}$  και  $B = \{i, j\}$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ = \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} (\langle \sigma_0 \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ - \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+ \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda; \beta, h}^+) \geq 0$$

και η μονοτονία διατηρείται στο θερμοδυναμικό όριο. □

### Ορίζουμε την critical inverse temperature

Επειδή  $\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, 0}^- = -\langle \sigma_0 \rangle_{\beta, 0}^+$  από συμμετρία, το θεώρημα 3.7.1 μας λέει ότι όταν  $h = 0$  η μοναδικότητα είναι ανάλογη με  $m^*(\beta) = 0$  και επειδή από το Λήμμα 3.5 έχουμε ότι η  $m^*(\beta) = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, 0}^+$  είναι μονότονη ως προς  $\beta$ , οδηγούμαστε στον εξής ορισμό.

**Ορισμός 3.7.2.** Το *critical inverse temperature* είναι

$$\beta_c(d) \stackrel{\text{def}}{=} \inf\{\beta \geq 0 : m^*(\beta) > 0\} = \sup\{\beta \geq 0 : m^*(\beta) = 0\}. \quad (3.26)$$

Το  $\beta_c(d)$  είναι το μοναδικό  $\beta$  τέτοιο ώστε  $m^*(\beta) = 0$  αν  $\beta < \beta_c$  και  $m^*(\beta) > 0$  αν  $\beta > \beta_c$ .

Πρέπει όμως να διαπιστώσουμε αν το  $\beta_c(d)$  είναι μη-τετριμμένο, δηλαδή αν  $0 < \beta_c(d) < \infty$ .

**Παρατήρηση 3.3.** Από *translation invariance*  $\langle \sigma_i \rangle_{\beta,0}^+ = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta,0}^+ = m^*(\beta) \quad \forall i \in \mathbb{Z}^d$ . Χρησιμοποιώντας την ανισότητα FKG έχουμε

$$\langle \sigma_i \sigma_0 \rangle_{\beta,0}^+ \geq \langle \sigma_i \rangle_{\beta,0}^+ \langle \sigma_0 \rangle_{\beta,0}^+ = m^*(\beta)^2$$

Συγκεκριμένα

$$\inf_{i \in \mathbb{Z}^d} \langle \sigma_i \sigma_0 \rangle_{\beta,0}^+ > 0 \quad \forall \beta > \beta_c$$

Μια τέτοια συμπεριφορά ονομάζεται *long-range order*. Η παρουσία *long-range order* δεν σημαίνει ότι η τυχαία μεταβλητή  $\sigma_i$  είναι συσχετισμένες σε μεγάλες αποστάσεις. Για κάθε  $\beta$  έχουμε,

$$\lim_{\|i\|_1 \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \sigma_0 \rangle_{\beta,0}^+ - \langle \sigma_i \rangle_{\beta,0}^+ \langle \sigma_0 \rangle_{\beta,0}^+ = 0.$$

Άρα τα  $\sigma_0$  και  $\sigma_i$  είναι ασυμπτωτικά ασυσχέτιστα.

### Δεύτερος χαρακτηρισμός Μοναδικότητας

Το παρακάτω θεώρημα συνδέει τις δύο έννοιες του **first order phase transition**, δηλαδή ότι η μη-μοναδικότητα στο  $(\beta, h)$  ισχύει αν και μόνο αν η πίεση δεν είναι διαφορίσιμη ως προς  $h$  στο σημείο αυτό. Βασιζόμαστε στην κυρτότητα της συνάρτησης της πίεσης ώστε να δείξουμε ότι η δεξιά και αριστερή παράγωγος ως προς το  $h$  είναι πάντα καλώς ορισμένες.

**Θεώρημα 3.7.2.** Οι επόμενες σχέσεις ισχύουν για όλες τις τιμές  $\beta \geq 0$  και  $h \in \mathbb{R}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h) = m^+(\beta, h), \quad \frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h) = m^-(\beta, h)$$

Συγκεκριμένα,  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  είναι διαφορίσιμη στο  $h$  αν και μόνο αν υπάρχει μοναδικό Gibbs state για  $(\beta, h)$ .

**Σχόλιο 3.7.4.** Το θεώρημα ουσιαστικά μας πληροφορεί ότι η πίεση είναι διαφορίσιμη ως προς  $h$  στις τιμές  $(\beta, h)$  για τις οποίες το Gibbs state είναι μοναδικό.

Απόδειξη. Υπενθυμίζουμε ότι το σύνολο  $\mathfrak{B}_\beta$  είναι το σύνολο των σημείων όπου δεν είναι παραγωγίσιμη η πίεση. Γνωρίζουμε ότι αυτό το σύνολο είναι το πολύ αριθμήσιμο. Άρα  $\forall h \in \mathbb{R}$  μπορούμε να βρούμε μία ακολουθία  $h_k \downarrow h$  τέτοια ώστε  $h_k \notin \mathfrak{B}_\beta \quad \forall k \geq 1$ . Τότε

$$\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h) = \lim_{h_k \downarrow h} m(\beta, h_k) = \lim_{h_k \downarrow h} m^+(\beta, h_k) = m^+(\beta, h),$$

επειδή  $m^+(\beta, h') = m(\beta, h') \quad \forall h' \notin \mathfrak{B}_\beta$  και  $m^+(\beta, h)$  είναι δεξιά συνεχής συνάρτηση ως προς  $h$ . Από συμμετρία έχουμε,

$$\frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h) = -\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, -h) = -m^+(\beta, -h) = m^-(\beta, h).$$



Άρα προκύπτει ότι

$$\frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h) \text{ υπάρχει} \iff m^+(\beta, h) = m^-(\beta, h).$$

Το συμπέρασμα προκύπτει από το θεώρημα 3.7.1 και την πρόταση 3.7.1

$$m^+(\beta, h) = m^-(\beta, h) \iff \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^+ = \langle \sigma_0 \rangle_{\beta, h}^- \iff \text{μοναδικότητα στο}(\beta, h).$$

□

Στα επόμενα δύο υποκεφάλαια θα αποδείξουμε το (3) του θεωρήματος 3.6, όπου εδραιώνει στο  $h = 0$  διαφορετικές συμπεριφορές για υψηλές και χαμηλές θερμοκρασίες.

### 3.7.2 Στιγμαιαία κατάρρευση της συμμετρίας σε χαμηλές θερμοκρασίες

Σε αυτή την υποενότητα, θα αποδείξουμε ότι  $\beta_c(d) < \infty$ , για κάθε  $d \geq 2$ . Προκειμένου να αποδειχθεί αυτό αρκεί να δείξουμε ότι, **ομοιόμορφα με το μέγεθος του χωρίου  $\Lambda$** , ισχύει

$$\mu_{\Lambda; \beta, 0}^+(\sigma_0 = -1) \leq \delta(\beta), \quad (3.27)$$

με  $\delta(\beta) \downarrow 0$  όταν  $\beta \rightarrow \infty$ . Αυτό έχει ως συνέπεια

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ &= \mu_{\Lambda; \beta, 0}^+(\sigma_0 = +1) - \mu_{\Lambda; \beta, 0}^+(\sigma_0 = -1) \\ &= 1 - 2\mu_{\Lambda; \beta, 0}^+(\sigma_0 = -1) \\ &\geq 1 - 2\delta(\beta). \end{aligned}$$

Άρα αν σταθεροποιήσουμε ένα  $\beta$  αρκετά μεγάλο, τέτοιο ώστε  $1 - 2\delta(\beta) > 0$  και έπειτα πάρουμε το θερμοδυναμικό όριο  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$ , τότε

$$m^*(\beta) = \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ > 0. \quad (3.28)$$

Χρησιμοποιώντας τον χαρακτηρισμό (3.26), είναι φανερό ότι  $\beta_c < \infty$  και το φαινόμενο **first order phase transition** συμβαίνει σε χαμηλές θερμοκρασίες.

Η απόδειξη της (3.27) χρησιμοποιεί μια ιδέα που ξεκίνησε ο Peierls που σήμερα ονομάζεται το επιχείρημα του **Peierl** και αποτελεί θεμέλιο στην κατανόηση του φαινομένου **phase transition**. Το επιχείρημα βασίζεται στην εξής **ιδέα**:

Όταν το  $\beta$  είναι μεγάλο, τα γειτονικά spins με διαφορετικές τιμές έχουν μεγάλη συμβολή στην συνολική ενέργεια και άρα το σύστημα τα καταστέλλει. Άρα τα contours, δηλαδή οι γραμμές που διαχωρίζουν τις περιοχές με +, - spins, είναι σπάνια και ένα τυπικό configuration υπό το μέτρο  $\mu_{\Lambda; \beta, 0}^+$  έχει την δομή ενός «ωκεανού» από +1 spins με μικρές «νησίδες» από - spins.

Δηλαδή όταν το  $\beta$  είναι μεγάλο, ένα τυπικό configuration υπό το μέτρο  $\mu_{\Lambda; \beta, 0}^+$  είναι ένα μικρό perturbation του ground state  $\eta^+$ , και αυτό πραγματοποιείται από τα contours του configuration. Θα εφαρμόσουμε αυτό το επιχείρημα στο διδιάστατο μοντέλο και έπειτα θα το επεκτείνουμε σε υψηλότερες διαστάσεις.

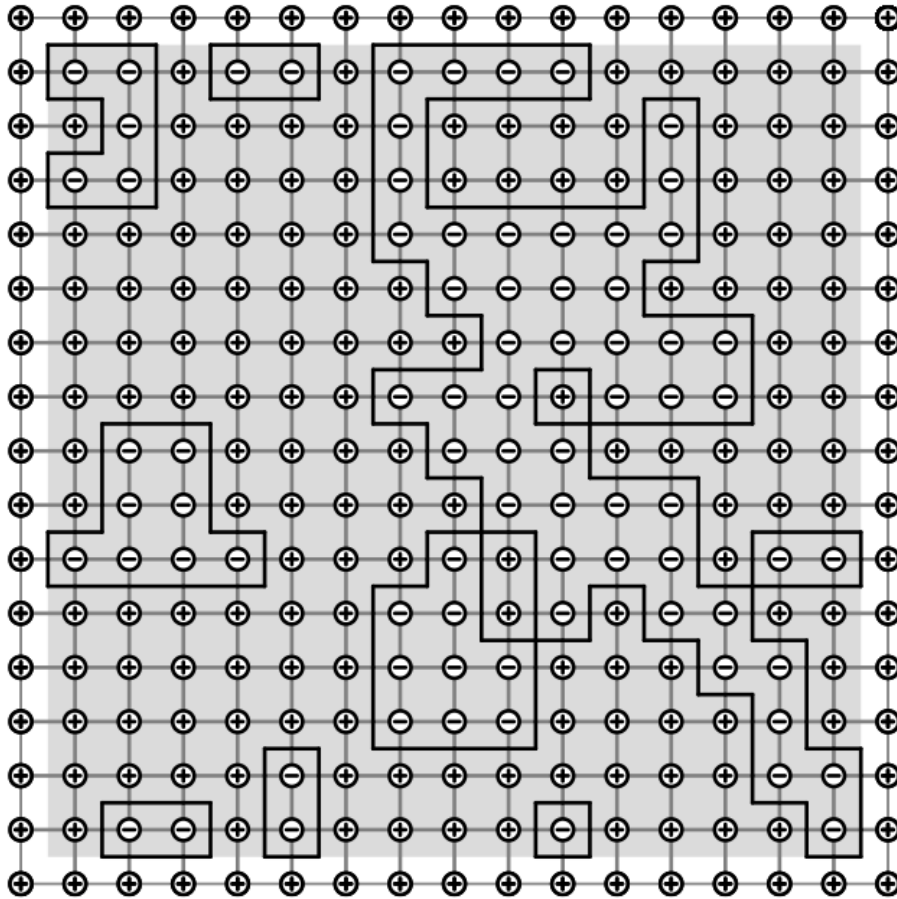
### Αναπαράσταση σε χαμηλές θερμοκρασίες.

Θεωρούμε το δισδιάστατο μοντέλο Ising στο  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ , με μηδενικό μαγνητικό πεδίο και + συνοριακή συνθήκη. Θεωρούμε επίσης ένα configuration  $\omega \in \Omega_{\Lambda}^+$  και δίνουμε μία γεωμετρική περιγραφή του  $\omega$ , της οποίας ο σκοπός είναι να εξηγήσει το επιχείρημα που αναφέρθηκε παραπάνω, δηλαδή ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες έχουμε στοίχιση γειτονικών spins. Ξεκινάμε αρχικά με το να εκφράσουμε τη Χαμιλτονιανή με τέτοιο τρόπο ώστε να δείχνει τον ρολο που παίζουν τα spin με αντίθετες τιμές:

$$\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,0} = -\beta \sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \sigma_i \sigma_j = -\beta |\mathcal{E}_{\Lambda}^b| + \sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \beta(1 - \sigma_i \sigma_j).$$

Η εξάρτηση από το  $\omega$  είναι μόνο στο άθροισμα

$$\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \beta(1 - \sigma_i \sigma_j) = \sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b: \sigma_i \neq \sigma_j} 2\beta = 2\beta \cdot \#\{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b : \sigma_i \neq \sigma_j\}.$$



Εικόνα 3.10: Ένα configuration του δισδιάστατου μοντέλου Ising σε ένα πεπερασμένο κουτί  $\Lambda$  με + συνοριακή συνθήκη. Σε χαμηλές θερμοκρασίες, οι γραμμές που διαχωρίζουν τις περιοχές των + και - spin αναμένονται να είναι αραιές, το οποίο μας οδηγεί σε μία θετική μαγνήτιση στο  $\Lambda$ .

Θα συσχετίσουμε σε κάθε κορυφή  $i \in \mathbb{Z}^2$  το κλειστό μοναδιαίο τετράγωνο με κέντρο το  $i$ :

$$\mathcal{L}_i \stackrel{def}{=} i + [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2. \quad (3.29)$$

Το σύνορο, υπό την έννοια της standard topology του  $\mathbb{R}^2$ , του  $\mathcal{L}_i$ , το συμβολίζουμε με  $\partial\mathcal{L}_i$ , μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι κατασκευασμένο από 4 ακμές που συνδέουν κοντινούς γείτονες του dual lattice

$$\mathbb{Z}_*^2 = \mathbb{Z}^2 + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \stackrel{def}{=} \{(i_1 + \frac{1}{2}, i_2 + \frac{1}{2}) : (i_1, i_2) \in \mathbb{Z}^2\}.$$

Παρατηρούμε ότι μία ακμή  $e$  του αρχικού lattice έρχεται σε επαφή με ακριβώς μία ακμή  $e_\perp$  του dual lattice. Αν συσχετίσουμε σε ένα configuration  $\omega \in \Omega_\Lambda^+$  το τυχαίο σύνολο

$$\mathcal{M}(\omega) \stackrel{def}{=} \cup_{i \in \Lambda: \sigma_i(\omega) = -1} \mathcal{L}_i,$$

τότε το  $\partial\mathcal{M}(\omega)$  περιέχει ακμές του dual lattice. Επίσης κάθε ακμή  $e_\perp = \{i, j\}_\perp \subset \partial\mathcal{M}(\omega)$  διαχωρίζει δύο αντίθετα spins :  $\sigma_i(\omega) \neq \sigma_j(\omega)$ . Άρα μπορούμε να γράψουμε

$$\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) = -\beta |\mathcal{E}_\Lambda^b| + 2\beta |\partial\mathcal{M}(\omega)|.$$

Θα διαμερίσουμε το  $|\partial\mathcal{M}(\omega)|$  σε ξένα σύνολα. Για δική μας διευκόλυνση ορίζουμε έναν κανόνα παραμόρφωσης για να καθορίσουμε πως θα ορίσουμε αυτά τα σύνολα. Παρατηρούμε ότι κάθε dual κορυφή του  $\mathbb{Z}_*^2$  αντιστοιχεί σε 0, 2 ή 4 ακμές του  $\partial\mathcal{M}(\omega)$ . Όταν ο αριθμός είναι 4, παραμορφώνουμε το  $\partial\mathcal{M}(\omega)$  χρησιμοποιώντας τον εξής κανόνα:



Εικόνα 3.11: Ο κανόνας της παραμόρφωσης.

Μία εφαρμογή αυτού του κανόνα σε όλα τα σημεία στα οποία έχουμε 4 ακμές, μας οδηγεί σε μία διαμέριση του  $\partial\mathcal{M}(\omega)$  σε ξένες κλειστές απλές διαδρομές στο dual lattice, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.12.

$$\partial\mathcal{M}(\omega) = \gamma_1 \cup \dots \cup \gamma_n.$$

Κάθε διαδρομή  $\gamma_i$  καλείται **contour του  $\omega$** . Έστω  $\Gamma(\omega) \stackrel{def}{=} \{\gamma_1, \dots, \gamma_n\}$  και ορίζουμε το **μήκος**  $|\gamma|$  του contour  $\gamma \in \Gamma(\omega)$  ως ο αριθμός των ακμών του dual lattice που περιέχει. Για παράδειγμα στην Εικόνα 3.12  $|\gamma_5| = 14$ .

Χρησιμοποιώντας τον παραπάνω συμβολισμό, η ενέργεια του configuration  $\omega \in \Omega_\Lambda^+$  εκφράζεται ως προς τα contours:

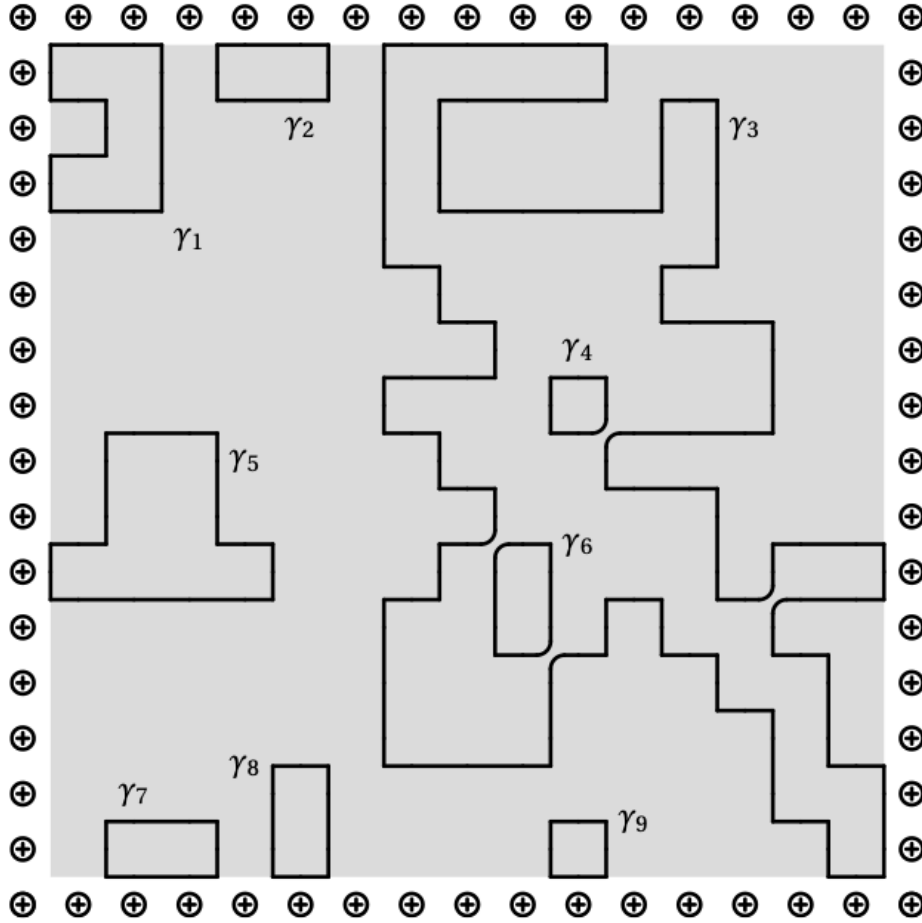
$$\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) = -\beta |\mathcal{E}_\Lambda^b| + 2\beta \sum_{\gamma \in \Gamma(\omega)} |\gamma|.$$

Αντίστοιχα, η συνάρτηση επιμερισμού στο  $\Lambda$  με + συνοριακή συνθήκη γράφεται ως:

$$\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,0}^+ = e^{\beta|\mathcal{E}_{\Lambda}^b|} + \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} \prod_{\gamma \in \Gamma(\omega)} e^{-2\beta|\gamma|} \quad (3.30)$$

Άρα η πιθανότητα του  $\omega \in \Omega_{\Lambda}^+$  εκφράζεται με τη χρήση των contours ως

$$\mu_{\Lambda;\beta,0}^+(\omega) = \frac{e^{-\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,0}(\omega)}}{\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,0}^+} = \frac{\prod_{\gamma \in \Gamma(\omega)} e^{-2\beta|\gamma|}}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} \prod_{\gamma \in \Gamma(\omega)} e^{-2\beta|\gamma|}}. \quad (3.31)$$



Εικόνα 3.12: Τα contours που σχετίζονται με το configuration της εικόνας 3.10. Μαζί με τις τιμές των spins στο σύνορο (+1 στην συγκεκριμένη περίπτωση), το αρχικό configuration  $\omega$  μπορεί να ανακατασκευαστεί με μοναδικό τρόπο.

### Το επιχείρημα του Peierl.

Θεωρούμε το κουτί  $B(n) = \{-n, \dots, n\}^2$ . Για να μελετήσουμε το  $\mu_{B(n);\beta,0}^+(\sigma_0 = -1)$ , αρχικά παρατηρούμε ότι κάθε configuration  $\omega \in \Omega_{B(n)}^+$  τέτοιο ώστε  $\sigma_0(\omega) = -1$  πρέπει να έχει τουλάχιστον ένα (για την ακρίβεια έναν περιττό αριθμό) contours που περιβάλλουν το origin.

Για να κάνουμε αυτό το επιχείρημα πιο ξεκάθαρο, παρατηρούμε ότι κάθε contour  $\gamma \in \Gamma(\omega)$  είναι

μία φραγμένη απλή κλειστή καμπύλη στο  $\mathbb{R}^2$  και άρα χωρίζει το χωρίο σε δύο περιοχές, μία που είναι φραγμένη και καλείται το **εσωτερικό του  $\gamma$**  και συμβολίζεται με  $Int(\gamma)$ . Άρα γράφουμε

$$\mu_{B(n);\beta,0}^+(\sigma_0 = -1) \leq \mu_{B(n);\beta,0}^+(\exists \gamma_* \in \Gamma : Int(\gamma_*) \in 0) \leq \sum_{\gamma_*:0 \in Int(\gamma_*)} \mu_{B(n);\beta,0}^+(\gamma_* \in \Gamma).$$

**Λήμμα 3.6.** Για όλα τα  $\beta > 0$  και για κάθε contour  $\gamma_*$ ,

$$\mu_{B(n);\beta,0}^+(\gamma_* \in \Gamma) \leq e^{-2\beta|\gamma_*|} \quad (3.32)$$

Το φράγμα (3.32) δείχνει ότι η πιθανότητα ενός contour να εμφανιστεί σε ένα configuration είναι μικρή όταν το  $\beta$  είναι μεγάλο ή το μήκος του contour είναι μεγάλο. Θα αναφερόμαστε σε αυτό το επιχείρημα λέγοντας ότι το ground state  $\eta^+$  είναι stable.

*Απόδειξη.* Χρησιμοποιώντας την (3.31),

$$\begin{aligned} \mu_{B(n);\beta,0}^+(\gamma_* \in \Gamma) &= \sum_{\omega:\gamma_* \in \Gamma(\omega)} \mu_{B(n);\beta,0}^+(\omega) \\ &= e^{-2\beta|\gamma_*|} \frac{\sum_{\omega:\gamma_* \in \Gamma(\omega)} \prod_{\gamma \in \Gamma(\omega) \setminus \{\gamma_*\}} e^{-2\beta|\gamma|}}{\sum_{\omega} \prod_{\gamma \in \Gamma} e^{-2\beta|\gamma|}} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Θα δείξουμε ότι το κλάσμα στην (3.33) φράσσεται από πάνω από την μονάδα, δείχνοντας ότι το άθροισμα του αριθμητή είναι το ίδιο με του παρονομαστή με έναν επιπλέον περιορισμό. Σε κάθε configuration  $\omega$  με  $\gamma_* \in \Gamma(\omega)$  που εμφανίζεται στο άθροισμα του αριθμητή, συσχετίζουμε ένα configuration  $\mathcal{E}_{\gamma_*}(\omega)$  που προκύπτει από το  $\omega$  αφαιρώντας το  $\gamma_*$ . Αυτό μπορεί να πραγματοποιηθεί αντιστρέφοντας όλα τα spins στο εσωτερικό του  $\gamma_*$ :

$$(\mathcal{E}_{\gamma_*}(\omega))_i \stackrel{def}{=} \begin{cases} -\omega_i & \text{αν } i \in Int(\gamma_*), \\ \omega_i & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.34)$$

Είναι σημαντικό να κατανοήσουμε ότι το σύνολο  $\mathcal{E}_{\gamma_*}(\omega)$  αποτελείται από τα configuration των οποίων το σύνολο των contour είναι ακριβώς  $\Gamma(\omega) \setminus \{\gamma_*\}$ . Έστω ότι το  $Int(\gamma_*)$  περιέχει άλλα contour (όπως το  $\gamma_3$  στην εικόνα 3.12, που περιέχει το  $\gamma_4$  και  $\gamma_6$  στο εσωτερικό του). Ακόμα και μετά την εναλλαγή των *spin* ( $+ \rightleftharpoons -$ ) τα contour αυτά υπάρχουν ακόμα. Έστω το σύνολο  $\mathfrak{C}(\gamma_*)$ , το σύνολο των configurations που μπορούν να προκύψουν αφαιρώντας το  $\gamma_*$  από ένα configuration που περιέχει το  $\gamma_*$ . Έχουμε

$$\sum_{\omega:\gamma_* \in \Gamma(\omega)} \prod_{\gamma \in \Gamma(\omega) \setminus \{\gamma_*\}} e^{-2\beta|\gamma|} = \sum_{\omega' \in \mathfrak{C}(\gamma_*)} \prod_{\gamma' \in \Gamma(\omega')} e^{-2\beta|\gamma'|}.$$

Επειδή το άθροισμα για  $\omega' \in \mathfrak{C}(\gamma_*)$  είναι μικρότερο από το άθροισμα για  $\omega' \in \Omega_{B(n)}^+$ , αυτό μας δείχνει ότι το κλάσμα της σχέσης (3.33) φράσσεται από πάνω από τη μονάδα.  $\square$

Χρησιμοποιούμε την (3.32) για να φράξουμε το άθροισμα όλων των contour που περιβάλλουν το origin, ταξινομώντας τα με βάση το μήκος τους. Επειδή το μικρότερο contour που περιβάλλει το origin αποτελείται από 4 διπλές ακμές,

$$\begin{aligned}
\mu_{B(n);\beta,0}^+(\sigma_0 = -1) &\leq \sum_{\gamma_*:0 \in \text{Int}(\gamma_*)} e^{-2\beta|\gamma_*|} \\
&= \sum_{k \geq 4} \sum_{\gamma_*:0 \in \text{Int}(\gamma_*), |\gamma_*|=k} e^{-2\beta|\gamma_*|} \\
&= \sum_{k \geq 4} e^{-2\beta|\gamma_*|} \#\{\gamma_* : 0 \in \text{Int}(\gamma_*), |\gamma_*| = k\}.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Ένα contour μήκους  $k$  που περιβάλλει το origin αναγκαστικά περιέχει μία κορυφή του συνόλου  $\{(u - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) : u = 1, \dots, [k/2]\}$ . Όμως ο συνολικός αριθμός contour μήκους  $k$ , που ξεκινάνε από μία δοσμένη κορυφή, είναι το πολύ  $4 \cdot 3^{k-1}$  καθώς υπάρχουν 4 πιθανές κατευθύνσεις για την πρώτη γραμμή και 3 για τις υπόλοιπες  $k-1$  γραμμές (γιατί δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δύο φορές την ίδια ακμή). Άρα,

$$\#\{\gamma_* : 0 \in \text{Int}(\gamma_*), |\gamma_*| = k\} \leq \frac{k}{2} 4 \cdot 3^{k-1}. \tag{3.36}$$

Συγκεντρώνοντας τις εκτιμήσεις έχουμε,

$$\mu_{B(n);\beta,0}^+(\sigma_0 = -1) \leq \frac{2}{3} \sum_{k \geq 4} k 3^k e^{-2\beta k} \stackrel{\text{def}}{=} \delta(\beta). \tag{3.37}$$

Αν  $\beta$  είναι αρκετά μεγάλο (τέτοιο ώστε  $3e^{-2\beta} < 1$ ), τότε η σειρά συγκλίνει. Επίσης,  $\delta(\beta) \downarrow 0$  καθώς  $\beta \rightarrow \infty$ . Με αυτό αποδεικνύουμε την (3.27), το οποίο μας βοήθησε να δείξουμε ότι  $\beta_c(2) < \infty$ .

### Επέκταση σε μεγαλύτερες διαστάσεις.

Μένει να δείξουμε ότι το φαινόμενο phase transition συμβαίνει στο μοντέλο Ising για  $d \geq 3$ . Η προσαρμογή του επιχειρήματος του Peierls σε υψηλότερες διαστάσεις είναι εφικτή, αλλά η αρίθμηση στη σχέση (3.36) είναι περίπλοκη.

Για αυτό το λόγο θα χρησιμοποιήσουμε μία εναλλακτική **προσέγγιση**:

Θα εκμεταλλευτούμε την εμφύτευση του  $\mathbb{Z}^d$  στο  $\mathbb{Z}^{d+1}$  και τις ανισότητες GKS, ώστε να αποδείξουμε ότι  $\beta_c(d)$  είναι φθίνουσα. Ουσιαστικά μπορούμε να κατασκευάσουμε το μοντέλο Ising στο  $\mathbb{Z}^{d+1}$  με το να «στοιβάξουμε» πολλές φορές το μοντέλο Ising στο  $\mathbb{Z}^d$  και να προσθέσουμε την αλληλεπίδραση μεταξύ των γειτονικών spin μέσα σε διαφορετικά layers. Έπειτα χρησιμοποιώντας τις ανισότητες GKS θα δούμε ότι οι αλληλεπιδράσεις που προσθέσαμε δεν μειώνουν τη μαγνήτιση και άρα δεν αυξάνεται η inverse critical temperature.

Θα εφαρμόσουμε αυτή την ιδέα για  $d = 3$  και η επέκταση σε υψηλότερες διαστάσεις είναι ανάλογη. Θα δούμε πως το  $\mathbb{Z}^2$  εμφυτεύεται στο  $\mathbb{Z}^3$ . Θα χρησιμοποιήσουμε τους εξής συμβολισμούς:

$$B^3(n) \stackrel{\text{def}}{=} \{-n, \dots, n\}^3, \quad B^2(n) \stackrel{\text{def}}{=} \{-n, \dots, n\}^2.$$

Θεωρούμε ότι

$$\langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ \geq \langle \sigma_0 \rangle_{B^2(n); \beta, 0}^+.$$

Θεωρούμε το σύνολο των ακμών  $\{i, j\}$  που συνδέουν δύο γειτονικές κορυφές  $i = (i_1, i_2, i_3)$  και  $j = (j_1, j_2, j_3)$  τέτοια ώστε  $i_3 = 0$  και  $|j_3| = 1$ . Αυτά τα spin συμβάλουν στη συνολική ενέργεια κατά  $-\beta\sigma_i\sigma_j = -J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ . Με βάση τις ανισότητες GKS,

$$\frac{\partial}{\partial J_{ij}} \langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ = \langle \sigma_0 \sigma_i \sigma_j \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ - \langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ \geq 0.$$

Μπορούμε σταδιακά για αυτές τις κορυφές να ελαττώσουμε την αλληλεπίδραση από την αρχική τιμή  $J_{ij} = \beta$  στην  $J_{ij} = 0$ . Συμβολίζουμε με  $\mu_{B^3(n); \beta, 0}^{+, 0}$  την κατανομή Gibbs που παίρνουμε αφού ελαττώσουμε τα  $J_{ij}$ , τότε

$$\langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ \geq \langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^{+, 0}.$$

Παρατηρούμε ότι τα spin που περιέχονται στην περιοχή  $j_3 = 0$  αλληλεπιδρούν σαν να είναι σε δισδιάστατο σύστημα και άρα ισχύει  $\langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^{+, 0} = \langle \sigma_0 \rangle_{B^2(n); \beta, 0}^+$ . Επομένως προκύπτει

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{B^3(n); \beta, 0}^+ \geq \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle_{B^2(n); \beta, 0}^+.$$

Σε συνδυασμό με την (3.27), αυτή η ανισότητα μας δείχνει ότι  $\beta_c(3) \leq \beta_c(2)$ . Η ύπαρξη του **first order phase transition** σε χαμηλές θερμοκρασίες του μοντέλου Ising στο  $\mathbb{Z}^3$  επιβεβαιώνεται από το γεγονός ότι  $\beta_c(2) < \infty$ .

### 3.7.3 Μοναδικότητα σε υψηλές θερμοκρασίες

Παρουσιάζουμε μία γραφική μέθοδο, που είναι προσαρμοσμένη σε συσχετίσεις σε υψηλές θερμοκρασίες, για να αποδείξουμε τη μοναδικότητα του Gibbs state.

**Αναπαράσταση σε υψηλές θερμοκρασίες.**

Η αναπαράσταση βασίζεται στην παρακάτω απλή ταυτότητα. Επειδή η ποσότητα  $\sigma_i \sigma_j$  παίρνει μόνο δύο τιμές  $\pm 1$ ,

$$e^{\beta \sigma_i \sigma_j} = \cosh(\beta) + \sigma_i \sigma_j \sinh(\beta) = \cosh(\beta)(1 + \tanh(\beta) \sigma_i \sigma_j). \quad (3.38)$$

Η ταυτότητα (3.38) θα μας χρησιμεύσει καθώς θα αναδιατυπώσουμε το βάρος Boltzmann. Για όλα τα  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  και  $\omega \in \Omega^+$ ,

$$e^{-\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,0}(\omega)} = \prod_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} e^{\beta \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega)} = \cosh(\beta)^{|\mathcal{E}_{\Lambda}^b|} \prod_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} (1 + \tanh(\beta) \omega_i \omega_j), \quad (3.39)$$

όπου  $\mathcal{E}_{\Lambda}^b$  ορίστηκε στην (3.2). Χρησιμοποιώντας τη σχέση (3.39) και τη σχέση  $\prod_{e \in \mathcal{E}} (1 + f(e)) = \sum_{E \subset \mathcal{E}} \prod_{e \in E} f(e)$ , όπου  $\mathcal{E}$  οποιοδήποτε μη κενό πεπερασμένο σύνολο, προκύπτει ότι

$$\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,0}^+ = \cosh(\beta)^{|\mathcal{E}_{\Lambda}^b|} \sum_{E \subset \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \tanh(\beta)^{|E|} \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} \prod_{\{i,j\} \in E} \omega_i \omega_j,$$

όπου  $\prod_{\{i,j\} \in E} \omega_i \omega_j = \prod_{i \in \Lambda} \omega_i^{I(i,E)}$ , με  $I(i,E) \stackrel{\text{def}}{=} \#\{j \in \mathbb{Z}^d : \{i,j\} \in E\}$ . Άρα μπορούμε να αθροίσουμε για  $\omega \in \Omega_{\Lambda}^+$  ξεχωριστά σε κάθε κορυφή  $i \in \Lambda$ :

$$\sum_{\omega_i = \pm 1} \omega_i^{I(i,E)} = \begin{cases} 2 & \text{αν } I(i,E) \text{ είναι άρτιο,} \\ 0 & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.40)$$

Συμπεραίνουμε ότι

$$\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,0}^+ = 2^{|\Lambda|} \cosh(\beta)^{|\mathcal{E}_{\Lambda}^b|} \sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda}^{+;\text{even}}} \tanh(\beta)^{|E|}, \quad (3.41)$$

όπου,

$$\mathfrak{E}_{\Lambda}^{+;\text{even}} \stackrel{\text{def}}{=} \{E \subset \mathcal{E}_{\Lambda}^b : I(i,E) \text{ είναι άρτιο για όλα τα } i \in \Lambda\}.$$

Όταν αναφερόμαστε σε τέτοια σύνολα ακμών θα συμπεριλαμβάνουμε και τα γραφήματα που αναπαριστούν. Η σχέση (3.41) καλείται **αναπαράσταση της συνάρτησης επιμερισμού σε υψηλές θερμοκρασίες**. Ακολουθώντας τα ίδια βήματα, μπορούμε να εκφράσουμε το  $\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda;\beta,0}^+$  ως εξής:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda;\beta,0}^+ &= (\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,0}^+)^{-1} 2^{|\Lambda|} \cosh(\beta)^{|\mathcal{E}_{\Lambda}^b|} \sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda}^{+;0}} \tanh(\beta)^{|E|} \\ &= \frac{\sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda}^{+;0}} \tanh(\beta)^{|E|}}{\sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda}^{+;\text{even}}} \tanh(\beta)^{|E|}} \end{aligned}$$



όπου,

$$\mathfrak{E}_\Lambda^{+,0} \stackrel{def}{=} \{E \subset \mathcal{E}_\Lambda^b : I(i, E) \text{ είναι άρτιο για όλα τα } i \in \Lambda \setminus \{0\}, \text{ αλλά } I(0, E) \text{ είναι περιττό}\}.$$

Δοσμένου  $E \subset \mathcal{E}_\Lambda^b$ , συμβολίζουμε με  $\Delta(E)$  το σύνολο των ακμών του  $\mathcal{E}_\Lambda^b$  που δεν συνδέονται με ακμές του  $E$ . Οποιαδήποτε συλλογή ακμών  $E \in \mathfrak{E}_\Lambda^{+,0}$  μπορεί να διαμεριστεί ως  $E = E_0 \cap E'$  με

- $E_0 \neq \emptyset$  τα συνδεδεμένα στοιχεία του  $E$  που περιέχουν το 0,
- $E' \in \mathfrak{E}_\Lambda^{+,even}$  τέτοιο ώστε  $E' \subset \Delta(E_0)$ .

Άρα,

$$\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ = \sum_{E_0 \in \mathfrak{E}_\Lambda^{+,0} \text{ connected}, 0 \in E_0} \tanh(\beta)^{|E_0|} \frac{\sum_{E' \in \mathfrak{E}_\Lambda^{+,even}: E' \subset \Delta(E_0)} \tanh(\beta)^{|E'|}}{\sum_{E \in \mathfrak{E}_\Lambda^{+,even}} \tanh(\beta)^{|E|}}. \quad (3.42)$$

**Απόδειξη ότι  $\beta_c(d) > 0$ , για όλα τα  $d$ .** Φράσουμε το κλάσμα στη σχέση (3.42) από τη μονάδα, προκύπτει

$$\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ \leq \sum_{E_0 \in \mathfrak{E}_\Lambda^{+,0} \text{ connected}, 0 \in E_0} \tanh(\beta)^{|E_0|} \quad (3.43)$$

Μπορούμε να φράξουμε το άθροισμα χρησιμοποιώντας το παρακάτω Λήμμα.

**Λήμμα 3.7.** Έστω  $G$  ένα *connected graph* με  $N$  ακμές. Ξεκινώντας από οποιαδήποτε κορυφή του  $G$ , υπάρχει μια διαδρομή στο  $G$  που περνάει από κάθε ακμή του  $G$  δύο φορές.

*Απόδειξη.* Η απόδειξη επιτυγχάνεται με επαγωγή στο  $N$ . Παρατηρούμε ότι ένα αυθαίρετο *connected graph* μπορεί να κατασκευαστεί βήμα βήμα και τα ενδιάμεσα γραφήματα να είναι *connected*. Όταν  $N = 1$ , είναι τετριμμένο. Υποθέτουμε ότι ισχύει για  $N = k$  και έστω  $\pi = (\pi(1), \dots, \pi(2k))$  μια διαδρομή. Προσθέτουμε μία νέα κορυφή στο γράφημα με τέτοιο τρόπο ώστε τουλάχιστον μία κορυφή  $\nu$ , που είναι συνδεδεμένη με την καινούργια ακμή, να ανήκει στη διαδρομή. Η διαδρομή που εμείς αναζητάμε επιτυγχάνεται από το γεγονός ότι ακολουθούμε τη διαδρομή  $\pi$  μέχρι την πρώτη επίσκεψη στο  $\nu$ , και έπειτα χρησιμοποιούμε τη νέα ακμή με διπλή κατεύθυνση και ακολουθούμε τη διαδρομή  $\pi$  μέχρι το τέλος.  $\square$

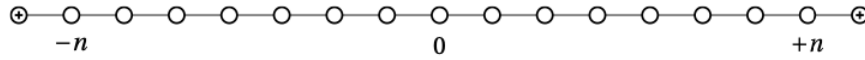
Χρησιμοποιώντας το λήμμα, βλέπουμε ότι ο αριθμός των γραφημάτων  $E_0$  με  $l$  ακμές που συμβάλλουν στην (3.43) φράσσεται από πάνω από τον αριθμό των διαδρομών μήκους  $2l$  ξεκινώντας από το 0. Αυτό το φράγμα είναι μικρότερο από  $(2d)^{2l}$  επειδή κάθε νέα κορυφή μπορεί να έχει το πολύ  $(2d)$  κατευθύνσεις. Από την άλλη πλευρά, το  $E_0$  συνδέει αναγκαστικά το 0 με το  $B(n)^c$  γιατί :

Το  $\sum_{i \in \mathbb{Z}^d} I(i, E_0) = 2|E_0|$  είναι άρτιο και επειδή  $I(0, E_0)$  είναι περιττό, υπάρχει τουλάχιστον μία κορυφή  $i \neq 0$  με  $I(i, E_0)$  περιττό · όμως τέτοια κορυφή δεν μπορεί να ανήκει στο  $B(n)$ , επειδή  $I(i, E_0)$  είναι άρτιο για όλα τα  $i \in B(n) \setminus \{0\}$ . Συμπεραίνουμε ότι  $|E_0| \geq n$ , που μας δίνει σε συνδυασμό με  $\tanh(\beta) \leq \beta$ ,

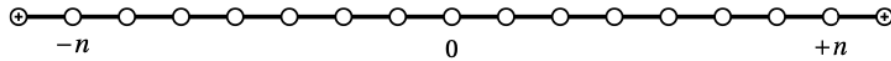
$$\langle \sigma_0 \rangle_{B(n); \beta, 0}^+ \leq \sum_{l \geq n} (4d^2 \beta)^l \leq e^{-cn}, \quad (3.44)$$

με  $c = c(\beta, d) > 0$ , για όλα τα  $\beta < \frac{1}{4d^2}$ . Συγκεκριμένα,  $\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ = 0$  για όλα τα  $\beta < \frac{1}{4d^2}$  που μας δείχνει ότι  $\beta_c(d) > 0$ , δηλαδή μοναδικότητα σε υψηλές θερμοκρασίες, από Θεώρημα 3.7.1 και τον χαρακτηρισμό (3.26).

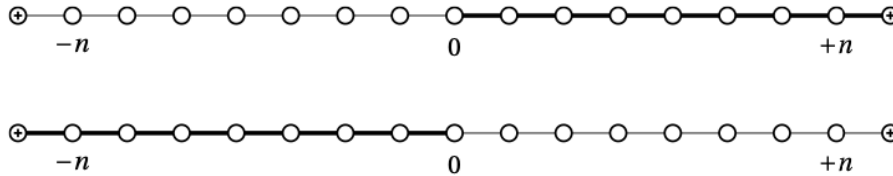
**Απόδειξη ότι  $\beta_c(1) = \infty$ .** Θεωρούμε το μοντέλο Ising στο κουτί  $B(n)$  σε μία διάσταση με + συνοριακή συνθήκη:



Λόγω της δομής του  $\mathbb{Z}$ , υπάρχουν λίγα υπογραφήματα  $E \subset \mathcal{E}_{B(n)}^b$  στη σχέση  $\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ = \frac{\sum_{E \in \mathcal{E}_{\Lambda}^{+;0}} \tanh(\beta)^{|E|}}{\sum_{E \in \mathcal{E}_{\Lambda}^{+;even}} \tanh(\beta)^{|E|}}$  και μπορούμε να τα περιγράψουμε. Αρχικά περιγράφουμε τον αριθμητή. Επειδή για τα υπογραφήματα που εμφανίζονται στο άθροισμα πρέπει να ισχύει ότι το  $I(i, E_0)$  να είναι είτε 0 ή 2  $\forall i \in B(n)$ , τότε  $\mathcal{E}_{B(n)}^{+;even}$  περιέχει δύο γραφήματα: το γράφημα στο οποίο το σύνολο των ακμών  $E = \emptyset$ , όπως στην προηγούμενη εικόνα, και ένα στο οποίο  $E = \mathcal{E}_{B(n)}^b$ :



Από την άλλη πλευρά,  $\mathcal{E}_{B(n)}^{+;0}$  ελαττώνεται σε δύο γραφήματα, ένα που απαρτίζεται από όλες τις ακμές με δύο μη αρνητικές κορυφές για άκρα, και ένα που απαρτίζεται από όλες τις κορυφές με αρνητικά άκρα:



Άρα η  $\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ = \frac{\sum_{E' \in \mathcal{E}_{\Lambda}^{+;0}} \tanh(\beta)^{|E'|}}{\sum_{E \in \mathcal{E}_{\Lambda}^{+;even}} \tanh(\beta)^{|E|}}$  γίνεται

$$\langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda; \beta, 0}^+ = \frac{2 \tanh(\beta^{(n+1)})}{1 + \tanh(\beta^{2(n+1)})}$$

το οποίο τείνει στο 0 όταν  $n \rightarrow \infty$ , για όλα τα  $\beta < \infty$ .

### 3.7.4 Μοναδικότητα σε μη-μηδενικό μαγνητικό πεδίο

Απομένει να αποδείξουμε το item 1 του θεωρήματος 3.7.1, το οποίο αναφέρει ότι αν  $h \neq 0$ , το Gibbs state για το ζευγάρι  $(\beta, h)$  είναι μοναδικό, ανεξάρτητα από την τιμή του  $\beta$ . Η απόδειξη θα δωθεί σε κομμάτια, χρησιμοποιώντας αποτελέσματα από τη μιγαδική ανάλυση και θα μας επιτρέψει να ορίσουμε μία σημαντική ιδιότητα της πίεσης του μοντέλου Ising.

Θα μελετήσουμε τη μοναδικότητα και τις ιδιότητες της πίεσης ως προς  $h$ , όταν το  $h$  παίρνει τιμές στα μιγαδικά χωρία:

$$H^+ \stackrel{\text{def}}{=} \{z \in \mathbb{C} : \Re z > 0\},$$

$$H^- \stackrel{\text{def}}{=} \{z \in \mathbb{C} : \Re z < 0\}.$$

Επειδή η αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta > 0$  δεν έχει σημαντικό ρόλο σε αυτό το υποκεφάλαιο θα γράφουμε  $\psi(h)$  αντί για  $\psi(\beta, h)$ .

**Θεώρημα 3.7.3.** Έστω  $\beta > 0$ . Ως συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου  $h$ , η πίεση του μοντέλου Ising στο θερμοδυναμικό όριο,  $\psi(h)$ , μπορεί να επεκταθεί από το σύνολο  $\{h \in \mathbb{R} : h > 0\}$  (αντίστοιχα  $\{h \in \mathbb{R} : h < 0\}$ ) σε μια αναλυτική συνάρτηση σε όλο το χωρίο  $H^+$  (αντίστοιχα  $H^-$ ). Στα  $H^+$  και  $H^-$ , μπορούμε να υπολογίσουμε την  $\psi$  στο θερμοδυναμικό όριο με ελεύθερες συνοριακές συνθήκες.

Ουσιαστικά το παραπάνω αποτέλεσμα μας πληροφορεί ότι η μιγαδική παράγωγος της  $\psi$  ως προς  $h$  υπάρχει στο  $H^+$  και  $H^-$ . Άρα η πραγματική μερική παράγωγος  $\frac{\partial \psi}{\partial h}$  υπάρχει σε κάθε πραγματικό  $h \neq 0$ . Από το θεώρημα 3.7.2, έχουμε τη μοναδικότητα του Gibbs state για όλα τα  $h \neq 0$ , άρα ολοκληρώνεται η απόδειξη του θεωρήματος 3.7.1.

Για πραγματικές παραμέτρους, το θερμοδυναμικό όριο της πίεσης μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας οποιεσδήποτε συνοριακές συνθήκες. Όταν το μαγνητικό πεδίο είναι μιγαδικός αριθμός, η έννοια της συνοριακής συνθήκης χάνεται. Θα χρησιμοποιήσουμε την ελεύθερη συνοριακή συνθήκη και θα εργαστούμε σε πεπερασμένο  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  για να μελετήσουμε την

$$\psi_\Lambda^\emptyset(h) = \frac{1}{|\Lambda|} \log \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\emptyset.$$

Η ύπαρξη και οι αναλυτικές ιδιότητες της πίεσης προκύπτουν εφαρμόζοντας το θερμοδυναμικό όριο  $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$ . Η αναλυτική συνάρτηση που προκύπτει είναι η αναλυτική επέκταση της πίεσης σε μιγαδικές τιμές.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Αναφέρουμε ένα γνωστό αποτέλεσμα από την πραγματική και μιγαδική ανάλυση για αναλυτικές συναρτήσεις που θα χρησιμοποιήσουμε. (**Identity theorem**) Έστω δύο αναλυτικές συναρτήσεις  $f, g$  σε ένα χωρίο  $D$  (ανοιχτό και συνεκτικό υποσύνολο του  $\mathbb{R}$  ή  $\mathbb{C}$ ). Εάν  $f = g$  σε ένα σύνολο  $A \subseteq D$  που έχει σημείο συσσώρευσης στο  $D$  τότε  $f = g$  στο  $D$ . Δηλαδή, αν μπορούμε να βρούμε μια διαφορετική συνάρτηση της πίεσης  $\tilde{\psi}$  χρησιμοποιώντας διαφορετικές συνοριακές συνθήκες, η οποία είναι αναλυτική στο  $H^+, H^-$ , τότε επειδή αυτή η πίεση ταυτίζεται με την πίεση με ελεύθερες συνοριακές συνθήκες στον πραγματικό άξονα, τότε ταυτίζεται και στο  $H^+, H^-$ .

Από τη μία πλευρά, όταν το μαγνητικό πεδίο είναι πραγματικό, επειδή  $\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^\emptyset$  είναι πεπερασμένος γραμμικός συνδυασμός των  $e^{\pm h}$ , είναι αναλυτική ως προς  $h$ . Επίσης επειδή

$$\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^\emptyset > 0 \text{ για κάθε } h \in \mathbb{R} \quad (3.45)$$

η πίεση  $\psi_\Lambda^\emptyset(\cdot)$  είναι επίσης αναλυτική στο  $h$  (ως σύνθεση αναλυτικών συναρτήσεων). Αυτό όμως δεν είναι σίγουρο ότι ισχύει μετά την εφαρμογή του θερμοδυναμικού ορίου. Από το επιχείρημα του Peierls είδαμε ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες, η πίεση δεν είναι διαφορίσιμη στο σημείο  $h = 0$ .

Από την άλλη πλευρά, επειδή τα Boltzmann weights είναι μιγαδικοί αριθμοί όταν  $h \in \mathbb{C}$ , η συνάρτηση επιμερισμού  $\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^\emptyset$  μπορεί να εξαφανιστεί, το οποίο προκαλεί πρόβλημα στον ορισμό της πεπερασμένου-όγκου πίεσης.

Ευτυχώς το Lee-Yang Circle Theorem [14] [15] μας δείχνει ότι η συνάρτηση επιμερισμού ικανοποιεί μία σημαντική ιδιότητα, ανάλογη της (3.45), σε συγκεκριμένες περιοχές του μιγαδικού χωρίου. Αυτό μας δίνει τη δυνατότητα να έχουμε τον έλεγχο της αναλυτικότητας της πίεσης στο θερμοδυναμικό όριο.

**Θεώρημα 3.7.4.** (Lee-Yang). Έστω  $\beta \geq 0$ . Έστω  $D \subset \mathbb{C}$  ένα ανοιχτό, απλά συνεκτικό χωρίο τέτοιο ώστε  $D \cap \mathbb{R}$  να είναι ένα διάστημα του  $\mathbb{R}$ . Υποθέτουμε ότι για κάθε πεπερασμένου όγκου  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ ,

$$\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^\emptyset \neq 0 \forall h \in D. \quad (3.46)$$

Τότε, η πίεση  $h \mapsto \psi(h)$  επιδέχεται αναλυτική επέκταση στο  $D$ .

Γνωρίζουμε από την ανάλυση που κάναμε στα προηγούμενα κεφάλαια, ότι η πίεση δεν είναι διαφορίσιμη στο σημείο  $h = 0$  όταν  $\beta > \beta_c(d)$ . Όταν συμβαίνει αυτό, το προηγούμενο θεώρημα μας εξασφαλίζει ότι υπάρχει ακολουθία  $(h_k) \in \mathbb{C}$  που τείνει στο 0 και μία ακολουθία  $\Lambda_k \uparrow \mathbb{Z}^d$  τέτοια ώστε  $\mathbf{Z}_{\Lambda_k;\beta,h_k}^\emptyset = 0$  για κάθε  $k$ . Άρα ακόμα και αν η συνάρτηση επιμερισμού δεν εξαφανίζεται για  $h$  πραγματικό, μιγαδικά μέσω της ακολουθίας προσεγγίζουμε το σημείο  $h = 0$  στο θερμοδυναμικό όριο. Με αυτό τον τρόπο, παρατηρούμε ότι παρόλο που οι τιμές του μαγνητικού πεδίου με μη-μηδενικό μιγαδικό μέρος είναι πειραματικά ανούσιες, ο τρόπος με τον οποίο συμπεριφέρεται η συνάρτηση επιμερισμού για τέτοιες μιγαδικές τιμές του μαγνητικού πεδίου αποδεικνύεται ότι έχει ενδιαφέρουσες φυσικές συνέπειες.

*Απόδειξη.* Έστω  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ . Χρησιμοποιώντας την (3.46), από το θεώρημα (B.5) (Appendix) εξασφαλίζεται μια συνάρτηση  $h \mapsto \log \mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,h}^\emptyset$ , αναλυτική στο  $D$  που συμπίπτει με την πίεση όταν  $h \in D \cap \mathbb{R}$  (βλ. παρατήρηση B.1 στο Appendix για την ύπαρξη του branch of the logarithm με αυτή την ιδιότητα). Ορίζουμε

$$g_n(h) \stackrel{\text{def}}{=} \exp(|\Lambda_n|^{-1} \log \mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,h}^\emptyset),$$

η οποία είναι αναλυτική στο  $D$ . Όταν  $h \in D \cap \mathbb{R}$ ,  $g_n(h)$  συμπίπτει με  $e^{\psi_\Lambda^\emptyset(h)}$ , και από το θεώρημα 3.1 εξασφαλίζεται ότι για τέτοιες τιμές του  $h$ ,  $g_n(h) \rightarrow g(h) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\psi(h)}$  καθώς  $n \rightarrow \infty$ , όπου  $\psi$  είναι η πίεση του μοντέλου Ising σε άπειρο όγκο.

Παρατηρούμε ότι η ακολουθία  $(g_n)$  είναι τοπικά ομοιόμορφα φραγμένη στο  $D$ , επειδή,

$$\begin{aligned} |\mathbf{Z}_{\Lambda_n;\beta,h}^\emptyset| &\leq \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} |\exp(-\mathcal{H}_{\Lambda_n;\beta,h}^\emptyset(\omega))| \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda_n;\beta,\Re h}^\emptyset(\omega)) \leq \exp((2d\beta + |\Re h| + \log 2)|\Lambda_n|), \end{aligned}$$

και άρα  $|g_n(h)| = \exp(|\Lambda_n|^{-1} \log \mathbf{Z}_{\Lambda_n; \beta, h}^\emptyset) \leq \exp(2d\beta + |\Re h| + \log 2) \quad \forall h \in D$ . Τώρα είμαστε σε θέση να εφαρμόσουμε το Vitali's convergence theorem (B'.6) ώστε να δείξουμε ότι η  $(g_n)_{n \geq 1}$  συγκλίνει τοπικά με ομοιόμορφο τρόπο, στο  $D$ , σε μία αναλύτικη συνάρτηση  $g$ . Επειδή  $g_n(h) \neq 0$  για όλα τα  $h \in D$  και  $n \geq 1$ , από το θεώρημα του Hurwitz (B'.7) έχουμε ότι η  $g$  δεν μηδενίζεται στο  $D$ , γιατί η περίπτωση  $g \equiv 0$  στο  $D$  δεν μπορεί να συμβαίνει καθώς  $g = e^\psi > 0$  στο  $D \cap \mathbb{R}$ . Καθώς η  $g$  δεν εξαφανίζεται στο  $D$ , από το θεώρημα B'.5 (Appendix) η  $g$  επιδέχεται έναν αναλυτικό λογάριθμο στο  $D$ . Όμως επιλέγουμε ξανά το branch το οποίο να είναι πραγματικό για  $D \cap \mathbb{R}$  μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η συνάρτηση  $\log(g)$  συμπίπτει με την πίεση του μοντέλου Ising στον πραγματικό άξονα, άρα αποδείξαμε το θεώρημα.  $\square$

Για να αποδείξουμε το θεώρημα 3.7.3 χρησιμοποιώντας το θεώρημα 3.7.4 χρειάζεται να δείξουμε επίσης

**Θεώρημα 3.7.5.** (*Lee-Yang Circle Theorem*). Η συνθήκη (3.51) ικανοποιείται όταν  $D = H^+$  και όταν  $D = H^-$ .

Η απόδειξη παρακάτω χρησιμοποιεί τη μεταβλητή

$$z \stackrel{\text{def}}{=} e^{-2h}.$$

Έχουμε ότι  $h \in H^+$  αν και μόνο αν  $z \in \mathbb{U}$ , όπου  $\mathbb{U}$  είναι

$$\mathbb{U} \stackrel{\text{def}}{=} \{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}.$$

Άρα το θεώρημα 3.7.5 ουσιαστικά αναφέρει ότι τα σημεία μηδενισμού της  $\mathbf{Z}_{\Lambda_n; \beta, h}^\emptyset$  (ως συνάρτηση του  $z$ ) βρίσκονται στον μοναδιαίο κύκλο.

*Απόδειξη.* Όταν  $\beta = 0$ , ο ισχυρισμός είναι τετριμμένος. Για αυτό από εδώ και πέρα θεωρούμε ότι  $\beta > 0$ . Είναι βολικό να θεωρήσουμε ότι το μοντέλο είναι ορισμένο σε έναν υπο-γράφο του  $\mathbb{Z}^d$  ο οποίος δεν έχει απομονωμένες κορυφές, δηλαδή θεωρούμε το μοντέλο σε ένα γράφο  $(V, E)$  όπου  $E$  ένα πεπερασμένο σύνολο από ακμές μεταξύ γειτονικών κορυφών στο  $\mathbb{Z}^d$  και  $V$  το σύνολο όλων των σημείων σύνδεσης των ακμών του  $E$ . Θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση μεταξύ spin στο  $V$  που εμφανίζονται στη Χαμιλτονιανή είναι μόνο μεταξύ spin σε κορυφές που συνδέονται με μία ακμή που ανήκει στο  $E$ .

Όπως αναφέραμε και πριν, η συνάρτηση επιμερισμού με ελεύθερες συνοριακές συνθήκες στο  $V$  είναι π.επερασμένος γραμμικός συνδυασμός δυνάμεων των  $e^{\pm h}$ . Θα προσπαθήσουμε να εκφράσουμε τη συνάρτηση επιμερισμού ως πολυώνυμο με μεταβλητή  $z = e^{-2h}$ . Συγκεκριμένα έχουμε,

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{V; \beta, h}^\emptyset &= \sum_{\omega \in \Omega_V} \prod_{\{i, j\} \in E} e^{\beta \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega)} \prod_{i \in V} e^{h \sigma_i(\omega)} \\ &= e^{\beta|E| + h|V|} \sum_{\omega \in \Omega_V} \prod_{\{i, j\} \in E} e^{\beta(\sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - 1)} \prod_{i \in V} e^{h(\sigma_i(\omega) - 1)}. \end{aligned}$$

Μπορούμε για κάθε configuration  $\omega \in \Omega_V$  να ορίσουμε το σύνολο  $X = X(\omega) \subset V$  που ορίζεται ως  $X(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \{i \in V : \sigma_i(\omega) = -1\}$ . Άρα

$$\sum_{\omega \in \Omega_V} \prod_{\{i, j\} \in E} e^{\beta(\sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - 1)} \prod_{i \in V} e^{h(\sigma_i(\omega) - 1)} = \sum_{X \subset V} a_E(X) z^{|X|} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P}_E(z),$$

όπου  $a_E(\emptyset) = a_E(V) \stackrel{\text{def}}{=} 1$  και σε όλες τις άλλες περιπτώσεις,

$$a_E(X) \stackrel{\text{def}}{=} \prod_{\{i,j\} \in E, i \in X, j \in V \setminus X} e^{-2\beta}.$$

Παρατηρούμε ότι οι συντελεστές  $a_E(X) \in [0, 1]$ . Επειδή  $\mathbf{Z}_{\Lambda_n; \beta, h}^\emptyset = e^{\beta|E| + h|V|} \mathcal{P}_E(z)$ , για να δείξουμε ότι  $\mathbf{Z}_{\Lambda_n; \beta, h}^\emptyset \neq 0$  για κάθε  $h \in H^+$ , αρκεί να δείξουμε ότι το  $\mathcal{P}_E(z)$  δεν εξαφανίζεται στο  $\mathbb{U}$ .

Το επόμενο βήμα είναι να μετατρέψουμε το πολυώνυμο μίας μεταβλητής αλλά μεγάλου βαθμού  $\mathcal{P}_E(z)$  σε πολυώνυμο πολλών μεταβλητών πρώτου βαθμού (για κάθε μεταβλητή): έστω  $\mathbf{z}_V = (z_i)_{i \in V} \in \mathbb{C}^V$  και θεωρούμε το πολυώνυμο

$$\mathcal{P}_E(\mathbf{z}_V) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{X \subset V} a_E(X) \prod_{i \in X} z_i.$$

Το αρχικό πολυώνυμο που θεωρήσαμε μπορεί να ανακτηθεί θεωρώντας  $z_i = z$  για όλα τα  $i \in V$ . Θα δείξουμε ότι

$$|z_i| < 1, \forall i \in V \implies \mathcal{P}_E(\mathbf{z}_V) \neq 0. \quad (3.47)$$

Η απόδειξη βασίζεται στην επαγωγή της πληθικότητας του  $E$ . Αρχικά επαληθεύουμε την (3.47) για την περίπτωση όπου το  $E$  περιέχει μια ακμή  $\{i, j\}$ . Σε αυτή την περίπτωση, επειδή  $a_E(\{j\}) = a_E(\{i\}) = e^{-2\beta}$ ,

$$\mathcal{P}_E(\mathbf{z}_{\{i,j\}}) = z_i z_j + e^{-2\beta}(z_i + z_j) + 1.$$

Άρα,  $\mathcal{P}_E(\mathbf{z}_{\{i,j\}}) = 0$  αν και μόνο αν

$$z_i = -\frac{e^{-2\beta} z_j + 1}{z_j + e^{-2\beta}}.$$

Χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό Möbius  $z \mapsto -(e^{-2\beta} z + 1)/(z + e^{-2\beta})$  και το γεγονός ότι  $0 \leq e^{-2\beta} < 1$  εναλλάσσουμε το εσωτερικό με το εξωτερικό του  $\mathbb{U}$ . Αυτό έχει ως συνέπεια ότι αν  $|z_j| < 1$ , τότε  $|z_i| > 1$ , και άρα το  $\mathcal{P}_E(z_i, z_j)$  δεν εξαφανίζεται όταν  $|z_i|, |z_j| < 1$ .

Θεωρούμε τώρα ότι η σχέση (3.47) ισχύει για  $(V, E)$  και έστω  $b = \{i, j\}$  μία ακμή του  $\mathbb{Z}^d$  που δεν περιέχεται στο  $E$ . Θα δείξουμε ότι η σχέση (3.47) ισχύει για τον γράφο  $(V \cup \{i, j\}, E \cup \{b\})$ .

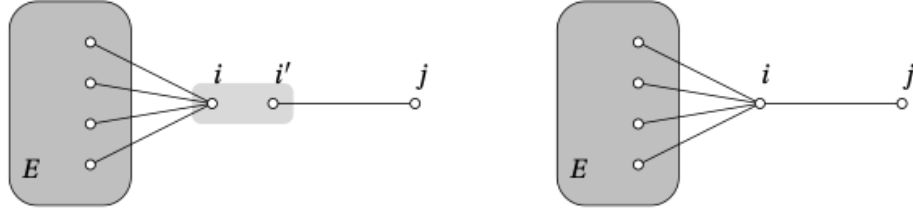
Υπάρχουν τρεις περιπτώσεις να θεωρήσουμε, ως προς το αν το  $V \cap \{i, j\}$  είναι κενό, περιέχει μία κορυφή ή δύο κορυφές.

**Περίπτωση 1:**  $V \cap \{i, j\} = \emptyset$ . Σε αυτή την περίπτωση, το άθροισμα για  $X \subset V \cup \{i, j\}$  μπορεί να διασπαστεί σε δύο ανεξάρτητα αθροίσματα με  $X_1 \subset V$  και  $X_2 \subset \{i, j\}$  το οποίο μας δίνει,

$$\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{i,j\}}) = \hat{\mathcal{P}}_E(\mathbf{z}_V) \hat{\mathcal{P}}_{\{b\}}(\mathbf{z}_{\{i,j\}}) \quad (3.48)$$

Επειδή κανένα από τα πολυώνυμα στην δεξιά πλευρά δεν εξαφανίζεται (από την αρχική μας υπόθεση) για  $|z_k| < 1$  για όλα τα  $k \in V \cup \{i, j\}$ , το ίδιο πρέπει να ισχύει για το πολυώνυμο αριστερά.

**Περίπτωση 2:**  $V \cap \{i, j\} = \{i\}$ . Η βασική ιδέα είναι να προσθέσουμε τη νέα ακμή  $b$  σε δύο βήματα. Αρχικά προσθέτουμε στο  $E$  μία νοητή ακμή  $b' = \{i', j\}$ , όπου  $i'$  μία νοητή κορυφή που δεν ανήκει στο  $V$ , και μετά συσχετίζουμε το  $i'$  με την  $i$  μέσω μίας διαδικασίας που ονομάζεται **Asano contraction** [16].



Από τη μία πλευρά, επειδή  $V \cap \{i', j\} = \emptyset$  εφαρμόζουμε την τεχνική της περίπτωσης 1. Από την άλλη πλευρά, το άθροισμα για  $X \subset V \cup \{i', j\}$  μπορεί να διασπαστεί ανάλογα με το αν  $X \cap \{i', i\} = \{\{i', i\}, \{i'\}, \{i\}, \emptyset\}$  και έχουμε

$$\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b'\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{i', j\}}) = \hat{\mathcal{P}}^{-,-} z_i z_{i'} + \hat{\mathcal{P}}^{+,-} z_{i'} + \hat{\mathcal{P}}^{-,+} z_i + \hat{\mathcal{P}}^{+,+},$$

όπου  $\hat{\mathcal{P}}^{-,-}$ ,  $\hat{\mathcal{P}}^{+,-}$ ,  $\hat{\mathcal{P}}^{-,+}$ ,  $\hat{\mathcal{P}}^{+,+}$  είναι πολυώνυμα των μεταβλητών  $z_j$  και  $z_k, k \in V \setminus \{i\}$ .

Το **Asano contraction** του  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b'\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{i', j\}})$  ορίζεται ως το πολυώνυμο

$$\hat{\mathcal{P}}^{-,-} z_i + \hat{\mathcal{P}}^{+,+}.$$

Θα δείξουμε ότι αυτό το πολυώνυμο ταυτίζεται με το  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{j\}})$ .

**Λήμμα 3.8.**  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{j\}}) = \hat{\mathcal{P}}^{-,-} z_i + \hat{\mathcal{P}}^{+,+}$ .

Απόδειξη. Έστω  $\tilde{V} \stackrel{\text{def}}{=} (V \setminus \{i\}) \cap \{j\}$ . Για  $\sigma_1, \sigma_2 \in \{-, +\}$  τα πολυώνυμα  $\hat{\mathcal{P}}^{\sigma_1, \sigma_2}$  ορίζονται ως

$$\hat{\mathcal{P}}^{\sigma_1, \sigma_2} = \sum_{X \subset \tilde{V}} a_{E \cup \{b'\}}^{\sigma_1, \sigma_2}(X) \prod_{k \in X} z_k$$

όπου

$$\begin{aligned} a_{E \cup \{b'\}}^{-,-}(X) &\stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{1}_{\{j \in X\}} + \mathbf{1}_{\{j \notin X\}} e^{-2\beta}) a_E(X \cup \{i\}), \\ a_{E \cup \{b'\}}^{+,-}(X) &\stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{1}_{\{j \in X\}} + \mathbf{1}_{\{j \notin X\}} e^{-2\beta}) a_E(X), \\ a_{E \cup \{b'\}}^{-,+}(X) &\stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{1}_{\{j \notin X\}} + \mathbf{1}_{\{j \in X\}} e^{-2\beta}) a_E(X \cup \{i\}), \\ a_{E \cup \{b'\}}^{+,+}(X) &\stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{1}_{\{j \notin X\}} + \mathbf{1}_{\{j \in X\}} e^{-2\beta}) a_E(X). \end{aligned}$$

στο πολυώνυμο  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{j\}})$  έχουμε

$$\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{j\}}) = \hat{\mathcal{P}}^{-} z_i + \hat{\mathcal{P}}^{+},$$

όπου για  $\sigma \in \{-, +\}$  έχουμε

$$\hat{\mathcal{P}}^{\sigma} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{X \subset \tilde{V}} a_{E \cup \{b'\}}^{\sigma}(X) \prod_{k \in X} z_k,$$

με

$$\begin{aligned} a_{E \cup \{b'\}}^{-}(X) &\stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{1}_{\{j \in X\}} + \mathbf{1}_{\{j \notin X\}} e^{-2\beta}) a_E(X \cup \{i\}), \\ a_{E \cup \{b'\}}^{+}(X) &\stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{1}_{\{j \notin X\}} + \mathbf{1}_{\{j \in X\}} e^{-2\beta}) a_E(X). \end{aligned}$$

□

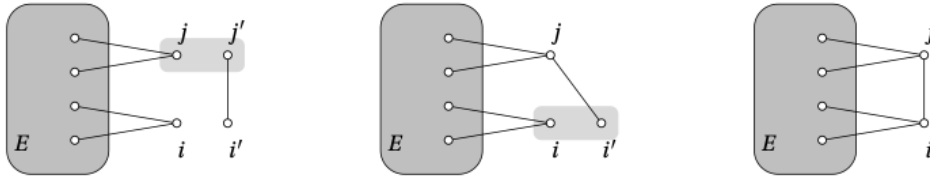
Έχουμε δει ότι το πολυώνυμο  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b'\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{i', j\}})$  δεν εξαφανίζεται όταν όλες οι μεταβλητές ανήκουν στο  $\mathbb{U}$ , άρα αρκεί να δείξουμε το ίδιο και για το **Asano contraction**.

Σταθεροποιούμε τις μεταβλητές  $z_j$  και  $z_k, k \in V \setminus \{i\}$  με τέτοιο τρόπο ώστε να ανήκουν στο  $\mathbb{U}$ . Από την περίπτωση 1 γνωρίζουμε ότι το  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b'\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{i', j\}})$  δεν μπορεί να εξαφανιστεί όταν  $z_i$  και  $z_{i'}$  ανήκουν στο  $\mathbb{U}$ . Για  $z_i = z_{i'} = z$  προκύπτει,

$$z \mapsto \hat{\mathcal{P}}^{-,-} z^2 + (\hat{\mathcal{P}}^{+,-} + \hat{\mathcal{P}}^{-,+}) z + \hat{\mathcal{P}}^{+,+}$$

Συγκεκριμένα για το γινόμενο των δύο ριζών του τριωνύμου θα ισχύει:  $|z_1 \cdot z_2| \geq 1$ . Όμως από νόμους Vietta έχουμε  $|z_1 \cdot z_2| = \frac{|\hat{\mathcal{P}}^{+,+}|}{|\hat{\mathcal{P}}^{-,-}|} \geq 1 \implies |\hat{\mathcal{P}}^{+,+}| \geq |\hat{\mathcal{P}}^{-,-}|$  και άρα  $z \mapsto \hat{\mathcal{P}}^{-,-} z + \hat{\mathcal{P}}^{+,+}$  δεν μπορεί να εξαφανίζεται όταν  $|z| < 1$ .

**Περίπτωση 3:**  $V \cap \{i, j\} = \{i, j\}$ . Η περίπτωση αυτή είναι ανάλογη της περίπτωσης 2. Αρχικά προσθέτουμε μία νοητή ακμή  $b'' = \{i', j'\}$  και προκύπτει το πολυώνυμο  $\hat{\mathcal{P}}_{E \cup \{b''\}}(\mathbf{z}_{V \cup \{i', j'\}})$  που ικανοποιεί την (3.47) από την περίπτωση 1. Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε δύο **Asano contractions**, το πρώτο contraction για να συσχετίσουμε τις μεταβλητές  $z_{j'}$  και  $z_j$  και το δεύτερο για τις μεταβλητές  $z_{i'}$  και  $z_i$ .



Εικόνα 3.13: Προσθέτουμε τη νοητή ακμή  $\{i', j'\}$  στο  $E$ , και συσχετίζουμε τις κορυφές  $j, j'$  και  $i, i'$ .

□

**Σχόλιο 3.7.5.** Παρατηρούμε ότι η παραπάνω απόδειξη δεν εξαρτάται από τη δομή του γραφήματος που προκύπτει από τη Χαμιλτονιανή του μοντέλου και δεν χρησιμοποιεί το γεγονός ότι η αλληλεπίδραση μεταξύ γειτονικών spin είναι ίδια, δηλαδή η coupling constant  $\beta$  μπορεί να αντικατασταθεί από τα couplings  $J_{ij}$  που διαφέρουν από ακμή σε ακμή. Άρα το Circle Theorem και οι συνέπειες του (θεώρημα 3.7.3) μπορεί να εφαρμοστεί σε πιο γενικές συνθήκες.

### 3.7.5 Συμπεράσματα

**Θεώρημα.** Το βασικό αποτέλεσμα συνοψίζεται στις παρακάτω περιπτώσεις.

1.  $\forall d \geq 1$ , όταν  $h \neq 0$ ,  $\exists!$  Gibbs state  $\forall \beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ .
2. Για  $d = 1$   $\exists!$  Gibbs state  $\forall (\beta, h) \in \mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}$ .
3. Για  $h = 0$  και  $d \geq 2$   $\exists \beta_c = \beta_c(d) \in (0, \infty)$  τέτοιο ώστε
  - για  $\beta < \beta_c \implies$  το Gibbs state στο  $(\beta, 0)$  είναι μοναδικό,



- για  $\beta > \beta_c \implies$  έχουμε *first-order phase transition* στο  $(\beta, 0)$ :

$$\langle \cdot \rangle_{\beta,0}^+ \neq \langle \cdot \rangle_{\beta,0}^-$$

Συμπεραίνουμε από την ανάλυση μας ότι για τη μέση μαγνητική πυκνότητα και inverse critical temperature ισχύει το παρακάτω θεώρημα.

**Θεώρημα.** Έστω  $\beta_c(d)$  η inverse critical temperature του μοντέλου Ising στο  $\mathbb{Z}^d$ .

1. Για κάθε  $\beta < \beta_c(d)$ , η μέση μαγνητική πυκνότητα  $m(\beta, h)$  είναι καλώς ορισμένη και ανεξάρτητη από τις συνοριακές συνθήκες και την ακολουθία συνόλων που την ορίζει, για κάθε  $h \in \mathbb{R}$ . Ως συνάρτηση είναι περιττή, αύξουσα και συνεχής ως προς  $h$  και συγκεκριμένα  $m(\beta, 0) = 0$ .
2. Για κάθε  $\beta > \beta_c(d)$ , η μέση μαγνητική πυκνότητα  $m(\beta, h)$  είναι καλώς ορισμένη και ανεξάρτητη από τις συνοριακές συνθήκες και την ακολουθία συνόλων που την ορίζει, για κάθε  $h \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ . Ως συνάρτηση είναι περιττή, αύξουσα ως προς  $h$  και συνεχής παντού εκτός από  $h = 0$ , όπου

$$\lim_{h \downarrow 0} m(\beta, h) = m^+(\beta, h) > 0, \quad \lim_{h \uparrow 0} m(\beta, h) = m^-(\beta, h) < 0.$$

Συγκεκριμένα η στιγμιαία μαγνήτιση ικανοποιεί

$$m^*(\beta) = 0 \text{ για } \beta < \beta_c(d), \quad m^*(\beta) > 0 \text{ για } \beta > \beta_c(d).$$

*Απόδειξη.* Από το θεώρημα 3.7.5 έχουμε ότι για όλα τα  $\beta \geq 0$  η πίεση  $\psi(\beta, h)$  είναι διαφορίσιμη ως προς  $h$ ,  $\forall h \neq 0$ . Επίσης από την πρόταση 3 του θεωρήματος 3.6 σε συνδυασμό με το θεώρημα 3.7.2 προκύπτει ότι η απεικόνιση  $h \mapsto \psi(\beta, h)$  είναι διαφορίσιμη στο σημείο  $h = 0$  όταν  $\beta < \beta_c(d)$ , αλλά δεν είναι διαφορίσιμη στο σημείο  $h = 0$  όταν  $\beta > \beta_c(d)$ . Δηλαδή  $\mathfrak{B}_\beta = \emptyset$  όταν  $h \neq 0$  ή  $\beta < \beta_c(d)$  και  $\mathfrak{B}_\beta = \{0\}$  όταν  $h = 0$  και  $\beta > \beta_c(d)$ . Οι υπόλοιποι ισχυρισμοί έπονται από την πρόταση 3.2.1.  $\square$

**Παρατήρηση 3.4.** Όταν  $h = 0$ , η στιγμιαία μαγνήτιση  $m^*(\beta)$  μας επιτρέπει να διαχωρίσουμε το *ordered regime* στο οποίο  $m^*(\beta) > 0$ , από το *disordered regime* στο οποίο ισχύει  $m^*(\beta) = 0$ . Μία συνάρτηση με αυτή την ιδιότητα ονομάζεται *order parameter*.

## 3.8 Απόδειξη των ανισοτήτων συσχέτισης

Θα αποδείξουμε τις ανισότητες συσχέτισης σε ένα πιο γενικό πλαίσιο από αυτό που τις ορίσαμε.

### 3.8.1 Απόδειξη των ανισοτήτων GKS

Έστω  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  και  $\mathbf{K} = (K_C)_{C \subset \Lambda}$  μία οικογένεια πραγματικών αριθμών που καλείται **coupling constants**. Θεωρούμε την ακόλουθη κατανομή πιθανότητας στον  $\Omega_\Lambda$ :

$$\nu_{\Lambda; \mathbf{K}}(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{1}{Z_{\Lambda; \mathbf{K}}} \exp\left\{ \sum_{C \subset \Lambda} K_C \omega_C \right\},$$

όπου  $\omega_C \stackrel{\text{def}}{=} \prod_{i \in C} \omega_i$  και  $\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{K}}$  η συνάρτηση επιμερισμού. Οι κατανομές Gibbs  $\mu_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^+$ ,  $\mu_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\emptyset$  και  $\mu_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\text{per}}$  μπορούν να προσαρμοστούν σε αυτή τη μορφή για  $K_C \geq 0 \quad \forall C \subset \Lambda$ , αν  $\mathbf{h} \geq 0$ . Για παράδειγμα  $\mu_{\Lambda; \beta, h}^+ = \nu_{\Lambda; \mathbf{K}}$  για

$$K_C = \begin{cases} h + \beta \#\{j \notin \Lambda : j \sim i\} & \text{για } C = \{i\} \subset \Lambda, \\ \beta & \text{για } C = \{i, j\} \subset \Lambda, i \sim j, \\ 0 & \text{αλλού.} \end{cases}$$

Παρουσιάζουμε τη γενίκευση του θεωρήματος 3.4

**Θεώρημα 3.7.** Έστω  $\mathbf{K} = (K_C)_{C \subset \Lambda}$  τέτοιο ώστε  $K_C \geq 0 \quad \forall C \subset \Lambda$ . Τότε  $\forall A, B \subset \Lambda$ ,

$$\langle \sigma_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} \geq 0, \quad (3.49)$$

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} \geq \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}}. \quad (3.50)$$

Απόδειξη. Παρατηρούμε ότι  $\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{K}} > 0$ . Άρα επικεντρωνόμαστε στον αριθμητή. Εκφράζουμε τον εκθετικό παράγοντα ως σειρά Taylor  $e^{K_C \omega_C} = \sum_{n_C \geq 0} \frac{1}{n_C!} K_C^{n_C} \omega_C^{n_C}$ , και γράφουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{K}} \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} &= \sum_{\omega} \omega_A \prod_{C \subset \Lambda} e^{K_C \omega_C} \\ &= \sum_{n_C \geq 0} \prod_{C \subset \Lambda} \frac{K_C^{n_C}}{n_C!} \sum_{\omega} \omega_A \prod_{C \subset \Lambda} \omega_C^{n_C}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Γράφουμε  $\omega_A \prod_{C \subset \Lambda} \omega_C^{n_C} = \prod_{i \in \Lambda} \omega_i^{m_i}$  με  $m_i = \mathbb{1}_{\{i \in A\}} + \sum_{C \subset \Lambda, i \in C} n_C$ . Άρα προκύπτει

$$\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{K}} \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} = \sum_{n_C \geq 0} \prod_{C \subset \Lambda} \frac{K_C^{n_C}}{n_C!} \sum_{\omega} \prod_{i \in \Lambda} \omega_i^{m_i}$$

Επειδή έχουμε

$$\sum_{\omega_i = \pm 1} \omega_i^{m_i} = \begin{cases} 2, & \text{για } m_i \text{ άρτιο} \\ 0 & \text{για } m_i \text{ περιττό} \end{cases}$$

και

$$\sum_{\omega} \prod_{i \in \Lambda} \omega_i^{m_i} = \prod_{i \in \Lambda} \sum_{\omega_i = \pm 1} \omega_i^{m_i} \geq 0$$

Αυτό μας δίνει τη σχέση (3.49).

Για τη σχέση (3.50) διπλασιάζουμε το σύστημα, δηλαδή θεωρούμε το γινόμενο των κατανομών πιθανότητας  $\nu_{\Lambda; \mathbf{K}} \otimes \nu_{\Lambda; \mathbf{K}}$  στον  $\Omega_{\Lambda} \times \Omega_{\Lambda}$  που ορίζεται ως

$$\nu_{\Lambda; \mathbf{K}} \otimes \nu_{\Lambda; \mathbf{K}}(\omega, \omega') \stackrel{\text{def}}{=} \nu_{\Lambda; \mathbf{K}}(\omega) \nu_{\Lambda; \mathbf{K}}(\omega').$$

Ορίζουμε  $\sigma_i(\omega, \omega') \stackrel{\text{def}}{=} \omega_i$  και  $\sigma'_i(\omega, \omega') \stackrel{\text{def}}{=} \omega'_i$ . Τότε προκύπτει

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_A(\sigma_B - \sigma'_B) \rangle_{\nu_{\Lambda, \mathbf{K}} \otimes \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}} &= \sum_{\omega} \sum_{\omega'} \sigma_A(\omega, \omega') (\sigma_B(\omega, \omega') - \sigma'_B(\omega, \omega')) \nu_{\Lambda, \mathbf{K}} \otimes \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega, \omega') \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\omega'} \sigma_A(\sigma_B - \sigma'_B) \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega) \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega') \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\omega'} \sigma_A \sigma_B \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega) \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega') - \sum_{\omega} \sum_{\omega'} \sigma_A \sigma'_B \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega) \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega') \\
&= \sum_{\omega} \sigma_A \sigma_B \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega) \sum_{\omega'} \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega') - \sum_{\omega} \sigma_A \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega) \sum_{\omega'} \sigma'_B \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}(\omega') \\
&= \langle \sigma_A \sigma_B \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} - \langle \sigma_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}} \langle \sigma_B \rangle_{\Lambda, \mathbf{K}}
\end{aligned}$$

Άρα αρκεί να αποδείξουμε ότι η ποσότητα

$$(\mathbf{Z}_{\Lambda, \mathbf{K}})^2 \langle \sigma_A(\sigma_B - \sigma'_B) \rangle_{\nu_{\Lambda, \mathbf{K}} \otimes \nu_{\Lambda, \mathbf{K}}} = \sum_{\omega, \omega'} \omega_A (\omega_B - \omega'_B) \prod_{C \subset \Lambda} e^{K_C(\omega_C + \omega'_C)}.$$

είναι θετική.

Εισάγουμε τις ποσότητες  $\omega''_i \stackrel{\text{def}}{=} \omega_i \omega'_i = \frac{\omega'_i}{\omega_i}$ ,

$$\begin{aligned}
\sum_{\omega, \omega'} \omega_A (\omega_B - \omega'_B) \prod_{C \subset \Lambda} e^{K_C(\omega_C + \omega'_C)} &= \sum_{\omega, \omega'} \omega_A \omega_B (1 - \omega''_B) \prod_{C \subset \Lambda} e^{K_C(1 + \omega''_C) \omega_C} \\
&= \sum_{\omega''} (1 - \omega''_B) \sum_{\omega} \omega_A \omega_B \prod_{C \subset \Lambda} e^{K_C(1 + \omega''_C) \omega_C}.
\end{aligned}$$

Επειδή  $1 - \omega''_B \geq 0$ , η (3.50) έπεται με το να αναλύσουμε το άθροισμα ως προς  $\omega$  (για σταθερό  $\omega''$ ) όπως στο βήμα (3.51) με  $K_C(1 + \omega''_C) \geq 0$ .  $\square$

### 3.8.2 Απόδειξη της ανισότητας FKG

Θέλουμε να δείξουμε για πεπερασμένου όγκου  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  και για δύο αύξουσες συναρτήσεις  $f, g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$\langle fg \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\eta} \geq \langle f \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\eta} \langle g \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, \mathbf{h}}^{\eta}. \quad (3.52)$$

Υπενθυμίζουμε ότι η **διάταξη** στον  $\Omega_{\Lambda}$  ορίζεται ως εξής:

$$\omega \leq \omega' \iff \omega_i \leq \omega'_i \quad \forall i \in \Lambda$$

για  $\omega = (\omega_i)_{i \in \Lambda}$ ,  $\omega' = (\omega'_i)_{i \in \Lambda}$ . Ορίζουμε επίσης τις ποσότητες

$$\begin{aligned}
\omega \wedge \omega' &\stackrel{\text{def}}{=} (\omega_i \wedge \omega'_i)_{i \in \Lambda} (\text{min}), \\
\omega \vee \omega' &\stackrel{\text{def}}{=} (\omega_i \vee \omega'_i)_{i \in \Lambda} (\text{max}).
\end{aligned}$$

Θα δείξουμε ότι η (3.52) είναι συνέπεια του παρακάτω θεωρήματος.

**Θεώρημα 3.8.** Έστω  $\mu = \otimes_{i \in \Lambda} \mu_i$  το μέτρο γινόμενο στον  $\Omega_\Lambda$ . Έστω  $f_1, \dots, f_4 : \Omega_\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$  μη αρνητικές συναρτήσεις στο  $\Omega_\Lambda$  τέτοιες ώστε

$$f_1(\omega)f_2(\omega') \leq f_3(\omega \wedge \omega')f_4(\omega \vee \omega'), \quad \forall \omega, \omega' \in \Omega_\Lambda. \quad (3.53)$$

Τότε

$$\langle f_1 \rangle_\mu \langle f_2 \rangle_\mu \leq \langle f_3 \rangle_\mu \langle f_4 \rangle_\mu. \quad (3.54)$$

**Σχόλιο 3.8.1.** Πριν αποδείξουμε το θεώρημα θα δείξουμε πως από αυτό θα βρεθούμε στη σχέση (3.52).

Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε ότι  $f, g$  εξαρτώνται μόνο από τις τιμές των configuration μέσα στο  $\Lambda$  και ότι είναι μη αρνητικές <sup>2</sup>. Για  $i \in \Lambda, s \in \{\pm 1\}$  ορίζουμε

$$\begin{aligned} \mu_i(s) &\stackrel{\text{def}}{=} e^{hs + s \sum_{j \notin \Lambda, j \sim i} J_{i,j} \eta_j} \\ p(\omega) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{e^{\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} J_{ij} \omega_i \omega_j}}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta} \end{aligned}$$

και παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned} p(\omega)\mu(\omega) &= \frac{\exp\left(\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} J_{ij} \omega_i \omega_j\right)}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta} \prod_{i \in \Lambda} \mu_i(\omega) \\ &= \frac{\exp\left(\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} J_{ij} \omega_i \omega_j\right)}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta} \exp\left(h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i + \sum_{i \in \Lambda} \omega_i \sum_{j \notin \Lambda, j \sim i} J_{i,j} \eta_j\right) \\ &= \frac{\exp\left(\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} J_{ij} \omega_i \omega_j + \sum_{i \in \Lambda} \omega_i \sum_{j \notin \Lambda, j \sim i} J_{i,j} \eta_j + h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i\right)}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta}. \end{aligned}$$

Υπενθυμίζουμε ότι

$$\mathcal{E}_\Lambda^b = \{\{i, j\} \subset \mathbb{Z}^d : \{i, j\} \cap \Lambda \neq \emptyset, i \sim j\}.$$

και ότι το  $\mathcal{E}_\Lambda^b$  διαφέρει από το  $\mathcal{E}_\Lambda$  με την προσθήκη ακμών που συνδέουν κορυφές μέσα στο  $\Lambda$  με γειτονικές εκτός του  $\Lambda$ . Παρατηρούμε δηλαδή ότι

$$\begin{aligned} p(\omega)\mu(\omega) &= \frac{\exp\left(\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} J_{ij} \omega_i \omega_j + \sum_{i \in \Lambda} \omega_i \sum_{j \notin \Lambda, j \sim i} J_{i,j} \eta_j + h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i\right)}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta} \\ &= \frac{\exp\left(\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b} J_{ij} \omega_i \omega_j + h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i\right)}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta} \\ &= \mu_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta(\omega). \end{aligned}$$

<sup>2</sup> Αν αυτό δεν ισχύει, επαναπροσδιορίζουμε την  $f(\omega)$  για  $\omega \in \Omega_\Lambda$  ως  $f(\omega|_{\Lambda^c}) - \min_{\omega'} f(\omega'|_{\Lambda^c})$  όπου  $\omega|_{\Lambda^c}$  το configuration που συμπίπτει με το  $\omega$  στο  $\Lambda$  και  $\eta$  στο  $\Lambda^c$ . Το ίδιο γίνεται και για την  $g$ . Αυτό δεν επηρεάζει τη συσχέτιση των  $f, g$ .

Άρα παρατηρούμε ότι ισχύει

$$\langle fp \rangle_\mu = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} f(\omega)p(\omega)\mu(\omega) = \langle f \rangle_{\Lambda; \mathbf{J}, \mathbf{h}}^\eta.$$

Έστω  $f_1 = pf$ ,  $f_2 = pg$ ,  $f_3 = p$ ,  $f_4 = pfg$ . Αν ισχύει η σχέση (3.53) για αυτή την επιλογή τότε ισχύει και η (3.54) άρα δείξαμε την (3.52).

Δηλαδή

$$\left( p(\omega)f(\omega) \right) \left( p(\omega')g(\omega') \right) \leq p(\omega \wedge \omega')p(\omega \vee \omega')f(\omega \vee \omega')g(\omega \vee \omega').$$

Αρκεί δηλαδή να δείξουμε ότι ισχύει  $p(\omega)p(\omega') \leq p(\omega \wedge \omega')p(\omega \vee \omega')$  καθώς η  $f$ ,  $g$  την ικανοποιούν. Όμως επειδή ισχύει

$$\omega_i \omega_j + \omega'_i \omega'_j \leq (\omega_i \vee \omega'_i)(\omega_j \vee \omega'_j) + (\omega_i \wedge \omega'_i)(\omega_j \wedge \omega'_j) \quad (3.55)$$

αυτό μας αποδεικνύει ότι η σχέση που θέλαμε να αποδείξουμε ισχύει και αυτό προκύπτει κατασκευαστικά.

Η σχέση (3.55) ισχύει αν και τα δύο μέλη δεξιά της ανισότητας είναι 1. Έστω ότι θεωρούμε ότι ένα από αυτά είναι -1. Αυτό δεν μπορεί αν συμβεί αν ταυτόχρονα έχουμε  $\omega_i \neq \omega'_i, \omega_j \neq \omega'_j$ . Έστω  $\omega_i = \omega'_i$ . Τότε το δεξί μέλος είναι

$$\begin{aligned} &= \omega_i(\omega_j \vee \omega'_j) + \omega_i(\omega_j \wedge \omega'_j) \\ &= \omega_i((\omega_j \vee \omega'_j) + (\omega_j \wedge \omega'_j)) \\ &= \omega_i \omega_j + \omega_i \omega'_j \\ &= \omega_i \omega_j + \omega'_i \omega'_j. \end{aligned}$$

**Σχόλιο 3.8.2.** Η παρακάτω απόδειξη δεν βασίζεται στο γεγονός ότι τα spin παίρνουν τις τιμές  $\{\pm 1\}$  και ισχύει για αυθαίρετη πραγματική τιμή των spin.

Απόδειξη. (Απόδειξη θεωρήματος 3.8) Για ένα δοσμένο  $i \in \Lambda$  κάθε configuration  $\omega \in \Omega_\Lambda$  μπορεί να ταυτιστεί με το ζευγάρι  $(\tilde{\omega}, \omega_i)$  όπου  $\tilde{\omega} \in \Omega_{\Lambda \setminus \{i\}}$ .

Θα δείξουμε ότι

$$f_1(\omega)f_2(\omega') \leq f_3(\omega \wedge \omega')f_4(\omega \vee \omega') \quad (3.56)$$

συνεπάγεται ότι

$$\tilde{f}_1(\tilde{\omega})\tilde{f}_2(\tilde{\omega}') \leq \tilde{f}_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}')\tilde{f}_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}') \quad (3.57)$$

όπου για  $k=1,2,3,4$   $\tilde{f}_k(\tilde{\omega}) \stackrel{def}{=} \langle f_k(\tilde{\omega}, \cdot) \rangle_{\mu_i} = \sum_{\nu=\pm 1} f_k(\tilde{\omega}, \nu)\mu_i(\nu)$ . Αν αυτό το κάνουμε  $|\Lambda|$  φορές παίρνουμε την (3.52).

Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned} \langle f_k(\tilde{\omega}, u)f_k(\tilde{\omega}', \nu) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} &= \sum_{u=\pm 1, \nu=\pm 1} f_k(\tilde{\omega}, u)f_k(\tilde{\omega}', \nu)\mu_i(u)\mu_i(\nu) = \sum_{u=\pm 1} f_k(\tilde{\omega}, u)\mu_i(u) \sum_{\nu=\pm 1} f_k(\tilde{\omega}', \nu)\mu_i(\nu) \\ &= \langle f_k(\tilde{\omega}, \cdot) \rangle_{\mu_i} \langle f_k(\tilde{\omega}', \cdot) \rangle_{\mu_i} \\ &= \tilde{f}_k(\tilde{\omega})\tilde{f}_k(\tilde{\omega}'). \end{aligned}$$

Το αριστερό μέλος της (3.57) γράφεται ως

$$\begin{aligned} \langle f_1(\tilde{\omega}, u)f_2(\tilde{\omega}', \nu) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} &= \langle \mathbb{1}_{\{u=\nu\}} f_1(\tilde{\omega}, u)f_2(\tilde{\omega}', \nu) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} \\ &+ \langle \mathbb{1}_{\{u<\nu\}} (f_1(\tilde{\omega}, u)f_2(\tilde{\omega}', \nu) + f_1(\tilde{\omega}, \nu)f_2(\tilde{\omega}', u)) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i}. \end{aligned}$$

Το δεξί μέλος της (3.57) γράφεται ως

$$\begin{aligned} \langle f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', u)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', \nu) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} &= \langle \mathbb{1}_{\{u=\nu\}} f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', u)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', \nu) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} \\ &+ \langle \mathbb{1}_{\{u<\nu\}} (f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', u)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', \nu) + f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', \nu)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', u)) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i}. \end{aligned}$$

Άρα προκύπτει

$$\begin{aligned} \tilde{f}_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}')\tilde{f}_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}') - \tilde{f}_1(\tilde{\omega})\tilde{f}_2(\tilde{\omega}') &= \langle \mathbb{1}_{\{u=\nu\}} (f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', u)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', \nu) - f_1(\tilde{\omega}, u)f_2(\tilde{\omega}', \nu)) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} \\ &+ \langle \mathbb{1}_{\{u<\nu\}} (C + D - A - B) \rangle_{\mu_i \otimes \mu_i} \end{aligned} \quad (3.58)$$

όπου

$$\begin{aligned} A &\stackrel{def}{=} f_1(\tilde{\omega}, u)f_2(\tilde{\omega}', \nu) \\ B &\stackrel{def}{=} f_1(\tilde{\omega}, \nu)f_2(\tilde{\omega}', u) \\ C &\stackrel{def}{=} f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', u)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', \nu) \\ D &\stackrel{def}{=} f_3(\tilde{\omega} \wedge \tilde{\omega}', \nu)f_4(\tilde{\omega} \vee \tilde{\omega}', u) \end{aligned}$$

Το πρώτο μέλος στην (3.58) δεξιά είναι θετικό από την (3.56). Για να έχουμε την (3.57) απαιτείται  $A + B \leq C + D$ .

Από την (3.56) παρατηρούμε ότι  $A \leq C$ ,  $B \leq C$ .

$$\begin{aligned} AB &= f_1(\tilde{\omega}, u)f_2(\tilde{\omega}', \nu)f_1(\tilde{\omega}, \nu)f_2(\tilde{\omega}', u) \leq f_3(\omega \wedge \omega', u)f_4(\omega \vee \omega', \nu)f_3(\omega \wedge \omega', \nu)f_4(\omega \vee \omega', u) \\ &= CD \end{aligned}$$

• Αν  $C = 0 \implies A = B = 0$  και  $A + B \leq C + D$  ισχύει

• Αν

$$\begin{aligned} C \neq 0 \implies \frac{C + D - A - B}{C} &= 1 + \frac{D}{C} - \frac{A}{C} - \frac{B}{C} \geq 1 + \frac{AB}{C^2} - \frac{A}{C} - \frac{B}{C} \\ &= 1 + \frac{A}{C}(\frac{B}{C} - 1) - \frac{B}{C} = (1 - \frac{A}{C})(1 - \frac{B}{C}) \geq 0 \end{aligned}$$

όπου στην πρώτη ανισότητα χρησιμοποιήσαμε το  $AB \leq CD$ . □

# Παράρτημα Α΄

## Τεχνικές αποδείξεις

Εδώ παρουσιάζουμε τεχνικές αποδείξεις που εμφανίζονται ως εργαλεία για την ολοκλήρωση αποδείξεων ή συμπερασμάτων.

### Α΄.1 Κεφάλαιο 1

**Πρόταση Α΄.1.1.** Απόδειξη ότι η εντροπία Shannon  $S_{sh}(\mu) = -\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \mu(\omega) \log \mu(\omega)$  είναι κοίλη.

Απόδειξη. Αρχικά ορίζουμε  $f(x) = -x \log x$  και παρατηρούμε ότι  $S_{sh}(\mu) = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} f(\mu(\omega))$ . Για την  $f(x)$  προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} f'(x) &= -\log x - 1 \\ f''(x) &= -\frac{1}{x} < 0 \quad \forall x \in (0, \infty). \end{aligned}$$

Από γνωστό θεώρημα της ανάλυσης προκύπτει ότι η  $f(x)$  είναι κοίλη και γνωρίζουμε ότι το άθροισμα κοίλων συναρτήσεων είναι κοίλη συνάρτηση.  $\square$

**Πρόταση Α΄.1.2.** Απόδειξη ότι ο διωνυμικός συντελεστής  $\binom{n}{k}$  παρουσιάζει μέγιστο για  $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ .

Απόδειξη. Από γνωστή πρόταση (Condition for increasing Binomial coefficient) έχουμε ότι

$$\binom{n}{k} > \binom{n}{k-1} \iff k \leq \frac{n}{2}$$

Έστω  $n$  ένας άρτιος ακέραιος αριθμός  $n = 2r \implies r = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ . Άρα έχουμε ότι

$$\forall k < r \implies \binom{n}{r} > \binom{n}{k}$$

Από γνωστή πρόταση (Symmetry rule for Binomial coefficient)

$$\forall k < r \implies \binom{n}{r} > \binom{n}{n-k}$$

και άμεσα προκύπτει ότι

$$\forall k > r \implies \binom{n}{r} > \binom{n}{k}$$

Όμως

$$\binom{n}{r} = \binom{n}{n-r} = \binom{n}{\frac{n}{2}}.$$

Άρα

$$\forall k \neq r \implies \binom{n}{k} < \binom{n}{\frac{n}{2}} \implies k_{max} = \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$$

□

**Πρόταση Α'.1.3.** Απόδειξη ότι η πιθανότητα να έχουμε τον ίδιο αριθμό σωματιδίων σε κάθε δοχείο είναι  $\frac{1}{\sqrt{N}}$ .

Απόδειξη. Προκύπτει άμεσα χρησιμοποιώντας το Λήμμα 5 (σελ. 28) απο [17].

□

**Πρόταση Α'.1.4.** Απόδειξη ότι η  $s_{Boltz}^{hard}(\mu) \stackrel{def}{=} -\rho \log \rho - (1-\rho) \log(1-\rho)$  είναι κοίλη.

Απόδειξη. Όπως και στην προηγούμενη άσκηση οι συναρτήσεις  $f(\rho) = -\rho \log \rho$   $g(\rho) = -(1-\rho) \log(1-\rho)$  έχουν αρνητική δεύτερη παράγωγο και από γνωστό θεώρημα της ανάλυσης είναι κοίλες συναρτήσεις και γνωρίζουμε το άθροισμα κοίλων συναρτήσεων είναι κοίλη συνάρτηση.

□

**Πρόταση Α'.1.5.** Απόδειξη ότι  $\langle M_\Lambda \rangle_{\Lambda; \beta, 0} = 0$

Απόδειξη. Υπενθυμίζουμε ότι  $M_\Lambda(\omega) \stackrel{def}{=} \sum_{i \in \Lambda} \omega_i$  και  $\mu_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) = \mu_{\Lambda; \beta, 0}(-\omega)$ . Παρατηρούμε ότι  $M_\Lambda(-\omega) = -M_\Lambda(\omega)$ .

$$\begin{aligned} \langle M_\Lambda \rangle_{\Lambda; \beta, 0} &= \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} M_\Lambda(\omega) \mu_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) \\ &= \frac{1}{2} \left( \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} M_\Lambda(\omega) \mu_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) + \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} M_\Lambda(-\omega) \mu_{\Lambda; \beta, 0}(-\omega) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} M_\Lambda(\omega) \mu_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) - \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} M_\Lambda(\omega) \mu_{\Lambda; \beta, 0}(-\omega) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} M_\Lambda(\omega) (\mu_{\Lambda; \beta, 0}(\omega) - \mu_{\Lambda; \beta, 0}(-\omega)) \right) = 0 \end{aligned}$$

όπου στην τελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε τη συμμετρία υπό **global flip spin**.

□

## Α'.2 Κεφάλαιο 2

**Πρόταση Α'.2.1.** Απόδειξη της σχέσης (2.11)



Απόδειξη. Αρχικά

$$\binom{N}{\frac{1+m}{2}} = \frac{N!}{\left[\frac{1+m}{2}N\right]! \left[\frac{1-m}{2}N\right]!}$$

Με τη βοήθεια της φόρμουλας *Stirling*, για τον όρο  $N!$  έχουμε :

$$e^{\frac{1}{12N+1}} \sqrt{2\pi N} N^N e^{-N} \leq N! \leq e^{\frac{1}{12N}} \sqrt{2\pi N} N^N e^{-N}$$

ενώ για τα  $\left[\frac{1+m}{2}N\right]!$ ,  $\left[\frac{1-m}{2}N\right]!$  προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\left[ e^{1/\left[12\left(\frac{1+m}{2}N\right)\right]} \sqrt{2\pi} \left(\frac{1+m}{2}N\right)^{\left(\frac{1+m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} e^{-\left(\frac{1+m}{2}N\right)} \right]} &\leq \frac{1}{\left[\frac{1+m}{2}N\right]!} \leq \\ \frac{1}{\left[ e^{1/\left[12\left(\frac{1+m}{2}N\right)+1\right]} \sqrt{2\pi} \left(\frac{1+m}{2}N\right)^{\left(\frac{1+m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} e^{-\left(\frac{1+m}{2}N\right)} \right]} & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\left[ e^{1/\left[12\left(\frac{1-m}{2}N\right)\right]} \sqrt{2\pi} \left(\frac{1-m}{2}N\right)^{\left(\frac{1-m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} e^{-\left(\frac{1-m}{2}N\right)} \right]} &\leq \frac{1}{\left[\frac{1-m}{2}N\right]!} \leq \\ \frac{1}{\left[ e^{1/\left[12\left(\frac{1-m}{2}N\right)+1\right]} \sqrt{2\pi} \left(\frac{1-m}{2}N\right)^{\left(\frac{1-m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} e^{-\left(\frac{1-m}{2}N\right)} \right]} & \end{aligned}$$

Θα ξεκινήσουμε την ανάλυση μας κάνοντας ορισμένα σχόλια που θα διευκολύνουν την ανάλυση των παρονομαστών κάθε πλευράς. Αρχικά παρατηρούμε ότι:

- Όταν πολλαπλασιάζονται οι ποσότητες  $e^{-\left(\frac{1+m}{2}N\right)}$ ,  $e^{-\left(\frac{1-m}{2}N\right)}$  έχουμε  $e^{-\left(\frac{1+m}{2}N\right)} e^{-\left(\frac{1-m}{2}N\right)} = e^{-N}$ . Άρα απλοποιούνται από αριθμητή και παρονομαστή και στις δύο πλευρές.
- Χωρίζουμε το  $\left(\frac{1+m}{2}N\right)^{\left(\frac{1+m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} \left(\frac{1-m}{2}N\right)^{\left(\frac{1-m}{2}N+\frac{1}{2}\right)}$  με τον εξής τρόπο:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1+m}{2}N\right)^{\left(\frac{1+m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} \left(\frac{1-m}{2}N\right)^{\left(\frac{1-m}{2}N+\frac{1}{2}\right)} &= \left[\left(\frac{1+m}{2}N\right)\left(\frac{1+m}{2}N\right)\right]^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{1+m}{2}\right)^{\left(\frac{1+m}{2}N\right)}\right. \\ &\quad \left.\left(\frac{1-m}{2}\right)^{\left(\frac{1-m}{2}N\right)}\right] \left[\binom{N}{\left(\frac{1+m}{2}N\right)} \binom{N}{\left(\frac{1-m}{2}N\right)}\right] \end{aligned}$$

Προκύπτει άμεσα ότι:

1.  $\left[\binom{N}{\left(\frac{1+m}{2}N\right)} \binom{N}{\left(\frac{1-m}{2}N\right)}\right] = N^N$  άρα απλοποιούνται από αριθμητή και παρονομαστή και στις δύο πλευρές.

2. Υπενθυμίζουμε ότι  $s(m) = -\left(\frac{1+m}{2}\right)\log\left(\frac{1+m}{2}\right) - \left(\frac{1-m}{2}\right)\log\left(\frac{1-m}{2}\right)$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{1+m}{2}\right)^{\binom{1+m}{2}N} \left(\frac{1-m}{2}\right)^{\binom{1-m}{2}N}\right] &= \exp\left(N\left[\log\left[\left(\frac{1+m}{2}\right)^{\binom{1+m}{2}} \left(\frac{1-m}{2}\right)^{\binom{1-m}{2}}\right]\right]\right) \\ &= \exp\left(N\left[\left(\frac{1+m}{2}\right)\log\left(\frac{1+m}{2}\right) + \left(\frac{1-m}{2}\right)\log\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]\right) \\ &= \exp(-Ns(m)) \end{aligned}$$

Έτσι όταν ανεβαίνει στον αριθμητή έχουμε το  $\exp(Ns(m))$  της (2.11).

3.  $\left[\left(\frac{1+m}{2}N\right)\left(\frac{1-m}{2}N\right)\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\left(\frac{1+m}{2}\right)\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}N.$

Έτσι προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{e^{\frac{1}{12n+1}}N^{-1/2}\exp(Ns(m))}{e^{1/\left[12\left(\frac{1-m}{2}N\right)\right]}e^{1/\left[12\left(\frac{1+m}{2}N\right)\right]}\sqrt{2\pi}\left[\left(\frac{1+m}{2}\right)\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}} &\leq \frac{N!}{\left[\frac{1+m}{2}N\right]!\left[\frac{1-m}{2}N\right]!} \\ &\leq \frac{e^{\frac{1}{12n+1}}\exp(Ns(m))}{e^{1/\left[12\left(\frac{1-m}{2}N\right)+1\right]}e^{1/\left[12\left(\frac{1+m}{2}N\right)+1\right]}\sqrt{2\pi}N\left[\left(\frac{1+m}{2}\right)\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

Για

$$\begin{aligned} c^- &= \frac{e^{\frac{1}{12N+1}}}{e^{1/\left[12\left(\frac{1-m}{2}N\right)\right]}e^{1/\left[12\left(\frac{1+m}{2}N\right)\right]}\sqrt{2\pi}\left[\left(\frac{1+m}{2}\right)\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}} \\ c^+ &= \frac{e^{\frac{1}{12N+1}}}{e^{1/\left[12\left(\frac{1-m}{2}N\right)+1\right]}e^{1/\left[12\left(\frac{1+m}{2}N\right)+1\right]}\sqrt{2\pi}N\left[\left(\frac{1+m}{2}\right)\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

έχουμε το επιθυμητό αποτέλεσμα. □

**Πρόταση Α'.2.2.** Χρησιμοποιώντας την (2.14) δείξτε ότι η πίεση μπορεί να πάρει την εξής μορφή:

$$\psi_\beta^{CW}(h) = -d\beta m_\beta^{CW}(h)^2 + \log \cosh(2d\beta m_\beta^{CW}(h) + h) + \log 2$$

Αποδείξτε επίσης ότι είναι αναλυτική στο διάστημα  $(-\infty, 0)$  και  $(0, +\infty)$ .

Απόδειξη. Αρχικά θυμόμαστε ότι η πίεση έχει την εξής μορφή στο μοντέλο *Curie Weiss*.

$$\psi_\beta^{CW}(h) = \max_{m \in [-1,1]} \{hm - f_\beta^{CW}(m)\}$$

όπου  $f_\beta^{CW}(m) = \beta e(m) - s(m)$  είναι η *free energy* με

$$e(m) = -dm^2$$

$$s(m) = -\frac{1-m}{2}\log\frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2}\log\frac{1+m}{2}$$

Άρα η πίεση έχει την εξής μορφή

$$\psi_{\beta}^{CW}(h) = \max_{m \in [-1,1]} \left\{ hm + \beta dm^2 - \frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2} \right\}$$

Όπως διατυπώσαμε και στο κεφάλαιο 2, συμβολίζουμε με  $m_{\beta}^{CW}(h)$  το σημείο στο οποίο η ποσότητα  $hm - f_{\beta}^{CW}(m)$  έχει *supremum*. Άρα η παραπάνω σχέση παίρνει την εξής μορφή:

$$\begin{aligned} \psi_{\beta}^{CW}(h) &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 - \frac{1-m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \log \frac{1-m_{\beta}^{CW}(h)}{2} - \frac{1+m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \log \frac{1+m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \\ &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 - \frac{1}{2} \left( \log \frac{1-m_{\beta}^{CW}(h)}{2} + \log \frac{1+m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \right) \\ &\quad + \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{1-m_{\beta}^{CW}(h)}{2} - \log \frac{1+m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \right) \\ &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 - \frac{1}{2} \left( \log \frac{(1-m_{\beta}^{CW}(h))(1+m_{\beta}^{CW}(h))}{4} \right) + \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{(1-m_{\beta}^{CW}(h))}{(1+m_{\beta}^{CW}(h))} \right) \\ &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 - \frac{1}{2} \left( \log \frac{1-(m_{\beta}^{CW}(h))^2}{4} \right) + \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{(1-m_{\beta}^{CW}(h))}{(1+m_{\beta}^{CW}(h))} \right) \\ &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 - \frac{1}{2} \left( \log(1-(m_{\beta}^{CW}(h))^2) - \log 2^2 \right) + \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{(1-m_{\beta}^{CW}(h))}{(1+m_{\beta}^{CW}(h))} \right) \\ &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 + \log 2 - \frac{1}{2} \left( \log(1-(m_{\beta}^{CW}(h))^2) \right) + \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{(1-m_{\beta}^{CW}(h))}{(1+m_{\beta}^{CW}(h))} \right) \end{aligned}$$

Θα αναλύσουμε τώρα μόνο τον παράγοντα  $1 - (m_{\beta}^{CW}(h))^2$  μέσα στην παράσταση  $-\frac{1}{2} \left( \log(1 - (m_{\beta}^{CW}(h))^2) \right)$ . Υπενθυμίζουμε ότι  $m_{\beta}^{CW}(h) = \tanh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)$ . Άρα

$$\begin{aligned} 1 - (m_{\beta}^{CW}(h))^2 &= 1 - (\tanh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h))^2 \\ &= \operatorname{sech}^2(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h) \\ &= \frac{1}{\cosh^2(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)} \end{aligned}$$

Έτσι προκύπτει:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \left( \log(1 - (m_{\beta}^{CW}(h))^2) \right) &= +\frac{1}{2} \log \left( \cosh^2(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h) \right) \\ &= \log \left( \cosh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h) \right) \end{aligned}$$

Επιστρέφοντας στην αρχική μας ταυτότητα:

$$\psi_{\beta}^{CW}(h) = hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 + \log 2 + \log(\cosh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)) + \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{(1 - m_{\beta}^{CW}(h))}{(1 + m_{\beta}^{CW}(h))} \right)$$

Με την ίδια λογική θα αναλύσουμε τώρα μόνο τον παράγοντα  $\frac{(1 - m_{\beta}^{CW}(h))}{(1 + m_{\beta}^{CW}(h))}$ .

$$\frac{(1 - m_{\beta}^{CW}(h))}{(1 + m_{\beta}^{CW}(h))} = \frac{1 - \tanh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)}{1 + \tanh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)}$$

Ορίζουμε  $C = 2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h$  και έχουμε:

$$\begin{aligned} 1 - \tanh(C) &= 1 - \frac{\sinh(C)}{\cosh(C)} = \frac{\cosh(C) - \sinh(C)}{\cosh(C)} \\ 1 + \tanh(C) &= 1 + \frac{\sinh(C)}{\cosh(C)} = \frac{\cosh(C) + \sinh(C)}{\cosh(C)} \end{aligned}$$

Διαιρώντας τις παραπάνω σχέσεις κατά μέλη έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{1 - \tanh(C)}{1 + \tanh(C)} &= \frac{\cosh(C) - \sinh(C)}{\cosh(C) + \sinh(C)} \\ &= \frac{\frac{e^C + e^{-C}}{2} - \frac{e^C - e^{-C}}{2}}{\frac{e^C + e^{-C}}{2} + \frac{e^C - e^{-C}}{2}} \\ &= \frac{\frac{2e^{-C}}{2}}{\frac{2e^C}{2}} \\ &= e^{-2C} = e^{-2(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)} \end{aligned}$$

Άρα

$$\begin{aligned} \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \left( \log \frac{(1 - m_{\beta}^{CW}(h))}{(1 + m_{\beta}^{CW}(h))} \right) &= \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \log e^{-2(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)} \\ &= \frac{m_{\beta}^{CW}(h)}{2} \{ -2(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h) \} \\ &= -2d\beta m_{\beta}^{CW}(h)^2 - hm_{\beta}^{CW}(h) \end{aligned}$$

Επιστρέφοντας στην αρχική μας ταυτότητα:

$$\begin{aligned} \psi_{\beta}^{CW}(h) &= hm_{\beta}^{CW}(h) + \beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 + \log 2 + \log(\cosh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h)) - 2\beta dm_{\beta}^{CW}(h)^2 - hm_{\beta}^{CW}(h) \\ &= d\beta m_{\beta}^{CW}(h)^2 + \log \cosh(2d\beta m_{\beta}^{CW}(h) + h) + \log 2 \end{aligned}$$

Επειδή η  $h \mapsto m_{\beta}^{CW}(h)$  είναι αναλυτική στο  $(-\infty, 0)$  και  $(0, \infty)$  τότε η  $\psi_{\beta}^{CW}(h)$  είναι αναλυτική ως σύνθεση και πρόσθεση αναλυτικών συναρτήσεων. □

**Πρόταση Α'.2.3.** Αποδείξτε ότι όλοι οι μετασχηματισμοί *Lagrange* είναι κυρτοί.

Απόδειξη. Απο τον ορισμό του μετασχηματισμού *Lagrange* έχουμε για  $f : I \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$

$$f^*(y) = \sup_{x \in I} \{yx - f(x)\}, \quad y \in \mathbb{R}.$$

Έστω  $y_1, y_2 \in \mathbb{R}$  και  $a \in (0, 1)$ . Τότε έχουμε:

$$\begin{aligned} f^*(ay_1 + (1-a)y_2) &= \sup_{x \in I} \{ (ay_1 + (1-a)y_2)x - f(x) \} \\ &= \sup_{x \in I} \{ (ay_1 + (1-a)y_2)x - (a + (1-a))f(x) \} \\ &= \sup_{x \in I} \{ a(y_1x - f(x)) + (1-a)(y_2x - f(x)) \} \\ &\leq \sup_{x \in I} \{ a(y_1x - f(x)) \} + \sup_{x \in I} \{ (1-a)(y_2x - f(x)) \} \\ &= a \sup_{x \in I} \{ (y_1x - f(x)) \} + (1-a) \sup_{x \in I} \{ (y_2x - f(x)) \} \\ &= af^*(y_1) + (1-a)f^*(y_2). \end{aligned}$$

□

**Πρόταση Α'.2.4.** Απόδειξη της σχέσης (2.12)  $\implies \tanh(2d\beta m) = m$

Απόδειξη. Θυμόμαστε ότι θέλουμε να βρούμε τα σημεία μηδενισμού της  $\mathcal{I}_\beta^{CW}$  μέσω της παραγώγου

$$\frac{\partial \mathcal{I}_\beta^{CW}}{\partial m} = 0 \implies (f_\beta^{CW}(m))' = 0$$

όπου  $f_\beta^{CW}(m) = \beta e(m) - s(m)$  με

$$e(m) = -dm^2$$

$$s(m) = -\frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2}.$$

$$(f_\beta^{CW}(m))' = \beta e'(m) - s'(m)$$

$$= -2\beta dm - \left[ \left( -\left(\frac{1-m}{2}\right)' \log \frac{1-m}{2} - \left(\frac{1-m}{2}\right) (\log \frac{1-m}{2})' \right) + \left( -\left(\frac{1+m}{2}\right)' \log \frac{1+m}{2} - \left(\frac{1+m}{2}\right) (\log \frac{1+m}{2})' \right) \right]$$

$$= -2\beta dm - \left[ \frac{1}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1-m}{2} \left( \frac{-\frac{1}{2}}{\frac{1-m}{2}} \right) - \frac{1}{2} \log \frac{1+m}{2} - \frac{1+m}{2} \left( \frac{\frac{1}{2}}{\frac{1+m}{2}} \right) \right]$$

$$= -2\beta dm - \left[ \frac{1}{2} \log \frac{1-m}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log \frac{1+m}{2} - \frac{1}{2} \right]$$

$$= -2\beta dm - \left[ \frac{1}{2} \log \frac{1-m}{2} - \frac{1}{2} \log \frac{1+m}{2} \right]$$

$$= -2\beta dm - \left[ \frac{1}{2} \log \frac{1+m}{1-m} \right]$$

$$(f_\beta^{CW}(m))' = 0 \implies -2\beta dm = \frac{1}{2} \log \left( \frac{1-m}{1+m} \right)$$

$$\begin{aligned}
&\implies e^{2(2\beta dm)} = \frac{1+m}{1-m} \\
&\implies e^{2(2\beta dm)} - e^{2(2\beta dm)}m = 1+m \\
&\implies e^{2(2\beta dm)} - 1 = e^{2(2\beta dm)}m + m \\
&\implies \frac{e^{2(2\beta dm)} - 1}{e^{2(2\beta dm)} + 1} = m \\
&\implies \frac{e^{(2\beta dm)} - \frac{1}{e^{(2\beta dm)}}}{e^{(2\beta dm)} + \frac{1}{e^{(2\beta dm)}}} = m \\
&\implies \frac{e^{(2\beta dm)} - e^{-(2\beta dm)}}{e^{(2\beta dm)} + e^{-(2\beta dm)}} = m
\end{aligned}$$

Θυμόμαστε ότι  $\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ , άρα προκύπτει:

$$\tanh(2d\beta m) = m.$$

□

### Α'.3 Κεφάλαιο 3

**Πρόταση Α'.3.1.** Απόδειξη ότι η  $B(n) \uparrow \mathbb{Z}^d$  με την έννοια του **Van Hove**.

Απόδειξη. Αρχικά παρατηρούμε ότι το  $B(n) = \{-n, \dots, n\}^d$  ικανοποιεί τα κριτήρια των ακολουθιών που απαιτούμε για την σύγκλιση  $\mathbb{Z}^d$ , δηλαδή

- $B(n)$  αύξουσα
- $\cup_{n \geq 1} B(n) = \mathbb{Z}^d$ .

Παρατηρούμε ότι  $|B(n)| = (2n+1)^d$  και  $|\partial^{in} B(n)| = |B(n) \setminus B(n-1)| = (2n+1)^d - (2n-1)^d$ , άρα

$$\begin{aligned} \frac{|\partial^{in} B(n)|}{|B(n)|} &= \frac{(2n+1)^d - (2n-1)^d}{(2n+1)^d} \\ &= \frac{(2n+1)^d}{(2n+1)^d} - \frac{(2n-1)^d}{(2n+1)^d} \\ &= 1 - \left(\frac{2n-1}{2n+1}\right)^d \\ &= 1 - \left(\frac{n(2 - \frac{1}{n})}{n(2 + \frac{1}{n})}\right)^d \\ &= 1 - \left(\frac{(2 - \frac{1}{n})}{(2 + \frac{1}{n})}\right)^d \end{aligned}$$

Με βάση τον ορισμό της σύγκλισης με την έννοια του **Van Hove** έχουμε:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\partial^{in} B(n)|}{|B(n)|} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \left(\frac{(2 - \frac{1}{n})}{(2 + \frac{1}{n})}\right)^d\right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} 1 - \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\left(\frac{(2 - \frac{1}{n})}{(2 + \frac{1}{n})}\right)^d\right) \\ &= 1 - \left(\frac{2}{2}\right)^d \\ &= 1 - (1)^d \\ &= 1 - 1 \\ &= 0 \end{aligned}$$

και έχουμε το επιθυμητό αποτέλεσμα. □

**Πρόταση Α'.3.2.** Δείξτε ότι αν  $(f_n)_{n \geq 1}$  είναι μία ακολουθία κυρτών συναρτήσεων από  $\mathcal{I} = (a, b)$  (ένα ανοιχτό σύνολο του  $\mathbb{R}$ ) στο  $\mathbb{R}$  τότε:

1.  $x \mapsto \limsup_{n \rightarrow \infty} f_n(x)$  είναι κυρτό.

2. Αν το όριο  $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x)$  υπάρχει στο  $\mathbb{R} \cup \{\infty\} \forall x \in \mathcal{I}$ , τότε  $f(x)$  είναι κυρτό.

Απόδειξη. 1. Αφού  $f_n$  κυρτή  $\forall n \geq 1$  έχουμε για  $x_1, x_2 \in \mathcal{I}$  και  $a \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} f_n(ax_1 + (1-a)x_2) &\leq af_n(x_1) + (1-a)f_n(x_2) \\ \sup_n \left( f_n(ax_1 + (1-a)x_2) \right) &\leq \sup_n \left( af_n(x_1) + (1-a)f_n(x_2) \right) \\ &\leq \sup_n \left( af_n(x_1) \right) + \sup_n \left( (1-a)f_n(x_2) \right) \\ &\leq a \sup_n \left( f_n(x_1) \right) + (1-a) \sup_n \left( f_n(x_2) \right) \end{aligned}$$

Άρα έχουμε με χρήση ιδιοτήτων  $\sup$

$$\begin{aligned} \limsup_{n \rightarrow \infty} \left( f_n(ax_1 + (1-a)x_2) \right) &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \left( a \sup_n \left( f_n(x_1) \right) + (1-a) \sup_n \left( f_n(x_2) \right) \right) \\ &= \limsup_{n \rightarrow \infty} \left( af_n(x_1) \right) + \limsup_{n \rightarrow \infty} \left( (1-a)f_n(x_2) \right) \\ &= a \limsup_{n \rightarrow \infty} f_n(x_1) + (1-a) \limsup_{n \rightarrow \infty} f_n(x_2). \end{aligned}$$

2. Έστω  $x_1, x_2 \in \mathcal{I}$  και  $a \in [0, 1]$ . Τότε

$$\begin{aligned} f(ax_1 + (1-a)x_2) &= \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(ax_1 + (1-a)x_2) \\ &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} (af_n(x_1) + (1-a)f_n(x_2)) \end{aligned}$$

Επειδή το όριο υπάρχει  $\forall x \in \mathcal{I}$  και  $a$  σταθερά, από γνωστή ιδιότητα ορίων

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} (af_n(x_1) + (1-a)f_n(x_2)) &= a \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x_1) + (1-a) \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x_2) \\ &= af(x_1) + (1-a)f(x_2). \end{aligned}$$

Άρα έχουμε το επιθυμητό αποτέλεσμα. □

**Πρόταση Α'.3.3.** Για την ποσότητα  $M_\Lambda$  δείξτε ότι η *cumulant generating function* μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\log \langle e^{tM_\Lambda} \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\# = |\Lambda| \left( \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t) - \psi_\Lambda^\#(\beta, h) \right).$$

Επίσης δείξτε ότι η *rth cumulant* της  $M_\Lambda$  είναι

$$c_r(M_\Lambda) = |\Lambda| \frac{\partial^r \psi_\Lambda^\#}{\partial h^r}(\beta, h).$$



Απόδειξη. Αρχικά υπενθυμίζουμε ότι  $M_\Lambda = \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$ . Προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned}
C_{M_\Lambda}(t) &= \log \langle e^{tM_\Lambda} \rangle_{\Lambda; \beta, h}^\# \\
&= \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} e^{tM_\Lambda} \mu_{\Lambda; \beta, h}^\#(\omega) \\
&= \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} e^{tM_\Lambda} \frac{1}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\#} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}^\#(\omega)} \\
&= \log \frac{\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}^\#(\omega) + tM_\Lambda}}{\mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\#} \\
&= \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} e^{-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h}^\#(\omega) + tM_\Lambda} - \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\# \\
&= |\Lambda| \left( \frac{1}{|\Lambda|} \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} \exp(\beta \sum \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) + h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i(\omega) + t \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i(\omega)) - \frac{\log \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\#}{|\Lambda|} \right) \\
&= |\Lambda| \left( \frac{1}{|\Lambda|} \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda; \beta, h+t}^\#(\omega)) - \frac{\log \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\#}{|\Lambda|} \right)
\end{aligned}$$

Επειδή  $\psi_\Lambda^\#(\beta, h) = \frac{1}{|\Lambda|} \log \mathbf{Z}_{\Lambda; \beta, h}^\#$  προκύπτει

$$|\Lambda| \left( \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t) - \psi_\Lambda^\#(\beta, h) \right)$$

Για την απόδειξη της **rth cumulant** της  $M_\Lambda$  θα δείξουμε την περίπτωση  $r = 1, 2$  και για μεγαλύτερες τιμές η απόδειξη είναι ανάλογη. Έχουμε

$$c_r(M_\Lambda) = \frac{d^r}{dt^r} C_{M_\Lambda}(t) \Big|_{t=0}$$

- Για  $r = 1$  έχουμε:

$$\begin{aligned}
c_1(M_\Lambda) &= \frac{d}{dt} C_{M_\Lambda}(t) \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{d}{dt} \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t) - 0 \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{\partial \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{\partial(h+t)} \frac{d(h+t)}{dt} - 0 \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{\partial \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{\partial(h+t)} \cdot 1 \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{\partial \psi_\Lambda^\#(\beta, h)}{\partial h}
\end{aligned}$$

- Για  $r = 2$  έχουμε:

$$\begin{aligned}
c_2(M_\Lambda) &= \frac{d^2}{dt^2} C_{M_\Lambda}(t) \Big|_{t=0} \\
&= \frac{d}{dt} \left( \frac{d}{dt} C_{M_\Lambda}(t) \right) \Big|_{t=0} \\
&= \frac{d}{dt} \left( |\Lambda| \frac{d}{dt} \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t) \right) \Big|_{t=0} \\
&= \frac{d}{dt} \left( |\Lambda| \frac{\partial \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{\partial(h+t)} \frac{d(h+t)}{dt} \right) \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{\partial(h+t)} \right) \frac{d(h+t)}{dt} + |\Lambda| \frac{\partial \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{\partial(h+t)} \frac{d}{dt} \left( \frac{d(h+t)}{dt} \right) \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{\partial}{\partial(h+t)} \left( \frac{d \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{dt} \right) \frac{d(h+t)}{dt} + 0 \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{\partial^2 \psi_\Lambda^\#(\beta, h+t)}{\partial(h+t)^2} \left( \frac{d(h+t)}{dt} \right)^2 + 0 + 0 \Big|_{t=0} \\
&= |\Lambda| \frac{\partial^2 \psi_\Lambda^\#(\beta, h)}{\partial h^2}.
\end{aligned}$$

□

**Πρόταση Α'.3.4.** Για την (3.9) (πίεση στο μονοδιάστατο μοντέλο Ising) υπολογίστε την  $m(\beta, h)$ . Δείξτε επίσης ότι:

$$\begin{aligned}
\lim_{h \rightarrow \pm\infty} m(\beta, h) &= \pm 1, \quad \forall \beta \geq 0 \\
\lim_{\beta \rightarrow \infty} m(\beta, h) &= \begin{cases} +1 & \text{για } h > 0, \\ 0 & \text{για } h = 0, \\ -1 & \text{για } h < 0. \end{cases}
\end{aligned}$$

Απόδειξη. Έχουμε ότι

$$\psi(\beta, h) = \log \left\{ e^\beta \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\}$$

και

$$m(\beta, h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h), \quad \forall h \in \mathbb{R}.$$

Άρα

$$\begin{aligned}
m(\beta, h) &= \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h) \\
&= \frac{e^\beta \sinh(h) + \frac{2 \cosh(h) \sinh(h) e^{2\beta}}{2\sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}}}{\left\{ e^\beta \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\}} \\
&= \frac{\left( e^\beta \sinh(h) \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} + \cosh(h) \sinh(h) e^{2\beta} \right) / \left( \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right)}{\left\{ e^\beta \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\}} \\
&= \frac{\left( e^\beta \sinh(h) \left( \cosh(h) e^\beta + \sqrt{e^\beta \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right) \right) / \left( \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right)}{\left\{ e^\beta \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\}} \\
&= \frac{e^\beta \sinh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}}
\end{aligned}$$

Για το όριο  $\lim_{h \rightarrow \pm\infty} m(\beta, h)$  έχουμε

$$\begin{aligned}
\lim_{h \rightarrow \pm\infty} m(\beta, h) &= \lim_{h \rightarrow \pm\infty} \frac{e^\beta \sinh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}} \\
&= e^\beta \lim_{h \rightarrow \pm\infty} \frac{\sinh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}} \\
&= e^\beta \lim_{h \rightarrow \pm\infty} \frac{\tanh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} - 2 \sinh(2\beta) \operatorname{sech}^2(h)}} \\
&= e^\beta \frac{\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \tanh(h)}{\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \sqrt{e^{2\beta} - 2 \sinh(2\beta) \operatorname{sech}^2(h)}} \\
&= e^\beta \frac{\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \tanh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} - 2 \sinh(2\beta) \lim_{h \rightarrow \pm\infty} \operatorname{sech}^2(h)}}
\end{aligned}$$

Γνωρίζουμε ότι  $\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \tanh(h) = \pm 1$  και  $\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \operatorname{sech}^2(h) = 0$ . Άρα έχουμε,

$$\lim_{h \rightarrow \pm\infty} m(\beta, h) = e^\beta \frac{\lim_{h \rightarrow \pm\infty} \tanh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} - 2 \sinh(2\beta) \lim_{h \rightarrow \pm\infty} \operatorname{sech}^2(h)}} = \pm \frac{e^\beta}{e^\beta} = \pm 1$$

Για το όριο  $\lim_{\beta \rightarrow \infty} m(\beta, h)$  έχουμε

- για  $h = 0$  επειδή  $\sinh(0) = 0$  είναι προφανές ότι  $\lim_{\beta \rightarrow \infty} m(\beta, 0) = 0$

- Αρχικά παρατηρούμε ότι

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} m(\beta, h) = \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - \frac{2\sinh(2\beta)}{e^{2\beta}}}}$$

και ότι

$$\frac{\sinh 2\beta}{e^{2\beta}} = \frac{\frac{e^{2\beta} - e^{-2\beta}}{2}}{e^{2\beta}} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2e^{4\beta}}$$

Έτσι προκύπτει ότι

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} m(\beta, h) = \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2e^{4\beta}}\right)}} = \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 1}} = \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h)}} = \frac{\sinh(h)}{|\sinh(h)|} = \pm 1$$

ανάλογα με το αν  $h > 0, h < 0$ . Στην προτελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα  $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ .

□

**Πρόταση Α'.3.5.** Απόδειξη της σχέσης (3.18)

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, h}^+ \geq \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, h}^+ \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, h}^+$$

Απόδειξη. Έχουμε τη σχέση

$$\mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1, \sigma_j = 1) \geq \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1) \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_j = 1).$$

Αρχικά απο τη δεξιά σχέση της παραπάνω ανισότητας σε συνδυασμό με τη σχέση  $\mathbb{1}_{\{\sigma(i)=1\}} = \frac{1}{2}(\sigma_i + 1)$  προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1) \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_j = 1) &= \left( (\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1\}} = 1) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1\}} = 1) \right. \\ &\quad \left. + (\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1\}} = 0) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1\}} = 0) \right) \\ &\quad \cdot \left( (\mathbb{1}_{\{\sigma_j=1\}} = 1) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_j=1\}} = 1) \right. \\ &\quad \left. + (\mathbb{1}_{\{\sigma_j=1\}} = 0) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_j=1\}} = 0) \right) \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας ξανά τη σχέση  $\mathbb{1}_{\{\sigma_i=1\}} = \frac{1}{2}(\sigma_i + 1)$  έχουμε:

$$\begin{aligned} &= \left( (\{\sigma_i = 1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_i = 1\}) + (\{\sigma_i = -1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_i = -1\}) \right) \\ &\quad \cdot \left( (\{\sigma_j = 1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_j = 1\}) + (\{\sigma_j = -1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_j = -1\}) \right) \end{aligned}$$

Δηλαδή

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, h}^+ \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, h}^+$$

Για να αποδείξουμε την αριστερή πλευρά της ανισότητας, αρχικά παρατηρούμε ότι:

$$\begin{aligned}
\mathbb{1}_{\{\sigma_i \cap \sigma_j = 1\}} &= \mathbb{1}_{\{\sigma_i = 1\}} \cdot \mathbb{1}_{\{\sigma_j = 1\}} \\
&= \frac{1}{2}(\sigma_i + 1) \frac{1}{2}(\sigma_j + 1) \\
&= \frac{1}{4}(\sigma_i + 1)(\sigma_j + 1) \\
&= \frac{1}{4}(\sigma_i \sigma_j + \sigma_i + \sigma_j + 1)
\end{aligned}$$

Για  $\{\sigma_i = 1, \sigma_j = 1\} \implies \frac{1}{4}(\sigma_i \sigma_j + \sigma_i + \sigma_j + 1) = 1$  και για κάθε άλλη περίπτωση  $\frac{1}{4}(\sigma_i \sigma_j + \sigma_i + \sigma_j + 1) = 0$ . Έτσι προκύπτει

$$\begin{aligned}
\mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\sigma_i = 1, \sigma_j = 1) &= \left( (\mathbb{1}_{\{\sigma_i = 1, \sigma_j = 1\}} = 1) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_i = 1, \sigma_j = 1\}} = 1) \right. \\
&\quad \left. + (\mathbb{1}_{\{\sigma_i = 1, \sigma_j = 1\}} = 0) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\mathbb{1}_{\{\sigma_i = 1, \sigma_j = 1\}} = 0) \right) \\
&= \left( (\{\sigma_i \sigma_j = 1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_i = 1, \sigma_j = 1\}) + (\{\sigma_i \sigma_j = 1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_i = -1, \sigma_j = -1\}) \right. \\
&\quad \left. \cdot (\{\sigma_i \sigma_j = -1\}) \cdot \mu_{\Lambda, \beta, h}^+(\{\sigma_i = \pm 1, \sigma_j = \mp 1\}) \right)
\end{aligned}$$

Δηλαδή

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda, \mathbf{J}, h}^+$$

□

**Πρόταση Α'.3.6.** Θα αποδείξουμε τη **Χωρική ιδιότητα Markov**:  $\forall \Delta \subset \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  και για κάθε *configuraition*  $\eta \in \Omega$  και  $\omega' \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}$ ,

$$\mu_{\Lambda, \beta, h}^{\eta}(\cdot | \sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta) = \mu_{\Delta, \beta, h}^{\omega'}(\cdot)$$

*Απόδειξη.* Θα δείξουμε την ιδιότητα αυτή για την περίπτωση  $h = 0$ . Η περίπτωση για  $h \neq 0$  είναι ανάλογη.

$$\mu_{\Lambda, \beta, 0}^{\eta}(\cdot | \sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta) = \frac{\mu_{\Lambda, \beta, 0}^{\eta}(\cdot \cap \{\sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta\})}{\mu_{\Lambda, \beta, 0}^{\eta}(\{\sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta\})}$$

Γράφουμε  $\Lambda = \Delta \cup \{\Lambda \setminus \Delta\}$  και θα αναλύσουμε τον αριθμητή,

$$\begin{aligned}
\mu_{\Lambda, \beta, 0}^{\eta}(\cdot \cap \{\sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta\}) &= \frac{\exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \omega_i \omega_j\right)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}} \exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \omega_i \omega_j\right)} \\
&= \frac{\exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Delta}^b} \omega_i \omega_j\right) \exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda \setminus \Delta}^b} \omega_i \omega_j\right)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}} \exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \omega_i \omega_j\right) \exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda \setminus \Delta}^b} \omega_i \omega_j\right)} \\
&= \frac{\exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Delta}^b} \omega_i \omega_j\right)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Delta}^{\eta}} \exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Delta}^b} \omega_i \omega_j\right)} \cdot \frac{\exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda \setminus \Delta}^b} \omega_i \omega_j\right)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda \setminus \Delta}^{\eta}} \exp\left(-\beta \sum_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_{\Lambda \setminus \Delta}^b} \omega_i \omega_j\right)} \\
&= \mu_{\Delta, \beta, 0}^{\omega'}(\cdot) \mu_{\Lambda \setminus \Delta, \beta, 0}^{\eta}(\cdot)
\end{aligned}$$

Άρα

$$\begin{aligned}
\mu_{\Lambda;\beta,0}^{\eta}(\cdot | \sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta) &= \frac{\mu_{\Lambda;\beta,0}^{\eta}(\cdot \cap \{\sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta\})}{\mu_{\Lambda;\beta,0}^{\eta}(\{\sigma_i = \omega'_i, \forall i \in \Lambda \setminus \Delta\})} \\
&= \frac{\mu_{\Delta;\beta,0}^{\omega'}(\cdot) \cdot \mu_{\Lambda \setminus \Delta;\beta,0}^{\eta}(\cdot)}{\mu_{\Lambda \setminus \Delta;\beta,0}^{\eta}(\cdot)} \\
&= \mu_{\Delta;\beta,h}^{\omega'}(\cdot)
\end{aligned}$$

□

**Πρόταση Α'.3.7.** Θα αποδείξουμε ότι οι συναρτήσεις  $n_A, n_j, \sum_{i \in A} n_i - n_A$  είναι αύξουσες συναρτήσεις για κάθε  $i \in \mathbb{Z}^d, A \subset \mathbb{Z}^d$ .

Απόδειξη. Έστω  $\omega, \omega' \in \Omega_A$  τέτοιο ώστε να υπάρχει  $i \in \mathbb{Z}^d$  με την εξής ιδιότητα:

$$\omega_i = 1 \quad \omega'_i = -1 \quad \text{και} \quad \omega_j = \omega'_j \quad \forall j \neq i$$

Υπενθυμίζουμε τη **μερική διάταξη** στο  $\Omega$ :  $\omega \leq \omega'$  αν και μόνο αν  $\omega_i \leq \omega'_i, \forall i \in \mathbb{Z}^d$ .

- Υπενθυμίζουμε ότι  $n_i = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i) = \frac{1}{2}(1 + \omega_i)$ . Για  $\omega_i = 1 \implies n_i = 1$  ενώ για  $\omega_i = -1 \implies n_i = 0$ . Άρα για την συνάρτηση  $n(\omega) = (n(\omega_i))_{i \in A}$  ισχύει  $\omega' \leq \omega \implies n(\omega') \leq n(\omega)$ .
- Με απλούς υπολογισμούς παρατηρούμε ότι  $n_A(\omega) = 1$  και  $n_A(\omega') = 0$ , δηλαδή  $\omega' \leq \omega \implies n_A(\omega') \leq n_A(\omega)$ .
- Αντίστοιχα για  $g(\omega) = \sum_{i \in A} n_i - n_A$  με απλούς υπολογισμούς προκύπτει ότι  $\omega' \leq \omega \implies g(\omega') \leq g(\omega)$ .

□

# Παράρτημα Β'

## Μαθηματικά εργαλεία και Ορισμοί

### Β'.1 Κεφάλαιο 1

**Θεώρημα Β'.1.** (Νόμος των Μεγάλων Αριθμών). Έστω  $(X_n)_{n \geq 1}$  μία ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών με μέση τιμή  $m$ . Τότε, η ακολουθία των δειγματικών μέσων τιμών  $M_n = (X_1 + \dots + X_n)/n$  συγκλίνει στο  $m$ , με πιθανότητα 1, υπό την έννοια ότι

$$P\left(\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{X_1 + \dots + X_n}{n} = m\right) = 1.$$

**Θεώρημα Β'.2.** (Κεντρικό Οριακό Θεώρημα). Έστω  $(X_n)_{n \geq 1}$  μια ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών με  $m \stackrel{\text{def}}{=} E[X_1] < \infty$  και  $\sigma^2 \stackrel{\text{def}}{=} \text{Var}(X_1) < \infty$ . Τότε για  $n \rightarrow \infty$ ,

$$\frac{(X_1 - m) + \dots + (X_n - m)}{\sigma\sqrt{n}} \rightarrow \mathcal{N}(0, 1) \text{ κατα κατανομή.}$$

Συγκεκριμένα,  $\forall a < b$ ,

$$P\left(a \leq \frac{(X_1 - m) + \dots + (X_n - m)}{\sigma\sqrt{n}} \leq b\right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{t^2}{2}} dt.$$

### Β'.2 Κεφάλαιο 2

**Ορισμός Β'.2.1.** Ένα απλό γράφημα ονομάζεται **πλήρες**, εάν κάθε ζεύγος κορυφών του συνδέεται με μία ακμή. Ένα πλήρες γράφημα έχει  $n$  **κορυφές** και  $\frac{n(n-1)}{2}$  **ακμές** και συμβολίζεται με  $K_n$ .

### Β'.3 Κεφάλαιο 3

**Ορισμός Β'.3.1.** (Ανισότητα Hölder)

Αν  $p, q$  είναι συζυγείς εκθέτες (δηλαδή  $p > 1$  και  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ ) και  $a_1, \dots, a_k, b_1, \dots, b_k$  είναι  $2k$  πραγματικοί αριθμοί τότε

$$\sum_{i=1}^k |a_i b_i| \leq \left(\sum_{i=1}^k |a_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^k |b_i|^q\right)^{\frac{1}{q}}$$

Στην ειδική περίπτωση που  $p = q = 2$  έχουμε την ανισότητα *Cauchy – Swartz*.

**Ορισμός Β'.3.2. (Ανισότητα Chernov)**

Η ανισότητα *Chernov* για μία τυχαία μεταβλητή  $X$  και για όλα τα  $\lambda > 0$  είναι:

$$P(X \geq \lambda) \leq \inf_{t>0} \frac{E[e^{tX}]}{e^{t\lambda}}$$

**Θεώρημα Β'.3.** Έστω κυρτή συνάρτηση  $f : \mathcal{I} \rightarrow \mathbb{R}$ . Τότε ισχύουν οι εξής ιδιότητες.

1.  $\partial^+ f$  και  $\partial^- f$  υπάρχουν για όλα τα  $x \in \mathcal{I}$ .
2.  $\partial^- f(x) \leq \partial^+ f(x)$ , για όλα τα  $x \in \mathcal{I}$ .
3.  $\partial^+ f(x) \leq \partial^- f(y)$ , για όλα τα  $x, y \in \mathcal{I} : x < y$ .
4.  $\partial^+ f$  και  $\partial^- f$  είναι αύξουσες.
5.  $\partial^+ f$  είναι δεξιά συνεχής και  $\partial^- f$  είναι αριστερά συνεχής.
6.  $\{x : \partial^+ f(x) \neq \partial^- f(x)\}$  είναι το πολύ αριθμήσιμο.
7. Έστω  $(g_n)_{n \geq 1}$  μία ακολουθία κυρτών συναρτήσεων από το  $\mathcal{I}$  στο  $\mathbb{R}$  η οποία συγκλίνει σημειακά σε μία συνάρτηση  $g$ . Αν η  $g$  είναι διαφορίσιμη στο  $x$ , τότε ισχύει  $\lim_{n \rightarrow \infty} \partial^+ g_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \partial^- g_n(x) = g'(x)$ .

**Θεώρημα Β'.4. (Implicit function theorem).** Έστω  $(\omega, z) \mapsto F(\omega, z)$  μία αναλυτική συνάρτηση σε ένα ανοιχτό χωρίο  $U \times V \subset \mathbb{C}^2$ . Έστω  $(\omega_0, z_0) \in U \times V$  τέτοιο ώστε  $F(\omega_0, z_0) = 0$  και  $\frac{\partial F}{\partial z}(\omega_0, z_0) \neq 0$ . Τότε υπάρχει ένα ανοιχτό υποσύνολο  $U_0 \subset U$  που περιέχει το  $\omega_0$  και μία αναλυτική απεικόνιση  $\phi : U_0 \rightarrow V$  τέτοια ώστε

$$F(\omega, \phi(\omega)) = 0 \quad \forall \omega \in U_0.$$

**Λήμμα Β'.1.** Έστω μία αύξουσα διπλή ακολουθία  $(a_{m,n})_{m,n \geq 1}$ , η οποία είναι φραγμένη από πάνω. Τότε ισχύει,

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} a_{m,n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{m \rightarrow \infty} a_{m,n} = \lim_{m,n \rightarrow \infty} a_{m,n} = \sup\{a_{m,n} : m, n \geq 1\}.$$

**Ορισμός Β'.3.3. (connected graph)** Ένα γράφημα ονομάζεται *connected* όταν υπάρχει μία διαδρομή από κάθε σημείο σε οποιαδήποτε άλλο σημείο.

**Ορισμός Β'.3.4.** Έστω  $D \subset \mathbb{C}$  ένα χωρίο (ανοιχτό και συνεκτικό). Μία συνάρτηση  $f : D \rightarrow \mathbb{C}$  ονομάζεται *holomorphic* εάν

$$f'(z) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{w \rightarrow z} \frac{f(w) - f(z)}{w - z}$$

υπάρχει και είναι πεπερασμένη για κάθε  $z \in D$ . Είναι γνωστό ότι οι *holomorphic* συναρτήσεις έχουν παραγώγους κάθε τάξης και η  $f$  είναι *holomorphic* αν και μόνο αν είναι *αναλυτική* δηλαδή εάν μπορεί να εκφραστεί σε κάθε σημείο  $z_0 \in D$  ως συγκλίνουσα σειρά *Taylor*:

$$f(z) = \sum_{n \geq 0} a_n (z - z_0)^n,$$

όπου  $a_n = \frac{1}{n!} f^{(n)}(z_0)$ . Θα θεωρούμε ότι *holomorphic* και αναλυτικότητα είναι συνώνυμες έννοιες σε αυτήν την εργασία.



**Θεώρημα Β'.5.** Έστω  $f$  μία *holomorphic* συνάρτηση σε ένα απλό συνεκτικό ανοιχτό σύνολο  $D \subset \mathbb{C}$  που δεν μηδενίζεται στο  $D$ . Τότε, υπάρχει συνάρτηση  $g$  αναλυτική στο  $D$ , η οποία καλείται *branch of the logarithm of  $f$  on  $D$* , τέτοια ώστε  $f = e^g$ .

**Παρατήρηση Β'.1.** 1. Έστω  $\gamma$  *branch of the logarithm of  $f$  on  $D$* . Τότε  $\Re g = \log|f|$ . Όντως,

$$|f| = |e^g| = |e^{\Re g} e^{i\Im g}| = e^{\Re g}.$$

2. Έστω  $g_1$  και  $g_2$  *two branches of the logarithm of  $f$  on  $D$* . Επειδή  $\forall z \in D$

$$e^{g_1 - g_2} = \frac{e^{g_2(z)}}{e^{g_1(z)}} = \frac{f(z)}{f(z)} = 1,$$

συμπεραίνουμε ότι  $g_2(z) = g_1(z) + 2ik(z)\pi$  για κάποιο  $k(z) \in \mathbb{Z}$ . Επειδή η απεικόνιση  $z \mapsto k(z) = (g_2(z) - g_1(z))/2i\pi$  είναι συνεχής, προκύπτει ότι είναι σταθερά στο  $D$ . Από αυτό προκύπτει ότι  $g_2 = g_1 + 2ik\pi$  για  $k \in \mathbb{Z}$ .

3. Υποθέτουμε ότι το χωρίο  $D$  του προηγούμενου θεωρήματος είναι τέτοιο ώστε το  $D \cup \mathbb{R}$  να είναι συνεκτικό. Υποθέτουμε ότι  $f(z) \in \mathbb{R}_{>0}$  για  $z \in D \cup \mathbb{R}$ . Τότε υπάρχει *branch of the logarithm of  $f$  on  $D$*   $g$  τέτοιο ώστε  $g(z) \in \mathbb{R}$  για  $z \in D \cup \mathbb{R}$  και συγκεκριμένα ισχύει ότι η  $g$  ταυτίζεται με τον συνήθη λογάριθμο στο  $D \cup \mathbb{R}$ .

**Ορισμός Β'.3.5.** Έχουμε τους εξής ορισμούς:

- **Κλειστή καμπύλη** (*closed curve*) λέγεται μία καμπύλη της οποίας η αρχή και το πέρας ταυτίζονται.
- **Απλή κλειστή καμπύλη** (*simple closed curve*) λέγεται μία κλειστή καμπύλη η οποία δεν έχει σημεία τομής με τον εαυτό της.

**Ορισμός Β'.3.6.** **Απλά συνεκτικός** (*simply connected*) **τόπος** ονομάζεται ένας ανοικτός ή κλειστός τόπος  $D$  του  $\mathbb{R}^n$  που έχει την εξής ιδιότητα: οποιαδήποτε απλή κλειστή (*simple closed curve*)  $c$ , που περιέχεται στον τόπο  $D$  να μπορεί να συσταλεί συνεχώς (*continuously contracted*) μέχρι να καταλήξει σε ένα σημείο χωρίς να βγαίνει έξω από τον τόπο. Σε κάθε άλλη περίπτωση ο τόπος  $D$  ονομάζεται **πολλαπλά συνεκτικός** (*multiply connected*).

**Ορισμός Β'.3.7.** Μία οικογένεια  $\mathcal{A}$  συναρτήσεων στο  $\mathbb{C}$  είναι **ομοιόμοφα φραγμένη τοπικά** σε ένα σύνολο  $D \subset \mathbb{C}$  αν,  $\forall z \in D$  υπάρχει πραγματικός αριθμός  $M$  και μία περιοχή  $\mathcal{U}(z)$  τέτοια ώστε  $|f(w)| \leq M$  για όλα  $w \in \mathcal{U}(z)$  και  $f \in \mathcal{A}$ .

**Θεώρημα Β'.6.** (*Vitali Convergence Theorem*) Έστω  $D$  ένα ανοιχτό, συνεκτικό υποσύνολο του  $\mathbb{C}$  και  $(f_n)_{n \geq 1}$  μία ακολουθία από αναλυτικές συναρτήσεις στο  $D$ , οι οποίες είναι ομοιόμοφα φραγμένες (τοπικά) και συγκλίνουν σε ένα σύνολο που έχει σημείο συσσώρευσης στο  $D$ . Τότε η ακολουθία  $(f_n)_{n \geq 1}$  συγκλίνει ομοιόμοφα (τοπικά) στο  $D$  σε μία αναλυτική συνάρτηση.

**Θεώρημα Β'.7.** (*Hurwitz Theorem*) Έστω  $D$  ένα ανοιχτό υποσύνολο του  $\mathbb{C}$  και  $(f_n)_{n \geq 1}$  μία ακολουθία από αναλυτικές συναρτήσεις η οποία συγκλίνει ομοιόμοφα (τοπικά) στο  $D$  σε μία αναλυτική συνάρτηση  $f$ . Αν  $f_n(z) \neq 0$ , για όλα τα  $z \in D$  και για όλα τα  $n$ , τότε είτε η  $f$  εξαφανίζεται είτε η  $f$  δεν μηδενίζεται πουθενά στο  $D$ .

# Βιβλιογραφία

- [1] S. Friedli and Y.Velenik. *Statistical Mechanics of Lattice Systems: a Concrete Mathematical Introduction*. Cambridge University Press, 2017.
- [2] J. Willard Gibbs. *Elementary principles in statistical mechanics: developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*. Dover publications, Inc., New York, 1960. Original publication year: 1902.
- [3] C. E. Shannon. *A mathematical theory of communication*. Bell System Tech. J., 27:379–423, 623–656, 1948.
- [4] E. T. Jaynes. *Information theory and statistical mechanics*. Phys. Rev. (2), 106:620–630, 1957.
- [5] W. Lenz. *Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern*. Physikal. Z., 21:613–615, 1920.
- [6] R. E. Peierls. *On Ising’s ferromagnet model*. Proc. Camb. Phil. Soc., 32:477–481, 1936.
- [7] E. Ising. *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik, 31(1):253–258, 1925.
- [8] H. N. V. Temperley. *The Mayer theory of condensation tested against a simple model of the imperfect gas*. Proc. Phys. Soc., London, Sect. A, 67(3):233, 1954.
- [9] K. Husimi. *Statistical mechanics of condensation*. In H. Yukawa, editor, Proceedings of the International Conference of Theoretical Physics. Science Council of Japan, 1954.
- [10] M. Kac. *Mathematical mechanisms of phase transitions*. In M. Chretien, E. P. Gross, and S. Deser, editors, Statistical Physics: Phase Transitions and Superfluidity, volume 1. Gordon and Breach, 1968.
- [11] R. B. Griffiths. *Correlation in Ising ferromagnets I, II*. J. Math. Phys., 8:478–489, 1967.
- [12] D. G. Kelly and S. Sherman. *General Griffiths’s inequality on correlation in Ising ferromagnets*. J. Math. Phys., 9:466–484, 1968.
- [13] C. M. Fortuin, P. W. Kasteleyn, and J. Ginibre. *Correlation inequalities on some partially ordered sets*. Comm. Math. Phys., 22:89–103, 1971.

- [14] C. N. Yang and T. D. Lee. *Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of condensation.* Physical Rev. (2), 87:404–409, 1952.
- [15] T. D. Lee and C. N. Yang. *Statistical theory of equations of state and phase transitions. ii. lattice gas and Ising model.* Phys. Rev., 87(3):410–419, 1952.
- [16] T. Asano. *Theorems on the partition functions of the Heisenberg ferromagnets.* J. Phys. Soc. Japan, 29:350–359, 1970.
- [17] Μ. Λουλάκης. *Στοχαστικές Διαδικασίες* [Προπτυχιακό εγχειρίδιο]. Κάλλιπος, Ανοιχτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις, 2015.