Seminar zur angewandten Wahrscheinlichkeitstheorie: Das Ising-Modell (WS 20/21)

Notizen zum 1. Vortrag vom 17.11.2020 von Timo Schorlepp

Inhalt:

---

1. Motivation, Ziele des Vortrags

Wir wollen mit dem Ising-Modell auf möglichst einfache Weise im Rahmen der statistischen Physik das Verhalten eines Magneten in einem äußeren Magnetfeld modellieren, der (je nach Dimension) einen Phasenübergang aufweist, bei dem sich das Verhalten des System unterhalb einer kritischen Temperatur von paramagnetisch zu ferromagnetisch ändert.

Dazu betrachten wir in diesem Vortrag (zunächst) endliche, diskrete Gitter $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$ mit Spins $\sigma_i \in \{+1,-1\}$ an jedem Gitterpunkt, die also entweder nach „oben" oder „unten" zeigen sollen. Für die Ausrichtung der einzelnen Spins berücksichtigen wir zwei Effekte:

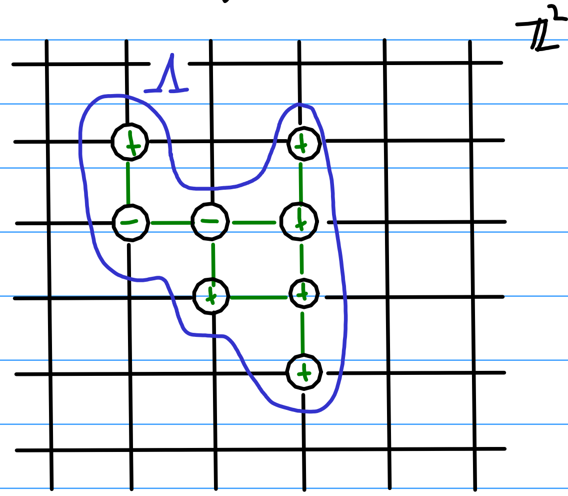
a) Wechselwirkung nächster Nachbarn, wobei parallele Ausrichtung energetisch günstiger sein möge.

b) Ausrichtung längs eines äußeren Feldes h

Maximierung der Entropie bei gegebener mittlerer Energie liefert als Verteilung auf der Menge der Konfigurationen $\{-1,+1\}^\Lambda$ das Gibbs-Maß $\mu^{\#}_{\Lambda,\beta,h}$

(genaue Def. folgt später, # steht für Randbedingung, β für die inverse Temperatur)

Skizze einer Konfiguration $\omega \in \{-1,+1\}^\Lambda$:



Frage für diesen Vortrag:

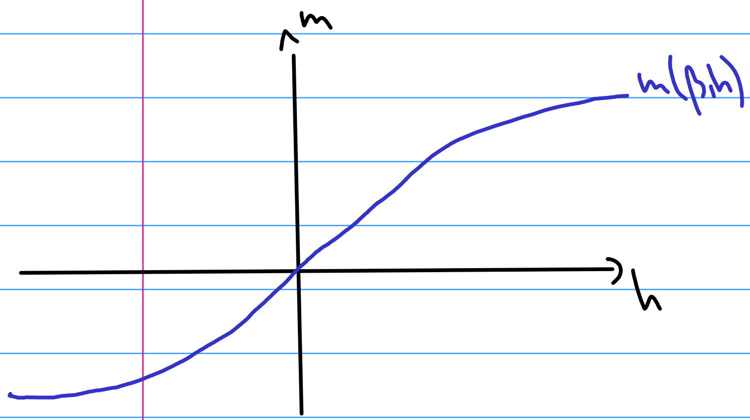
Existiert für Folgen $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ im Ising-Modell der Grenzwert

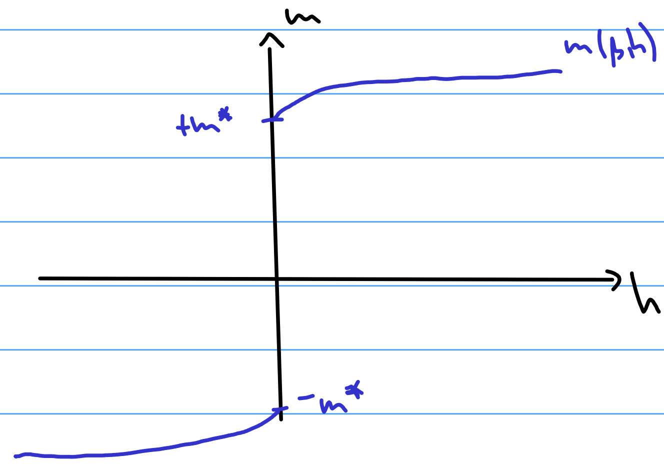
$$m(\beta,h) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \langle \sum_{i\in\Lambda_n} \sigma_i \rangle^{\#}_{\Lambda,\beta,h}$$

Erwartungswert bzgl. $\mu^{\#}_{\Lambda;\beta,h}$

der Magnetisierung(sdichte) für alle β und h, und hängt dieser von der gewählten Folge (Λ_n) und den Randbed. $\#$ ab?

Dieser Grenzwert $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ wird als thermodynamischer Grenzwert bezeichnet und ist sowohl physikalisch als auch mathematisch notwendig für das Auftreten von Phasenübergängen, die wir hier z.B. als Unstetigkeitsstellen der Magnetisierung bei Variation von h definieren:





Paramagnetisches Verhalten bei diesem β, die Magnetisierung $m(\beta,h)$ geht gegen 0 für äußeres Feld $h \to 0$

Ferromagnetisches Verhalten bei diesem β, d.h. $m(\beta,h) \not\to 0$ für $h \to 0$, $m(\beta,\cdot)$ unstetig bei $h=0$.

2. Def. Gibbs-Maß des Ising-Modells auf endlichen Volumina mit verschiedenen Randbedingungen [Abschnitt 3.1 in [1]]

2.1 Freie Randbedingungen

Sei $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$ eine endliche Teilmenge und $\Omega_\Lambda = \{-1,+1\}^\Lambda$ der Zustandsraum der möglichen Spinkonfigurationen.

$i,j \in \mathbb{Z}^d$ heißen nächste Nachbarn [Notation: $i \sim j$], falls $\sum_{k=1}^{d} |i_k - j_k| = 1$ [also hat $i \in \mathbb{Z}^d$ $2d$ nächste Nachbarn].

Wir identifizieren Λ stets mit dem Graphen, der Λ als Knotenmenge besitzt und Kanten $\mathcal{E}_\Lambda = \{\{i,j\} \subset \Lambda \mid i \sim j\}$ hat.

Wir definieren weiterhin für $i \in \Lambda$ $\sigma_i : \Omega_\Lambda \to \{-1,+1\}$, $\sigma_i(\omega) = \omega_i$ und setzen die Energie oder Hamiltonfunktion für $\beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$, $h \in \mathbb{R}$ als

$$\boxed{\begin{aligned} \mathcal{H}^{\phi}_{\Lambda;\beta,h} &: \Omega_\Lambda \to \mathbb{R} \\ \omega &\mapsto \mathcal{H}^{\phi}_{\Lambda;\beta,h}(\omega) = \underbrace{-\beta \cdot \sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda} \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega)}_{\text{Wechselwirkungsterm}} \underbrace{- h \cdot \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i(\omega)}_{\text{äußeres Feld}} \end{aligned}}$$

$\frac{1}{\text{Temperatur}}$

Stärke äußeres Magnetfeld

Bem.: • Dabei signalisiert ϕ die Randbed., die sich im Wechselwirkungsterm $\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda}$ widerspiegeln [s. später, dort wird für andere Randbed.

über weitere Kanten summiert]

- Man beachte, dass die Energie niedriger ist, wenn benachbarte Spins in die gleiche Richtung zeigen, und wenn $\sigma_i = \mathrm{sgn}(h)$, also Ausrichtung parallel zum äußeren Feld.
- Die Konvention ist außerdem anders als in der Physik, wo β nicht Teil der Hamiltonfkt. wäre oder alternativ der zweite Summand $-\beta h \sum_{i\in\Lambda} \sigma_i$ lauten würde [die Def. hier vereinfacht später die Rechnungen]

Def. 2.1: [Def. 3.1 in [1]] Das Gibbs-Maß auf Λ mit freien Randbedingungen und Parametern β, h ist die Verteilung auf Ω_Λ, die gegeben ist durch

$$\mu^{\emptyset}_{\Lambda;\beta,h}(\omega) = \frac{1}{Z^{\emptyset}_{\Lambda;\beta,h}} \exp(-\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta,h}(\omega)),$$

wobei die Normierungskonstante

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

Zustandssumme in Λ mit freien Randbedingungen heißt.

Bem.: • An dieser Stelle ist das einfach die Definition der Verteilung, mit der wir uns beschäftigen werden. Diese kann physikalisch durch das mikrokanonische und kanonische Ensemble, Entropiemaximierung oder einfach durch Übereinstimmung der daraus abgeleiteten Vorhersagen mit Experimenten motiviert werden.

• Wie wir später sehen werden, liefert uns das Verhalten der Zustandssumme bei Änderung der Parameter β und h wichtige Informationen, auch wenn Z hier zunächst nur als Normierungskonstante eingeführt wurde.

2.2 Periodische Randbedingungen

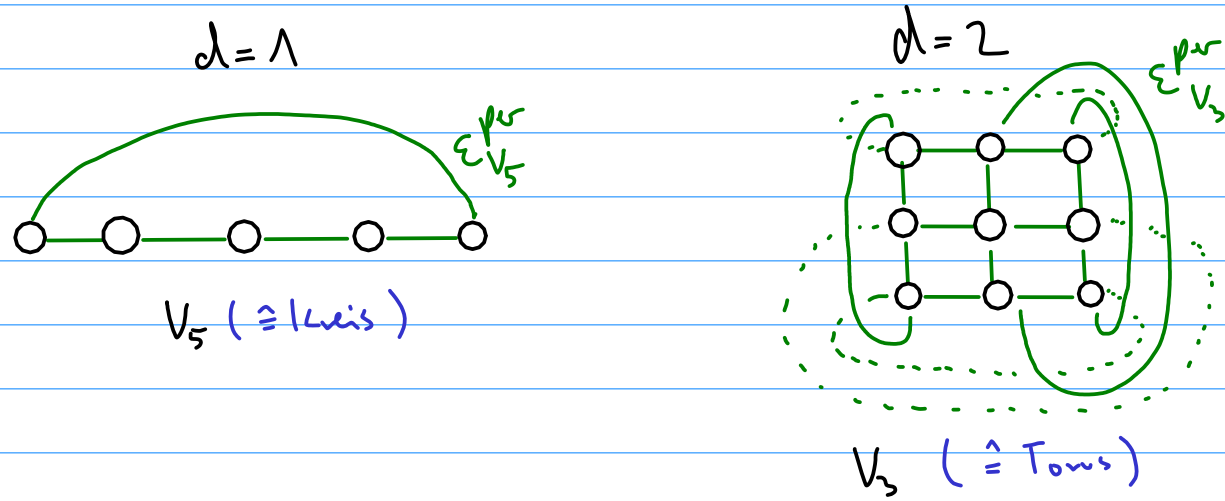
Sei $\Lambda = V_n = \{0, \dots, n-1\}^d \subseteq \mathbb{Z}^d$. Wir definieren die Kantenmenge auf V_n mit periodischen Randbedingungen als

$$\mathcal{E}^{per}_{V_n} = \left\{ \{i,j\} \subset V_n \;\middle|\; \sum_{k=1}^{d} \left| (i_k - j_k) \bmod n \right| = 1 \right\}, \text{ und}$$

 für den Zustandsraum $\Omega_{V_n} = \{-1,+1\}^{V_n}$ die

Hamilton-Funktion als $\mathcal{H}^{per}_{V_n;\beta,h}(\omega) = -\beta \sum_{\{i,j\}\in \mathcal{E}^{per}_{V_n}} \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega) - h\cdot\sum_{i\in V_n}\sigma_i(\omega)$. !

Skizzen der V_n:



Def. 2.2: Das Gibbs-Maß auf V_n mit periodischen Randbedingungen und Parametern [Def. 3.2 in [1]] β, h ist die Verteilung auf Ω_{V_n}, die gegeben ist durch

$$\mu^{per}_{\Lambda;\beta,h}(\omega) = \frac{1}{Z^{per}_{\Lambda;\beta,h}} \exp(-\mathcal{H}^{per}_{\Lambda;\beta,h}(\omega)),$$

wobei die Normierungskonstante

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

Zustandssumme in V_n mit periodischen Randbedingungen heißt.

Bem.: Der Unterschied zwischen $\mathcal{H}^{\emptyset}_{V_n;\beta,h}$ und $\mathcal{H}^{per}_{V_n;\beta,h}$ sind genau

die äußeren Kanten, die in letzterem Fall einmal „herumgewrapped" werden und somit $d \cdot n^{d-1}$ zusätzliche WW-Terme im Hamiltonian liefern.

2.3 Feste Randbedingungen

Sei $\Omega = \{-1,1\}^{\mathbb{Z}^d}$ und $\eta \in \Omega$ eine beliebige, feste Konfiguration. Sei wieder $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$ eine endliche Teilmenge. Wir betrachten als Zustandsraum

$$\Omega_\Lambda^\eta = \{\omega \in \Omega \mid \omega_i = \eta_i \; \forall i \notin \Lambda\}$$

[s.d. $|\Omega_\Lambda^\eta| = 2^{|\Lambda|} < \infty$] und nennen $\omega \in \Omega_\Lambda^\eta$ eine Konfiguration des Ising-Modells in Λ mit Randbed. η. Als Kantenmenge definieren wir

$$\mathcal{E}_\Lambda^b = \{\{i,j\} \subset \mathbb{Z}^d \mid \{i,j\} \cap \Lambda \neq \emptyset, i \sim j\}$$

[d.h. $\mathcal{E}_\Lambda^b$ enthält $\mathcal{E}_\Lambda$ sowie alle Kanten, die Punkte aus Λ mit nächsten Nachbarn außerhalb von Λ verbinden]

und damit

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

[auf Ω^η_Λ sind die Spins bei $i \notin \Lambda$ ja auf η fixiert und tragen über den WW-Term zu $\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,h}$ bei, falls i an Λ angrenzt. Die RB, die durch η gegeben sind, werden dabei in den Raum Ω^η_Λ statt explizit in $\mathcal{H}$ gepackt]

<u>Def. 2.3:</u> Das <u>Gibbs-Maß auf Λ mit Randbedingung η</u> und Parametern [Def. 3.3 in [1]]

β, h ist die Verteilung auf Ω^η_Λ, die gegeben ist durch

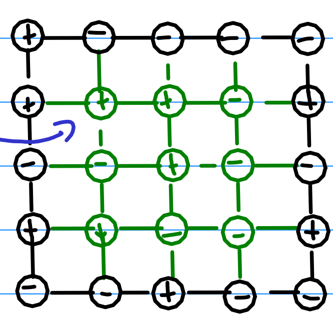
$$\mu^\eta_{\Lambda;\beta,h}(\omega) = \frac{1}{Z^\eta_{\Lambda;\beta,h}} \exp\left(-\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,h}(\omega)\right),$$

wobei die Normierungskonstante

$$Z^\eta_{\Lambda;\beta,h} = \sum_{\omega \in \Omega^\eta_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,h}(\omega)\right)$$

<u>Zustandssumme</u> in Λ mit Randbedingungen η heißt.

<u>Skizze</u> für $d=2$, $\Lambda = \{-1,0,1\}^2$



Notation: • Für das $\eta \in \Omega$ mit $\eta_i = +1 \; \forall i \in \mathbb{Z}^d$ schreiben wir statt Ω_Λ^η auch Ω_Λ^+ und für $\mu_{\Lambda;\beta,h}^\eta$ auch $\mu_{\Lambda;\beta,h}^+$.

Entsprechendes gilt für die Konfiguration mit $\eta_i = -1 \; \forall i \in \mathbb{Z}^d$.

• Das Symbol $\#$ steht im folgenden für eine der Randbedingungen ϕ, per, η. Für $\# = \mathrm{per}$ wird damit immer implizit $\Lambda = V_n$ für ein $n \in \mathbb{N}$ angenommen.

• Erwartungswerte bzgl. $\mu_{\Lambda;\beta,h}^\#$ schreiben wir als

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

---

3. Def. van Hove-Konvergenz; Druck und Magnetisierung im thermodynamischen Grenzwert, Def. Phasenübergang 1. Ordnung [Abschnitt 3.2 in [1]]

Def. 3.1: Wir sagen, dass eine Folge $(\Lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ aus endlichen Teilmengen $\Lambda_n \subset \mathbb{Z}^d$ gegen $\mathbb{Z}^d$ konvergiert (Notation: $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$), falls:

① $\Lambda_n \subset \Lambda_{n+1} \; \forall n \in \mathbb{N}$

② $\bigcup_{n \in \mathbb{N}} \Lambda_n = \mathbb{Z}^d$.

Wir definieren weiterhin den Rand einer Menge $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$

durch $\partial^{in}\Lambda = \{ i \in \Lambda \mid \exists j \notin \Lambda \text{ mit } i \sim j \}$. Gilt

$\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ und zusätzlich

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|\partial^{in}\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} = 0 \quad (*),$$

so sagen wir, dass (Λ_n) <u>im Sinne von van Hove</u> gegen $\mathbb{Z}^d$ konvergiert und schreiben $\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$.

<u>Bem.:</u> Die Bedingung $(*)$ stellt eine Regularitätsbedingung an die Folge Λ_n dar, die wir im nachfolgenden Beweis zur Existenz des Druckes im thermodynamischen Grenzwert benötigen.

<u>Bsp.:</u> [Aufgabe 3.1 in [1]]

- Es gilt $B(n) \Uparrow \mathbb{Z}^d$, wobei $B(n) = \{-n, -(n-1), \dots, n-1, n\}^d$.

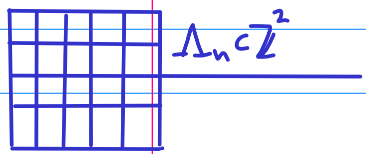
$B(n) \uparrow \mathbb{Z}^d$ ist klar, und es ist $|B(n)| = (2n+1)^d$ sowie

$$|\partial^{in} B(n)| \underset{\substack{\text{So werden}\\\text{„Ecken" auf}\\\text{RHS doppelt}\\\text{gezählt}}}{<} \underbrace{2d}_{\substack{\text{Anzahl}\\\text{Oberflächen}\\\text{des Würfels}}} \cdot \underbrace{(2n+1)^{d-1}}_{\substack{\text{Punkte pro}\\\text{Oberfläche}}}, \text{ also}$$

$$0 \le \lim_{n\to\infty} \frac{|\partial^{in} B(n)|}{|B(n)|} \le \lim_{n\to\infty} \frac{2d}{2n+1} = 0.$$

• Eine Folge mit $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$, aber $\Lambda_n \not\nearrow \mathbb{Z}^d$ ist bspw. für $d \geq 2$

Skizze:



$$\Lambda_n = B(n) \cup \{(i,0,\dots,0) \in \mathbb{Z}^d \mid 0 \leq i \leq e^n\},$$

da $|\Lambda_n| \leq (2n+1)^d + e^n$ und $|\partial^{in} \Lambda_n| \geq e^n$,

also $\dfrac{|\partial^{in} \Lambda_n|}{|\Lambda_n|} \geq \dfrac{e^n}{(2n+1)^d + e^n} \xrightarrow{n\to\infty} 1$.

Def. 3.2: Der Druck in $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$ mit Randbedingungen # ist [Def. 3.4 in [1]]

definiert als $$\psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h) = \frac{1}{|\Lambda|} \log Z^{\#}_{\Lambda;\beta,h}.$$

Bem.: An dieser Stelle ist zunächst sowohl die mathematische als auch physikalische Motivation für die vorige Definition unklar, also:

① Zur Physik: Bildet man die Spin-Ausrichtungen $\sigma_i \in \pm 1$ stattdessen auf die Werte 0 [„kein Atom am i-ten Gitterpunkt"] und 1 [„ein Atom am i-ten Gitterpunkt"] ab, so erhält man ein hard-core Gas im großkanonischen Ensemble (Teilchenzahl nicht fest). Damit ergibt es zumindest Sinn, von Druck zu sprechen [und genauer hätte man allgemein $P = \langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial V} \rangle = \frac{1}{\beta} \partial_V \log Z$ in Physik-Konvention].

(2) Mathematisch interessiert uns vor allem der später gezeigte Zusammenhang zwischen Druck und Magnetisierung:

$$m^{\#}_{\Lambda}(\beta,h) = \frac{\partial}{\partial h} \psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h),$$

und damit insbesondere die Differenzierbarkeit von $\psi^{\#}_{\Lambda_n}$ in h für $\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$.

__Lemma 3.3:__ Für alle $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$, $\beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ und $h \in \mathbb{R}$ gilt:

[Aufgabe 3.2 in [13]]

(i) $\psi^{\emptyset}_{\Lambda}(\beta,h) = \psi^{\emptyset}_{\Lambda}(\beta,-h)$

(ii) $\psi^{per}_{\Lambda}(\beta,h) = \psi^{per}_{\Lambda}(\beta,-h)$

(iii) $\psi^{+}_{\Lambda}(\beta,h) = \psi^{-}_{\Lambda}(\beta,-h)$

__Bew.:__ Wir zeigen nur (i), da alle Beweise ähnlich funktionieren und wir nur (i) später benötigen.

Es gilt $|\Lambda| \cdot \psi^{\emptyset}_{\Lambda}(\beta,h) = \log Z^{\emptyset}_{\Lambda;\beta,h}$

$$= \log \sum_{\omega\in\Omega_\Lambda} \exp(\underbrace{-\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,h}(\omega)}_{= -\beta \sum_{\{i,j\}\in\mathcal{E}_\Lambda} \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega) - h\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i(\omega)}) = \ldots$$

Der erste Term des Hamiltonians ist invariant unter $\omega \mapsto -\omega$, der zweite wechselt das Vorzeichen. Damit:

$$\ldots = \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta,-h}(-\omega)\right)$$

Summe geht über alle Konfigurationen

$$= \log \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta,-h}(\omega)\right)$$

$$= |\Lambda| \, \psi^{\emptyset}_{\Lambda}(\beta,-h)$$

__Lemma 3.4:__ Für jede Randbedingung # ist $(\beta,h) \mapsto \psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h)$ __konvex__.

[Lemma 3.5 in [1]]

wichtig! Nutzen wir später mehrmals

__Bew.:__ Wir benötigen wieder nur freie Randbedingungen. Zunächst gilt für $\alpha \in [0,1]$, $\beta_1,\beta_2 \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ und $h_1,h_2 \in \mathbb{R}$:

$$\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\alpha\beta_1+(1-\alpha)\beta_2,\alpha h_1+(1-\alpha)h_2} = \alpha \cdot \mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta_1,h_1} + (1-\alpha)\,\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta_2,h_2}.$$

Damit erhalten wir:

$$Z^{\emptyset}_{\Lambda;\alpha\beta_1+(1-\alpha)\beta_2,\alpha h_1+(1-\alpha)h_2}$$

$$= \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp\left(-\alpha \cdot \mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta_1,h_1}(\omega)\right) \exp\left(-(1-\alpha)\,\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta_2,h_2}(\omega)\right)$$

Hölder-Ungleichung mit $\frac{1}{p}=\alpha$, $\frac{1}{q}=1-\alpha$

$$\leq \left(\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta_1,h_1}(\omega)\right)\right)^{\alpha} \left(\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}^{\emptyset}_{\Lambda;\beta_2,h_2}(\omega)\right)\right)^{1-\alpha}$$

Also $\Psi_\Lambda^\phi(\alpha\beta_1+(1-\alpha)\beta_2, \alpha\cdot h_1+(1-\alpha)h_2)$

$$= \frac{1}{|\Lambda|} \log Z^\phi_{\Lambda;\alpha\beta_1+(1-\alpha)\beta_2,\alpha\cdot h_1+(1-\alpha)h_2}$$

$$\leq \frac{1}{|\Lambda|}\left(\alpha\cdot \log Z^\phi_{\Lambda;\beta_1,h_1} + (1-\alpha)\log Z^\phi_{\Lambda;\beta_2,h_2}\right)$$

$$= \alpha\cdot \Psi_\Lambda^\phi(\beta_1,h_1) + (1-\alpha)\Psi_\Lambda^\phi(\beta_2,h_2)$$

Satz 3.5: Die Größe $\Psi(\beta,h) = \lim\limits_{\Lambda\Uparrow\mathbb{Z}^d} \Psi_\Lambda^\#(\beta,h)$ (**) ist

[Theorem 3.6 in [1]]

„thermodynamischer Grenzwert"

$\forall \beta\in\mathbb{R}_{\geq 0}, h\in\mathbb{R}$ endlich und wohldefiniert, d.h. unabhängig von der Folge $\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$ sowie der Randbedingung $\#$.

Außerdem ist $(\beta,h)\mapsto\Psi(\beta,h)$ konvex und $h\mapsto \Psi(\beta,h)$ gerade.

Bew.: Zunächst die folgenden, einfachen Beobachtungen:

1. Für jedes $\Lambda\Subset\mathbb{Z}^d$ gilt:

$$|\Psi_\Lambda^\phi(\beta,h)| \leq 2\cdot d\cdot\beta + |h| + \log 2 \qquad (***)$$

denn: $|\mathcal{H}^\phi_{\Lambda;\beta,h}(\omega)| \leq (\underbrace{2d}_{\substack{\text{höchstens } 2d \\ \text{nächste Nachbarn} \\ \text{pro } i\in\Lambda;\ \text{zählt Kanten so sogar doppelt}}}\beta + |h|)\cdot|\Lambda|$, also $Z^{\phi}_{\Lambda;\beta,h} = \sum_{\omega\in\Omega_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}^{\phi}_{\Lambda;\beta,h}(\omega)\right)$

untere Schranke $-(2d\beta+|h|)|\Lambda|$ für $\mathcal{H}$ einsetzen

$$\leq \exp\left((2d\beta+|h|)|\Lambda|\right)\cdot \underbrace{\sum_{\omega\in\Omega_\Lambda} 1}_{=2^{|\Lambda|}}$$

$$= \exp\left((2d\beta+|h|+\log 2)|\Lambda|\right)$$

und analog $Z^{\phi}_{\Lambda;\beta,h} \geq \exp\left(-(2d\beta+|h|-\log 2)|\Lambda|\right)$
$$\geq \exp\left(-(2d\beta+|h|+\log 2)|\Lambda|\right),$$

also $-(2d\beta+|h|+\log 2) \leq \frac{1}{|\Lambda|}\log Z^{\phi}_{\Lambda;\beta,h} \leq +(2d\beta+|h|+\log 2)$.

[damit haben wir u.a., falls (**) existiert und nicht von den Randbed. abhängt, sofort $|\psi(\beta,h)| < \infty$]

2. Da nach Lemma $\psi^{\phi}_{\Lambda_n}$ konvex in (β,h) und gerade in h ist $\forall n\in\mathbb{N}$, folgt, falls (**) existiert und unabhängig von den Randbed. ist, sofort, dass ψ als punktweise Grenzfunktion diese Eigenschaften erbt [s. auch Anhang über konvexe Funktionen].

Den eigentlichen Beweis vollziehen wir nun in <u>drei Schritten:</u>

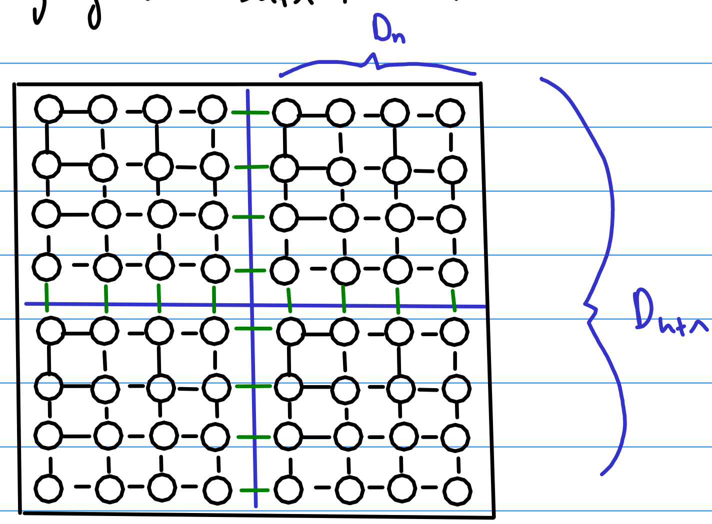
① Zeige Existenz des Grenzwerts für freie Randbedingungen ϕ und $\Lambda_n = D_n = \{1,2,3,\dots,2^n\}^d$

(2) Folgere (**) für beliebige Folgen $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ und freie Randbedingungen $\emptyset$

(3) Zeige (**) für periodische und feste Randbedingungen.

(1) Wir wollen zeigen, dass $\left(\Psi^{\emptyset}_{D_n}(\beta,h)\right)_{n\in\mathbb{N}}$ eine Cauchy-Folge ist.

Dazu schätzen wir zunächst $\left|\Psi^{\emptyset}_{D_{n+1}}(\beta,h) - \Psi^{\emptyset}_{D_n}(\beta,h)\right|$ ab durch Zerlegung von D_{n+1}, dazu zuerst eine Skizze:



Zerlege also $D_{n+1} = \{0,1,\dots,2^{n+1}\}^d$ in 2^d disjunkte, verschobene Kopien von $D_n = \{0,1,\dots,2^n\}^d$, die wir mit $D_n^{(i)}$, $i = 1,\dots,2^d$ bezeichnen.

Die Hamilton-Funktion lässt sich dann schreiben als

$$\boxed{\mathcal{H}^{\emptyset}_{D_{n+1};\beta,h} = \sum_{i=1}^{2^d} \mathcal{H}^{\emptyset}_{D_n;\beta,h} + R_n,}$$

wobei R_n die in der Skizze grün angedeuteten Wechselwirkungsterme zwischen Spins benachbarter Blöcke beinhaltet. Diesen Term können wir abschätzen durch

$$|R_n| \leq \underset{\substack{\text{WW für}\\ \text{1 Kante}}}{\beta} \cdot \underset{\substack{\text{Anzahl}\\ \text{an } D_{n+1}\text{-Oberflächen}\\ \text{zwischen } D_n\text{-Würfeln}}}{d} \cdot \underbrace{\left(2^{n+1}\right)^{d-1}}_{\text{„Oberfläche" einer Seite des Würfels } D_{n+1}\text{, s. Skizze}} .$$

Aus $\mathcal{H}^{\phi}_{D_{n+1};\beta,h} \geq \sum_{i=1}^{2^d} \mathcal{H}^{\phi}_{D_n^{(i)};\beta,h} - \beta d \left(2^{n+1}\right)^{d-1}$

folgt dann

$$Z^{\phi}_{D_{n+1};\beta,h} = \sum_{\omega\in\Omega_{D_{n+1}}} \exp\left(-\mathcal{H}^{\phi}_{D_{n+1};\beta,h}(\omega)\right)$$

$$\leq \exp\left(\beta\cdot d\cdot\left(2^{n+1}\right)^{d-1}\right)\cdot \underbrace{\sum_{\omega\in\Omega_{D_{n+1}}}}_{=\sum_{\omega^{(1)}\in\Omega_{D_n^{(1)}}} \cdots \sum_{\omega^{(2^d)}\in\Omega_{D_n^{(2^d)}}}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp\left(-\mathcal{H}^{\phi}_{D_n^{(i)};\beta,h}(\omega)\right)$$

$$= \ldots$$

Wir zerlegen also die Summe über $\omega\in\Omega_{D_{n+1}}$ in separate Summationen über die Teilkonfigurationen auf den $D_n^{(i)}$. Ohne Wechselwirkungen zwischen diesen Teilsystemen gilt $\mathcal{H}^{\phi}_{D_n^{(i)};\beta,h}(\omega) = \mathcal{H}^{\phi}_{D_n^{(i)};\beta,h}(\omega^{(i)})$, und damit faktorisiert die Summe vollkommen:

$$\circ\circ\circ = \exp\left(\beta \cdot d \cdot (2^{n+1})^{d-1}\right) \cdot \left(Z^{\phi}_{D_n;\beta,h}\right)^{2^d}$$

Vollkommen analog bekommen wir mit

$$\mathcal{H}^{\phi}_{D_{n+1};\beta,h} \leq \sum_{i=1}^{2^d} \mathcal{H}^{\phi}_{D_n^{(i)};\beta,h} + \beta d (2^{n+1})^{d-1}$$

dann

$$Z^{\phi}_{D_{n+1};\beta,h} \geq \exp\left(-\beta \cdot d \cdot (2^{n+1})^{d-1}\right) \cdot \left(Z^{\phi}_{D_n;\beta,h}\right)^{2^d}$$

Logarithmieren und Division durch $|D_{n+1}| = (2^{n+1})^d$

ergibt

$$-\beta \cdot d \cdot 2^{-(n+1)} + \frac{1}{(2^n)^d} \cdot \log Z^{\phi}_{D_n;\beta,h} \leq \frac{1}{(2^{n+1})^d} \log Z^{\phi}_{D_{n+1};\beta,h} \leq +\beta d 2^{-(n+1)} + \frac{1}{(2^n)^d} \cdot \log Z^{\phi}_{D_n;\beta,h}$$

also $$\boxed{\left| \psi^{\phi}_{D_{n+1}}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{D_n}(\beta,h) \right| \leq \beta d 2^{-(n+1)}}.$$

Damit sind wir fertig, da somit für $n \leq m$ gilt:

$$\left| \psi^{\phi}_{D_m}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{D_n}(\beta,h) \right| \underset{\uparrow}{\leq} \beta d \cdot \sum_{k=n+1}^{m} 2^{-k} \leq \beta d \sum_{k=n+1}^{\infty} 2^{-k} \xrightarrow{n \to \infty} 0$$

Dreiecks-
Ungleichung...

Somit ist $\left(\Psi^{\phi}_{D_n}(\beta,h)\right)_{n\in\mathbb{N}}$ für alle $\beta\in\mathbb{R}_{\geq 0}, h\in\mathbb{R}$ eine Cauchy-Folge; wir bezeichnen den Grenzwert mit $\Psi(\beta,h)$.

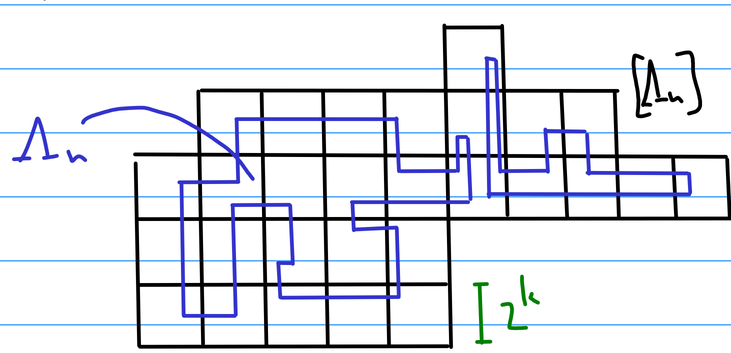
② Sei jetzt $\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$ eine beliebige van Hove-Folge. Sei $\varepsilon>0$ beliebig. Wir wollen zeigen, dass ein $n_0\in\mathbb{N}$ existiert, sodass $\forall n\geq n_0$: $\left|\Psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h)-\Psi(\beta,h)\right|\leq\varepsilon$.

Wähle ein festes $k\in\mathbb{N}$ [unabhängig von n bzw. n_0; die genaue Wahl wird später spezifiziert] und zerlege $\mathbb{Z}^d$ in disjunkte, verschobene Kopien von $D_k=\{1,\dots,2^k\}^d$.

Wir definieren $[\Lambda_n]$ als die minimale [stets endlich!?] Überdeckung von $\Lambda_n \Subset \mathbb{Z}^d$ durch D_k's; dies schreiben wir als $[\Lambda_n]=\bigcup_j D_k^{(j)} \supseteq \Lambda_n$.

endliche Vereinigung

Skizze:



Wir schätzen ab:

$$\left|\Psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h)-\Psi(\beta,h)\right| \le \underbrace{\left|\Psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h)-\Psi^{\phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h)\right|}_{\text{I}} + \underbrace{\left|\Psi^{\phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h)-\Psi^{\phi}_{D_k}(\beta,h)\right|}_{\text{II}}$$

$$+\underbrace{\left|\Psi^{\phi}_{D_k}(\beta,h)-\Psi(\beta,h)\right|}_{\text{III}}$$

- Für III liefert Teil 1 dieses Beweises, dass $k_0 \in \mathbb{N}$ existiert

mit $\boxed{\left|\Psi^{\phi}_{D_k}(\beta,h)-\Psi(\beta,h)\right| \le \frac{\varepsilon}{3} \quad \forall k \ge k_0.}$

- Für II schätzen wir analog zu 1 ab:

$$\mathcal{H}^{\phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} = \sum_j \mathcal{H}^{\phi}_{D_k^{(j)};\beta,h} + W_n$$

mit $$|W_n| \le \underbrace{\frac{|[\Lambda_n]|}{|D_k|}}_{\substack{\text{Anzahl an}\\ \text{Teilwürfeln}}} \cdot d \cdot \beta \cdot \underbrace{\left(2^k\right)^{d-1}}_{\substack{\text{Eine Oberfläche}\\ \text{eines } D_k^{(j)}\text{-Würfels}}} = |[\Lambda_n]| \cdot \beta \cdot d \cdot 2^{-k}$$

max. 2d Oberflächen pro Teilwürfel; zähle so nicht doppelt

Also wieder

$$Z^{\phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} = \sum_{\omega\in\Omega_{[\Lambda_n]}} \exp\left(-\mathcal{H}^{\phi}_{[\Lambda_n];\beta,h}(\omega)\right)$$

$$\leq \exp\left(|[\Lambda_n]| \cdot d \cdot \beta \cdot 2^{-k}\right) \underbrace{\sum_{\omega \in \Omega_{[\Lambda_n]}} \prod_j \exp\left(-\mathcal{H}^{\phi}_{D_k^{(j)};\beta,h}(\omega)\right)}_{\overset{\text{s.o.}}{=} \left(Z^{\phi}_{D_k;\beta,h}\right)^{|[\Lambda_n]|/|D_k|}}$$

und ebenso $Z^{\phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} \geq \exp\left(-|[\Lambda_n]| \cdot d \cdot \beta \cdot 2^{-k}\right) \left(Z^{\phi}_{D_k;\beta,h}\right)^{|[\Lambda_n]|/|D_k|}$, also

$$-d \cdot \beta \cdot 2^{-k} \cdot |[\Lambda_n]| + \frac{|[\Lambda_n]|}{|D_k|} \log Z^{\phi}_{D_k;\beta,h} \leq \log Z^{\phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} \leq d \cdot \beta \cdot 2^{-k} \cdot |[\Lambda_n]| + \frac{|[\Lambda_n]|}{|D_k|} \log Z^{\phi}_{D_k;\beta,h}$$

$$\Rightarrow \boxed{\left|\psi^{\phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{D_k}(\beta,h)\right| \leq d \cdot \beta \cdot 2^{-k} \leq \frac{\varepsilon}{3}}$$

$\forall k \geq k_1 \in \mathbb{N}$.

Damit sind für $k \geq \max\{k_0, k_1\}$ die Terme II und III jeweils $\leq \frac{\varepsilon}{3}$; und die Wahl dieses k ist unabhängig von n!

Es verbleibt der Term I: $\left|\psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h)\right|$

[hier muss dann offensichtlich die bisher nicht verwendete van Hove-Bedingung eingehen]

Wir definieren $\Delta_n = [\Lambda_n] \setminus \Lambda_n$ als Differenz der

Würfelüberdeckung und der ursprünglichen Menge Λ_n.

Es gilt $|\Delta_n| \leq |\partial^{in}\Lambda_n| \cdot |D_k|$, und damit

Der ungünstigste Fall tritt ein, wenn in jedem der $D_k^{(j)}$ nur ein einziger, isolierter Punkt aus Λ_n (und damit aus $\partial^{in}\Lambda_n$) liegt. Allgemeiner kann es in $D_k^{(j)}$ nur Punkte aus Δ_n geben, wenn $D_k^{(j)}$ Randpunkte aus $\partial^{in}\Lambda_n$ enthält.

liefert uns die van Hove-Bedingung die Abschätzung

$$1 \leq \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} = \frac{|\Lambda_n| + |\Delta_n|}{|\Lambda_n|} \leq 1 + |D_k| \cdot \frac{|\partial^{in}\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} \xrightarrow{n\to\infty} 1,$$

also $\frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \xrightarrow{n\to\infty} 1$ (+)

Die Differenz der zugehörigen Hamilton-Funktionen zu Λ_n und $[\Lambda_n]$

können wir wie vorher durch

$$\left| \mathcal{H}^{\Phi}_{\Lambda_n;\beta,h} - \mathcal{H}^{\Phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} \right| \leq (\underbrace{2d\beta}_{\substack{\text{jeder der } |\Delta_n| \text{ Knoten}\\ \text{hat maximal}\\ 2d \text{ nächste Nachbarn}\\ \text{(zählt Kanten doppelt)}}} + |h|)\,|\Delta_n|$$

$|\Delta_n|$ Terme h.o. in der Differenz

abschätzen, und

damit wie immer:

$$Z^{\Phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} = \sum_{\omega\in\Omega_{[\Lambda_n]}} \exp\left(-\mathcal{H}^{\Phi}_{[\Lambda_n];\beta,h}(\omega)\right)$$

$$\leq \exp\left((2d\beta+|h|)|\Delta_n|\right)\cdot \sum_{\omega\in\Omega_{[\Lambda_n]}} \exp\Big(-\underbrace{\mathcal{H}^{\Phi}_{\Lambda_n;\beta,h}(\omega)}_{\text{alle Spins in } \Delta_n \text{ gehen gar nicht ein}}\Big)$$

$$= \exp\left((2d\beta+|h|)\cdot|\Delta_n|\right)\cdot 2^{|\Delta_n|}\cdot Z^{\Phi}_{\Lambda_n;\beta,h}$$

$$= \exp\left(\left(2d\beta+|h|+\log 2\right)\cdot|\Delta_n|\right)\cdot Z^{\Phi}_{\Lambda_n;\beta,h}$$

und nach unten $Z^{\Phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} \geq \exp\left(-\left(2d\beta+|h|+\log 2\right)\cdot|\Delta_n|\right)\cdot Z^{\Phi}_{\Lambda_n;\beta,h}$

Also $\left|\log Z^{\Phi}_{[\Lambda_n];\beta,h} - \log Z^{\Phi}_{\Lambda_n;\beta,h}\right| \leq \left(2d\beta+|h|+\log 2\right)\cdot|\Delta_n|$

$$\leq \left(2d\beta+|h|+\log 2\right)\cdot|D_k|\cdot|\partial^{in}\Lambda_n|$$

$$\Rightarrow \Big|\underbrace{\frac{1}{|\Lambda_n|}\cdot\log Z^{\Phi}_{[\Lambda_n];\beta,h}}_{=\frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|}\cdot\psi^{\Phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h)} - \psi^{\Phi}_{\Lambda_n}(\beta,h)\Big| \leq \left(2d\beta+|h|+\log 2\right)\cdot|D_k|\cdot\frac{|\partial^{in}\Lambda_n|}{|\Lambda_n|}$$

und damit letztendlich für (I)

$$\left| \psi^{\phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h) \right|$$

$$\leq \underbrace{\left| \psi^{\phi}_{[\Lambda_n]}(\beta,h) - \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \cdot \psi^{\phi}_{[\Lambda]}(\beta,h) \right|}_{\leq \underbrace{\left|\psi^{\phi}_{[\Lambda]}(\beta,h)\right|}_{\leq 2d\beta + |h| + \log 2 \;\; \forall n \in \mathbb{N} \text{ nach } (\ast\ast\ast) \text{ am Anfang des Beweises}} \cdot \underbrace{\left| 1 - \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \right|}_{\xrightarrow{n\to\infty} 0 \;\; (+)}} + \underbrace{\left| \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \cdot \psi^{\phi}_{[\Lambda]}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h) \right|}_{\overset{\text{s.o.}}{\leq} (2d\beta + |h| + \log 2)\, |\Theta_L| \cdot \frac{|\partial^{in}\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} \xrightarrow{n\to\infty} 0, \text{ da } \Lambda_n \,\hat{\uparrow}\, \mathbb{Z}^d}$$

$$\leq \frac{\varepsilon}{3} \quad \text{für} \quad n \geq n_0.$$

③ Als letztes bleibt die Unabhängigkeit des Grenzwertes von den Randbedingungen zu zeigen [auch hier sollte anschaulich die van Hove-Bedingung eine Rolle spielen].

Betrachte zunächst feste RB, also $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$, $\eta \in \Omega$, $\omega \in \Omega_\Lambda$ und $\omega' \in \Omega^{\eta}_{\Lambda}$ mit $\omega = \omega'$ in Λ.

Dann gilt:

$$\left| \mathcal{H}_{\Lambda;\beta,h}(\omega') - \mathcal{H}^{\phi}_{\Lambda;\beta,h}(\omega) \right| \leq 2d\beta \cdot |\partial^{in}\Lambda|$$

Unterschied nur durch zusätzliche Kanten am Rand, höchstens $2d$ pro Knoten und damit $Z^{\eta}_{\Lambda;\beta,h} = \sum_{\omega \in \Omega^{\eta}_{\Lambda}} \exp(-\mathcal{H}_{\Lambda;\beta,h}(\omega))$

$$\leq \exp(2d\beta|\partial^{in}\Lambda|) \cdot \sum_{\omega \in \Omega^{\eta}_{\Lambda}} \exp(-\mathcal{H}^{\phi}_{\Lambda;\beta,h}(\omega))$$

$$= \exp(2d\beta|\partial^{in}\Lambda|) \cdot Z^{\phi}_{\Lambda;\beta,h}$$

analog für $\geq \ldots$, Logarithmus und $\frac{1}{|\Lambda|}$

$$\Rightarrow \quad |\psi^{\eta}_{\Lambda}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{\Lambda}(\beta,h)| \leq 2d\beta \frac{|\partial^{in}\Lambda|}{|\Lambda|}$$

Also für $\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$:

$$|\psi^{\eta}_{\Lambda_n}(\beta,h) - \psi(\beta,h)| \leq \underbrace{|\psi^{\eta}_{\Lambda_n}(\beta,h) - \psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h)|}_{\leq 2d\beta \frac{|\partial^{in}\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} \to 0} + \underbrace{|\psi^{\phi}_{\Lambda_n}(\beta,h) - \psi(\beta,h)|}_{\to 0 \text{ nach } 2}$$

Beweis für periodische Randbedingungen genau gleich ...

<u>Bem.:</u> Für Folgen von Quadern $\Lambda_n = [a^n_1, b^n_1] \times \ldots \times [a^n_d, b^n_d] \cap \mathbb{Z}^d$ lässt sich die Existenz des Drucks im thermodynamischen Grenzwert auf mithilfe von Subadditivität der Zustands-summe für einen transformierten Hamiltonian zeigen [Aufgabe 3.3, Lemma B.6 in [1]]. Dies vertiefen wir

hier aber aus Zeitgründen nicht.

<u>Def. 3.6</u>: Sei $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$. Wir definieren die (Gesamt-) <u>Magnetisierung</u>

$M_\Lambda = \sum_{i\in\Lambda} \sigma_i$ und die <u>Magnetisierungsdichte</u>

$m_\Lambda = \frac{1}{|\Lambda|} M_\Lambda$. Weiterhin schreiben wir

$m^\#_\Lambda(\beta,h) = \langle m_\Lambda \rangle^\#_{\Lambda;\beta,h}$ für den Erwartungswert der Magnetisierungsdichte.

<u>Prop. 3.7</u>: Die <u>kumulantenerzeugende Funktion</u> von M_Λ unter $\mu^\#_{\Lambda;\beta,h}$

[Aufgabe 3.4 in [13]]

ist $\log \langle e^{tM_\Lambda} \rangle^\#_{\Lambda;\beta,h} = |\Lambda| \cdot \left(\psi^\#_\Lambda(\beta,h+t) - \psi^\#_\Lambda(\beta,h) \right)$.

Insbesondere ist die r-te Kumulante von M_Λ

gegeben durch $c_r(M_\Lambda) = |\Lambda| \cdot \frac{\partial^r}{\partial h^r} \psi^\#_\Lambda(\beta,h)$,

und damit $(r=1)$ $\boxed{m^\#_\Lambda(\beta,h) = \frac{\partial}{\partial h} \psi^\#_\Lambda(\beta,h)}$.

<u>Bew.</u>: $\langle e^{tM_\Lambda} \rangle^\#_{\Lambda;\beta,h} = \frac{1}{Z^\#_{\Lambda;\beta,h}} \cdot \sum_{\omega\in\Omega_\Lambda} \exp\left(-\mathcal{H}^\#_{\Lambda;\beta,h+t}\right)$!

$$= \frac{1}{Z^{\#}_{\Lambda;\beta,h}} \cdot Z^{\#}_{\Lambda;\beta,h+t}$$

Also $\log \langle e^{tM_\Lambda} \rangle^{\#}_{\Lambda;\beta,h} = \log Z^{\#}_{\Lambda;\beta,h+t} - \log Z^{\#}_{\Lambda;\beta,h}$

$$= |\Lambda| \cdot \left(\psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h+t) - \psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h) \right)$$

und damit insbesondere

$$c_1(M_\Lambda) = \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \log \langle e^{tM_\Lambda} \rangle^{\#}_{\Lambda;\beta,h}$$

$$= \frac{\langle M_\Lambda \rangle^{\#}_{\Lambda;\beta,h}}{\langle 1 \rangle^{\#}_{\Lambda;\beta,h}} = |\Lambda| \cdot m^{\#}_{\Lambda}(\beta,h) = |\Lambda| \cdot \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h+t)$$

$$= |\Lambda| \cdot \frac{\partial}{\partial h} \psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h).$$

<u>Frage</u>: Was passiert mit $m^{\#}_{\Lambda_n}(\beta,h) = \frac{\partial}{\partial h} \psi^{\#}_{\Lambda_n}(\beta,h)$ im thermodynamischen Grenzwert $\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$. Existiert der Grenzwert der RHS und ist unabhängig von den Randbed. und der gewählten Folge? Gilt $\lim_{\Lambda \Uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\partial}{\partial h} \psi^{\#}_{\Lambda}(\beta,h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta,h)$?

?

<u>Antwort</u>: Wir wissen bereits, dass ψ <u>konvex</u> ist [in (β,h), also auch in h für jedes feste β]. Damit existieren laut <u>Anhang</u> für alle $\beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ und $h \in \mathbb{R}$ die linksseitigen

Satz 4.5 ①, ⑥

und rechtsseitigen Ableitungen

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

und für jedes $\beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ existiert eine höchstens

<u>abzählbare</u> Menge $\mathcal{B}_\beta = \{h \in \mathbb{R} \mid \frac{\partial \Psi}{\partial h^-}(\beta,h) \neq \frac{\partial \Psi}{\partial h^+}(\beta,h)\}$,

wo Ψ nicht diff'bar in h ist.

<u>Prop. 3.8</u>: Für <u>$h \notin \mathcal{B}_\beta$</u> ist $m(\beta,h) := \lim_{\Lambda \Uparrow \mathbb{Z}^d} m_\Lambda^\#(\beta,h)$
[Korollar 3.7 in [13]]
wohldefiniert, d.h. unabhängig von der gewählten Folge

$\Lambda_n \Uparrow \mathbb{Z}^d$ und Randbedingung $\#$. Außerdem gilt:

(i) $m(\beta,h) = \frac{\partial \Psi}{\partial h}(\beta,h)$ für $h \notin \mathcal{B}_\beta$

(ii) $h \mapsto m(\beta,h)$ ist monoton wachsend auf $\mathbb{R} \setminus \mathcal{B}_\beta$.

(iii) $h \mapsto m(\beta,h)$ ist stetig in $h \notin \mathcal{B}_\beta$.

In jedem <u>$h \in \mathcal{B}_\beta$</u> ist $h \mapsto m(\beta,h)$ unstetig mit

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

Wir definieren die spontane Magnetisierung als

$m^*(\beta) = \lim_{h \downarrow 0} m(\beta,h)$; diese ist mit der vorigen Aussage immer wohldefiniert.

Bew.: (1) Für $h \notin B_\beta$ gilt

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

Satz 4.5 (7) im Anhang

$$\overset{\text{Satz 4.5 (7)}}{=} \lim_{\Lambda \Uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\partial}{\partial h} \psi_\Lambda^\#(\beta,h)$$

Rechnung zu voriger Proposition

$$= \lim_{\Lambda \Uparrow \mathbb{Z}^d} m_\Lambda^\#(\beta,h)$$

womit die RHS automatisch wohldefiniert ist.

Da ψ konvex ist, folgt (ii) sofort aus Satz 4.5 (4) und (iii) aus Satz 4.5 (5).

Ist $h \in B_\beta$, so wähle eine Folge $(h_k) \subset \mathbb{R} \setminus B_\beta$ mit $h_k \downarrow h$ [existiert, da B_β abzählbar], dann gilt für jedes $k \in \mathbb{N}$ $\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta,h_k) = m(\beta,h_k)$, also wegen der Rechtsstetigkeit von $\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta,\cdot)$ [Satz 4.5, (5)]

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta,h_k) = \frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta,h) = \lim_{h' \downarrow h} m(\beta,h')$$

und analog für linksseitige Ableitung. Da $h \in \mathcal{B}_\beta$,

ist per Def. von $\mathcal{B}_\beta$ damit $\lim\limits_{h \nearrow h'} m(\beta,h') \neq \lim\limits_{h \searrow h'} m(\beta,h')$.

Def. 3.9: [Def. 3.8 in [1]] Wir sagen, dass der Druck Ψ bei (β,h) einen Phasenübergang 1. Ordnung zeigt, falls $h \mapsto \Psi(\beta,h)$ in diesem Punkt nicht differenzierbar ist.

4. Anhang: Einige Sätze über konvexe Funktionen [Abschnitt B.2 in [1]]

Sei $I = (a,b) \subseteq \mathbb{R}$ ein offenes Intervall mit $-\infty \leq a < b \leq +\infty$.

Def. 4.1: [Definition B.8 in [1]] Eine Funktion $f: I \to \mathbb{R}$ heißt konvex, falls $\forall x,y \in I, \forall \alpha \in [0,1]$:

$$f(\alpha x + (1-\alpha) y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y).$$

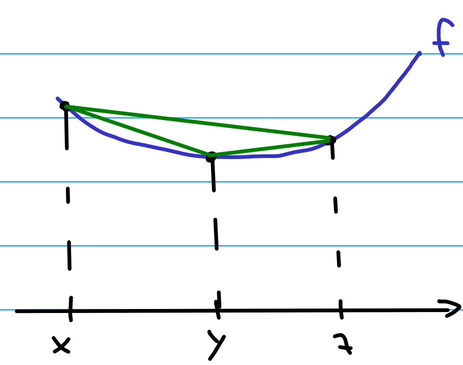
Lemma 4.2: [Aufgabe B.1 in [1]] Eine Funktion $f: I \to \mathbb{R}$ ist genau dann konvex, falls $\forall x,y,z \in I$

mit $x<y<z$ gilt: $\quad f(y) \leq \frac{z-y}{z-x} f(x) + \frac{y-x}{z-x} f(z) \quad (*)$

Falls f überall endlich ist [was wir voraussetzen], so folgt aus $(*)$, dass

$$\frac{f(y)-f(x)}{y-x} \leq \frac{f(z)-f(x)}{z-x} \leq \frac{f(z)-f(y)}{z-y} \quad \forall x,y,z \in I \text{ mit } x<y<z \ (**).$$

Skizze:



Prop. 4.3: [Aufgabe B.3 in [1]] Seien $f_n: I \to \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$, konvex und $f_n \to f$ punktweise.

Dann ist f konvex.

Prop. 4.4 [Proposition B.9 in [1]] Sei $f: I \to \mathbb{R}$ konvex. Dann ist f lokal Lipschitz-stetig und

damit insbesondere stetig.

Notation: $\partial^+ f(x) = \frac{\partial f}{\partial x^+}(x) = \lim_{x' \downarrow x} \frac{f(x') - f(x)}{x' - x}$

$$\partial^- f(x) = \frac{\partial f}{\partial x^-}(x) = \lim_{x' \uparrow x} \frac{f(x') - f(x)}{x' - x}$$

Satz 4.5: Sei $f: I \to \mathbb{R}$ konvex. Dann gelten folgende Aussagen:

[Theorem B.12 in [1]]

1. $\partial^+ f(x), \partial^- f(x)$ existieren für alle $x \in I$.
2. $\partial^- f(x) \leq \partial^+ f(x) \; \forall x \in I$.
3. $\partial^+ f(x) \leq \partial^- f(y) \; \forall x, y \in I$ mit $x < y$.
4. $\partial^+ f, \partial^- f$ sind monoton wachsend.
5. $\partial^+ f$ ist rechtsstetig, $\partial^- f$ ist linksstetig.
6. $\{x \in I \mid \partial^+ f(x) \neq \partial^- f(x)\}$ ist höchstens abzählbar.
7. Sind $g_n: I \to \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}$, konvexe Funktionen mit $g_n \to g$ punktweise, so gilt $\forall x \in I$, wo g diff'bar ist:
   $$g'(x) = \lim_{n\to\infty} \partial^+ g_n(x) = \lim_{n\to\infty} \partial^- g_n(x).$$

Zugehörige Beweise

Lemma 4.2: „$\Rightarrow$" Sei $f: I \to \mathbb{R}$ konvex und $x, y, z \in I$ mit $x < y < z$.

Definiere $\alpha = \frac{z-y}{z-x} \in (0,1)$, dann gilt $y = \alpha x + (1-\alpha) z$

und somit $f(y) \leq \alpha \cdot f(x) + (1-\alpha) f(z)$
$$= \frac{z-y}{z-x} f(x) + \frac{y-x}{z-x} f(z).$$

„$\Leftarrow$" Sei $x < z \in I$ und $\underbrace{\alpha \in (0,1)}_{\alpha = 0 \text{ oder } \alpha = 1 \text{ klar...}}$. Definiere $y = \alpha x + (1-\alpha) z$,

dann folgt $x < y < z$ und somit:

$$f(y) = f(\alpha x + (1-\alpha)z) \leq \frac{z-y}{z-x} f(x) + \frac{y-x}{z-x} f(z)$$

$$= \frac{z - \alpha x - (1-\alpha) z}{z-x} f(x) + \frac{\alpha x + (1-\alpha) z - x}{z-x} f(z)$$

$$= \alpha f(x) + (1-\alpha) f(z).$$

Aus (*) folgt dann

$$\frac{f(y)-f(x)}{y-x} \leq \frac{\frac{z-y}{z-x} f(x) - f(x) + \frac{y-x}{z-x} f(z)}{y-x} = \frac{f(z)-f(x)}{z-x}$$

Sowie

$$\frac{f(z)-f(y)}{z-y} \geq \frac{f(z) - \frac{y-x}{z-x} f(z) - \frac{z-y}{z-x} f(x)}{z-y} = \frac{f(z)-f(x)}{z-x}.$$

<u>Prop. 4.3</u>: Seien $x, y \in I$ und $\alpha \in [0,1]$. Dann gilt $\forall n \in \mathbb{N}$

$$f_n(\alpha x + (1-\alpha) y) \leq \alpha \cdot f_n(x) + (1-\alpha) f_n(y),$$

also per $n \to \infty$ auch $f(\alpha x + (1-\alpha) y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$.

<u>Prop. 4.4</u>: Sei $K \subset I$ kompakt und $\varepsilon > 0$ so gewählt, dass

$K_\varepsilon = \{ z \in \mathbb{R} \mid d(K, z) \leq \varepsilon \} \subset I$. Definiere $M = \sup_{z \in K_\varepsilon} f(z)$

und $m = \inf_{z \in K_\varepsilon} f(z)$. Dann gilt $|m|, |M| < \infty$, denn:

Falls $M = +\infty$, so gäbe es eine Folge $(x_n) \subset K_\varepsilon$ mit $f(x_n) \nearrow \infty$. Da K_ε kompakt ist, ex. eine konvergente Teilfolge $(x_{n_k}) \subset (x_n)$ mit $x_{n_k} \to x_* \in I$ und $f(x_{n_k}) \nearrow \infty$. Sind $z, z' \in I$ mit $z < x_* < z'$, so gibt es damit ein x_n mit $z < x_n < z'$ und $f(x_n) > \max\{f(z), f(z')\}$ im Widerspruch zur Konvexität von f [$m = -\infty$ geht ähnlich, dort Widerspruch über $f(x_*) > f(x_n)$ für $n \to \infty$ konstruieren].

Seien nun $x, y \in K$ mit $x \neq y$. Setze $z = y + \varepsilon \cdot \frac{y-x}{|y-x|} \in K_\varepsilon$.

Dann gilt $y = (1-\lambda)x + \lambda z$ mit $\lambda = \frac{|y-x|}{|y-x| + \varepsilon} \in (0,1)$,

also $f(y) \leq (1-\lambda) f(x) + \lambda f(z)$ bzw.

$$f(y) - f(x) \leq \underbrace{\lambda}_{\leq \frac{|y-x|}{\varepsilon}} \cdot \underbrace{(f(z) - f(x))}_{\leq M - m} \leq \frac{M-m}{\varepsilon} \cdot |y-x|$$

Analoges Vorgehen mit $x \leftrightarrow y$ ergibt also

$$|f(y) - f(x)| \leq \frac{M-m}{\varepsilon} \cdot |y-x|.$$

<u>Satz 4.5:</u> Aus Lemma 2 folgt zunächst, dass

$$y \mapsto \frac{f(y)-f(x)}{y-x} \quad \text{und} \quad x \mapsto \frac{f(y)-f(x)}{y-x}$$

beide monoton wachsend sind $(***)$.

① Seien $x, y \in I$ mit $x < y$ und $(z_k) \subset I$ mit $z_k \downarrow y$.

Dann ist mit $(***)$ die Folge $\frac{f(z_k) - f(y)}{z_k - y}$ monoton fallend

und mit $(**)$ von unten durch $\frac{f(y) - f(x)}{y - x}$ beschränkt,

also existiert $\partial^+ f(y) = \lim_{k \to \infty} \frac{f(z_k) - f(y)}{z_k - y}$ (und hängt natürlich

nicht von der gewählten Folge ab). Für $\partial^- f$ geht alles vollkommen

analog.

② In $(**)$, d.h. $\forall x, y, z \in I$ mit $x < y < z$ gilt

$$\frac{f(y) - f(x)}{y - x} \leq \frac{f(z) - f(x)}{z - x} \leq \frac{f(z) - f(y)}{z - y},$$

bilden wir zunächst den Grenzwert $x \uparrow y$ und anschließend

$z \downarrow y$ für $\partial^- f(y) \leq \partial^+ f(y)$.

③ Mit $(***)$ folgt für $y \downarrow x$ bzw. $x \uparrow y$ und $x < y$

$$\partial^+ f(x) \leq \frac{f(y) - f(x)}{y - x} \leq \partial^- f(y).$$

④ $\partial^- f(x) \overset{②}{\leq} \partial^+ f(x) \overset{③}{\leq} \partial^- f(y) \overset{②}{\leq} \partial^+ f(y)$

⑤ Zur Rechtsstetigkeit von $\partial^+ f$: Mit ④ ist $\partial^+ f$ monoton wachsend, also existiert $\lim_{y \downarrow x} \partial^+ f(y) \geq \partial^+ f(x)$.

Nach Prop. 4 ist f stetig, also gilt $\forall z > x$

$$\frac{f(z) - f(x)}{z - x} = \lim_{y \downarrow x} \underbrace{\frac{f(z) - f(y)}{z - y}}_{\geq \partial^+ f(y),\ s.\ 3} \geq \lim_{y \downarrow x} \partial^+ f(y) \text{ , d.h. mit } z \downarrow x$$

$$\partial^+ f(x) \geq \lim_{y \downarrow x} \partial^+ f(y).$$

6 Da das Intervall I sich als abzählbare Vereinigung abg. Intervalle $[a,b]$ schreiben lässt (F_σ-Menge), genügt es zu zeigen, dass auf einem solchen abg. Intervall nur abzählbar viele Punkte existieren, wo f nicht diff'bar ist. Sei wieder $\varepsilon > 0$ s.d. $[a-\varepsilon, b+\varepsilon] \subset I$ und $M = \sup_{x \in [a-\varepsilon, b+\varepsilon]} |f(x)| < \infty$ (da f stetig).

Der Beweis von 3 liefert $\partial^+ f(b) \leq \frac{f(b+\varepsilon) - f(b)}{\varepsilon} \leq \frac{2M}{\varepsilon}$

und $\partial^- f(a) \geq \frac{f(a) - f(a-\varepsilon)}{\varepsilon} \geq -\frac{2M}{\varepsilon}$.

Mit 3 und 4 gilt außerdem $\forall x \in [a,b]$:

$$\partial^- f(a) \leq \partial^\pm f(x) \leq \partial^+ f(b)$$

und zusammen damit $\sup_{x \in [a,b]} |\partial^\pm f(x)| \leq \frac{2M}{\varepsilon}$.

Setze nun $\forall r \in \mathbb{N}$ $A_r := \{ x \in [a,b] \mid \partial^+ f(x) - \partial^- f(x) \geq \frac{1}{r} \}$,

s.d. $\bigcup_{r \in \mathbb{N}} A_r = \{ x \in [a,b] \mid \partial^+ f(x) > \partial^- f(x) \}$ genau die

Menge der Punkte in $[a,b]$ ist, wo f nicht diff'bar ist.

Wir zeigen, dass $|A_r| < \infty$ $\forall r \in \mathbb{N}$.

Sei also $r \in \mathbb{N}$ beliebig und $x_1 < \ldots < x_n \in A_r$ für ein $n \in \mathbb{N}$.

Dann gilt $\partial^+ f(x_n) - \partial^- f(x_1)$

$$= \partial^+ f(x_n) - \partial^- f(x_n) + \partial^- f(x_n) - \partial^- f(x_1)$$

$$\overset{③}{\geq} \partial^+ f(x_n) - \partial^- f(x_n) + \partial^+ f(x_{n-1}) - \partial^- f(x_1)$$

$$\geq \ldots \geq \sum_{k=1}^{n} \left(\partial^+ f(x_k) - \partial^- f(x_k) \right) \geq \frac{n}{r}$$

also $n \leq r \cdot \left(\partial^+ f(x_n) - \partial^- f(x_1) \right) \leq r \cdot \frac{4M}{\varepsilon} < \infty$.

⑦ Aus dem Beweis von ③ folgt wieder:

$\partial^+ g_n(x) \leq \frac{g_n(x+h) - g_n(x)}{h}$,

also $\limsup_{n \to \infty} \partial^+ g_n(x) \leq \frac{g(x+h) - g(x)}{h}$, und falls g in x diff'bar

ist, damit mit $h \downarrow 0$ $\limsup_{n \to \infty} \partial^+ g_n(x) \leq g'(x)$. Analog dann

-38- $g'(x) \leq \liminf_{n \to \infty} \partial^- g_n(x)$ und damit

$$g'(x) \leq \liminf_{n\to\infty} \partial^- g_n(x) \overset{②}{\leq} \liminf_{n\to\infty} \partial^+ g_n(x) \leq \limsup_{n\to\infty} \partial^+ g_n(x) \leq g'(x)$$

Sowie

$$g'(x) \leq \liminf_{n\to\infty} \partial^- g_n(x) \leq \limsup_{n\to\infty} \partial^- g_n(x) \overset{②}{\leq} \limsup_{n\to\infty} \partial^+ g_n(x) \leq g'(x).$$

Literatur

[1] Friedli, S. und Velenik, Y. „Statistical mechanics of lattice systems: a concrete mathematical introduction". Cambridge University Press, 2017.