

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně a použil při tom pouze citované literatury.

Souhlasím se zapůjčováním diplomové práce.

19. dubna 1996

Karel Netočný

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

Nízkoteplotní fáze amfifilických
systémů

Autor: Karel Netočný

Obor: Teoretická fyzika

Vedoucí diplomové práce: Prof. RNDr. Roman Kotecký, DrSc.

Konzultant: RNDr. Miloš Zahradník, CSc.

Poděkování

Rád bych vyjádřil poděkování těm, bez jejichž pomoci by tato práce nikdy nemohla vzniknout. Především děkuji Prof. Koteckému za to, že mi umožnil nahlédnout do zajímavé moderní partie matematické fyziky, za cenné konzultace, trpělivost při překonávání mých začátečnických problémů a v neposlední řadě také za jeho materiální pomoc. RNDr. Zahradníkovi bych chtěl vyjádřit poděkování za kvalitní uvedení do problematiky. Nesmím také v žádném případě zapomenout na své rodiče, kterým vděčím za jejich trpělivost a trvalou podporu.

Obsah

Uvod	1
1 Nízkoteplotní chování klasických mřížových modelů	4
1.1 Základní pojmy	4
1.2 Rovnovážný stav systému	5
1.3 Základní stavy	8
1.3.1 Definice	8
1.3.2 Metody určení základních stavů	9
1.4 Parametrický model	10
1.4.1 Definice parametrického modelu	10
1.4.2 Fázový diagram	11
1.5 Konturové modely	13
1.5.1 Abstraktní definice	13
1.5.2 Mřížové realizace konturových modelů	14
1.6 Pirogov-Sinajova teorie	18
1.6.1 Reformulace modelu	19
1.6.2 Metastabilní modely	22
1.6.3 Vlastnosti stabilních fází	24
1.6.4 Ekvivalentní základní stavy	25
1.6.5 Obecné základní stavy	26
1.7 Systémy s nekonečným počtem základních stavů	28
1.7.1 Konstrukce faktorového modelu	28
1.7.2 Lokálně dominantní základní stavy	30
1.7.3 Fázový diagram parametrického modelu	32
2 Ternární amfilické systémy	33
2.1 Fázové chování	34
2.2 Mikroskopické modely na mříži	35
2.2.1 Úvod	35
2.2.2 Alexanderův model	35
2.2.3 Stručný přehled ostatních modelů	39

3	Rozbor Alexanderova modelu	41
3.1	Lamelární fáze	42
3.1.1	Základní pojmy	42
3.1.2	Základní stavy	42
3.1.3	Nízkoteplotní fázový diagram	44
3.2	Blokové fáze	59
3.2.1	Základní pojmy	60
3.2.2	Základní stavy blokového typu	61
3.2.3	Nízkoteplotní fázový diagram	63
3.3	Řez fázového diagramu rovinou $r = 0$	69
3.3.1	Základní stavy	69
3.3.2	Nízkoteplotní fázový diagram	72
4	Závěr	79

Úvod

Cílem rovnovážné statistické mechaniky je popis makroskopického stavu systému na základě jeho známé mikroskopické struktury. Tento program se daří úspěšně realizovat v případě slabě interagujících systémů, jejichž stav se mění hladce v závislosti na vnějších parametrech, jakými jsou například teplota, magnetické pole nebo chemický potenciál. Jsou však známy systémy, které při jistých hodnotách těchto parametrů vykazují skoky v energii, magnetizaci nebo hustotě a právě pochopení fázových přechodů na mikroskopické úrovni a jejich rigorózní popis představuje důležitý test statistického přístupu.

Pro širokou třídu systémů se osvědčují různé aproximativní techniky, pro něž je zpravidla společná představa ‘středního pole’ působícího na každou částici systému a buzeného souborem ostatních částic. Do této třídy lze zařadit van der Waalsovou teorii fázového přechodu kapalina-plyn, Weissovou teorii molekulárního pole ve ferromagnetikách, případně teorie Landau-Ginzburgova typu. Dlouho nebylo jasné, jestli je statistická mechanika schopna jít za rámec těchto metod. Je totiž zřejmé, že konečné systémy nemohou vykazovat neanalytičnost termodynamických funkcí a rozšíření statistických metod na nekonečné systémy představovalo netriviální problém.

Přelom nastal ve třicátých letech, kdy se objevil důkaz existence fázového přechodu I. druhu v Isingově dvoudimenzionálním ferromagnetickém modelu, který do každého bodu mříže \mathbb{Z}^2 umísťuje ‘spin’ nabývající hodnot $x_t = \pm 1$ a jehož hamiltonián je dán formálním předpisem

$$H(x) = - \sum_{\langle s,t \rangle} x_s x_t - h \sum_t x_t,$$

s interakcí mezi nejbližšími sousedy. Magnetizace

$$m(\beta, h) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^2} \left\langle \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{t \in \Lambda} x_t \right\rangle$$

je nespojitá v bodě $h = 0$ pro β dost velké. Postatným bodem důkazu byla reformulace modelu prostřednictvím kontur jakožto objektů oddělujících jednotlivé základní stavy a využití dobrých vlastností získaného konturového modelu.

K dalšímu rozvoji došlo až v šedesátých letech, kdy byly podrobně studovány vlastnosti abstraktních konturových modelů, které byly následně použity k obecnější analýze mřížových modelů. Výsledkem byla Pirogov-Sinajova teorie (dále

jen PS-teorie) poskytující nízkoteplotní fázové diagramy mřížových modelů s konečným počtem periodických základních stavů (viz [3]). Podstatný kvalitativní výsledek se dá formulovat jako tvrzení, že nízkoteplotní fázový diagram je pouhou spojitou deformací fázového diagramu při nulové teplotě. Důkaz úplnosti těchto fázových diagramů byl podán v článku [2]. Poučení o PS-teorii lze také nalézt např. v [1, 6, 10].

PS-teorie také umožňuje ospravedlnit formální poruchovou teorii (viz např. [12]), alespoň pro systémy s konečným počtem periodických základních stavů. Formální poruchová teorie pracuje s vhodnou množinou ‘referenčních stavů’, nad kterými konstruuje *omezený soubor* ‘excitací’ nízkého řádu. Intuitivně lze očekávat, že skutečný makrostav je ‘malou odchylkou’ některé referenční konfigurace a lze jej dobře aproximovat omezeným souborem excitací nad touto referenční konfigurací. Jako referenční konfigurace zpravidla volíme soubor základních stavů na okolí vyšetřovaného bodu v množině parametrů a ty základní stavy, které minimalizují hustotu volné energie omezeného souboru, označujeme jako dominantní. Očekáváme právě fáze jsoucí malou odchylkou dominantních základních stavů.

Ukazuje se, že v mnoha modelech s nekonečným počtem základních stavů formální poruchové rozvoje nevykazují žádné patologické chování a předpovídají existenci konečného počtu dominantních základních stavů. Jestliže tedy model reformulujeme tak, aby konfigurace byly nahrazeny omezenými soubory (faktori-zace modelu), získáme model s konečným počtem zobecněných základních stavů. Příslušné rozšíření PS-teorie bylo předloženo v práci [7] (nadále BS-teorie).

Přestože rigorózní přístup dosáhl značných úspěchů, jsou zřejmá i jeho omezení. Veškeré výsledky, kterých bylo dosaženo, se týkají pouze mřížových modelů, což představuje rozumnou aproximaci pouze pro některé reálné systémy. Tento popis je vhodný pro studium termodynamických vlastností ferromagnetik nebo kapalných směsí, zatímco například rozbor fázového přechodu kapalina-plyn je mimo rámec uvedených technik. Další omezení se týká teploty — veškeré výsledky jsou pro nízkoteplotní oblasti, v nichž nedochází ke kritickým jevům. Podstata tohoto omezení spočívá v podmínce konvergence clusterových rozvoju, které jsou základním technickým nástrojem zmíněných metod.

V této práci se budeme zabývat možností aplikace uvedených metod na rozbor nízkoteplotních vlastností trojsložkových amfifilických systémů. Takto označujeme kapalnou směs tvořenou dvěma nemísícími se kapalinami a amfifilickou složkou, jejíž molekuly mají tendenci vyhledávat rozhraní mezi oběma kapalinami a tak snižovat příslušné povrchové napětí. Jejich neméně zajímavou vlastností je schopnost organizovat zbylé dvě komponenty a vytvářet pravidelné struktury. Podrobný přehled o vlastnostech těchto systémů viz [8, 9].

Zaměříme se na Alexanderův model (viz odst. 2.2.2) a ukážeme existenci oblastí v množině parametrů s lamelárními fázemi třídy $\langle 1 \rangle$, $\langle 2 \rangle$, $\langle 3 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$ (definice těchto pojmů viz odst. 3.1), blokovými fázemi třídy $\langle 1; 1; 1 \rangle$, $\langle 2; 2; 2 \rangle$, $\langle 3; 3; 3 \rangle$, $\langle 1, 2; 1, 2; 1, 2 \rangle$ a uspořádanými fázemi dalších typů (viz fáze typu M a

\bar{M} zavedené v odst. 3.3). Nejde o vyčerpávající rozbor nízkoteplotního fázového diagramu Alexanderova modelu, ale pouze o studium reprezentativního souboru lyotropických fází (viz kap. 2), které lze provést pomocí BS-teorie, případně standardní PS-teorie.

Práce je uspořádána následujícím způsobem. V kap. 1 jsou definovány základní pojmy statistické mechaniky mřížových systémů. Je zde popsán abstraktní parametrický model, jehož fázové chování je studováno, a podrobně vysvětlen pojem fázového diagramu tohoto modelu. Značná pozornost je věnována konturovým modelům a příslušným clusterovým rozvojem. Poslední dva odstavce obsahují přehled PS-teorie a BS-teorie. V kap. 2 je přehled nejdůležitějších vlastností amfifilických směsí a jsou zde uvedeny nejznámější mřížové modely těchto systémů. Podrobně je zde diskutován Alexanderův model, jehož rozboru je věnována kap. 3. Omezujeme se pouze na studium lamelárních fází, obecnější třídy blokových fází a rozbor vhodně zvoleného řezu fázového diagramu.

Kapitola 1

Nízkotepelné chování klasických mřížových modelů

1.1 Základní pojmy

Nechť \mathbb{Z}^ν označuje ν -dimenzionální mříž a předpokládejme $\nu \geq 2$. Metriku na mříži definujeme takto:

$$d(s, t) = \max_i |s_i - t_i|, \quad s, t \in \mathbb{Z}^\nu. \quad (1.1)$$

Pro konečnou množinu $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ označme Λ^c její *doplňek* a definujme též *l-okolí*, *l-vnitřek* a *l-hranici* ($l > 0$):

$$R_l \Lambda = \{t \in \mathbb{Z}^\nu; d(t, \Lambda) \leq l\}, \quad R_{-l} \Lambda = \{t \in \mathbb{Z}^\nu; d(t, \Lambda^c) > l\}, \quad (1.2)$$

$$\partial_l \Lambda = \{t \in \Lambda; d(t, \Lambda^c) \leq l\}.$$

Řekneme dále, že množina Λ je *l-souvislá*, jestliže neexistuje rozklad

$$\Lambda = \Lambda_1 \cup \Lambda_2, \quad \text{kde } \Lambda_{1,2} \neq \emptyset, \quad d(\Lambda_1, \Lambda_2) > l.$$

Označme S konfigurační prostor nad mřížovým bodem (množinu ‘spinů’), nechť $|S| < \infty$. Množina konfigurací na množině Λ je potom S^Λ ($S^{\mathbb{Z}^\nu} \stackrel{\text{ozn.}}{=} \Omega$). Dohodněme se také, že pro $x \in \Omega$ bude x_Λ označovat restrikcí konfigurace na Λ .

Model je definován *potenciálem* jakožto zobrazením, které každé konečné množině $B \subset \mathbb{Z}^\nu$ a konfiguraci x_B přiřadí reálnou energii $\Phi_B(x_B)$. V dalším se omezíme na modely s potenciálem konečného dosahu R , tzn. $\Phi_B(x_B) = 0$, kdykoliv $\text{diam } B > R$.

Hamiltonián

$$H(x) = \sum_{B \subset \mathbb{Z}^\nu} \Phi_B(x_B) \quad (1.3)$$

je pouze formální vyjádření, neboť pro mřížový systém, mající nekonečně mnoho stupňů volnosti, suma obecně diverguje. Smysl mají jen rozdíly energie konfigurací

lišících se pouze na konečné podmnožině mříže ('rovných skoro všude', zkráceně s. v.)

$$H(x) - H(y) = \sum_{B \subset \mathbb{Z}^\nu} [\Phi_B(x_B) - \Phi_B(y_B)], \quad x = y \text{ s. v.}, \quad (1.4)$$

případně energie konfigurace na konečné množině Λ s volnou nebo deterministicou okrajovou podmínkou

$$H(x_\Lambda) = \sum_{B \subset \Lambda} \Phi_B(x_B), \quad (1.5)$$

$$H(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \sum_{B \not\subset \Lambda^c} \Phi_B(x_B). \quad (1.6)$$

Bijektivní zobrazení $\mathcal{T} : \Omega \rightarrow \Omega$ nazýváme *operací symetrie* potenciálu Φ , jestliže pro ně existuje taková bijekce $\tilde{\mathcal{T}}$ na množině všech konečných podmnožin mříže \mathbb{Z}^ν , že pro všechna $x \in \Omega$ a $B \subset \mathbb{Z}^\nu$ platí

$$\Phi_{\tilde{\mathcal{T}}B}((\mathcal{T}x)_{\tilde{\mathcal{T}}B}) = \Phi_B(x_B).$$

Grupou operací symetrie potenciálu Φ označíme $\mathcal{F}(\Phi)$. Řekneme také, že konfigurace $x, y \in \Omega$ jsou *ekvivalentní* vzhledem ke grupě symetrie potenciálu $\mathcal{F}(\Phi)$ nebo zkráceně \mathcal{F} -ekvivalentní, jestliže existuje takové $\mathcal{T} \in \mathcal{F}(\Phi)$, pro něž platí $\mathcal{T}x = y$. Konfigurační prostor Ω se rozpadá na třídy \mathcal{F} -ekvivalentních konfigurací.

Speciálním typem symetrie jsou translační symetrie a periodičita potenciálu. Necht' \mathbb{Z}_0^ν je podgrupa grupy \mathbb{Z}^ν . Řekneme, že Φ je *periodický potenciál* vzhledem k \mathbb{Z}_0^ν , jestliže pro každé $t \in \mathbb{Z}_0^\nu$ je zobrazení $\mathcal{T}_t : \Omega \rightarrow \Omega$ definované předpisem

$$(\mathcal{T}_t x)_s = x_{t+s}, \quad s \in \mathbb{Z}^\nu$$

operací symetrie potenciálu Φ . Jestliže $\mathbb{Z}_0^\nu = \mathbb{Z}^\nu$, mluvíme o *translační symetrii* potenciálu. Nadále budeme předpokládat, že model je translačně invariantní, pokud nebude řečeno jinak.

1.2 Rovnovážný stav systému

Pojmem *stav* rozumíme pravděpodobnostní míru definovanou na vhodné σ -algebře měřitelných množin zkonstruované nad konfiguračním prostorem Ω . Stav termodynamické rovnováhy (Gibbsův stav) je definován přirozeným způsobem pro systémy s konečným počtem stupňů volnosti, v daném případě pro konečnou podmnožinu mříže (pravděpodobnost konfigurace je úměrná příslušnému boltzmannovskému faktoru). Pro systémy s nekonečným počtem stupňů volnosti jeho definice spočívá na představě 'vnitřní rovnováhy' každého konečného pod systému s okolím jako termostatem: podmíněné rozdělení na konfiguračním prostoru konečné množiny je gibbsovské.

Množinu $\omega \subset \Omega$ nazýváme *cylindrickou*, jestliže je určena projekcí na konfigurační prostor Ω_Λ nějaké konečné množiny Λ , tzn. lze ji psát ve tvaru kartézského součinu

$$\omega = \tilde{\omega} \times \Omega_{\Lambda^c}, \quad \tilde{\omega} \subset \Omega_\Lambda.$$

Cylindrické množiny generují σ -algebru, kterou označíme \mathcal{B} .

Pravděpodobnostní míru \mathcal{P} na měřitelném prostoru (Ω, \mathcal{B}) nazveme *Gibbsův stav*, jestliže pro každou konečnou množinu Λ je podmíněné rozdělení na Ω_Λ s pravděpodobností 1 rovno¹

$$\mathcal{P}(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \frac{\exp[-\beta H(x_\Lambda | x_{\Lambda^c})]}{Z_\Lambda(x_{\Lambda^c})}, \quad (1.7)$$

$$Z_\Lambda(x_{\Lambda^c}) = \sum_{x_\Lambda \in \Omega_\Lambda} \exp[-\beta H(x_\Lambda | x_{\Lambda^c})].$$

Množinu všech Gibbsových stavů přiřazených potenciálu Φ označme $\mathcal{G}(\Phi)$. Tato množina je konvexní a její extrémální body (nelze je zapsat jako netriviální konvexní kombinace měř z $\mathcal{G}(\Phi)$) nazýváme *čisté stavy*. Pro periodický čistý stav vyhradzujeme termín *čistá fáze* a množinu všech čistých fází potenciálu Φ označíme $\mathcal{G}_p(\Phi)$.

Vybavíme-li množinu pravděpodobnostních měř topologií

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{P}_n = \mathcal{P} \Leftrightarrow \forall \omega \subset \Omega, \omega \text{ je cylindrická množina : } \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{P}_n(\omega) = \mathcal{P}(\omega),$$

lze dokázat tvrzení (viz např. [1], věta 2.22), podle něhož každá limita Gibbsových měř na konečných množinách s libovolnými okrajovými podmínkami, pokud existuje, dává Gibbsův stav z \mathcal{G} . Přesněji: definujeme-li pro rostoucí posloupnost množin $\Lambda^{(n)} \nearrow \mathbb{Z}^d$ a posloupnost okrajových podmínek $x_{\Lambda^{(n)c}}^{(n)}$ posloupnost měř na (Ω, \mathcal{B}) předpisem

$$\mathcal{P}^{(n)}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P}(\omega_{\Lambda^{(n)}} | x_{\Lambda^{(n)c}}^{(n)}) \quad (1.8)$$

pro libovolnou cylindrickou množinu ω , platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{P}^{(n)} \in \mathcal{G}(\Phi),$$

pokud limita existuje.

Naopak ([1], věta 2.23), každý čistý stav je limitou vhodné posloupnosti konečně-objemových Gibbsových měř². To umožňuje alternativní pohled na Gibbsovy stavy jako na všechny termodynamické limity provedené na systém pod vlivem nejrůznějších okrajových podmínek.

¹Výraz na pravé straně je konečně-objemová Gibbsova míra na konfiguračním prostoru Ω_Λ určená okrajovou podmínkou x_{Λ^c} .

²Platí silnější tvrzení říkající zhruba toto: ‘téměř každý’ Gibbsův stav je limitou jisté posloupnosti Gibbsových měř na konečných objemech.

Jak se dále ukazuje (podrobně opět viz [1], věta 2.24), čisté stavy jsou izolované v tom smyslu, že existuje makroskopické měření schopné je navzájem odlišit.

Množina $\mathcal{G}(\Phi)$ je navíc simplex, tzn. každý prvek této množiny lze jednoznačně zapsat jako konvexní kombinaci čistých stavů.

Gibbsovy stavy \mathcal{P} a \mathcal{P}' označíme jako \mathcal{F} -ekvivalentní, jestliže existuje operace symetrie potenciálu $\mathcal{T} \in \mathcal{F}$, pro níž platí

$$\mathcal{T}\mathcal{P} = \mathcal{P}'$$

v běžném smyslu zobrazení na měřitelném prostoru (Ω, \mathcal{B}) generovaného zobrazením na konfiguračním prostoru Ω . Množina $\mathcal{G}(\Phi)$ se tak rozpadá na třídy \mathcal{F} -ekvivalentních Gibbsových stavů.

Ekvivalence potenciálů

Řekneme, že potenciály Φ a Φ' jsou *ekvivalentní*, jestliže $\mathcal{G}(\Phi) = \mathcal{G}(\Phi')$. K tomu je zřejmě postačující, aby pro každou konfiguraci $x \in \Omega$ a konečnou množinu Λ platila rovnost³

$$\mathcal{P}(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \mathcal{P}'(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}).$$

Z (1.7) potom plyne podmínka nezávislosti rozdílu

$$H'(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) - H(x_\Lambda | x_{\Lambda^c})$$

na konfiguraci x_Λ .

Nechť potenciál Φ' je určen potenciálem Φ pomocí předpisu

$$\Phi'_K(x_K) = \sum_B \chi_B(K) \Phi_B(x_B)$$

pro každou konečnou množinu K . Soubor reálných parametrů $\chi_B(K)$ nazýváme *váhová funkce*. Najdeme podmínky, jaké musí tato funkce splňovat, aby potenciály Φ a Φ' byly ekvivalentní. Protože energie $\Phi'_K(x_K)$ smí záviset pouze na konfiguraci x_K , musí platit

$$\chi_B(K) = 0 \quad \text{pro všechna } K, B \not\subset K.$$

Dále lze psát

$$\begin{aligned} H'(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) &= \sum_{K \not\subset \Lambda^c} \sum_{B \subset K} \chi_B(K) \Phi_B(x_B) = \\ &= \sum_{B \not\subset \Lambda^c} \sum_{K: B \subset K} \chi_B(K) \Phi_B(x_B) + \sum_{K \not\subset \Lambda^c} \sum_{B \subset \Lambda^c} \chi_B(K) \Phi_B(x_B). \end{aligned}$$

Protože druhý člen závisí pouze na konfiguraci x_{Λ^c} , dostáváme podmínku ekvivalence

$$\sum_{K: B \subset K} \chi_B(K) = 1.$$

Dokazujeme tak jednoduché

³Ve skutečnosti je to také nutná podmínka, alespoň v případě $\beta < \infty$ (srovnej [1], Tvzení 2.18).

Lemma 1. *Je dán potenciál Φ . Definujme nový potenciál Φ' vztahem*

$$\Phi'_K(x_K) = \sum_B \chi_B(K) \Phi_B(x_B)$$

pro každou konfiguraci $x \in \Omega$ a konečnou množinu $K \subset \mathbb{Z}^\nu$. Vyhovuje-li váhová funkce $\chi_B(K)$ podmínkám

$$\chi_B(K) = 0, \quad \text{jestliže } B \not\subset K,$$

$$\sum_K \chi_B(K) = 1 \quad \text{pro všechna } B \subset \mathbb{Z}^\nu,$$

potom jsou potenciály Φ a Φ' ekvivalentní.

1.3 Základní stavy

1.3.1 Definice

Obecně termínem základní stav rozumíme Gibbsův stav při nulové teplotě (viz [1]). My však nebudeme potřebovat tento pojem ve své plné obecnosti a uchýlíme se k běžně užívané terminologii (např. [2], [3]), poněkud přitom zaměňující pojmy konfigurace a stav. Základní stav v tomto smyslu bude odpovídat termínu ‘ground state configuration’ zavedenému v [1].

Řekneme, že konfigurace $x \in \Omega$ je *základním stavem*, jestliže pro libovolnou konfiguraci $y = x$ s. v. platí nerovnost

$$H(y) - H(x) \geq 0, \tag{1.9}$$

tzn. energie konfigurace se nezmění, jestliže konfiguraci změním na konečné podmnožině mříže.

Nechť je tato nerovnost navíc ostrá pro $y \neq x$. Potom Gibbsova míra při nulové teplotě na libovolné konečné množině Λ s okrajovou podmínkou x_{Λ^c} je zřejmě

$$\mathcal{P}(y_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \begin{cases} 1 & \text{pro } y_\Lambda = x_\Lambda, \\ 0 & \text{pro } y_\Lambda \neq x_\Lambda \end{cases}$$

a tudíž příslušný Gibbsův stav jako limita měř tohoto typu (viz (1.8)) splňuje rovnost

$$\mathcal{P}(\{x\}) = 1.$$

Je tedy lokalizován pouze na konfiguraci x , kterou budeme označovat termínem *rigidní základní stav*.

1.3.2 Metody určení základních stavů

Nechť Φ je periodický potenciál a $\hat{\Omega} \subset \Omega$ je množina všech periodických konfigurací. Pro $x \in \hat{\Omega}$ lze definovat *střední hustotu energie* jako limitu⁴

$$e(x) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^\nu} \frac{H(x_\Lambda)}{|\Lambda|}. \quad (1.10)$$

Platí následující

Tvrzení 1. *Periodická konfigurace $x \in \hat{\Omega}$ je základní stav periodického potenciálu, právě když minimalizuje střední hustotu energie na množině $\hat{\Omega}$, tzn.*

$$e(x) = \min_{y \in \hat{\Omega}} e(y).$$

Důkaz viz [3], Lemma 1.1.

◇

Potenciál Φ nazveme *m-potenciál*, jestliže existuje konfigurace $x \in \Omega$, pro níž platí

$$\Phi_B(x_B) = \min_y \Phi_B(y_B) \quad (1.11)$$

pro každou konečnou množinu $B \subset \mathbb{Z}^\nu$.

Takovou konfiguraci potom nazýváme *lokální základní stav*. Je zřejmé, že lokální základní stav je základním stavem ve výše uvedeném smyslu, opačně tvrzení obecně neplatí.

Nechť periodický m-potenciál má periodický lokální základní stav (zpravidla lze takový vybrat). Protože podle Tvrzení 1 všechny periodické základní stavy nabývají stejné střední hustoty energie, musí také minimalizovat potenciál ve smyslu (1.11). Jestliže totiž existuje množina $B \subset \mathbb{Z}^\nu$, na níž konfigurace $y \in \hat{\Omega}$ nabývá větší hodnoty energie než je minimální, generuje celou třídu množin tohoto typu získaných vhodným periodickým prodloužením a střední hustota energie nemůže nabývat minima. Tím dokazujeme jednoduché tvrzení, podle něhož metoda m-potenciálu dává všechny periodické základní stavy.

Tvrzení 2. *Nechť periodický m-potenciál má alespoň jeden periodický lokální základní stav. Potom všechny periodické základní stavy jsou také lokální základní stavy.*

Nemá-li Φ vlastnost m-potenciálu, můžeme se pokusit najít ekvivalentní m-potenciál.

Dokázat, že základní stav x je rigidní znamená ověřit jednoznačnost prodloužení x_{Λ^c} na základní stav pro libovolnou konečnou množinu Λ .

⁴Limita je ve smyslu $\frac{|\partial\Lambda|}{|\Lambda|} \rightarrow 0$. V dalším to již nebude explicitně zdůrazňováno.

Množinu všech lokálních základních stavů potenciálu Φ budeme značit $g(\Phi)$ a její podmnožinu všech periodických lokálních základních stavů $\hat{g}(\Phi)$. Je zřejmé, že množina $g(\Phi)$ obsahuje vždy celé třídy \mathcal{F} -ekvivalentních lokálních základních stavů. Jestliže jsou všechny lokální periodické základní stavy rigidní, existuje zřejmě bijekce množiny $\hat{g}(\Phi)$ na množinu $\mathcal{G}_p^{(0)}(\Phi)$ všech čistých fází při nulové teplotě.

Je užitečné pojem lokálního základního stavu poněkud rozšířit. Konfiguraci $x_\Lambda \in \Omega_\Lambda$ nazveme *lokálním základním stavem na množině Λ* , jestliže splňuje podmínku

$$\Phi_B(x_B) = \min_{y_B} \Phi_B(y_B)$$

pro každou množinu $B \subset \Lambda$.

Množinu všech lokálních základních stavů na Λ označíme symbolem $g_\Lambda(\Phi)$. Lokální základní stav $x_\Lambda \in g_\Lambda(\Phi)$ na množině Λ obecně nemusí být restrikcí žádné konfigurace $x \in g(\Phi)$.

1.4 Parametrický model

1.4.1 Definice parametrického modelu

V dalším budeme uvažovat *parametrický model* definovaný translačně invariantním m -potenciálem Φ_μ , který lze zapsat ve tvaru

$$\Phi_\mu = \Phi_0 + \sum_{i=1}^{r-1} \mu_i \Phi_i, \quad \mu = (\mu_1, \dots, \mu_{r-1}) \in \mathbb{R}^{r-1}. \quad (1.12)$$

Platí jednoduché

Lemma 1. *Pro takto definovaný parametrický model existuje otevřená množina $U(0) \subset \mathbb{R}^{r-1}$, $0 \in U(0)$, na níž platí*

$$g(\Phi_\mu) \subset g(\Phi_0) \quad \text{pro všechna } \mu \in U(0), \quad (1.13)$$

speciálně tedy

$$\hat{g}(\Phi_\mu) \subset \hat{g}(\Phi_0) \quad \text{pro všechna } \mu \in U(0). \quad (1.14)$$

Důkaz. Pro konfiguraci $x \in \Omega$ označme

$$\|x\|_\mu = \sup_B [\Phi_{\mu B}(x_B) - \Phi_{\mu B}],$$

kde

$$\Phi_{\mu B} = \min_{x \in \Omega} \Phi_{\mu B}(x_B).$$

Definujme dále

$$\|\Phi\|_\mu = \inf_{y \notin g(\Phi_0)} \|y\|_\mu.$$

Evidentně platí $\|x\|_0 = 0$, právě když $x \in g(\Phi_0)$. Uvědomíme-li si, že potenciál Φ_μ je určen energií na konečném počtu množin B (modulo translace) a množina S je konečná, je zřejmé, že $\|\Phi\|_0 > 0$. Protože $\|\Phi\|_\mu$ je spojitá funkce proměnné μ , je nenulová na některé otevřené množině $U(0)$, $0 \in U(0)$. Na ní potom zřejmě žádná konfigurace $x \notin g(\Phi_0)$ nemůže být základním stavem potenciálu Φ .

◇

Grupou symetrie \mathcal{F} parametrického modelu budeme rozumět společnou grupu symetrie souboru potenciálů Φ_μ pro $\mu \in \mathbb{Z}^{\nu^5}$. Pojem \mathcal{F} -ekvivalence (konfigurací, Gibbsových stavů) zavedený v předchozích odstavcích budeme v kontextu parametrického modelu užívat pro ekvivalenci vzhledem ke grupě symetrie \mathcal{F} parametrického modelu.

1.4.2 Fázový diagram

Mějme parametrický model definovaný v předchozím odstavci a navíc předpokládejme, že všechny lokální základní stavy potenciálu Φ_0 jsou rigidní. Pojmem *fázový diagram* parametrického modelu na otevřené množině $U(0) \subset \mathbb{Z}^{\nu^6}$ rozumíme zobrazení, které každému bodu $\mu \in U(0)$ přiřadí množinu $\mathcal{G}_p(\Phi_\mu)$ čistých fází. Teplota β^{-1} zde vystupuje jako implicitní parametr.

Speciálně *fázový diagram při nulové teplotě* na $U(0)$ je zobrazení přiřazující každému bodu $\mu \in U(0)$ množinu $\mathcal{G}_p^{(0)}(\Phi_\mu)$. Připomeňme, že množina $\mathcal{G}_p^{(0)}(\Phi_\mu)$ čistých fází při nulové teplotě je jedno-jednoznačně určena množinou $\hat{g}(\Phi_\mu)$ lokálních periodických základních stavů.

Je vhodné naší definici poněkud upravit, aby lépe odpovídala standardní představě fázového diagramu jako souboru křivek a ploch rozdělujících množinu parametrů na oblasti, ve kterých existují ‘fáze různých typů’. Tím intuitivně rozumíme stavy charakterizované jistými specifickými, parametricky nezávislými, vlastnostmi a odlišené navzájem vhodným označením⁷. Tyto úvahy dále poněkud zpřesníme.

Nechť danou čistou fází lze nalézt jako limitu konečně-objemových Gibbsových měř (1.8) s okrajovou podmínkou, která je restrikcí jisté konfigurace $X \in \Omega$. Potom budeme tuto čistou fází označovat jako X -fáze. Jde pouze o vhodnou, parametricky nezávislou, klasifikaci jednotlivých čistých fází, proto je otázka jednoznačnosti volby konfigurace X nepodstatná. Pro zjednodušení označení budeme nadále pod pojmem X -fáze rozumět jednak Gibbsův stav, jednak (parametricky nezávislou) konfiguraci X . Na uvedenou formální konstrukci lze tak nahlížet jako na zdůvodnění možnosti osvobodit pojem čistá fáze od závislosti na parametru μ .

⁵Vyhýbáme se problému úplnosti této grupy, tento požadavek se objeví v následujícím odstavci ve formě \mathcal{F} -úplnosti fázového diagramu při nulové teplotě.

⁶Množina $U(0)$ nemusí vyhovovat předpokladu Lemmatu 1.

⁷Používáme např. pojmy kapalná a plynná fáze, přestože fáze jako Gibbsův stav je samozřejmě parametricky závislá.

Fázový diagram na množině $U(0)$ lze nyní znázornit následujícím způsobem. Označme jednotlivé třídy \mathcal{F} -ekvivalentních čistých fází, které se vyskytují v uvedeném fázovém diagramu, symboly $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \dots, \mathcal{G}_n$, tzn.

$$\mathcal{G}_p(\Phi_\mu)/\mathcal{F} \subset \{\mathcal{G}_1, \dots, \mathcal{G}_n\} \text{ pro všechna } \mu \in U(0)$$

a předpokládejme $n < \infty$. Fázový diagram lze zadat jako zobrazení

$$a : U(0) \rightarrow \partial X_n, \quad (1.15)$$

kde ∂X_n označuje hranici n -rozměrného kladného oktantu

$$\partial X_n = \{t \in \mathbb{R}^n; \min_{i=1, \dots, n} t_i = 0\}. \quad (1.16)$$

Přitom $a(\mu) = (a_{\mathcal{G}_1}(\mu), \dots, a_{\mathcal{G}_n}(\mu))$ určuje množinu $\mathcal{G}_p(\Phi_\mu)$ předpisem

$$\mathcal{G}_p(\Phi_\mu)/\mathcal{F} = \{\mathcal{G}_k; a_{\mathcal{G}_k}(\mu) = 0\}. \quad (1.17)$$

Řekneme, že fázový diagram je \mathcal{F} -úplný, jestliže zobrazení (1.15) je homeomorfismus otevřené množiny $U(0) \subset \mathbb{R}^{r-1}$ na otevřené okolí bodu $0 \in \partial X_n$ ⁸. Je zřejmé, že \mathcal{F} -úplný fázový diagram má tyto vlastnosti:

1. existuje jeden bod koexistence právě n tříd \mathcal{F} -ekvivalentních čistých fází,
2. existuje n otevřených variet dimenze 1 koexistence právě $n - 1$ tříd \mathcal{F} -ekvivalentních čistých fází a hranici každé variety tvoří bod maximální koexistence z bodu 1,
- ⋮
- k . existuje $\binom{n}{k-1}$ otevřených variet dimenze $k - 1$ koexistence právě $n - k + 1$ tříd \mathcal{F} -ekvivalentních čistých fází a hranici každé variety tvoří variety dimenze $k - 2$ z předchozího bodu,
- ⋮
- n . Existuje n otevřených variet dimenze $n - 1$, kde existuje právě jediná třída \mathcal{F} -ekvivalentních čistých fází a hranici každé variety tvoří variety dimenze $n - 2$ z předchozího bodu.

Předpokládejme, že $U(0)$ je dostatečně malé, aby byl splněn předpoklad Lemmatu 1. Označíme-li prvky množiny $\hat{g}(\Phi_0)/\mathcal{F}$ tříd \mathcal{F} -ekvivalentních lokálních periodických základních stavů symboly g_1, \dots, g_n a užitjeme-li označení $e_{g_k}(\mu)$ pro střední hustotu energie konfigurací třídy g_k vzhledem k potenciálu Φ_μ , můžeme

⁸Protože topologická dimenze variety ∂X_n je $n - 1$, je nutnou podmínkou úplnosti rovnost $n = r$.

zobrazení (1.15) v případě fázového diagramu při nulové teplotě definovat předpisem

$$a_{g_k}^{(0)}(\mu) = e_{g_k}(\mu) - \min_{j=1, \dots, n} e_{g_j}(\mu) \quad \text{pro } k = 1, \dots, n.$$

Je-li fázový diagram při nulové teplotě \mathcal{F} -úplný, řekneme, že soubor poruchových potenciálů $\{\Phi_i\}_{i=1}^{i=r-1}$ *úplně snímá degeneraci* množiny $g(\Phi_0)$ vzhledem ke grupě \mathcal{F} .

1.5 Konturové modely

1.5.1 Abstraktní definice

Základním pojmem, se kterým pracují teorie zabývající se studiem rovnovážných vlastností mřížových modelů, je pojem kontury. Je to objekt společný jak pro Pirogov-Sinajovu teorii a její rozšíření studující nízkoteplotní chování těchto systémů, tak i pro vysokoteplotní techniky. Není možné vyčerpávajícím způsobem definovat, co to kontury jsou a jak je v konkrétních případech zavést, jejich konkrétní realizace závisí na povaze problému.

Reformulace modelu v termínech kontur představuje zjednodušení problému hlavně proto, že pro širokou třídu konturových modelů byla dokázána řada silných tvrzení umožňujících dobrou kontrolu nad jejich chováním. Zde si všimneme pouze nejdůležitějších vlastností, opírajíce se při tom převážně o práci [4] (viz též [5]).

Abstraktní konturový model budiž definován následujícím způsobem. Dána spočetná množina \mathcal{K} , její prvky nazveme *kontury* a budeme je značit písmenem γ .

Nechť $\iota \subset \mathcal{K} \times \mathcal{K}$ je reflexivní symetrická relace *nekompatibility*. Řekneme, že konečná množina $\partial \subset \mathcal{K}$ je *kompatibilní soubor kontur*, jestliže každé dvě různé kontury $\gamma_1, \gamma_2 \in \partial$ jsou kompatibilní. Je-li $\Lambda \subset \mathcal{K}$ konečná množina kontur, potom množinu všech kompatibilních souborů $\partial \subset \Lambda$ označíme symbolem $\Delta(\Lambda)$.

Konturový model je určen *váhovou funkcí* jakožto zobrazením $w : \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{C}$. Prostřednictvím vah kontur přiřadíme modelu *partiční sumu* na množině Λ předpisem

$$Z_\Lambda(w) = \sum_{\partial \in \Delta(\Lambda)} \prod_{\gamma \in \partial} w(\gamma). \quad (1.18)$$

Zobrazení $\pi : \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{N}$ s nosičem definovaným jako $\text{supp } \pi = \{\gamma; \pi(\gamma) > 0\}$ nazveme *cluster*, jestliže $|\text{supp } \pi| < \infty$ a neexistuje rozklad

$$\pi = \pi_1 + \pi_2, \quad \pi_{1,2} \neq 0, \quad \forall \gamma_{1,2} \in \text{supp } \pi_{1,2} : \gamma_1, \gamma_2 \text{ jsou kompatibilní.}$$

Přiřadíme-li množině \mathcal{K} graf, jehož vrcholy budou kontury spojené hranou právě tehdy, jsou-li nekompatibilní a zobrazíme-li π jako indukovaný podgraf na těch konturách, které leží v množině $\text{supp } \pi$, lze říci, že zobrazení π je cluster, právě když je tento podgraf konečný a souvislý.

Množinu všech clusterů π s nosičem $\text{supp } \pi \subset \Lambda$ označíme $\mathcal{C}(\Lambda)$. Definujme dále *váhu clusteru* a jeho *násobnost*

$$w^\pi = \prod_{\gamma \in \mathcal{K}} w(\gamma)^{\pi(\gamma)}, \quad n(\pi) = \sum_{\gamma \in \mathcal{K}} \pi(\gamma) \quad (1.19)$$

a dohodněme se na označení

$$\pi! = \prod_{\gamma \in \mathcal{K}} \pi(\gamma)!, \quad \frac{\partial^\pi}{\partial w^\pi} = \frac{\partial^{n(\pi)}}{\prod_{\gamma \in \mathcal{K}} \partial w(\gamma)^{\pi(\gamma)}}. \quad (1.20)$$

Základní tvrzení o konvergenci clusterového rozvoje pro $\ln Z_\Lambda(w)$ lze, v poněkud slabší verzi než je uvedeno v [4], formulovat takto:

Tvrzení 3. *Nechť $w_0 : \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{R}^+$, $b : \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{R}^+$ jsou dvě nezáporné funkce splňující podmínku*

$$\exp \left[\sum_{\bar{\gamma} \in \mathcal{K} : \bar{\gamma} \nu \gamma} w_0(\bar{\gamma}) b(\bar{\gamma}) \right] \leq b(\gamma) \quad (1.21)$$

a zvolme konečnou množinu $\Lambda \subset \mathcal{K}$. Potom platí:

1. *veličina $\ln Z_\Lambda(w)$ je analytickou funkcí proměnné w na množině $W_0(\Lambda) = \{w; \forall \gamma \in \Lambda : |w(\gamma)| < w_0(\gamma)\}$ a lze ji vyjádřit pomocí konvergentního rozvoje*

$$\ln Z_\Lambda(w) = \sum_{\pi \in \mathcal{C}(\Lambda)} a(\pi) w^\pi = \sum_{\pi \in \mathcal{C}(\Lambda)} q(\pi). \quad (1.22)$$

Koeficienty $a(\pi)$ jsou reálná čísla nezávisající na w , Λ a platí pro ně vyjádření

$$a(\pi) = \frac{1}{\pi!} \frac{\partial^\pi \ln Z_{\text{supp } \pi}(w)}{\partial w^\pi} \Big|_{w=0}. \quad (1.23)$$

2. *Pro každý cluster platí nerovnost*

$$|a(\pi)| \leq \frac{\sum_{\gamma \in \text{supp } \pi} w_0(\gamma) b(\gamma)}{w_0^\pi}. \quad (1.24)$$

Silnější verze tohoto tvrzení a jeho důkaz viz [4], Theorem 2.1.

1.5.2 Mřížové realizace konturových modelů

Vraťme se zpět ke mřížovým modelům. *Konturou* budeme ve zbytku této kapitoly rozumět objekt $\Gamma = \langle \text{dom } \Gamma, x_{\text{dom } \Gamma} \rangle$ definovaný konečnou l -souvislou množinou $\text{dom } \Gamma \subset \mathbb{Z}^d$ a konfigurací na této množině. Kompatibilita bude dána předpisem

$$\Gamma_1 \iota \Gamma_2 \Leftrightarrow \text{dom } \Gamma_1 \cup \text{dom } \Gamma_2 \text{ je } l\text{-souvislá množina.}$$

Označme pro zjednodušení $|\Gamma| \equiv |\text{dom } \Gamma|$ jako *délku* kontury a necht

$$\text{dom } \pi = \cup_{\Gamma \in \text{supp } \pi} \text{dom } \Gamma, \quad |\pi| = \sum_{\Gamma \in \mathcal{K}} \pi(\Gamma) |\Gamma|. \quad (1.25)$$

Dohodněme se také na tom, že Λ bude označovat jednak podmnožinu mříže, jednak množinu všech kontur Γ , $\text{dom } \Gamma \subset \Lambda$. Platí následující

Lemma 2. *Výše zavedené kontury splňují podmínku*

$$|\{\Gamma; |\Gamma| = n, t \in \text{dom}(\Gamma)\}| \leq \exp(cn), \quad n \in \mathbb{N}, \quad t \in \mathbb{Z}^\nu, \quad (1.26)$$

kde konstanta c závisí na ν , $|S|$ a l .

Důkaz. Lze psát

$$|\{\Gamma; |\Gamma| = n, t \in \text{dom}(\Gamma)\}| \leq |S|^n |\{A; |A| = n, t \in A, A \text{ je } l\text{-souvislá množina}\}|.$$

Na počet souvislých množin velikosti n obsahujících daný bod provedeme následující velmi hrubý odhad. Souvislou podmnožinu A mříže lze chápat jako souvislý graf (body množiny A znázorníme jako uzly, které jsou spojeny hranou, právě když je jejich vzdálenost $\leq l$). Počet hran tohoto grafu je nejvýše $\frac{1}{2}(2l)^\nu n$. Souvislý graf lze zadat sledem uzlů a hran a, ab, b, bc, \dots (a, b, \dots označují uzly, ab, bc, \dots hrany grafu), který lze vždy volit tak, abychom každou hranou prošli nejvýše dvakrát, tzn. v daném případě o délce $\leq (2l)^\nu n$. Počet souvislých množin velikosti n obsahujících bod $t \in \mathbb{Z}^\nu$ je potom nejvýše roven počtu takových sledů vycházejících z bodu t , lze jej tedy odhadnout shora jako

$$[(2l)^\nu]^{(2l)^\nu n}.$$

To ukazuje nejvýše exponenciální závislost počtu kontur dané délky n (modulo translace) na n .

◇

Zvolíme-li nyní $b(\Gamma) = e^{b|\Gamma|}$, $w_0 = e^{-\tau_0|\Gamma|}$, lze splnit podmínku (1.21) požadavkem

$$\sum_{\Gamma \in \Lambda} e^{-(\tau_0 - b)|\Gamma|} \leq b|\Gamma|.$$

Díky Lemmatu 2 a pozorování, že počet kontur délky n nekompatibilních s danou konturou Γ je nejvýše roven $(2l)^\nu |\Gamma| e^{cn}$, lze podmínku přepsat do tvaru

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\tau_0 - b - c)n} \leq \frac{b}{(2l)^\nu}.$$

Splnění této nerovnosti a tím také podmínky platnosti Tvzení 3 zajistíme volbou dostatečně velké hodnoty parametru τ_0 .

Bude-li splněna silnější podmínka $|w(\Gamma)| \leq e^{-\tau|\Gamma|}$, $\tau > \tau_0$, dostáváme z (1.24) následující odhad na váhu clusteru:

$$|q(\pi)| \leq |\text{supp } \pi| e^{-(\tau - \tau_0)|\pi|}. \quad (1.27)$$

Odvodíme ještě jiný odhad, který je zdánlivě silnější, ale ve skutečnosti pouze využívá silnější verze Lemmatu 2.

Lemma 3. *Pro výše zavedené kontury platí:*

$$|\{\pi \in \mathcal{C}; |\pi| = n, t \in \text{dom } \pi\}| \leq e^{c'n}, \quad n \in \mathbb{N}, t \in \mathbb{Z}^\nu. \quad (1.28)$$

Podstata důkazu. Podobně jako v případě Lemmatu 2 problém převedeme na odhad počtu souborů souvislých množin, jejichž sjednocení je souvislá množina obsahující zvolený bod $t \in \mathbb{Z}^\nu$ a jejichž součet velikostí je n (součet přes všechny konfigurace lze opět odhadnout faktorem $|S|^n$).

Využijeme-li reprezentace \mathbb{Z}^ν pomocí grafu, lze každý takový soubor znázornit sledem vycházejícím z bodu t a procházejícím postupně všemi množinami a v rámci každé množiny všemi jejími body s krokem délky nejvýše l . Různé množiny mohou ovšem obsahovat společné body, proto přechod mezi jednotlivými množinami vyznačíme v tomto sledu zarážkami. Takovýto sled se zarážkami jednoznačně zadává daný soubor množin a lze ho volit s délkou nejvýše rovnou $\text{konst} \times n$ jako v důkazu Lemmatu 2 (exaktní zdůvodnění je však poněkud jemnější). Počet všech takových sledů s libovolnými zarážkami a pevnou délkou n potom závisí na n nejvýše exponenciálně.

Podrobný matematický zápis všech kroků by byl poněkud těžkopádný.

◇

Užitím tohoto Lemmatu a nerovnosti (1.27) můžeme odhadnout součet vah všech clusterů obsahujících zvolený bod $t \in \mathbb{Z}^\nu$:

$$\sum_{\pi \in \mathcal{C}: t \in \text{dom } \pi} |q(\pi)| \leq \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(\tau - \tau_0 - c' - 1)n} \leq e^{-\frac{\tau}{2}}$$

pro τ dost velké (v 1. kroku jsme využili odhadu $|\text{supp } \pi| \leq e^{|\pi|}$).

Jako závěr můžeme formulovat

Tvrzení 4. *Pro výše definované kontury splňující podmínku $|w(\Gamma)| \leq e^{-\tau|\Gamma|}$, τ dost velké, platí následující odhady pro clusterové váhy:*

$$|q(\pi)| \leq e^{-\frac{\tau}{2}|\pi|}, \quad \pi \in \mathcal{C}, \quad (1.29)$$

$$\sum_{\pi \in \mathcal{C}: t \in \text{dom } \pi} |q(\pi)| \leq e^{-\frac{\tau}{2}}, \quad t \in \mathbb{Z}^\nu. \quad (1.30)$$

◇

Nadále předpokládejme, že konturový model je *translačně invariantní*, tzn. definujeme-li operaci translace na konturách

$$\Gamma' = \mathcal{T}_t \Gamma \Leftrightarrow \text{dom}(\Gamma') = \text{dom } \Gamma + t, \quad x'_{\text{dom } \Gamma + t} = x_{\text{dom } \Gamma},$$

platí

$$w(\Gamma') = w(\Gamma).$$

V tomto případě lze ve vyjádření pro $\ln Z_\Lambda$ oddělit objemovou a povrchovou část a dokázat existenci termodynamické limity. Platí⁹:

$$\begin{aligned} \ln Z_\Lambda &= \sum_{\pi \in \mathcal{C}(\Lambda)} q(\pi) = \sum_{t \in \Lambda} \sum_{\pi \in \mathcal{C}(\Lambda): (\text{dom } \pi)_1 = t} q(\pi) = \\ &= \sum_{t \in \Lambda} \left[\sum_{\pi \in \mathcal{C}: (\text{dom } \pi)_1 = t} q(\pi) - \sum_{\pi \notin \mathcal{C}(\Lambda): (\text{dom } \pi)_1 = t} q(\pi) \right] = \\ &= - \sum_{t \in \Lambda} \beta f_t + B_\Lambda, \end{aligned}$$

kde jsme označili $(\text{dom } \pi)_1$ jako 1. bod množiny $\text{dom } \pi$ ve smyslu libovolně zvoleného pevného lexikografického uspořádání a veličiny $f \equiv f_t$ (nezávislost f_t na t plyne z translační invariance modelu), B_Λ jsou dány vztahy

$$\begin{aligned} \beta f &= - \sum_{\pi \in \mathcal{C}: (\text{dom } \pi)_1 = t} q(\pi) = - \sum_{\pi \in \mathcal{C}: t \in \text{dom } \pi} \frac{q(\pi)}{|\text{dom } \pi|}, \quad t \in \mathbb{Z}^\nu, \\ B_\Lambda &= - \sum_{\pi \notin \mathcal{C}(\Lambda): (\text{dom } \pi)_1 \in \Lambda} q(\pi). \end{aligned}$$

podle Tvzení 4 platí odhady

$$\begin{aligned} |\beta f| &\leq e^{-\frac{\tau}{2}}, \\ |B_\Lambda| &\leq \sum_{\pi \in \mathcal{C}: \text{dom } \pi \cap \Lambda, \Lambda^c \neq \emptyset} |q(\pi)| \leq e^{-\frac{\tau}{2}} |\partial_l \Lambda|. \end{aligned}$$

Existence termodynamické limity je nyní zřejmá, neboť

$$\lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^\nu} \frac{\ln Z_\Lambda}{|\Lambda|} = -\beta f.$$

Výsledky zformulujeme do

Tvrzení 5. *Pro translačně invariantní konturový model s konturami definovanými výše, jejichž váhy splňují podmínku $|w(\Gamma)| \leq e^{-\tau|\Gamma|}$, τ dost velké, lze psát*

$$\ln Z_\Lambda = -\beta f |\Lambda| + B_\Lambda, \quad (1.31)$$

s odhady na veličiny f , B_Λ danými nerovnostmi

$$|\beta f| \leq e^{-\frac{\tau}{2}}, \quad (1.32)$$

$$|B_\Lambda| \leq e^{-\frac{\tau}{2}} |\partial_l \Lambda|. \quad (1.33)$$

⁹Ve vyjádření konečné sumy jako rozdílu dvou nekonečných sum využíváme jejich konvergence podle Tvzení 4.

Konturový model připouští termodynamickou limitu a pro hustotu volné energie f máme vyjádření

$$\beta f = - \sum_{\pi \in \mathcal{C}: t \in \text{dom } \pi} \frac{q(\pi)}{|\text{dom } \pi|}, \quad t \in \mathbb{Z}^\nu. \quad (1.34)$$

Volná energie je také analytickou funkcí všech parametrů, v nichž jsou konturové váhy $w(\Gamma)$ analytické.

◇

Na závěr této kapitoly ještě najdeme vyjádření pravděpodobnosti realizace zvoleného konečného kompatibilního souboru $\partial \in \Delta(\Lambda)$ (předpokládáme nyní reálný model). Lze psát:

$$\begin{aligned} \text{Prob}_\Lambda(\partial) &= \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\bar{\partial} \in \Delta(\Lambda): \partial \subset \bar{\partial}} \prod_{\Gamma \in \bar{\partial}} w(\Gamma) = \\ &= w(\partial) \frac{Z_{\Lambda \setminus [\partial]}}{Z_\Lambda}, \end{aligned}$$

kde jsme zavedli váhu kompatibilního souboru

$$w(\partial) = \prod_{\Gamma \in \partial} w(\Gamma)$$

a $[\partial]$ označuje množinu všech kontur nekompatibilních alespoň s jednou konturou z ∂ .

Použijeme-li pro vyjádření partičních sum clusterový rozvoj, dostaneme

Tvrzení 6. *Pravděpodobnost realizace kompatibilního souboru $\partial \in \Delta(\Lambda)$ na konfiguračním prostoru $\Delta(\Lambda)$ je dána clusterovým rozvojem*

$$\text{Prob}_\Lambda(\partial) = w(\partial) \exp \left[- \sum_{\pi \in \mathcal{C}(\Lambda): \pi \cap \partial} q(\pi) \right] \quad (1.35)$$

a horní odhad této veličiny je

$$\text{Prob}_\Lambda(\partial) \leq w(\partial). \quad (1.36)$$

◇

Obecnější tvrzení o korelačních funkcích viz [5].

1.6 Pirogov-Sinajova teorie

Tato kapitola je věnována rozboru nízkoteplotních vlastností modelů s konečným počtem periodických základních stavů. Tato základní úloha statistické mechaniky mřížových systémů je řešena Pirogov-Sinajovou teorií, její původní forma

viz např. [3]. Elegantní formulace založená na myšlence metastabilních modelů sestavených nad jednotlivými základními stavy umožňující využít dobře analyzované vlastnosti tlumených konturových modelů byla poprvé uvedena v článku [2], její rozšíření na systémy s komplexními interakcemi (modely teorie pole) viz [6].

Základní myšlenka této teorie spočívá v reformulaci mřížového modelu způsobem, ve kterém ústředním objektem jsou *kontury* jako komponenty hranic oddělujících jednotlivé základní stavy. Ukazuje se, že právě vlastnosti těchto rozhraní jsou určující pro chování celého systému. PS-teorie poskytuje silné tvrzení o topologických vlastnostech nízkoteplotního fázového diagramu, tvrdí, že je pouhou spojitou deformací fázového diagramu při nulové teplotě. Klade při tom v podstatě jedinou podmínku, aby energetické bariéry mezi oblastmi jednotlivých základních stavů byly dostatečně striktní (Peierlsova podmínka).

Nalezení asymptotiky fázového diagramu je předmětem poruchové teorie, jejíž ospravedlnění PS-teorie rovněž poskytuje.

Následuje nikoliv vyčerpávající formulace této teorie, ale její shrnutí v takové formě, ve které bude použita v kap. 3 při rozboru konkrétního modelu.

1.6.1 Reformulace modelu

Budeme uvažovat parametrický model popsáný v odst. 1.4.1. V situacích, ve kterých budeme používat výsledky Pirogov-Sinajovy teorie, bude vždy splněna následující podmínka.

Podmínka M. *Je dán parametrický model definovaný translačně invariantním m -potenciálem konečného dosahu splňující tyto podmínky: 1) potenciál Φ_0 má pouze konečný počet lokálních základních stavů, tzn. $|g(\Phi_0)| < \infty$, 2) existuje takové $l \geq R$, pro něž každý lokální základní stav na množině $R_l(t)$ pro $t \in \mathbb{Z}^\nu$ má prodloužení na lokální základní stav (na \mathbb{Z}^ν).*

◇

Poznamenejme, že část 2) této podmínky má pouze technický charakter a patrně není zcela nezávislá na bodu 1). K tomuto problému se ještě vrátíme při důkazu Peierlsovy podmínky pro tento model.

Protože potenciál Φ_0 je podle předpokladu translačně invariantní, je nutně každý lokální základní stav $x \in g(\Phi_0)$ periodický (jinak by bylo možno pomocí translace neperiodického základního stavu zkonstruovat nekonečně mnoho takových základních stavů) a platí tedy rovnost $\hat{g}(\Phi_0) = g(\Phi_0)$.

Bez újmy na obecnosti lze dokonce předpokládat, že tyto základní stavy jsou translačně invariantní. V opačném případě bychom totiž provedli ‘coarse-graining’ spočívající v nalezení společné grupy symetrie \mathcal{W} (podgrupa grupy translací \mathbb{Z}^ν) základních stavů, záměně $\mathbb{Z}^\nu \rightarrow \mathcal{W}$ a identifikaci bloků¹⁰ $\mathbb{Z}^\nu/\mathcal{W} + t$, $t \in \mathcal{W}$ jako

¹⁰Prvky faktorgrupy $\mathbb{Z}^\nu/\mathcal{W}$ lze přirozeně identifikovat jako podmnožinu \mathbb{Z}^ν .

bodů nové mříže \mathcal{W} . Transformace spinové množiny je $S \rightarrow S^{\mathbb{Z}^\nu/\mathcal{W}}$ a nový potenciál definujeme tak, aby byl ekvivalentní Φ . Nadále tedy budeme předpokládat, že množina $g(\Phi_0)$ obsahuje pouze translačně invariantní konfigurace a lze ji proto zadat množinou $Q \subset S$, pro níž konfigurace

$$x_i = q \text{ pro všechna } i \in \mathbb{Z}^\nu, q \in Q$$

jsou právě všechny základní stavy z množiny $g(\Phi_0)$. Symbolem q budeme nadále označovat prvky množiny Q a současně pro zjednodušení též konstantní konfigurace z množiny Ω , které jsou rovny q ve všech mřížových bodech.

Pro konfiguraci $x \in \Omega$ a $l \geq R$ provedeme následující klasifikaci bodů. Bod $t \in \mathbb{Z}^\nu$ nazveme *q-regulárním bodem* konfigurace x , jestliže $x_{R_l(t)} = q$ pro $q \in Q$. Bod, který není *q-regulární* pro žádné $q \in Q$, označíme termínem *irregulární bod* konfigurace x .

Konfiguraci $x \in \Omega$ nazveme *q-zředěnou*, jestliže $x = q$ s. v.

Definujeme *konturu* zředěné konfigurace x jako objekt $\Gamma = \langle \text{dom } \Gamma, x_{\text{dom } \Gamma} \rangle$, kde $\text{dom } \Gamma$ je souvislá komponenta množiny všech irregulárních bodů. Souvislá komponenta A množiny $(\text{dom } \Gamma)^c$ je *q-komponenta*, jestliže $x_{\partial A} = q_{\partial A}$ ¹¹. Konečnou komponentu $(\text{dom } \Gamma)^c$ označíme symbolem $\text{Ext } \Gamma$. Jde-li o *q-komponentu*, budeme konturu psát jako Γ^q . Dále zavedeme standardní označení $\text{Int}_m \Gamma$ pro sjednocení všech konečných *m-komponent* a dále

$$\text{Int } \Gamma = \cup_{m \in \mathbb{N}} \text{Int}_m \Gamma, \quad V(\Gamma) = \text{dom } \Gamma \cup \text{Int } \Gamma.$$

Jestliže pro všechny kontury *q-zředěné konfigurace* $x \in \Omega$ platí $V(\Gamma) \subset R_{-1}(\Lambda)$, nazveme ji *q-zředěnou konfigurací v Λ* . Množinu všech takových konfigurací označíme Ω_Λ^q . Pro každou konfiguraci $x \in \Omega_\Lambda^q$ je zřejmé $x_{\Lambda^c} = q$.

Konturu, jejíž nosič není obsažen ve vnitřku žádné jiné kontury, nazveme *vnější konturou*.

Hamiltonián konfigurace $x \in \Omega_\Lambda^q$ lze psát takto:

$$H(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \sum_{B \not\subset \Lambda^c} \sum_{t \in B} \frac{\Phi_B(x_B)}{|B|} = \sum_{t \in \Lambda} e_t(x) + \sum_{B \not\subset \Lambda^c} \frac{|B \setminus \Lambda|}{|B|} \Phi_B(x_B), \quad (1.37)$$

kde jsme zavedli *hustotu energie* konfigurace x v bodě t vztahem

$$e_t(x) = \sum_{B: t \in B} \frac{\Phi_B(x_B)}{|B|}. \quad (1.38)$$

Druhý člen na pravé straně vztahu (1.37) závisí pouze na Λ a q a lze jej tedy vynechat (dostaneme ekvivalentní model ve smyslu odst. 1.2). Označíme-li $\Lambda_q \subset \Lambda$

¹¹V důsledku translační invariance konfigurací z množiny $g(\Phi_0)$ ‘obarvení’ každé komponenty existuje a je jednoznačné.

sjednocení množiny všech q -regulárních bodů v množině Λ a nosičů všech q -kontur konfigurace $x \in \Omega_\Lambda^q$, platí

$$H(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \sum_{q \in Q} e_q |\Lambda_q| + \sum_{\Gamma} E(\Gamma) \quad (1.39)$$

s hustotou energie e_q v q -oblasti

$$e_q = e_t(q) \quad (1.40)$$

nezávisle na výběru bodu $t \in \mathbb{Z}^\nu$ a energií kontury $E(\Gamma^q)$ definovanou předpisem

$$E(\Gamma^q) = \sum_{t \in \text{dom } \Gamma^q} [e_t(x) - e_q]. \quad (1.41)$$

Označíme-li ještě veličinu

$$w(\Gamma) = e^{-\beta E(\Gamma)} \quad (1.42)$$

jako *váhu* kontury, můžeme partiční sumu Z_Λ^q všech q -zřaděných konfigurací v Λ psát ve tvaru

$$Z_\Lambda^q = \sum_{x \in \Omega_\Lambda^q} \prod_{\Gamma} w(\Gamma) \prod_{q=1}^Q e^{-\beta e_q |\Lambda_q|}. \quad (1.43)$$

Připomeňme, že veličiny e_q , $w(\Gamma)$ závisí na parametru μ .

Takto zapsaný model připouští novou interpretaci. Každá konfigurace $x \in \Omega_\Lambda^q$ je jednoznačně určena kompatibilním souborem kontur, jejichž vlastnosti jsou určeny zadáním *nosiče* $\text{dom } \Gamma$, *váhy* $w(\Gamma)$ a předpisu na přiřazení stavů ('*obarvení*') jednotlivým komponentám $(\text{dom } \Gamma)^c$. *Kompatibilita* je v tomto případě definována 1) kompatibilitou nosičů (ve smyslu $\text{dom } \Gamma_1 \cup \text{dom } \Gamma_2$ není souvislá množina), 2) kompatibilitou barev (předpisy na obarvení každé komponenty množiny $\mathbb{Z}^\nu \setminus \cup \text{dom } \Gamma$ jsou slučitelné), 3) kompatibilitou kontur a okrajové podmínky q (vnější kontury souboru musí být q -kontury). Každému základnímu stavu $q \in Q$ přiřazujeme hustotu energie e_q . Množina Ω_Λ^q bude nadále označovat podmnožinu configuračního prostoru Ω stejně jako množinu příslušných kompatibilních souborů kontur.

Abstraktní model tohoto typu je nazýván *Pirogov-Sinajův model*.

Řekneme, že PS-model splňuje *Peierlsovu podmínku*, jestliže pro každou konturu Γ platí nerovnost

$$w(\Gamma) \leq e^{-\tau |\text{dom } \Gamma|} \quad (1.44)$$

s konstantou τ vyhovující předpokladům Tvrzení 5.

Následující Lemma ukazuje, že výše uvažované modely vyhovují Peierlsově podmínce na jisté množině $U(0) \times (\beta_0, \infty)$.

Lemma 4. *Nechť parametrický model vyhovuje Podmínce M. Potom existují $l \geq R$, otevřená množina $U(0) \subset \mathbb{R}^{r-1}$ a konstanta K takové, že platí¹²*

$$E_\mu(\Gamma) \geq K|\text{dom } \Gamma| \quad \text{pro } \mu \in U(0).$$

Poznámka. Bod 2) Podmínky M pravděpodobně není nezávislý a je v nějakém smyslu důsledkem bodu 1). Platí totiž tvrzení (Holsztynski-Slawny, viz např. [1]), podle něhož každý konečně-dosahový m-potenciál s konečným počtem lokálních základních stavů splňuje Peierlsovu podmínku. Důkaz tohoto tvrzení však nemá konstruktivní charakter a neposkytuje tedy odhad konstanty vystupující v Peierlsově podmínce. Splnění dodatečného předpokladu tuto možnost dává a jeho ověření je zpravidla triviální.

Důkaz. Energie kontury je definována vztahem (1.41). Zaveďme označení

$$e_\mu = \max_{q \in Q} e_{\mu q}, \quad (1.45)$$

$$\|x\|_\mu(t) = \sum_{s \in R_i(t)} [e_{\mu s}(x) - e_\mu], \quad (1.46)$$

$$\|\Phi\|_\mu = \inf_{x \in \Omega, t: t \text{ je irreg. bod } x} \|x\|_\mu(t). \quad (1.47)$$

Jestliže zvolíme l tak, aby byl splněn bod 2) Podmínky M, potom pro každý irregulární bod $t \in \mathbb{Z}^r$ konfigurace x platí, že $x_{R_i t}$ není lokální základní stav na $R_i(t)$ a nutně tedy $\|x\|_0(t) > 0$. Použitím analogických argumentů jako v důkazu Lemmatu 1 (potenciál je translačně invariantní a spinová množina konečná, tudíž množina všech hodnot $\|x\|_0(t)$ je konečná) dostaneme nerovnost $\|\Phi\|_0 > 0$. Pro konturovou energii lze použít odhad

$$E_\mu(\Gamma) \geq \frac{1}{(2l)^\nu} \|\Phi\|_\mu |\text{dom } \Gamma|.$$

Protože veličina $\|\Phi\|_\mu$ je spojitou funkcí proměnné μ , nutně platí

$$\|\Phi\|_\mu \geq \text{konst} > 0 \quad \text{pro všechna } \mu \in U(0),$$

což dokazuje uvedené lemma.

◇

1.6.2 Metastabilní modely

Pirogov-Sinajův model zavedený v předchozí kapitole není konturový model ve smyslu odst. 1.5.2 (požadavek kompatibility barev vede k dalekodosahové interakci kontur a navíc takto definovaná kompatibilita nemá binární charakter)

¹²Zde je explicitně vyznačena parametrická závislost konturové energie, podobně jako v případě veličin e_q v důkazu lemmatu.

a proto nelze přímo využít dobrých vlastností, jaké tyto modely mají. Je však velmi výhodné přepsat partiční sumu Z_Λ^q do tvaru partiční sumy konturového modelu, přestože kontury tohoto modelu ztratí přímý fyzikální význam. Ten zůstane zachován pouze na úrovni vnějších kontur, to však bude dostačující k rozboru vlastností příslušného Gibbsova stavu získaného jako termodynamickou limitu konečně-objemových Gibbsových měř s okrajovou podmínkou q .

Ztotožníme-li konfiguraci $x \in \Omega_\Lambda^q$ s odpovídajícím kompatibilním souborem kontur $\{\Gamma_\alpha\}$ a označíme-li jeho podmnožinu vnějších kontur $\{\Gamma_\alpha\}_{\text{Ext}}$, lze přepsat partiční sumu do tvaru

$$Z_\Lambda^q = \sum_{\{\Gamma_\alpha^q\}_{\text{Ext}}} e^{-\beta e_q |\Lambda \setminus \text{Int}|} \prod_\alpha \left[w(\Gamma_\alpha^q) \prod_m Z_{\text{Int}_m \Gamma_\alpha^q}^m \right]. \quad (1.48)$$

Tento vztah představuje rekurentní rovnici pro výpočet partiční sumy. Ve vyjádření partiční sumy systému s okrajovou podmínkou q vystupují veličiny typu Z^m , $m \neq q$. Přepíšeme-li formálně

$$Z_\Lambda^q = \sum_{\{\Gamma_\alpha^q\}_{\text{Ext}}} e^{-\beta e_q |\Lambda \setminus \text{Int}|} Z_{\text{Int}}^q \left[\prod_\alpha w(\Gamma_\alpha^q) \prod_m \frac{Z_{\text{Int}_m \Gamma_\alpha^q}^m}{Z_{\text{Int}_m \Gamma_\alpha^q}^q} \right],$$

a opakujeme-li tento proces, dostaneme následující

Tvrzení 7. *Partiční sumu konfiguračního prostoru Ω_Λ^q lze psát ve tvaru partiční sumy konturového modelu*

$$Z_\Lambda^q = e^{-\beta e_q |\Lambda|} \sum_{\{\Gamma_\alpha^q\}} \prod_\alpha K(\Gamma_\alpha^q), \quad (1.49)$$

kde se sčítá přes všechny kompatibilní soubory q -kontur, přičemž kompatibilitou se nyní rozumí relace

$$\Gamma_1^q \iota \Gamma_2^q \Leftrightarrow d(\text{dom } \Gamma_1^q, \text{dom } \Gamma_2^q) < 2.$$

Nové váhy kontur jsou dány vztahem

$$K(\Gamma_\alpha^q) = w(\Gamma_\alpha^q) \prod_m \frac{Z_{\text{Int}_m \Gamma_\alpha^q}^m}{Z_{\text{Int}_m \Gamma_\alpha^q}^q}. \quad (1.50)$$

◇

Konturový model přiřazený okrajové podmínce q nazýváme q -*model*. Konturu Γ nazveme *stabilní*, jestliže její váha splňuje nerovnost

$$K(\Gamma) \leq e^{-\frac{\tau}{2} |\text{dom } \Gamma|}, \quad (1.51)$$

kde τ je konstanta vystupující v Peierlsově podmínce (1.44). Definujeme *metastabilní q -model* nad základním stavem $q \in Q$ tak, že zakážeme nestabilní kontury. *Partiční sumu metastabilního q -modelu* definujeme předpisem

$$Z'_\Lambda{}^q = e^{-\beta e_q |\Lambda|} \sum'_{\{\Gamma_\alpha^q\}} \prod_\alpha K(\Gamma_\alpha^q), \quad (1.52)$$

kde se sčítá přes kompatibilní soubory stabilních kontur. Tento konturový model splňuje předpoklady Tvzení 5, platí tedy pro něj všechny v tomto Tvzení uvedené závěry. Především systém připouští termodynamickou limitu a hustota volné energie

$$f_q = -\beta^{-1} \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^\nu} \frac{\ln Z'_\Lambda{}^q}{|\Lambda|} \quad (1.53)$$

je určena konvergentním clusterovým rozvojem (1.34). Obsahuje-li q -model pouze stabilní kontury, označíme q jako *stabilní okrajovou podmínku* a Gibbsův stav, který je limitou konečně-objemových Gibbsových měr s okrajovou podmínkou q , jako *stabilní q -fázi*.

1.6.3 Vlastnosti stabilních fází

Pro stabilní okrajovou podmínku q je $Z_\Lambda^q = Z'_\Lambda{}^q$. Protože hustota volné energie nazávisí na okrajové podmínce, je nutně $f = f_q$.

Zabývejme se nyní charakterem stabilní fáze. Protože pravděpodobnost realizace konfigurace na Λ obsahující zvolenou vnější konturu Γ^q lze vyjádřit vztahem

$$\text{Prob}_\Lambda(\Gamma^q) = \frac{1}{Z_\Lambda^q} \sum_{\{\Gamma_\alpha^q\}: \Gamma^q \in \{\Gamma_\alpha^q\}_{\text{Ext}}} \prod_\alpha K(\Gamma_\alpha^q),$$

je zřejmé, že q -model dává stejnou odpověď na otázky týkající se vnějších kontur jako původní model. Lze tedy využít Tvzení 6, podle něhož¹³

$$\text{Prob}_\Lambda(\Gamma^q) \leq K(\Gamma^q).$$

Určeme nyní pravděpodobnost $\text{Prob}(x_t \neq q_t)$, že konfigurace v bodě t nenabývá hodnoty q . Lze ji zřejmě odhadnout shora jako pravděpodobnost, že existuje kontura Γ , pro níž $t \in V(\Gamma)$. Protože počet takových kontur délky n je nejvýše roven $(2n)^\nu c^n$, kde c je konstanta vystupující v Lemmatu 1, máme odhad

$$\text{Prob}(x_t \neq q_t) \leq \sum_{n=1}^{\infty} (2n)^\nu c^n e^{-\frac{\tau}{2}n}.$$

Odtud plyne po triviálním zobecnění

¹³Odhad platí pro všechny kontury, tím spíše tedy pro vnější.

Lemma 5. *Nechť parametrický model splňuje Podmínku M a okrajová podmínka q je stabilní v bodě (μ, β) . Potom pro příslušnou stabilní q -fázi platí nerovnost*

$$\text{Prob}(x_A \neq q_A) \leq e^{-\frac{\tau}{3}|A|} \quad (1.54)$$

pro každou konečnou množinu $A \subset \mathbb{Z}^\nu$.

◇

Nechť nyní existuje křivka $\mu(\beta)$, $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mu = 0$, na níž je okrajová podmínka q stabilní. Potom podle výše uvedeného Lemmatu

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \text{Prob}(x_A \neq q_A) = 0.$$

To však znamená, že

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathcal{P}(\beta, \mu(\beta)) = \mathcal{P}_q, \quad (1.55)$$

kde jsme označili symbolem \mathcal{P}_q Gibbsův stav při nulové teplotě lokalizovaný na základním stavu q (viz odst. 1.3). Tento závěr zdůvodňuje označení ‘ q -fáze’: je to Gibbsův stav lokalizovaný ‘v blízkosti’ konfigurace q .

V dalších dvou odstavcích se budeme věnovat struktuře fázového diagramu na okolí bodu $\mu = 0$, $\beta = \infty$. Nejprve budeme uvažovat případ, kdy množina Q obsahuje pouze \mathcal{F} -ekvivalentní základní stavy a volná energie je analytickou funkcí proměnných β , μ (neobjevují se tedy žádné fázové přechody), poté složitějšímu případu, kdy tyto základní stavy nejsou \mathcal{F} -ekvivalentní a objevuje se netriviální fázový diagram.

1.6.4 Ekvivalentní základní stavy

Připomeňme, že \mathcal{F} je společná grupa symetrie množiny potenciálů Φ_μ , kde $\mu \in U(0)$. Předpokládejme, že množina Q obsahuje pouze \mathcal{F} -ekvivalentní základní stavy. Evidentně potom platí $g(\Phi_\mu) = g(\Phi_0)$ pro všechna $\mu \in U(0)$. Vyšetřujeme tedy nyní chování modelu v oblastech fázového diagramu při nulové teplotě, kde se nemění počet základních stavů.

Důsledkem ekvivalence základních stavů je rovnost

$$Z_\Lambda^q = Z_\Lambda^{q'} \quad \text{pro všechna } q, q' \in Q,$$

ze které plyne

$$K(\Gamma) = w(\Gamma).$$

Podle Lemmatu 4 existují $U(0)$ a β_0 takové, že pro $\mu \in U(0)$, $\beta \geq \beta_0$ je splněna Peierlsova podmínka a tudíž všechny kontury jsou stabilní. Využijeme-li ještě Tvrzení 5 a netriviálního výsledku týkajícího se úplnosti získaného v [2], můžeme výsledek shrnout do

Tvrzení 8. *Je dán parametrický model splňující Podmínku M a necht' všechny základní stavy z množiny $g(\Phi_0)$ jsou \mathcal{F} -ekvivalentní. Potom existují $U(0)$ a β_0 takové, že platí:*

- i) *pro všechna $\mu \in U(0)$, $\beta \geq \beta_0$ existuje právě $|g(\Phi_0)|$ stabilních fází,*
- ii) *volná energie $f(\beta, \mu)$ je analytickou funkcí svých proměnných na množině $(\beta, \infty) \times U(0)$ (tvrzení o neexistenci fázového přechodu na malém okolí bodu $\mu = 0$, $\beta = \infty$).*

◇

Tvrzení zahrnuje mj. problém koexistence '+' a '-' fáze v Isingově ferromagnetickém modelu při nulovém vnějším poli a dost nízké teplotě, naopak neřeší např. zajímavý problém existence dvou antiferromagnetických fází v Isingově antiferromagnetickém modelu při nízkých teplotách a slabém vnějším poli (při nenulovém vnějším poli totiž oba antiferromagnetické základní stavy nejsou ekvivalentní vzhledem k symetrii potenciálu). Tento případ vyžaduje poněkud jemnější rozbor, přesto i zde lze pomocí clusterových rozvoju ukázat stabilitu obou antiferromagnetických okrajových podmínek (podrobnosti a exaktní důkaz viz [10]).

1.6.5 Obecné základní stavy

Nyní se věnujme obecnému případu, kdy $g(\Phi_0)$ neobsahuje nutně pouze \mathcal{F} -ekvivalentní základní stavy. Potom je chování jednotlivých metastabilních modelů rozdílné a definujeme *index metastability* okrajové podmínky q předpisem

$$a_q(\beta, \mu) = f_q(\beta, \mu) - f(\beta, \mu), \quad (1.56)$$

kde jsme označili

$$f(\beta, \mu) = \min_q f_q(\beta, \mu). \quad (1.57)$$

Skutečná hustota volné energie nezávisí na okrajové podmínce a je shodná s hustotou volné energie metastabilního modelu přiřazeného stabilní okrajové podmínce. Intuitivně lze tedy očekávat, že stabilní okrajové podmínky budou právě ty s nulovým indexem metastability, nenulový index totiž signalizuje, že podstatné příspěvky do partiční sumy nebyly zahrnuty (právě nestabilní kontury umožňující 'laciný' přechod do výhodnější fáze). Přesné tvrzení je obsaženo v následující větě.

Tvrzení 9. *Necht' je dán parametrický model splňující Podmínku M. Potom existují β_0 a $U(0)$ takové, že pro libovolné $\beta \geq \beta_0$, $\mu \in U(0)$ platí:*

- i) *jestliže $a_q \text{diam } \Lambda \leq 1$, potom je každá kontura Γ^q , $\text{dom } \Gamma^q \subset \Lambda$ stabilní. Speciálně pokud $a_q = 0$, pak okrajová podmínka q je stabilní a poskytuje tak stabilní q -fázi,*

- ii) stabilní fáze představují úplnou množinu čistých fází,
- iii) systém připouští termodynamickou limitu a hustota volné energie je rovna $f(\beta, \mu)$ danému vztahem (1.57).

Důkaz. Plyne z teorému 3.1 v [6] a teorému v [2] kap. 3.2 díky Lemmatu 4 (splnění Peierlsovy podmínky pro modely vyhovující Podmínce M).

◇

Fázový diagram parametrického modelu je definován v odst. 1.4.1. Podle výše uvedeného Tvzení vyhovuje zobrazení

$$\mu \rightarrow a(\beta, \mu) = (a_{q_1}, \dots, a_{q_n}),$$

kde jsme označili symbolem q_k třídu \mathcal{F} -ekvivalentních konfigurací z množiny $g(\Phi_0)$, podmínkám kladeným na funkci (1.15). Platí následující věta, která je přímým zobecněním teorémů 1.10 (fázový diagram) a 3.2 (úplnost) v [2].

Tvrzení 10. *Nechť je dán parametrický model splňující Podmínku M, jeho grupu symetrie označme \mathcal{F} . Nechť soubor poruchových potenciálů $\{\Phi_i\}$ úplně snímá degeneraci množiny $g(\Phi_0)$ vzhledem k \mathcal{F} . Potom existuje oblast $(\beta_0, \infty) \times U(0)$, na níž je fázový diagram \mathcal{F} -úplný.*

◇

Zbývá vyřešit problém, jak nalézt fázový diagram, jehož existence je zaručena díky předchozímu tvrzení. Jde nám tedy o rozvinutí poruchové metody, která by umožnila nalézt alespoň asymptotické chování tohoto diagramu.

Křivka $a = 0$ koexistence $|Q|$ fází je dána podmínkou $f_1 = \dots = f_{|Q|}$. Zvolíme-li hladinu energie D , lze určit takové l (vystupující v definici kontur), že pro každou konturu Γ^q , pro níž $E(\Gamma) \leq D$, je $\text{Int } \Gamma^q = \text{Int}_q \Gamma^q$ (zpravidla ověřujeme splnění poněkud silnější podmínky $\text{Int } \Gamma^q = \emptyset$). Takovou konturu nazveme *excitací* základního stavu q . Množinu všech excitací základního stavu q s energií nepřevyšující D označme \mathcal{K}_D^q a množinu všech clusterů těchto excitací \mathcal{C}_D^q . Pro excitaci platí $K(\Gamma) = w(\Gamma)$ a díky konvergenci clusterového rozvoje pro volnou energii metastabilního q -modelu lze psát (viz odst. 1.5.2)

$$f_q = e_q - \beta^{-1} \sum_{\pi \in \mathcal{C}_D^q} \frac{q(\pi)}{|\text{dom } \pi|} + o(e^{-\beta D}).$$

Porovnáním hustot volných energií těchto ‘plynů excitací’ zkonstruovaných nad jednotlivými základními stavy dostaneme křivku $\mu = \mu(\beta)$ koexistence $|Q|$ čistých fází s přesností $o(e^{-\beta D})$. Analogicky bychom postupovali v případě asymptotiky variet koexistence vyšší dimenze.

1.7 Systémy s nekonečným počtem základních stavů

V této kapitole popíšeme v základních rysech teorii, která byla vyvinuta v práci [7] a věnuje se rozboru nízkoteplotních vlastností systémů připouštějících formální poruchové rozvoje (*regulární systémy*). Třída takových systémů je poměrně široká a zahrnuje mnoho modelů s nekonečným počtem základních stavů. V článku [11] byla tato teorie aplikována na rozbor lamelárních fází Widomova modelu (viz přehled v následující kapitole), z této práce také částečně uijeme terminologii a metodu analýzy prostřednictvím BS-teorie.

Poruchový rozvoj zde není pouze technickým prostředkem umožňujícím efektivně určit asymptotické chování fázového diagramu, ale hraje mnohem důležitější roli. Strategie analýzy modelu totiž spočívá v takové jeho reformulaci, kdy jednotlivé základní stavy jsou nahrazeny ‘plynem excitací nízkého řádu’ (konstrukce *omezených souborů* řízená poruchovým rozvojem) a nový potenciál je teplotně závislý. Podstatné je, že nový (‘renormalizovaný’) model může mít lepší vlastnosti než model původní. Podaří-li se touto technikou dosáhnout situace, kdy renormalizovaný model bude mít pouze konečný počet lokálních základních stavů (*dominantní základní stavy* jako význačné základní stavy původního modelu), lze nad těmito základními stavy reprezentovanými soubory konfigurací původního modelu rozvinout teorii, která představuje rozšíření Pirogov-Sinajovy teorie.

Přes značné množství předpokladů nutných k platnosti zde formulovaných tvrzení představuje tato teorie mocný nástroj umožňující analýzu široké třídy modelů klasické statistické mechaniky.

1.7.1 Konstrukce faktorového modelu

Budeme vycházet z parametrického modelu definovaného v odst. 1.4.1 a zaměříme se nyní na případ, kdy $|g(\Phi_0)| = \infty$. Základním předpokladem bude *rigidita* každého základního stavu $X \in g(\Phi_0)$ (viz odst. 1.3) zaručující jednoznačnost prodloužení konfigurace X_{Λ^c} na lokální základní stav.

První fáze konstrukce bude podobná postupu, jímž jsme v odst. 1.6.1 zavedli kontury. Ukáže se však, že objekty takto zavedené nemají dobré vlastnosti a stanou se pouze pomocným objektem teorie.

Zvolme $l \geq R$. Pro konfiguraci $x \in \Omega$ řekneme, že $t \in \mathbb{Z}^\nu$ je *regulární bod*, jestliže restrikce $x_{R_l t}$ je lokální základní stav na $R_l t$ (viz odst. (1.3)) vzhledem k potenciálu Φ_0 , v opačném případě ho nazveme *irregulárním bodem*. Souvislé komponenty množiny všech irregulárních bodů společně s konfiguracemi na těchto komponentách nazveme *defekty* a označíme $\mathcal{D} = (\text{dom } \mathcal{D}, x_{\text{dom } \mathcal{D}})$. energii defektu $\mathcal{D} = (\text{dom } \mathcal{D}, x_{\text{dom } \mathcal{D}})$ definujeme předpisem

$$E_0(\mathcal{D}) = \sum_{B \subset \text{dom } \mathcal{D}} [\Phi_{0B}(x_B) - \Phi_{0B}],$$

kde jsme označili

$$\Phi_{0B} = \min_x \Phi_{0B}(x_B).$$

Nechť $X \in g(\Phi_0)$. Konfiguraci $y \in \Omega$ nazveme X -zřaděnou, jestliže $y = X$ s. v. Jestliže každý defekt \mathcal{D} konfigurace y splňuje podmínku $\text{dom } \mathcal{D} \subset \Lambda$, kde $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ je konečná množina, řekneme, že konfigurace y je X -zřaděná v Λ a množinu všech takových konfigurací budeme značit $\Omega_{\Lambda, X}$.

Kontury Γ definované v odst. 1.6.1 měly tu vlastnost, že jednoznačně určovaly ‘obarvení’ souvislých komponent množiny $(\text{dom } \Gamma)^c$. Přesněji: jestliže konfigurace $y \in \Omega$ obsahovala jedinou konturu Γ , potom pro každou komponentu A množiny $(\text{dom } \Gamma)^c$ existoval lokální základní stav $X \in g(\Phi_0)$, pro nějž platilo $X_A = y_A$. Zde zavedené defekty tuto vlastnost nemají, neboť obecně pro $\mathcal{D} = (\text{dom } \mathcal{D}, y_{\text{dom } \mathcal{D}})$ neexistuje lokální základní stav $X \in g(\Phi_0)$, pro nějž $X_{\text{Ext } \mathcal{D}} = y_{\text{Ext } \mathcal{D}}$. Defekt tedy destruktivně ovlivňuje svůj vnějšek, což vede k efektivní interakci vnějších defektů (vnější defekty definujeme analogicky jako vnější kontury), která není záležitostí pouze jejich nosičů a nemá binární charakter (v případě PS-teorie tato vlastnost typická pro konturové modely byla zachována pro vnější kontury, což umožnilo přeformulovat model přiřazením konturového modelu každé okrajové podmínce). BS-teorie řeší uvedený problém tak, že požaduje obnovení této vlastnosti alespoň na úrovni defektů do jisté hladiny energie.

Pro každý defekt $\mathcal{D} = (\text{dom } \mathcal{D}, x_{\text{dom } \mathcal{D}})$ platí, že konfigurace $x_{\partial_l(\text{dom } \mathcal{D})}$ je lokální základní stav na $\partial_l(\text{dom } \mathcal{D})$. Jestliže existuje rozšíření této konfigurace na lokální základní stav na $\text{dom } \mathcal{D}$, řekneme, že defekt je *odstranitelný*. Požadujeme, aby model vyhovoval následující podmínce (v [7] je nazývána ‘retouch property’) s vhodnou konstantou D (bude specifikována později):

Podmínka R. *Nechť je model zadán translačně invariantním m -potenciálem Φ_0 konečného dosahu a všechny jeho lokální základní stavy jsou rigidní. Požadujeme, aby každý defekt, jehož energie nepřevyšuje D , byl odstranitelný.*

◇

Pro odstranitelné defekty s energií nepřevyšující D zavedeme termín *excitace* a pro odlišení je budeme značit symbolem \mathcal{E} . Nechť $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ jsou dvě excitace. Nazveme je *kompatibilní*, jestliže $\text{dom } \mathcal{E}_1 \cup \text{dom } \mathcal{E}_2$ není souvislá množina. Řekneme dále, že excitace $\mathcal{E} = (\text{dom } \mathcal{E}, y_{\text{dom } \mathcal{E}})$ je *kompatibilní s lokálním základním stavem* x_Λ na množině Λ , jestliže $\text{dom } \mathcal{E} \subset \Lambda$ a $x_{\partial_l \text{dom } \mathcal{E}} = y_{\partial_l \text{dom } \mathcal{E}}$.

Množinu všech excitací do řádu D lokálního základního stavu x_Λ na Λ budeme značit $\mathcal{K}_D(x_\Lambda)$ a nazveme ji *omezený soubor řádu D nad x_Λ* . Příslušnou množinu clusterů těchto excitací označíme $\mathcal{C}_D(x_\Lambda)$. Defekty s energií převyšující D budeme nazývat *velké defekty*.

Nyní přistoupíme k ‘renormalizaci’ modelu. Na konfiguračním prostoru Ω zavedeme následující relaci ekvivalence: konfigurace jsou *ekvivalentní*, jestliže obsahují stejný soubor velkých defektů. Faktorizací množiny Ω podle této ekvivalence

dostaneme soubor tříd ekvivalentních konfigurací, který lze bijektivně zobrazit na množinu všech konfigurací neobsahujících excitace. Nazveme je *faktorové konfigurace* a množinu všech faktorových konfigurací označíme Ω^* . Speciálně $\Omega_{\Lambda, X}^*$ bude označovat množinu všech faktorových X -zřaděných konfigurací v Λ .

Partiční sumu $Z_{\Lambda, X}$ konfiguračního prostoru $\Omega_{\Lambda, X}$ lze psát ve tvaru partiční sumy množiny konfigurací $\Omega_{\Lambda, X}^*$ takto:

$$Z_{\Lambda, X} = \sum_{y \in \Omega_{\Lambda, X}} e^{-\beta H(y_{\Lambda} | y_{\Lambda^c})} = \sum_{y \in \Omega_{\Lambda, X}^*} e^{-\beta H^*(y_{\Lambda} | y_{\Lambda^c})}, \quad (1.58)$$

kde

$$H^*(y_{\Lambda} | y_{\Lambda^c}) = H(y_{\Lambda} | y_{\Lambda^c}) - \beta^{-1} \ln \Theta_{\Lambda \setminus \cup \text{dom } \mathcal{D}}(y_{\Lambda \setminus \cup \text{dom } \mathcal{D}}) \quad \text{pro } y \in \Omega_{\Lambda, X}^*. \quad (1.59)$$

Symbolem $\Theta_{\Lambda}(y_{\Lambda})$ pro $y \in g_{\Lambda}(\Phi_0)$ přitom označujeme partiční sumu množiny $\mathcal{K}_{\mathcal{D}}(y_{\Lambda})$ excitací do řádu \mathcal{D} nad lokálním základním stavem y_{Λ} na množině Λ . Smysl Podmínky R je v tom, že tento ‘plyn excitací’ nyní tvoří konturový model ve smyslu odst. 1.5 s vahami

$$w_0(\mathcal{E}) = e^{-\beta E_0(\mathcal{E})} \quad (1.60)$$

a tudíž lze psát clusterový rozvoj (1.22)

$$\ln \Theta_{\Lambda}(y_{\Lambda}) = \sum_{\pi \in \mathcal{C}_{\mathcal{D}}(y_{\Lambda})} q_0(\pi), \quad (1.61)$$

kde suma jde přes všechny cluster excitací lokálního základního stavu x_{Λ} na Λ .

Dospěli jsme k *faktorovému modelu* s konfiguračním prostorem Ω^* a teplotně závislým hamiltoniánem definovaným vztahem (1.59). Hamiltonián $H^*(y_{\Lambda} | y_{\Lambda^c})$ pro $y \in \Omega_{\Lambda, X}$ lze interpretovat jako volnou energii množiny všech konfigurací na množině Λ obsahujících stejný soubor velkých defektů jako y ; okrajová podmínka je určena lokálním základním stavem X .

1.7.2 Lokálně dominantní základní stavy

Další postup spočívá v rozboru základních stavů faktorového modelu a rozvinutí vhodné konturové techniky Pirogov-Sinajova typu. Vraťme se nyní k parametrickému modelu definovanému potenciálem Φ_{μ} . Výše provedená konstrukce zůstane beze změny, jednotlivé veličiny se však stanou parametricky závislými.

Je zřejmé, že faktorizace modelu mění potenciál přidáním clusterových příspěvků, které jsou vyššího řádu (libovolně slabší). Hledáme-li tedy základní stavy faktorového modelu, stačí se omezit na množinu základních stavů původního modelu, clusterová interakce pouze snímá jejich degeneraci.

¹⁴Symbol $\cup \text{dom } \mathcal{D}$ označuje sjednocení definičních oborů velkých defektů konfigurace y .

Formální hamiltonián faktorového modelu lze pro konfiguraci $X \in g(\Phi_0)$ psát ve tvaru

$$H_\mu^*(X) = \sum_B \Phi_{\mu B}(X_B) - \beta^{-1} \sum_{\pi \in \mathcal{C}_D(X)} q_\mu(\pi) \equiv \sum_B \Phi_{\mu B}^*(X_B). \quad (1.62)$$

Potenciál definující tento hamiltonián nazveme *efektivním potenciálem*. Pro další postup je podstatný předpoklad, že lze k němu nalézt ekvivalentní *efektivní m-potenciál*.

Řekneme, že $X \in g(\Phi_0)$ je *lokálně dominantní základní stav* řádu D na křivce $\mu = \mu(\beta)$, jestliže je lokálním základním stavem potenciálu (1.62) na této křivce. Množinu všech lokálně dominantních základních stavů řádu D na křivce $\mu = \mu(\beta)$ budeme značit $g_D^*(\Phi_0; \mu(\beta))$.

Podmínka D. *Parametrický model splňuje následující předpoklady: 1) na křivce $\mu = \mu(\beta)$ existuje pouze konečný počet lokálně dominantních základních stavů řádu D , tzn. $|g_D^*(\Phi_0; \mu(\beta))| < \infty$, 2) jestliže konfigurace x_{R_t} pro $t \in \mathbb{Z}^V$ není restrikce žádného lokálně dominantního základního stavu z množiny $g_D^*(\Phi_0; \mu(\beta))$, potom platí nerovnost*

$$H_\mu^*(x_{R_t}) - \min_{y_{R_t}} H_\mu^*(y_{R_t}) \geq ce^{-\beta D},$$

kde $c > 0$, nezávislé na x .

◇

Poznámky.

1) Význam druhé části Podmínky D je analogický jako v případě Podmínky M — zaručuje, zhruba řečeno, existenci dostatečného energetického příspěvku připadajícího na každý bod, jehož okolí je odlišné od všech lokálně dominantních základních stavů, a tím umožňuje definovat kontury nad těmito základními stavy, které splňují nějakou variantu Peierlsovy podmínky (srovnej Lemma 4).

2) Ve skutečnosti budeme ověřovat Podmínku D v poněkud jiné formě. Množinu $\mathcal{C}_D(x)$ clusterů excitací do řádu D nahradíme její podmnožinou $\mathcal{C}_{(D)}(x)$ těch clusterů, jejichž energie splňuje nerovnost $w(\pi) \leq \exp(-\beta D)$. Potenciál Φ^* zavedený v (1.62) má potom konečný dosah. Dokážeme-li lokální dominanci v této formě na křivce $\mu = \mu(\beta)$, je lokální dominance požadovaná Podmínkou D splněna na jisté křivce $\mu = \mu(\beta) + o(e^{-\beta D})$.

Další postup pouze naznačme v hrubých rysech, protože podrobný zápis a důkaz všech kroků je poměrně složitý. Mříž pokryjeme krychlemi o hraně L , kde L je závislé na teplotě (teplotně závislý coarse-graining). Pro faktorovou konfiguraci $y \in \Omega^*$ řekneme, že krychle C je *regulární*, jestliže konfigurace $y_{R_1(C)}$ je restrikcí lokálně dominantního základního stavu. Jestliže pro krychli C existuje velký defekt \mathcal{D} , pro nějž $\text{dom } \mathcal{D} \cap C \neq \emptyset$, řekneme, že krychle C je *irregulární*. Krychle, které nejsou výše uvedených typů, označíme jako *semiregulární*. Je-li C semiregulární krychle faktorové konfigurace x , potom restrikce x_C je lokální

základní stav na C vzhledem k potenciálu Φ_0 , ale neexistuje prodloužení x_C na lokálně dominantní základní stav. *Kontury* zavedeme jako souvislé množiny irregulárních a semiregulárních krychlí.

Chceme-li nyní použít nějakou variantu Pirogov-Sinajovy teorie, musíme zajistit splnění Peierlsovy podmínky pro takto definované kontury. Je zřejmé, že irregulární krychle jsou dostatečně energeticky bohaté, problémem zůstávají semiregulární krychle.

Je vyžadován následující technický předpoklad.

Podmínka L. *Nechť C je krychle o hraně L a konfigurace x_C je lokální základní stav na C vzhledem k potenciálu Φ_0 , který není restrikcí žádného lokálně dominantního základního stavu. Potom existuje alespoň L^2 bodů $t \in R_{\lrcorner}C$, pro něž $x_{R_{\lrcorner}t}$ není restrikcí žádného lokálně dominantního základního stavu.*

◇

Jsou-li splněny Podmínky D a L, obsahuje každá semiregulární krychle nejméně $|C|^{\frac{2}{3}}$ bodů, z nichž každý přispívá energií alespoň (řádově) $e^{-\beta D}$ k její energetické nevýhodnosti. Zvolíme-li L dost velké, lze dosáhnout toho, aby energie připadající na semiregulární krychli byla dostatečně vysoká. Faktorizací modelu jsme tedy dosáhli možnosti rozumně definovat kontury, přičemž každá krychle obsažená v nosiči kontury přispívá k jejímu energetickému zisku. Vskutku lze ukázat, že takto je možné splnit Peierlsovu podmínku. Další postup spočívá v rozvinutí Pirogov-Sinajovy teorie se slabě interagujícími konturami. Podrobnosti viz [7].

1.7.3 Fázový diagram parametrického modelu

Hlavním výsledkem práce [7] je tvrzení o charakteru fázového diagramu parametrického modelu na okolí bodu $\mu = 0$, které lze formulovat takto:

Tvrzení 11. *Je dán parametrický model vyhovující podmínkám R a L. Nechť je dále splněna podmínka D na křivce $\mu_0 = \mu_0(\beta)$. Jestliže soubor poruchových potenciálů $\{\Phi_i\}$ úplně snímá degeneraci množiny $g^*(\Phi_0; \mu_0(\beta))$ vzhledem ke grupě symetrie \mathcal{F} , potom existují konstanty β_0 a $\alpha > 0$, pro které existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram na oblasti*

$$\beta > \beta_0, \quad |\mu - \mu_0(\beta)| < e^{-\beta\alpha D}.$$

Poznámka. Na rozdíl od PS-teorie, která zaručuje existenci \mathcal{F} -úplného fázového diagramu na nějaké množině $U(0) \times (\beta, \infty)$, výše uvedené tvrzení garantuje jeho existenci pouze na jistém ‘klínovitém’ okolí křivky lokální dominance.

Kapitola 2

Ternární amfifilické systémy

Je známo, že mnohé kapaliny jsou při běžných teplotách nemísitelné — jako nejjednodušší příklad slouží voda a olej — a značné praktické užití proto mají látky, které jsou schopny tuto situaci změnit. Ukazuje se, že přidáním vhodného množství třetí složky, označované jako *amfifilické*, lze dosáhnout nejen výrazného snížení povrchového napětí na rozhraních voda–olej a tím také poklesu kritické teploty, ale obecně vzniku množství komplexních struktur. Jako příklad lze uvést vodní roztoky váčkovitých útvarů naplněných olejem, jejichž stěny jsou ‘ušity’ z amfifilických molekul nebo pravidelné struktury tvořené válcovými kontejnery naplněnými olejem a oddělenými od vodního prostředí amfifilickým štítem. Právě schopnost amfifilických molekul organizovat zbylé dvě složky a uspořádat je do pravidelných struktur je jejich druhá zajímavá a prakticky využívaná vlastnost.

Všechny tyto jevy mají společnou příčinu, kterou jsou specifické chemické vlastnosti amfifilických molekul. Jde totiž o molekulu protáhlého tvaru, pro níž je typická výrazná odlišnost v afinitě obou jejích konců. Zatímco jeden konec tvořený iontovou skupinou preferuje vysoce polarizovatelné vodní prostředí a je tedy označován jako *hydrofilní*, druhý konec, *hydrofobní*, je ve vodě nerozpustný a preferuje tak olej. Energie amfifilické molekuly je nejnížší, jestliže je adsorbována na rozhraní voda–olej a tím lze vysvětlit jednak pokles povrchového napětí na těchto rozhraních, jednak schopnost samoorganizace amfifilických směsí. Díky této povrchové aktivitě jsou amfifilické molekuly také označovány jako *surfactanty*.

Z teoretického hlediska jsou směsi obsahující surfactanty zajímavé především pro velkou rozmanitost kapalných fází, které tyto systémy vykazují v závislosti na chemických vlastnostech surfactantových molekul, relativních koncentracích jednotlivých složek, teplotě, apod. Obtížnost dobrého mikroskopického popisu těchto systémů spočívá právě v komplexnosti jejich chování a také v tom, že jednotlivé fáze často vykazují uspořádání na mezoskopické úrovni (to je problém zejména mřížových modelů). Přesto se daří alespoň kvalitativně na modelové úrovni zachytit generické chování takových směsí.

Po krátkém přehledu experimentálně získaných znalostí o fázovém chování amfifilických směsí se budeme věnovat mřížovým modelům vyvinutým k jejich

popisu, podrobně pak Alexandrovu modelu, kterého se bude týkat zbytek této práce.

2.1 Fázové chování

Tato kapitola obsahuje krátký přehled typických fází objevujících se v ternárních amfifilických systémech, podrobněji viz [8] a [9]. Obecně je lze rozdělit na neuspořádanou fázi zvanou *mikroemulze* objevující se při malých surfactantových koncentracích a vyšších teplotách a uspořádané *lyotropické fáze*, které jsou vyjádřením organizačních tendencí surfactantových molekul při vyšších koncentracích.

Lyotropické fáze tvoří pravidelné struktury vykazující dalekodosahové uspořádání. Protože jejich vlastnosti jsou do jisté míry podobné vlastnostem pevných látek (periodicita, vysoká viskozita), označují se často termínem *fáze kapalných krystalů*. K jejich vytvoření dochází při vysokých surfactantových koncentracích a dostatečně nízkých teplotách.

Jejich typickým představitelem jsou *lamelární fáze*, ve kterých voda a olej jsou uspořádány do rovnoběžných vrstev navzájem oddělených surfactanty. Tato fáze se obvykle objevuje v případech, kdy koncentrace vody a oleje jsou porovnatelné.

Jiným příkladem jsou *hexagonální fáze*, ve kterých olejové domény jsou válcovité útvary uspořádané do uzlů 2D-trojúhelníkové mříže, *kubické fáze* s olejovými doménami ve tvaru krychle, apod. Olejové domény jsou odděleny od vodního rozpouštědla monomolekulární surfactantovou vrstvou a útvary tohoto typu se obecně označují termínem *micely*¹. Nabývají zpravidla mezoskopické velikosti.

Jestliže surfactantová koncentrace je dostatečně vysoká na překonání tendencí k fázové separaci, ale z důvodu vysoké teploty nevznikají lyotropické fáze s dalekodosahovým uspořádáním, objevuje se fáze zvaná *mikroemulze*. Jde v podstatě o homogenní micelární roztok, vodní a olejové domény jsou tedy stále dobře odděleny monovrstvami surfactantů. Micely mají opět mezoskopickou velikost a mají zpravidla tvar globulí při nízkých koncentracích nebo kvazivrstev, je-li surfactantová koncentrace vyšší.

Ukazuje se, že povrchové napětí na rozhraní mezi mikroemulzí a vodou, resp. olejem je ve srovnání s povrchovými napětím mezi vodou a olejem o několik řádů nižší. Právě kvůli této vlastnosti tato fáze přitahuje značnou pozornost a má velké užití.

¹Zpravidla se toto označení užívá pro separované domény kulového tvaru.

2.2 Mikroskopické modely na mříži

2.2.1 Úvod

Cílem mikroskopických modelů je vysvětlit nejdůležitější aspekty chování reálného systému na základě fyzikálních vlastností částic, které systém tvoří. Snahou je pochopit danou generickou vlastnost jisté třídy systémů na mikroskopické úrovni a tak získat možnost predikovat jejich chování a cíleně ho využít.

V daném případě odhlédneme od vnitřní struktury jednotlivých molekulárních komponent amfifilického systému a nahradíme je objekty charakterizovanými pouze malým počtem stavových parametrů. Vycházíme z předpokladu, že uvažované termodynamické vlastnosti uvedených systémů jsou důsledkem interakce molekul a ta je zvolenými stavovými parametry dobře určena. Společný pro všechny modely je předpoklad přitažlivé interakce mezi polárními objekty (voda a hydrofilní konec surfactantu), stejně jako mezi nepolárními (olej a hydrofobní konec surfactantu) a odpuzivá při kontaktu polárního a nepolárního objektu.

Kapalné směsi jako příklady silně interagujících systémů jsou vhodné k popisu pomocí mřížových modelů, ty však předem předpokládají jistou periodicitu, kterou by měl model sám poskytovat. Na rozdíl od kontinuálních modelů (teorie Ginzburg-Landauova typu) však umožňují jednak rozumně proveditelné simulace metodou Monte-Carlo, jednak analytický rozbor prostřednictvím Pirogov-Sinajovy teorie a jejich rozšíření (viz minulá kapitola).

2.2.2 Alexanderův model

Definice modelu

Uvažujme pravoúhlou mříž dimenze ν a dohodněme se na termínech vrcholy a hrany mříže. Vrcholy mříže \mathbb{Z}^ν budeme ve shodě s předchozí kapitolou označovat s, t, \dots a hrany $\langle s, t \rangle$ nebo někdy pro zkrácení b, b', \dots . Molekuly vody a oleje se mohou nacházet pouze ve vrcholech mříže a jejich stav je zcela určen polohou, přitom každý vrchol musí být obsazen právě jednou molekulou. Označíme $x_s = +1$, je-li v bodě s molekula vody a $x_s = -1$ v případě molekuly oleje. Soubor $\{x_s\}_{s \in \mathbb{Z}^\nu}$ je potom konfigurace binárního systému voda-olej.

Nejjednodušší mřížový model binárního systému 2 nemísících se kapalin je dán formálním hamiltoniánem

$$H(x) = \sum_{\langle s, t \rangle} \sum_{a, b=1}^2 P_s^a P_t^b E^{ab} - \sum_s \sum_{a=1}^2 P_s^a \mu_a, \quad (2.1)$$

kde P_s^a je počet částic typu a ve vrcholu s (0 nebo 1), E^{ab} je interakční energie částic typu a a b v sousedních vrcholech a μ_a je chemický potenciál částic typu a . Protože platí

$$P_s^1 = \frac{1 + x_s}{2}, \quad P_s^2 = \frac{1 - x_s}{2}, \quad (2.2)$$

lze hamiltonián psát v ekvivalentním tvaru:

$$H(x) = -J \sum_{\langle s,t \rangle} x_s x_t - h \sum_s x_s, \quad (2.3)$$

kde jsme označili

$$J = (2E^{12} - E^{11} - E^{22})/4,$$

$$h = [\mu_1 - \mu_2 - \nu(E^{11} - E^{22})]/2.$$

Vidíme, že binární směs lze v základním přiblížení popsat ferromagnetickým Isingovým modelem (nemísitelnost je vyjádřena nerovností $J > 0$). Na křivce $h = 0$, $\beta > \beta_c$ dochází ke koexistenci ‘+’ a ‘-’ fáze, tzn. fáze bohaté na vodu a fáze bohaté na olej. Při nadkritických teplotách $\beta < \beta_c$ se obě kapaliny stávají mísitelnými (existuje jediný Gibbsův stav).

Pro amfifilické molekuly vyhradíme místa hran mříže. Položíme přitom $\sigma_b = 1$, jestliže hrana b bude obsazena surfactantem a $\sigma_b = 0$, pokud místo zůstane prázdné. Konfigurace surfactantů je potom soubor $\{\sigma_b\}$ ‘spinů’ na hranách mříže. Naše přiblížení spočívá v předpokladu, že stav surfactantové molekuly je určen pouze polohou, odhlížíme tedy od jejích směrových vlastností (předpokládáme, že se molekula orientuje energeticky výhodnějším způsobem a odnímáme ji tak tento stupeň volnosti).

Ternární interakci surfactantu s molekulami ve vrcholech mříže popíšeme pomocí parametrů E^{ab} představujících interakční energii částic typu a a b v sousedních vrcholech, je-li hrana neobsazena a E'^{ab} v případě, že hrana je obsazena surfactantovou molekulou. Hamiltonián (2.3) je nutné pozměnit takto:

$$\tilde{H}_1(x, \sigma) = \sum_{\langle s,t \rangle} \sum_{a,b=1}^2 P_s^a (1 - \sigma_{st}) P_t^b E^{ab} + \sum_{\langle s,t \rangle} \sum_{a,b=1}^2 P_s^a \sigma_{st} P_t^b E'^{ab} - \sum_s \sum_{a=1}^2 P_s^a \mu_a. \quad (2.4)$$

Hamiltonián samotné surfactantové složky předpokládáme v obecném tvaru

$$\tilde{H}_2(\sigma) = -r \sum_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - s \sum'_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - p \sum''_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - \tilde{\mu} \sum_b \sigma_b, \quad (2.5)$$

přitom 1. suma jde přes dotýkající se hrany svírající úhel π , jsou-li obsazeny surfactantem, 2. suma přes hrany svírající úhel $\pi/2$ a 3. suma přes rovnoběžné sousední hrany.

Alexanderův model je potom zadán celkovým hamiltoniánem

$$H(x, \sigma) = \tilde{H}_1(x, \sigma) + \tilde{H}_2(\sigma). \quad (2.6)$$

Ve skutečnosti uvedený model představuje jisté rozšíření Alexandrova modelu uvedeného v [8], zde přidáváme navíc interakci rovnoběžných sousedních surfactantů vyjádřenou parametrem p .

Nadále budeme předpokládat symetrický případ $E^{11} = E^{22} = E, E'^{11} = E'^{22} = E'$ a omezíme se na křivku koexistence $\mu_1 = \mu_2$. To nepředstavuje příliš velké omezení, protože se ukazuje, že tento model se nechová příliš rozumně, je-li jedna z komponent silně znevýhodněna. Zatímco reálné systémy reagují na tuto situaci (dvojkomponentová limita, např. voda–surfactant) vznikem surfactantových dvojrstev, uvedený model, požadující, aby oba konce amfifilické molekuly byly v kontaktu s některou z obou základních složek, vynucuje jejich prosté rozpuštění.

V tomto případě je výhodné přepsat hamiltonián do tvaru

$$H(x, \sigma) = H_1(x, \sigma) + H_2(\sigma), \quad (2.7)$$

kde

$$H_1(x, \sigma) = A \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \sigma_{ij}) \left(\frac{x_i - x_j}{2} \right)^2 + B \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{ij} \left(\frac{x_i + x_j}{2} \right)^2, \quad (2.8)$$

$$H_2(\sigma) = -r \sum_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - s \sum_{b,b'}' \sigma_b \sigma_{b'} - p \sum_{b,b'}'' \sigma_b \sigma_{b'} - \mu \sum_b \sigma_b. \quad (2.9)$$

Použili jsme přitom označení

$$A = E^{12} - E > 0, \quad B = E' - E'^{12} > 0,$$

$$\mu = \tilde{\mu} + \nu(E - E'^{12}).$$

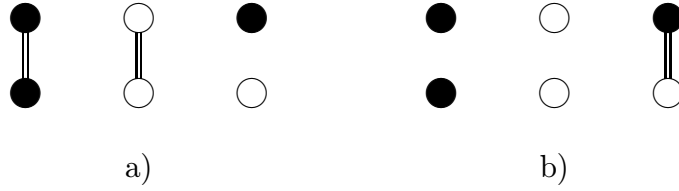
Aproximace slabého surfactantu

Amfifilické směsi zahrnují širokou třídu systémů, přitom fyzikální vlastnosti jednotlivých komponent mohou být značně rozdílné. Zpravidla je však splněno, že vzájemná interakce mezi surfactanty je slabší než interakce surfactantů s ostatními dvěma komponentami ([9], kap. 1). Chceme-li v mnohparametrickém Alexanderově modelu získat nějaké analytické výsledky, je nutno zvolit vhodné přiblížení, které zjednoduší rozbor a přitom zachová možnost popisu nejdůležitějších vlastností reálných systémů. Omezíme se tedy i zde na limitu *slabého surfactantu* a budeme předpokládat splnění zesílených nerovností

$$|r|, |s|, |p| \ll A, B.$$

Nyní máme k dispozici dvě asymptotické oblasti vhodné k nízkoteplotnímu rozboru. Předně jde o intermediální oblast $\beta^{-1} \gg |r|, |s|, |p|$, kdy jsou interakce surfactantů efektivně vypnuty a lze je položit rovny 0, to je situace analogická té, kterou popisuje základní verze Gompper-Schickova modelu, případně vektorový model vyšetřovaný v [9] (viz stručný přehled v následujícím odstavci). V daném případě není tato oblast příliš zajímavá.

Druhou vhodnou oblastí je $\beta^{-1} \ll A, B$, která ideově odpovídá Widomově modelu. V tomto případě lze položit $A = B = \infty$ a zcela tak zakázat konfigurace



Obrázek 2.1: Konfigurace na sousedních vrcholech mříže: a) zakázané, b) přípustné.

znázorněné na obr. 2.1a (příslušné excitace jsou silně potlačeny a nemohou tak ovlivnit strukturu nízkoteplotního fázového diagramu).

Zvolíme-li si tuto asymptotickou oblast, lze hamiltonián modelu přepsat do jednoduchého tvaru

$$H(x, \sigma(x)) = -r \sum_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - s \sum'_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - p \sum''_{b,b'} \sigma_b \sigma_{b'} - \mu \sum_b \sigma_b. \quad (2.10)$$

Konfigurace je přitom úplně určena hodnotami spinů na vrcholech mříže $\{x_t\}_{t \in \mathbb{Z}^\nu}$, na hranách lze jednoznačně doplnit ve shodě s obr. 2.1b konfiguraci

$$\sigma_{ij} = \frac{1 - x_i x_j}{2}. \quad (2.11)$$

Vidíme, že použité aproximace nám umožnili přepsat Alexanderův model na 1/2-spinový model Isingova typu (viz také Widom-Wheelerův model v přehledu na konci této kapitoly).

Symetrie modelu

Alexanderův model ve tvaru (2.10) vykazuje některé symetrie, jejichž znalost zjednoduší rozbor základních stavů modelu i jeho nízkoteplotního fázového diagramu. Evidentní jsou tyto:

1. Invariance potenciálu vzhledem k operacím symetrie mříže (translační invariance a invariance vůči permutacím souřadnicových os).
2. Invariance potenciálu vzhledem k zobrazení

$$x_i \rightarrow -x_i \quad \forall i \in \mathbb{Z}^\nu$$

(‘spin-flip’ symetrie).

Grupy symetrie potenciálu budeme značit symbolem \mathcal{F} .

Všimněme si ještě jedné vlastnosti symetrie, která se týká fázového diagramu. Uvažujme zobrazení dané předpisem

$$x \rightarrow \bar{x}, \quad \bar{x}_t = (-1)^{|t|} x_t.$$

Protože odpovídající transformace na konfiguračním prostoru surfactantů má tvar $\sigma_b \rightarrow 1 - \sigma_b$ pro všechna b , lze snadno ověřit, že platí

$$H(\bar{x}; \mu) = H(x; -\mu - 2r - 4(\nu - 1)s - 2(\nu - 1)p) + C(r, s, p, \mu).$$

Tento zápis je pouze formální, neboť pracujeme s hamiltoniánem na celé mříži a aditivní konstanta je nekonečná². Protože C nezávisí konfiguraci, dostaneme jejím vynecháním ekvivalentní potenciál. Označíme-li ještě

$$\delta = \mu + r + 2(\nu - 1)s + (\nu - 1)p, \quad (2.12)$$

lze psát

$$H(x; \delta) \stackrel{ekv}{=} H(\bar{x}; -\delta).$$

Protože oba potenciály jsou ekvivalentní, mají nutně stejný fázový diagram. Odtud dostáváme symetrii fázového diagramu vzhledem k zobrazení

$$x \rightarrow \bar{x}, \quad \delta \rightarrow -\delta. \quad (2.13)$$

Tato symetrie, označme ji \mathcal{S} , umožňuje omezit se při vyšetřování fázového diagramu na poloprostor $\delta < 0$ a druhou část diagramu získat symetrickým prodloužením.

2.2.3 Stručný přehled ostatních modelů

Gompper-Schickův model

Tento model spočívá na představě, že slabě amfilický systém lze popsat jako obyčejnou ternární směs bezstrukturních částic, tedy prostřednictvím Blume-Emery-Griffithsova modelu, který je zobecněním Isingova modelu (viz model binární směsi v minulé kapitole) na spin 1. Bezprostředním efektem, který tento model předpovídá je snížení kritické teploty směsi voda-olej. Tvorbu lyotropických fází objevujících se při vyšších surfactantových koncentracích tento model též dokáže postihnout za předpokladu, že přidáme ternární interakci preferující konfigurace typu '+0-'.²

Vektorový model

Vektorový model vychází z Gompper-Schickova modelu, jednotlivé částice opět obsazují vrcholy mříže, ale amfilické molekuly jsou reprezentovány vektory mířícími do libovolného mřížového směru. Tento další stupeň volnosti surfactantů umožňuje lépe popsat charakter jejich interakce se zbývajícími komponentami (iontový konec přitažlivě interaguje s polárním a hydrofobní s nepolárním prostředím).

²Přesný zápis by spočíval ve vyjádření energie konfigurace na konečné množině s obecnou okrajovou podmínkou.

Widom-Wheelerův model

V tomto modelu jednotlivé částice zaujímají místa hran mříže, amfifilické molekuly jsou navíc vybaveny orientací. Vzájemná interakce mezi polárními (voda a hydrofilní konec surfactantu) a nepolárními objekty (olej a hydrofobní konec) je nekonečně repulsivní. Výhodou tohoto modelu je jednak zahrnutí směrových vlastností amfifilické interakce a také skutečnost, že jej lze přepsat na obyčejný mřížový 1/2-spinový model (Isingova typu).

Kapitola 3

Rozbor Alexanderova modelu

V předchozí kapitole jsme se stručně seznámili se základními vlastnostmi ternárních systémů obsahujících amfifilickou složku a poté s některými modely, které si kladou za cíl tyto vlastnosti popsat. Zvláštní pozornost při tom byla věnována Alexanderovu modelu (odst. 2.2.2), jemuž také bude patřit celá následující kapitola. Nepůjde zdaleka o vyčerpávající rozbor, neboť to ani není v moci analytických prostředků, kterých bude při tomto rozboru užito. Základním omezením nízkoteplotního rozboru je vyloučení mikroemulzí, k jejichž vzniku dochází při vyšších teplotách a tvoří jakousi intermediální oblast mezi lyotropními a vysokoteplotní fází. Lze však na této úrovni popsat různé typy uspořádaných fází a tak ověřit mikroskopickou podstatu samoorganizačních schopností amfifilických molekul. První část bude věnována lamelárním fázím jako jejich typickým představitelům, jejichž rozbor je nejjednodušší. Poté se budeme věnovat blokovým fázím představujícím jejich trojrozměrné zobecnění a zahrnujícím krychlové fáze uvedené v přehledu a nakonec rozebereme jednu z asymptotických oblastí v množině parametrů, která kromě výše uvedených fází poskytuje také micelární struktury jiných typů.

Rozbor bude prováděn metodami uvedenými v kap. 1. Začneme vždy nalezením základních stavů metodou m -potenciálu (viz odst. 1.3) a konstrukcí příslušného fázového diagramu při nulové teplotě. Poté se pokusíme nalézt jeho deformaci při konečných teplotách, užívající v menší míře výsledky standardní Pirogov-Sinajovy teorie s odpovídající poruchovou metodou, ve větší míře pak metodu omezených souborů nad jednotlivými základními stavy popsanou v odst. 1.7.

3.1 Lamelární fáze

3.1.1 Základní pojmy

Lamelární fáze představují nejjednodušší příklad s možností aplikace metody omezených souborů k analýze fázového diagramu a jsou tedy jejím přirozeným testem.

Alexanderův model produkuje fáze tohoto typu ve značné části prostoru parametrů. Aby byl rozbor co nejjednodušší, je vhodné vybrat asymptotickou oblast

$$|r|, |p| \ll S, \quad S \stackrel{\text{ozn}}{=} -s, \quad (3.1)$$

ve které jsou výrazně znevýhodněny konfigurace obsahující surfactanty na dotýkajících se, navzájem kolmých hranách mříže ('rohy'). Je intuitivně jasné, že právě tato oblast bude lamelárním fázím příznivě nakloněna. Hamiltonián modelu je dán předpisem

$$H(x, \sigma(x)) = -r \sum_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{jk} + S \sum'_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - p \sum''_{\langle i,j \rangle \langle k,l \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{kl} - \mu \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{ij}, \quad (3.2)$$

sčítá se postupně přes sousední dotýkající se hrany svírající přímý a pravý úhel a přes sousední rovnoběžné hrany. Surfactantová konfigurace je dána jako

$$\sigma_{ij} = \frac{1 - x_i x_j}{2}. \quad (3.3)$$

Konfiguraci $x \in \Omega$ nazveme *lamelární konfigurací*, jestliže je určena přímkou $\mathbb{Z} \subset \mathbb{Z}^d$ (*vertikální osa* konfigurace x) a restrikcí $x_{\mathbb{Z}}$ na tuto přímku, přičemž na rovinách kolmých k této přímce (*horizontální roviny* konfigurace x) konfigurace nabývá konstantní hodnoty. *Vrstva* je posloupnost po sobě jdoucích horizontálních rovin téhož spinu, pokud předcházející a následující roviny k této posloupnosti mají spin opačný. Translační a 'spin-flip' symetrie modelu umožňují zavést běžné označení

$$\langle l_1, l_2, \dots, l_k \rangle$$

pro třídu \mathcal{F} -ekvivalentních periodických lamelárních konfigurací složených z vrstev šířky l_1, \dots, l_k v uvedeném pořadí; speciálně $\langle \infty \rangle$ označuje třídu konstantních konfigurací.

Lamelární konfigurace představují speciální třídu blokových konfigurací, kterým se budeme věnovat v odst. 3.2.

3.1.2 Základní stavy

K nalezení množiny g lokálních základních stavů parametrického modelu (3.2) použijeme metodu m-potenciálu uvedenou v odst. 1.3. Tvzení 2 nás ubezpečuje

o tom, že úspěšné použití této metody poskytne všechny periodické základní stavy.

Abychom si situaci maximálně zjednodušili, provedeme následující pomocnou úvahu. Protože dosah potenciálu je $R = 2$, lze jej ekvivalentně nahradit tak, že hamiltonián má tvar

$$H(x) = \sum_{K \subset \mathbb{Z}^\nu} \Phi_K(x_K), \quad (3.4)$$

kde K označuje krychle o hraně 3^1 . Díky předpokladu (3.1) nemůže konfigurace krychle minimalizující potenciál obsahovat rohy a musí tedy mít lamelární charakter (je-li hrana obsazena surfactantem, lze si snadno uvědomit, že sousední nedotýkající se rovnoběžné hrany musí též obsahovat surfactant, a proto surfactanty budou vyplňovat vždy celé ‘roviny’ tvořené navzájem rovnoběžnými hranami mříže, jejichž koncové body tvoří dvojici sousedních souřadnicových rovin — viz pojem *surfactantové roviny* v odst. 3.2). Protože každá taková konfigurace krychle má globální prodloužení, jedná se o m -potenciál a všechny lokální základní stavy budou mít lamelární charakter. Zapišeme-li formální hamiltonián modelu obecně jako

$$H(x) = \sum_B \Phi_B(x_B),$$

můžeme jej pro lamelární konfiguraci $x \in \Omega$ ekvivalentně přepsat do tvaru

$$H(x) = \sum_{\mathbb{Z} \subset \mathbb{Z}^\nu} \sum_B \frac{|B \cap \mathbb{Z}|}{|B|} \Phi_B(x_B), \quad (3.5)$$

kde první suma jde přes všechny vertikální linie konfigurace x . Smysl této reformulace je v tom, že díky translační invarianci modelu jsou příspěvky všech vertikálních linií shodné a dostáváme tak formálně 1-dimenzionální model. Lze tedy psát

$$H(x) = \sum_{\mathbb{Z} \subset \mathbb{Z}^\nu} H_1(x_{\mathbb{Z}}) \quad (3.6)$$

a po dosazení (3.2) do (3.5) dostaneme 1D-hamiltonián

$$\begin{aligned} H_1(x_{\mathbb{Z}}) &= -r \sum_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - (\nu - 1)p \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{ij} - \mu \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{ij} = \\ &= \sum_{P \subset \mathbb{Z}} \Phi_P(x_P), \end{aligned} \quad (3.7)$$

Kde P označuje úsečky délky 3 a ekvivalentní potenciál je dán vztahem

$$\Phi_P(x_P) = -r \sum_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle \subset P} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - \frac{(\nu - 1)p + \mu}{2} \sum_{\langle i,j \rangle \subset P} \sigma_{ij}. \quad (3.8)$$

Označíme-li ještě

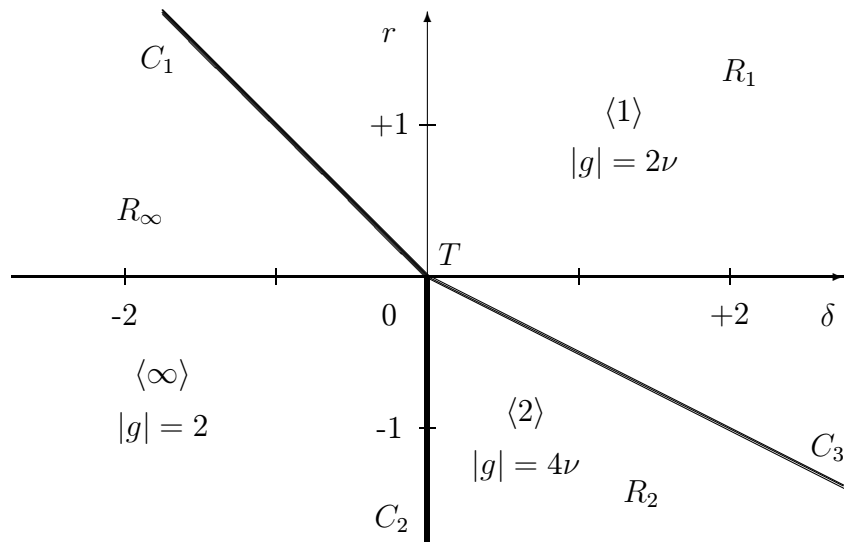
$$\delta = \mu + (\nu - 1)p, \quad (3.9)$$

¹To znamená, že hrana obsahuje 3 mřížové body.

je potenciál explicitně dán takto²:

$$\Phi_P(\bullet\bullet\bullet) = 0, \quad \Phi_P(\bullet\circ\bullet) = -r - \delta, \quad \Phi_P(\bullet\bullet\circ) = -\frac{\delta}{2}. \quad (3.10)$$

Je evidentní, že model je nyní formulován pomocí m-potenciálu, neboť každá konfigurace úsečky délky 3 má globální prodloužení na konfiguraci na \mathbb{Z} a to dokonce jednoznačným způsobem. Porovnáním energií jednotlivých konfigurací získáme parametricky závislou množinu lokálních základních stavů g (abychom zjednodušili označení, nebudeme explicitně vypisovat parametrickou závislost jednotlivých veličin) a fázový diagram při nulové teplotě znázorněný na obr. 3.1.



Obrázek 3.1: Fázový diagram při nulové teplotě v řezu $S, p = \text{konst.}$

Skládá se z oblastí existence lamelárních základních stavů třídy $\langle 1 \rangle$ (oblast R_1), $\langle 2 \rangle$ (oblast R_2) a $\langle \infty \rangle$ (oblast R_∞). Na ploše C_1 dané rovnicí $\delta + r = 0$, $r > 0$ koexistují základní stavy typu $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$, jejich počet je tedy konečný ($g = 2\nu + 2$). Základní stavy na ploše C_2 dané rovnicí $\delta = 0$, $r < 0$ jsou všechny lamelární konfigurace neobsahující vrstvy šířky 1 ($g = \infty$) a podobně na ploše C_3 s rovnicí $\delta + 2r = 0$, $r < 0$ konfigurace s vrstvami šířky 1 a 2 ($g = \infty$). Na ploše T dané jako $r = 0$, $\delta = 0$ jsou všechny lamelární konfigurace základními stavy.

3.1.3 Nízkoteplotní fázový diagram

V dalším se omezíme na dimenzi $\nu = 3$. Základní podmínkou použitelnosti metod kap. 1 k rozboru nízkoteplotního fázového diagramu je rigidita každého ze základních stavů. Je triviální ověřit, že třída lamelárních konfigurací tento před-

²Černé a bílé kroužky označují spiny opačného znaménka.

poklad splňuje. Nechť $x \in \Omega$ je lamelární konfigurace a zvolme konečnou množinu $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$. Nechť M je libovolná horizontální rovina konfigurace x , pro níž $M \cap \Lambda \neq \emptyset$. Potom platí $x_{M \cap \Lambda} = \text{konst}$ a jediné konstantní prodloužení na $\Lambda \cap M$ dává konfiguraci na M , která může být restrikcí nějaké lamelární konfigurace.

Protože použití BS-metody uvedené v odst. 1.7 je závislé na splnění Podmínek R a L, zkontrolujme, že třída lamelárních konfigurací těmto podmínkám vyhovuje.

Co se týká Podmínky R (umožňující rozumnou faktorizaci modelu), je třeba ověřit, že pro dostatečně velkou hladinu energie D (její velikost ukáže až rozbor lokálně dominantních základních stavů) existuje takové $l \geq R$ (dosah potenciálu je $R = 2$), že každý defekt \mathcal{D} s energií $E(\mathcal{D}) \leq D$ je odstranitelný, tzn. konfigurace na l -hranici množiny $\text{dom } \mathcal{D}$ má prodloužení na lokální základní stav na $\text{dom } \mathcal{D}$. Ukáže se, že hladiny D nutné k důkazu lokální dominance vždy budou takové, že všechny excitace \mathcal{D} s energií $E(\mathcal{D}) \leq D$ budou natolik ‘malé’, že tuto podmínku splní automaticky s konstantou $l = 2$. Problém ověření této podmínky je tedy v tomto případě (a zpravidla i v jiných regulárních modelech) čistě akademický.

Ve skutečnosti je Podmínka R splněna pro všechny hladiny D a zdůvodnění je možno zapsat následujícím způsobem. Model je *regulární* v tom smyslu, že pro každé D existuje $c(D) > 0$ takové, že každý 2-defekt³ \mathcal{D} s energií $E(\mathcal{D}) \leq D$ splňuje podmínku $|\text{dom } \mathcal{D}| \leq c(D)$, tzn. pouze konečně mnoho 2-defektů modulo translace má energii nepřevyšující D . Lze tedy jistě zvolit takové $l = l(D)$, že pro každý l -defekt \mathcal{D} s energií $E(\mathcal{D}) \leq D$ existují kvádry $W_{1,2}(\mathcal{D})$, pro něž platí $R_{-l}(\text{dom } \mathcal{D}) \subset W_1 \subset W_2 \subset \text{dom } \mathcal{D}$ a $W_2 \setminus W_1$ je souvislá množina. Ovšem konfigurace na $W_2 \setminus W_1 \subset \partial_l(\text{dom } \mathcal{D})$ je lokální základní stav, který z důvodu souvislosti této množiny musí být restrikcí nějaké lamelární konfigurace. Z rigidity potom plyne jednoznačnost prodloužení na $R_{-l}(\text{dom } \mathcal{D})$.

Podmínka L (nutná ke splnění Peierlsovy podmínky pro kontury zavedené v odst. 1.7.2) bude evidentně vždy splněna díky charakteru lamelárních konfigurací, které jsou definovány pouze restrikcí na vertikální osu.

Před rozбором excitací je výhodné přepsat model takto:

$$H(x) = \sum_{P \subset \mathbb{Z}^3} \Phi_P(x_P) + \sum_{C \subset \mathbb{Z}^3} \Phi_C(x_C), \quad (3.11)$$

kde P má stejný význam jako dříve, C je čtverec o straně 2 a potenciál je určen jako

$$\Phi_P(x_P) = -r \sum_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle \subset P} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - \frac{\delta}{2} \sum_{\langle i,j \rangle \in P} \sigma_{ij}, \quad (3.12)$$

$$\Phi_C(x_C) = S \sum_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle \subset C} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - p \sum_{\langle i,j \rangle \langle k,l \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{kl} + \frac{p}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{ij}. \quad (3.13)$$

³Defekt definovaný prostřednictvím konstanty l budeme také zkráceně označovat jako l -defekt.

Lze snadno ověřit, že tento potenciál je vskutku ekvivalentní (3.2) (δ je definováno vztahem (3.9)). Smysl tohoto zápisu je v oddělení energetických příspěvků různé velikosti. Navíc pro každou lamelární konfiguraci x platí $\Phi_C(x_C) = 0$.

Poznamenejme, že toto vyjádření je m -potenciál a lze tedy pomocí něj najít fázový diagram při nulové teplotě (k této metodě se vrátíme v odst. 3.2), což jsme v předchozím odstavci provedli převedením na 1D-problém. Smysl dříve použitého postupu je v tom, že ukazuje obecnější techniku práce s lamelárními konfiguracemi, kterou vzápětí použijeme při hledání lokálně dominantních základních stavů.

Mějme libovolnou lamelární konfiguraci $x \in \Omega$ a nad ní omezený soubor $\mathcal{K}_D(x)$ excitací do řádu D . Efektivní potenciál je dán vztahem (1.62) (viz také Poznámku 2 k Podmínce D), který lze v daném případě zapsat ve tvaru

$$\beta H^*(x) = \beta \sum_P \Phi_P(x_P) - \sum_{\pi \in \mathcal{C}_{(D)}(x)} q(\pi). \quad (3.14)$$

Nyní pracujeme s modelem, jehož konfigurační prostor tvoří lamelární konfigurace a potenciál je definován výše uvedeným vztahem. V analogii s metodou užitou při rozboru základních stavů přepíšeme ekvivalentně hamiltonián do tvaru

$$H^*(x) = \sum_{\mathbb{Z} \subset \mathbb{Z}^3} H_1^*(x_{\mathbb{Z}}) \quad (3.15)$$

se sumací přes vertikální osy konfigurace x a 1D-modelem

$$\beta H_1^*(x_{\mathbb{Z}}) = \beta \sum_{P \subset \mathbb{Z}} \Phi_P(x_P) - \sum_{\pi \in \mathcal{C}_{(D)}(x)} \frac{|\text{dom } \pi \cap \mathbb{Z}|}{|\text{dom } \pi|} q(\pi). \quad (3.16)$$

Opět použijeme argument translační invariance, abychom se mohli omezit pouze na vyšetřování tohoto 1D-modelu. Výše uvedené vyjádření bude základem pro pozdější reformulace v termínech m -potenciálu nezbytné pro důkaz lokální dominance.

Nyní se věnujme obecnému schématu rozboru excitací. Všimněme si, že potenciál je rozdělen na silnou část představovanou destičkami typu C a část výrazně slabší (destičky typu P), vyhradíme pro ně označení *hlavní* a *dekorativní* část potenciálu.

Rozbor excitací lze proto provést na dvou úrovních. Nejprve nalezneme excitace nejnižších řádů z hlediska hlavní části potenciálu, dekorativní část poté může pouze sejmout degenerace energií těchto excitací (ostré nerovnosti mezi energiemi excitací zůstanou přidáním dekorativní interakce zachovány) a vytvořit tak jakousi jemnou strukturu.

První část tohoto schématu je shodná pro celou množinu parametrů, můžeme ji proto provést ihned. Uvažujme obecný 2-defekt $\mathcal{D} = (\text{dom } \mathcal{D}, x_{\text{dom } \mathcal{D}})$. Protože konfigurace $x_{\text{dom } \mathcal{D}}$ není lokální základní stav na $\text{dom } \mathcal{D}$, avšak $x_{\partial_2 \text{dom } \mathcal{D}}$ ano (na $\partial_2 \text{dom } \mathcal{D}$), musí nutně existovat alespoň trojice rovin M takových, že

$M \cap \text{dom } \mathcal{D} \neq 0$ a $x_{M \cap \text{dom } \mathcal{D}}$ není lokální základní stav na $M \cap \text{dom } \mathcal{D}$, těmto rovinám říkáme *excitované*. Je snadno vidět, že každá excitovaná rovina musí obsahovat alespoň 4 *excitované čtverce typu I*⁴.

Odtud je zřejmé, že defekt nejnižšího řádu vznikne překlopením libovolného spinu lamelární konfigurace, neboť poskytuje právě 12 excitovaných čtverců typu I a žádný typu II. Defekt nejbližší vyššího řádu musí obsahovat alespoň 4 excitované roviny, tzn. nejméně 16 excitovaných destiček typu I. Defekt s právě 16 excitovanými destičkami typu I neobsahující žádnou excitovanou destičku typu II vznikne překlopením dvou sousedních spinů stejného znaménka. Analogickým způsobem můžeme postupovat dále a získat tak soubor defektů nejnižších řádu (zatím uvažujeme pouze hlavní část potenciálu). Uvedená metoda na rozdíl od určování defektů ad-hoc umožňuje přirozenou kontrolu, že žádný defekt nižšího řádu nebyl zapomenut. Víme totiž, že defekt \mathcal{D} s n excitovanými rovinami má alespoň $4n$ excitovaných destiček typu I, tedy energii $E(\mathcal{D}) \geq 4n(S + p)$. Zvolíme-li nižší hladinu energie, musí každý defekt s energií nepřevyšující tuto hladinu mít méně než n excitovaných rovin a soubor takových defektů lze snadno kontrolovat.

Najdeme-li všechny 2-defekty, jejichž energie nepřevyšuje zvolenou hodnotu $22(S + p)$, zjistíme, že jsou odstranitelné a mají tedy charakter excitací. Pro excitaci $\mathcal{E} = (\text{dom } \mathcal{E}, x_{\text{dom } \mathcal{E}})$ existuje jednoznačný lokální základní stav $y_{\text{dom } \mathcal{E}}$ na $\text{dom } \mathcal{E}$, pro nějž platí $y_{\partial_2 \text{dom } \mathcal{E}} = x_{\partial_2 \text{dom } \mathcal{E}}$. Lze definovat *nosič* excitace jako množinu $\{t \in \text{dom } \mathcal{E}; x_t \neq y_t\}$. Tuto excitaci znázorníme tak, že zakreslíme příslušnou konfiguraci $y_{\text{dom } \mathcal{E}}$, přičemž černé a bílé kroužky představují spiny opačného znaménka. Velké kroužky potom odpovídají bodům nosiče $\text{supp } \mathcal{E}$.

Všechny excitace s energií nepřevyšující $22(S + p)$ jsou zakresleny na obr. 3.2 (konfigurace na množině $\text{dom } \mathcal{E} \setminus \text{supp } \mathcal{E}$ je libovolná, proto není zakreslena).

Dohodněme se také na označení, které budeme používat. Např. symbolem $\sum_{\bullet\bullet\circ\in x}$ ve vyjádření 1D-efektivního potenciálu budeme rozumět sumu přes všechny výskyty uvedené sekvence a sekvencí, které jsou \mathcal{F} -ekvivalentní, v konfiguraci x , to znamená

$$\sum_{\bullet\bullet\circ\in x} \equiv \sum_{++-\in x} + \sum_{--+\in x} + \sum_{+--\in x} + \sum_{-++\in x} .$$

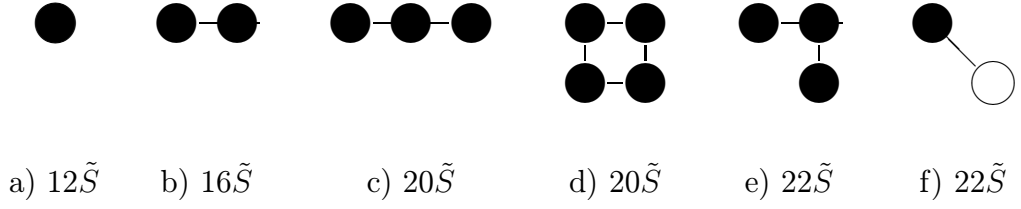
Zápis potenciálu právě v této formě se ukáže velmi výhodným při konstrukci ekvivalentního m -potenciálu a důkazu lokální dominance v konkrétních případech.

Často se také budu odvolávat na formální identity pro tyto sumy, např. pro konfigurace x obsahující pouze vrstvy šířky 1 a 2 platí

$$\sum_{\bullet\circ\in x} = \sum_{\bullet\bullet\in x} + \sum_{\bullet\bullet\in x}, \quad \sum_{\bullet\bullet\circ\in x} = 2 \sum_{\bullet\bullet\in x} .$$

⁴Excitované čtverce typu I a II jsou po řadě konfigurace

$$x_C = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{pmatrix}, x_C = \begin{pmatrix} \bullet & \circ \\ \circ & \bullet \end{pmatrix} .$$



Obrázek 3.2: Excitace nejnižších řádů z hlediska hlavní části potenciálu ($\tilde{S} = S + p$) a jejich energie.

Tyto a podobné rovnosti platí ve smyslu ekvivalence potenciálů (viz odst. 1.3), tzn. rozdíl levé a pravé strany v exaktním vyjádření na konečné podmnožině mříže Λ pro konfiguraci x_Λ s okrajovou podmínkou x_{Λ^c} nezávisí na konfiguraci x_Λ . Protože např. sekvence $\bullet\bullet\circ$ reprezentuje celý soubor sekvencí $++-+$, $--+-$, $+ - ++$, $- + --$, je třeba při zdůvodnění těchto identit jistě opatrnosti. Např. druhá z uvedených identit má následující zdůvodnění:

$$\begin{aligned} \sum_{\bullet\bullet\circ} &= \sum_{++-} + \sum_{--+} + \sum_{+--} + \sum_{-+-} = \\ &= 2\sum_{++} + 2\sum_{--} = 2\sum_{\bullet\bullet}. \end{aligned}$$

Symbol $*$ bude zastupovat libovolnou hodnotu spinu. Např. tedy

$$\sum_{\bullet\bullet*} \equiv \sum_{++-*} + \sum_{--+*} + \sum_{*+--} + \sum_{*-++}.$$

Oblasti R_1 , R_2 , R_∞

Na každé z těchto oblastí existuje pouze konečný počet lokálních základních stavů a k důkazu Podmínky M stačí ověřit, že každý lokální základní stav na množině R_2t , kde $t \in \mathbb{Z}^3$, má prodloužení na lokální základní stav (na \mathbb{Z}^3). To je ovšem triviální, neboť každý lokální základní stav na R_2t má lamelární charakter (viz např. úvaha s krychlemi o hraně 3 v odst. 3.1.2). Protože lokální základní stavy na každé oblasti jsou \mathcal{F} -ekvivalentní, jsou splněny předpoklady Tvzení 8.

Uvažujme např. oblast R_2 . Můžeme využít konstruktivního charakteru důkazu Lemmatu 4 k nalezení odhadu na teplotní interval, ve kterém je splněna Peierlsova podmínka. Tu lze zapsat ve tvaru

$$\beta\|\Phi\| > \tilde{\tau} \quad \text{pro } \tilde{\tau} \text{ dost velké,}$$

kde veličina $\|\Phi\|$ je definována vztahem (1.47) v odst. 1.6.1. Jestliže $t \in \mathbb{Z}^3$ je irregulární bod konfigurace x , potom restrikce x_{R_2t} není lokální základní stav na R_2t a obsahuje alespoň jednu neminimalizující destičku P . Lze proto psát odhad

$$\|\Phi\| \geq \text{konst} [\min\{\Phi_P(\bullet\bullet\bullet); \Phi_P(\bullet\circ\bullet)\} - \Phi_P(\bullet\bullet\circ)].$$

Peierlsova podmínka tedy bude splněna, jestliže bude platit nerovnost

$$\beta > \frac{\tau}{\min\{\frac{\delta}{2}; -r - \frac{\delta}{2}\}},$$

s dostatečně velkou konstantou τ . S využitím tohoto jednoduchého rozboru lze důsledek Tvzení 8 psát v následujícím tvaru.

Závěr. *Na oblasti*

$$\left\{ [S, p, r, \delta, \beta] : S \gg |p|, |r|; 0 < \delta < -2r; \beta > \frac{\tau}{\min\{\frac{\delta}{2}; -r - \frac{\delta}{2}\}} \right\}$$

v množině parametrů existuje právě 12 \mathcal{F} -ekvivalentních čistých fází třídy $\langle 2 \rangle$ a hustota volné energie $f(S, r, p, \delta, \beta)$ je analytickou funkcí svých proměnných.

◇

Mohli bychom také výrazně zeslabit nerovnost (3.1), tím se však nebudeme zabývat, neboť těžiště tohoto odstavce spočívá v rozboru fázového diagramu na okolí variet C_1 , C_2 a C_3 .

Analogické výsledky platí i pro zbývající dvě oblasti. Zdůvodnili jsme tak neexistenci fázového přechodu na těchto oblastech.

Plocha koexistence C_1

Na ploše C_1 je množina g lokálních základních stavů konečná ($|g| = 8$) a obsahuje konfigurace třídy $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$. Protože je splněna Podmínka M a řez $r = \text{konst} > 0$, $p = \text{konst}$, $S = \text{konst}$ diagramem 3.1 dává \mathcal{F} -úplný fázový diagram při nulové teplotě na okolí bodu $\delta = -r$ (ve smyslu odst. 1.4.1), lze využít výsledku Pirogov-Sinajovy teorie (Tvzení 10), podle něhož existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram na okolí bodu $\delta = -r$, $\beta = \infty$.

Jeho asymptotiku určíme pomocí poruchové metody diskutované v odst. 1.6.5. Je zřejmé, že tato metoda je vlastně součástí metody omezených souborů z odst. 1.7, a proto uijeme její označení i postup.

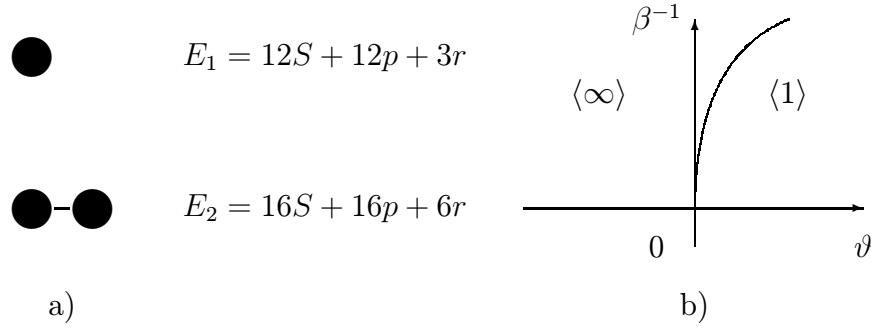
Označením $\delta = -r + \vartheta$ získává plocha C_1 tvar $r > 0$, $\vartheta = 0$. Dekorativní část potenciálu je nyní určena jako

$$\Phi_P(\bullet\bullet\bullet) = 0, \quad \Phi_P(\bullet\circ\bullet) = -\vartheta, \quad \Phi_P(\bullet\bullet\circ) = \frac{r}{2} - \frac{\vartheta}{2}. \quad (3.17)$$

Excitace 1. a 2. řádu jsou znázorněny na obr. 3.3 Jejich energie je vypočtena na ploše C_1 , je zřejmé, že to nemá vliv na vedoucí asymptotiku plochy koexistence. Dekorativní část potenciálu nedává žádné jemné rozlišení.

Efektivní potenciál je dán vztahem (3.16), v daném případě do 2. řádu platí:

$$\beta H_1^*(x) = - \sum_{\bullet\circ\bullet \in x} \beta \vartheta - \sum_{\bullet \in x} (w_1 + 2w_2) - \sum_{\bullet\bullet \in x} w_2.$$



Obrázek 3.3: Excitace do 2. řádu a fázový diagram na okolí plochy C_1 v řezu $S, p, r = \text{konst.}$

Ekvivalentně lze psát

$$\beta H_1^*(x) = \sum_P \Phi_P^*(x_P),$$

$$\Phi_P^*(x_P) = -w_1 - 2w_2 - \sum_{\bullet\bullet\bullet \in x_P} \beta\vartheta - \frac{1}{2} \sum_{\bullet\bullet \in x_P} w_2.$$

Odtud triviálně dostaneme porovnáním konfigurací $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$ asymptotiku křivky koexistence a můžeme vyslovit následující

Závěr. Řez fázového diagramu rovinou $S, p, r = \text{konst.}$ kde $r > 0, S \gg |r|, |p|$, je \mathcal{F} -úplný fázový diagram na okolí bodu $\delta = -r, \beta = \infty$ vzhledem k fázím třídy $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$ a křivka koexistence těchto fází má asymptotický tvar

$$\beta\delta^{\langle \infty \rangle \langle 1 \rangle} = -\beta r + w_2 + o(w_2). \quad (3.18)$$

Plocha koexistence C_2

Označíme-li $R = -r$, je plocha C_2 určena jako $\delta = 0, R > 0$. Dekorativní část potenciálu je dána takto:

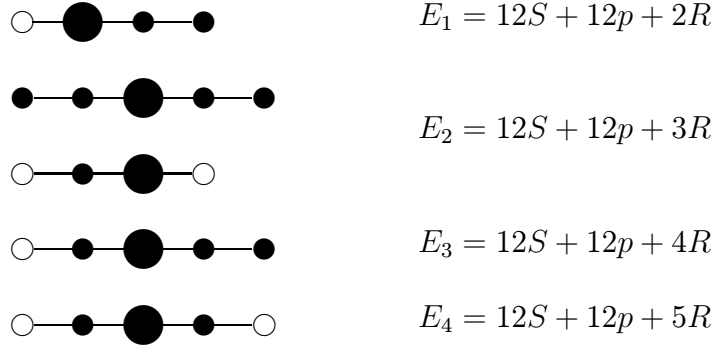
$$\Phi_P(\bullet\bullet\bullet) = 0, \quad \Phi_P(\bullet\bullet\circ) = -\frac{\delta}{2}, \quad \Phi_P(\bullet\circ\bullet) = R - \delta. \quad (3.19)$$

Lokální základní stavy jsou nyní všechny lamelární konfigurace, které neobsahují vrstvy šířky 1. Všechny 1-spinové excitace jsou dekorativní interakcí rozlišeny do 4 řádů, viz obr. 3.4. Energie jednotlivých excitací jsou určeny právě na ploše C_2 . Uvidíme, že to nebude mít vliv na níže provedené úvahy.

Budeme vyšetřovat řez fázového diagramu rovinou $S, R, p = \text{konst.}, R > 0$.

Začneme důkazem stability fáze $\langle 3 \rangle$ na okolí křivky $\delta = 0, \beta > \beta_0$. Efektivní potenciál řádu 1 je dán vztahem

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = - \sum_{\circ\bullet\bullet\bullet \in x} w_1, \quad w_1 = e^{-\beta E_1},$$



Obrázek 3.4: 1-spinové excitace na okolí plochy C_2 .

který plyne přímo z (3.16)⁵. Je evidentní, že základními stavy tohoto modelu budou právě konfigurace třídy $\langle 3 \rangle$, ukažme explicitně jejich lokální charakter. K tomu je třeba najít ekvivalentní m -potenciál. Budeme ho hledat ve tvaru

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = \sum_{L(5)} \Phi_{L(5)}(x_{L(5)}),$$

$$\Phi_{L(5)}(x_{L(5)}) = \sum_{*\circ\bullet\bullet\bullet \in x_{L(5)}} a_1 + \sum_{\circ\bullet\bullet*\bullet \in x_{L(5)}} a_2.$$

Přitom $L(n)$ bude označovat úsečky délky n . Koefficienty $a_{1,2}$ jsou vázány podmínkou ekvivalence zvoleného potenciálu a původního modelu. Uvědomíme-li si, že každá sekvence $\circ\bullet\bullet\bullet$ dává příspěvek $-w_1$ do efektivního potenciálu a současně existují dvě množiny typu $L(5)$, do nichž tato sekvence přispívá celkovou částkou $a_1 + a_2$, je zřejmé, že ekvivalence vyžaduje splnění podmínky

$$a_1 + a_2 = -w_1.$$

Tato elementární úvaha je samozřejmě ve shodě s Lemmatem 1, které dává jeho rigorózní ospravedlnění. Zůstává nám 1 stupeň volnosti při volbě vhodného potenciálu. Protože pro restrikce konfigurace $\langle 3 \rangle$ na $L(5)$ platí

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\circ\circ) = a_1, \quad \Phi_{L(5)}(\circ\bullet\bullet\bullet\circ) = 2a_2,$$

je hledaný m -potenciál dán volbou $a_1 = -\frac{2}{3}w_1$. Evidentně potom platí

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\circ\circ) = \Phi_{L(5)}(\circ\bullet\bullet\bullet\circ) = -\frac{2}{3}w_1,$$

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet) = 0, \quad \Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\bullet\circ) = -\frac{1}{3}w_1, \quad \Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\circ\circ\bullet) = 0$$

⁵Nadále již nebudeme explicitně vypisovat vztah mezi energií excitace a její vahou, jednotlivé excitace rozlišíme prostřednictvím indexů.

a minimalizující konfigurace $x_{L(5)}$ mají jednoznačné prodloužení na konfigurace typu $\langle 3 \rangle$, což dokazuje lokální dominanci základních stavů třídy $\langle 3 \rangle$ v bodě $\delta = 0$ a tím existenci příslušných stabilních $\langle 3 \rangle$ -fází na okolí křivky $\delta = 0$, $\beta > \beta_0$ podle Tvzení 11 (využíváme toho, že dominantní základní stavy jsou \mathcal{F} -ekvivalentní a tudíž platí speciální případ Tvzení 11 analogický Tvzení 8 týkajícímu se ekvivalentních základních stavů v PS-případě).

Také další postup rozboru fázového diagramu bude využívat tuto strategii. Nebude-li mít efektivní potenciál vlastnost m-potenciálu, budeme se snažit o jeho ekvivalentní reformulaci pomocí větších množin. Při tom si budeme ponechávat jistou volnost, kterou využijeme k tomu, aby všechny restriktce očekávaných lokálních základních stavů měly stejné energie. Ověříme-li, že tyto restriktce představují jediné⁶ minimalizující konfigurace potenciálu a jejich prodloužení je jednoznačné, dokážeme v konkrétních případech lokální dominanci daných základních stavů.

Poznamenejme také, že důkaz lokální dominance je ‘poruchová záležitost’, to znamená, že ho provádíme zvláště v jednotlivých řádech. Efektivní potenciál tedy rozepíšeme do řady

$$\beta H_1^* = \beta H_1^{*(1)} + \beta H_1^{*(2)} + \dots$$

podle řádů jednotlivých příspěvků a sledujeme ‘sejmutí degenerace’ množiny základních stavů působením excitací v jednotlivých řádech.

Dokážeme nyní existenci křivky koexistence fází $\langle \infty \rangle$ a $\langle 3 \rangle$. Efektivní potenciál řádu 1 je dán (viz (3.16) a obr. 3.4) předpisem⁷

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = - \sum_{\bullet \circ \in x} \beta \delta^{(1)} - \sum_{\bullet \bullet \bullet \circ \in x} w_1.$$

Přepíšeme jej v ekvivalentním tvaru

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = \sum_{L(4)} \Phi_{L(4)}(x_{L(4)}),$$

$$\Phi_{L(4)}(x_{L(4)}) = -\frac{1}{2} \sum_{\bullet \circ \bullet \bullet \in x_{L(4)}} \beta \delta^{(1)} - \sum_{\bullet \bullet \bullet \circ \in x_{L(4)}} w_1.$$

Na křivce $\beta \delta^{(1)} = -2w_1$ potom dostaneme

$$\Phi_{L(4)}(\bullet \bullet \bullet \bullet) = \Phi_{L(4)}(\bullet \bullet \bullet \circ) = \Phi_{L(4)}(\bullet \bullet \circ \circ) = 0,$$

$$\Phi_{L(4)}(\bullet \circ \circ \bullet) = 2w_1.$$

⁶To zaručuje splnění bodu 2) Podmínky D.

⁷Evidentně platí rovnost

$$\sum_{\bullet \bullet \circ \in x} = 2 \sum_{\bullet \circ \in x}.$$

Získali jsme m -potenciál, jehož lokální základní stavy jsou všechny konfigurace neobsahující vrstvy šířky 2. Současně vidíme, že 1. řád nestačí k izolování konečného počtu těchto základních stavů a splnění Podmínky D.

Skutečnost, že excitace 1. řádu není schopná rozlišit konfigurace obsahující vrstvy šířky ≥ 3 je ve skutečnosti velmi jednoduchý fakt, který lze snadno pochopit. Pro tyto konfigurace evidentně platí formální identita (ve smyslu ekvivalence potenciálů)

$$\sum_{\bullet\bullet\bullet\circ\in x} = 2 \sum_{\bullet\circ\in x},$$

a proto lze efektivní potenciál psát ve tvaru

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = -(\beta\delta^{(1)} + 2w_1) \sum_{\bullet\circ\in x}.$$

Odtud je zřejmé, že efektivní potenciál pro libovolnou konfiguraci uvažovaného typu je konvexní kombinace efektivního potenciálu pro konfigurace $\langle\infty\rangle$ a $\langle 3\rangle$ (tyto konfigurace obsahují extrémální počet sekvencí typu $\bullet\circ$). Na křivce koexistence těchto dvou konfigurací je potom nutně výše uvedená degenerace. Úvahy tohoto typu budeme v dalším také používat, abychom si zjednodušili výpočet.

Relevantní část příspěvku 2. řádu do efektivního potenciálu (tzn. po vynechání členů vázaných na sekvence \bullet a $\circ\bullet\bullet\circ$) je

$$\beta H_1^{*(2)}(x) = - \sum_{\bullet\circ\in x} \beta\delta^{(2)} - \sum_{\bullet\bullet\bullet\bullet\in x} w_2.$$

Ekvivalentní m -potenciál budeme hledat ve tvaru

$$\beta H_1^{*(2)}(x) = \sum_{L(5)} \Phi_{L(5)}(x_{L(5)}),$$

$$\Phi_{L(5)}(x_{L(5)}) = - \sum_{\bullet\bullet\bullet\bullet\in x_{L(5)}} w_2 - \sum_{\bullet\circ\bullet\bullet\in x_{L(5)}} a_1 - \sum_{*\bullet\circ\bullet\bullet\in x_{L(5)}} a_2.$$

Podmínka ekvivalence požaduje

$$2a_1 + 2a_2 = \beta\delta^{(2)}.$$

Pro restrikce konfigurací $\langle 3\rangle$ a $\langle\infty\rangle$ platí

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\bullet) = -w_2, \quad \Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\circ) = -a_2, \quad \Phi_{L(5)}(\bullet\circ\circ\circ) = -2a_1$$

a podmínka rovnosti energií těchto konfigurací dává

$$a_1 = \frac{1}{2}w_2, \quad a_2 = w_2, \quad \beta\delta^{(2)} = 3w_2.$$

Protože zbývá jediná netriviální konfigurace, pro níž je

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\bullet\circ) = -\frac{1}{2}w_2 > -w_2,$$

zkonstruovali jsme efektivní m -potenciál. Z jednoznačnosti prodloužení minimalizujících konfigurací potom dostáváme závěr, že lamelární konfigurace typu $\langle \infty \rangle$ a $\langle 3 \rangle$ tvoří množinu lokálně dominantních základních stavů řádu 2 na nalezené křivce.

Podle tvrzení 11 potom existuje křivka

$$\beta\delta^{\langle \infty \rangle \langle 3 \rangle} = -2w_1 + 3w_2 + o(w_2)$$

koexistence fází třídy $\langle 3 \rangle$ a $\langle \infty \rangle$ a na ‘klínovitém’ okolí této křivky existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram vzhledem k fázím těchto typů.

Mohli bychom také snadno ukázat dominanci lokálního základního stavu $\langle \infty \rangle$ v řádu 1 na libovolné křivce

$$\beta\delta^{(1)} = aw_1, \quad a < -2$$

a tím vyloučit možnost existence fází třídy $\langle 4 \rangle$, atd. To je však jednoduchý důsledek existence křivky koexistence $\langle 3 \rangle$ a $\langle \infty \rangle$ a tvaru efektivního potenciálu.

Při výpočtu jsme se dopustili jisté nepřesnosti tím, že jsme za energie excitací dosazovali jejich hodnoty na ploše C_2 . Je evidentní, že jsme se tím dopustili chyby řádu $O(w_1^2)$ v určení křivky koexistence fází $\langle \infty \rangle$ a $\langle 3 \rangle$ a stejného řádu je chyba ve vyjádření efektivního potenciálu na této křivce. Protože nám k důkazu lokální dominance postačoval 2. řád, nemůže tato chyba ohrozit výše provedené úvahy. Protože stejný argument lze použít i v dalších případech, nebudeme se již k tomuto problému vracet.

Nyní se věnujme fázovému přechodu mezi $\langle 2 \rangle$ a $\langle 3 \rangle$. Efektivní potenciál řádu 1 daný předpisem

$$\beta H_1^{*(1)} = - \sum_{\bullet \circ \in x} \beta\delta^{(1)} - \sum_{\bullet \bullet \bullet \circ \in x} w_1$$

ekvivalentně přepíšeme do tvaru

$$\beta H_1^{*(1)} = \sum_{L(5)} \Phi_{L(5)}(x_{L(5)}),$$

$$\Phi_{L(5)}(x_{L(5)}) = - \sum_{\bullet \bullet \bullet \circ * \in x_{L(5)}} w_1 - \frac{1}{4} \sum_{\bullet \circ \in x_{L(5)}} \beta\delta^{(1)}.$$

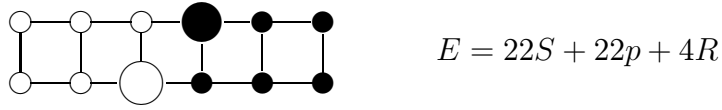
Protože pro $\beta\delta^{(1)} = 4w_1$ platí

$$\Phi_{L(5)}(\bullet \bullet \bullet \circ \circ) = \Phi_{L(5)}(\circ \bullet \bullet \bullet \circ) = \Phi_{L(5)}(\bullet \bullet \circ \circ \bullet) = -2w_1,$$

$$\Phi_{L(5)}(\bullet \bullet \bullet \bullet) = 0, \quad \Phi_{L(5)}(\bullet \bullet \bullet \circ) = -w_1,$$

jde o m -potenciál a lokálně dominantní základní stavy řádu 1 na uvedené křivce jsou všechny lamelární konfigurace obsahující vrstvy šířky 2 a 3.

Ukážeme si nyní, že 1-spinové excitace nemohou sejmout nekonečnou degeneraci na křivce koexistence. Využijeme k tomu analogických argumentů jako výše.



Obrázek 3.5: Excitace snímající degeneraci na ploše koexistence $\langle 2 \rangle$ a $\langle 3 \rangle$.

Všimněme si, že tyto excitace jsou vázány na sekvence $\bullet\circ\circ\bullet$ a $\bullet\circ\circ\circ\bullet$. Uvědomíme-li si platnost formálních identit pro tyto konfigurace

$$\begin{aligned} \sum_{\bullet \in x} &= \sum_{\bullet\bullet \in x} + \sum_{\bullet\circ \in x}, & \sum_{\bullet\bullet \in x} &= \sum_{\bullet\bullet\circ\circ \in x} + \sum_{\bullet\circ\circ\circ \in x}, \\ \sum_{\bullet\circ \in x} &= \sum_{\bullet\circ\circ\circ \in x} = \sum_{\bullet\circ\circ\bullet} + \sum_{\bullet\circ\bullet\circ \in x}, \end{aligned}$$

je zřejmé, že efektivní potenciál do řádu 4 lze ekvivalentně vyjádřit prostřednictvím sumy přes sekvence typu \bullet a $\bullet\circ$. Odtud je již patrné, že efektivní potenciál do řádu 4 obecné konfigurace obsahující vrstvy šířky 2 a 3 je konvexní kombinací efektivního potenciálu pro konfigurace $\langle 2 \rangle$ a $\langle 3 \rangle$. Na křivce koexistence je potom evidentní degenerace.

Z obr. 3.2 je patrné, že excitace, jejichž nosič leží v jedné vrstvě, jsou vázány na sekvence téhož typu jako excitace řádu 1 až 4 a z výše uvedených argumentů plyne, že nemohou nekonečnou degeneraci sejmout. Nejnižší excitace, jejíž nosič neleží v jedné vrstvě, je ta na obr. 3.2f. Vezmeme-li nyní v úvahu dekorativní část potenciálu, obdržíme excitaci na obr. 3.5 s energií E . Relevantní část efektivního potenciálu řádu E je (užitím (3.16)) dána vztahem

$$\begin{aligned} \beta H_1^{*(E)} &= - \sum_{\bullet\circ \in x} \beta \delta^{(E)} - \sum_{\bullet\bullet\circ\circ\circ \in x} 4w = \sum_{L(6)} \Phi_{L(6)}(x_{L(6)}), \\ \Phi_{L(6)}(x_{L(6)}) &= - \sum_{\bullet\bullet\circ\circ\circ \in x_{L(6)}} 4w - \frac{1}{4} \sum_{\bullet\circ\bullet\bullet\bullet, \bullet\circ\bullet\bullet\bullet \in x_{L(6)}} \beta \delta^{(E)}. \end{aligned}$$

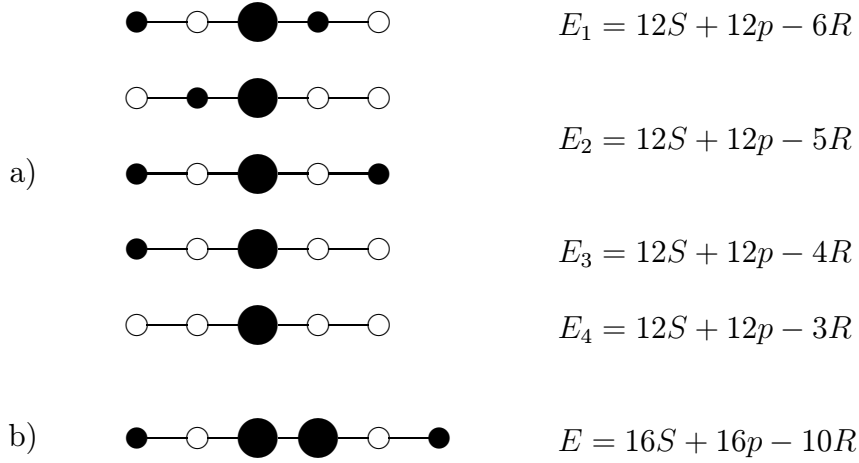
Na křivce $\beta \delta^{(E)} = 8w$ platí

$$\begin{aligned} \Phi_{L(6)}(\bullet\bullet\bullet\circ\circ\circ) &= \Phi_{L(6)}(\bullet\bullet\circ\circ\circ\bullet) = \Phi_{L(6)}(\bullet\bullet\circ\circ\bullet\bullet) = \Phi_{L(6)}(\bullet\circ\circ\bullet\bullet\circ) = -4w, \\ \Phi_{L(6)}(\bullet\bullet\bullet\circ\circ\bullet) &= -2w. \end{aligned}$$

Vidíme, že uvedený ekvivalentní přepis poskytuje m -potenciál a lokální základní stavy jsou pouze konfigurace typu $\langle 2 \rangle$ a $\langle 3 \rangle$ (ukázali jsme, že tato excitace diskriminuje jejich netriviální kombinace). Tím dokazujeme splnění Podmínky D. Podle Tvzení 11 potom existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram vzhledem k fázím typu $\langle 2 \rangle$ a $\langle 3 \rangle$ na okolí křivky

$$\beta \delta^{(2)/(3)} = 4w_1 + o(w_1).$$

Výsledky můžeme shrnout takto:



Obrázek 3.6: Relevantní excitace na okolí plochy C_3 .

Závěr. Řez fázového diagramu rovinou $S, p, r = \text{konst}$, kde $r < 0$, $S \gg |r|, |p|$, obsahuje na malém okolí bodu $\delta = 0$, $\beta = \infty$ pouze fáze třídy $\langle \infty \rangle$, $\langle 3 \rangle$ a $\langle 2 \rangle$.

Plocha koexistence C_3

Zavedeme-li označení $r = -R$, $\delta = -2r + \varepsilon$, je plocha koexistence C_3 lamelárních konfigurací obsahující vrstvy šířky 1 a 2 určena jako $R > 0$, $\varepsilon = 0$. Dekorativní část potenciálu má po této substituci explicitní tvar⁸

$$\Phi_P(\bullet\bullet\bullet) = R, \quad \Phi_P(\bullet\bullet\circ) = -\frac{\varepsilon}{2}, \quad \Phi_P(\bullet\circ\bullet) = -\varepsilon. \quad (3.20)$$

Opět studujeme řez $S, p, r = \text{konst}$ a postupujeme analogicky jako v případě plochy C_2 . Dekorativní část potenciálu rozlišuje 1-spinové excitace do 4 řádů, viz obr. 3.6a.

Efektivní potenciál řádu 1 na křivce $\varepsilon = 0$ je

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = - \sum_{\bullet\bullet\bullet \in x} w_1 = \sum_{L(5)} \Phi_{L(5)}(x_{L(5)}),$$

$$\Phi_{L(5)}(x_{L(5)}) = -\frac{1}{3} \sum_{\bullet\bullet\bullet * \in x_{L(5)}} w_1 - \frac{2}{3} \sum_{*\bullet\bullet\bullet \in x_{L(5)}} w_1.$$

Platí:

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\circ\bullet\bullet) = \Phi_{L(5)}(\bullet\circ\bullet\bullet\circ) = -\frac{2}{3}w_1,$$

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\circ\bullet\circ) = -\frac{1}{3}w_1, \quad \Phi_{L(5)}(\bullet\circ\bullet\bullet\bullet) = \Phi_{L(5)}(\bullet\circ\circ\bullet\bullet) = 0.$$

⁸Kvůli výhodnosti je ke každé destičce přidána konstanta R .

Zvolená ekvivalentní forma je tedy m -potenciál a lze snadno ověřit, že minimalizující konfigurace mají jednoznačné prodloužení na $\langle 1, 2 \rangle$, čímž dokazujeme Podmínku D. Na malém okolí křivky $\delta = 0$, $\beta > \beta_0$ tedy existuje soubor \mathcal{F} -ekvivalentních fází třídy $\langle 1, 2 \rangle$.

Nyní dokážeme existenci křivky koexistence fází $\langle 1 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$. Využijeme-li formálních identit platných pro konfigurace obsahující vrstvy šířky 1 a 2, které mají tvar

$$\sum_{\bullet\bullet\circ\in x} = 2 \sum_{\bullet\bullet\in x}, \quad \sum_{\bullet\circ\bullet\in x} = \sum_{\bullet\circ\bullet\in x} + \sum_{\bullet\bullet}$$

můžeme pro efektivní potenciál 1. řádu v obecném případě psát

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = - \sum_{\bullet\circ\in x} \beta \varepsilon^{(1)} - \sum_{\bullet\bullet\bullet\in x} w_1 = \sum_{L(4)} \Phi_{L(4)}(x_{L(4)}),$$

$$\Phi_{L(4)}(x_{L(4)}) = -\frac{1}{2} \sum_{\bullet\circ\bullet\bullet\in x_{L(4)}} \beta \varepsilon^{(1)} - \sum_{\bullet\bullet\bullet\in x_{L(4)}} w_1.$$

Na křivce $\beta \varepsilon^{(1)} = 2w_1$ mají jednotlivé konfigurace energie

$$\Phi_{L(4)}(\bullet\circ\bullet\circ) = \Phi_{L(4)}(\bullet\bullet\circ\bullet) = \Phi_{L(4)}(\bullet\circ\circ\bullet) = -2w_1,$$

$$\Phi_{L(4)}(\bullet\bullet\circ\circ) = 0.$$

Nejnižší řád tedy pouze diskriminuje konfigurace obsahující dvojici sousedních vrstev šířky 2.

Efektivní potenciál 2. řádu (pouze relevantní excitace vázaná na sekvenci $\bullet\circ\bullet\circ\bullet$):

$$\beta H_1^{*(2)}(x) = - \sum_{\bullet\circ\in x} \beta \varepsilon^{(2)} - \sum_{\bullet\circ\bullet\circ\bullet\in x} w_2 = \sum_{L(5)} \Phi_{L(5)}(x_{L(5)}),$$

$$\Phi_{L(5)}(x_{L(5)}) = -\frac{1}{6} \sum_{\bullet\circ\bullet\bullet\bullet\in x_{L(5)}} \beta \varepsilon^{(2)} - \frac{1}{3} \sum_{*\bullet\circ\bullet\bullet\in x_{L(5)}} \beta \varepsilon^{(2)} - \sum_{\bullet\circ\bullet\circ\bullet\in x_{L(5)}} w_2.$$

Na křivce $\beta \varepsilon^{(2)} = -3w_2$ platí

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\circ\bullet\circ\bullet) = \Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\circ\bullet\bullet) = \Phi_{L(5)}(\bullet\circ\bullet\bullet\circ) = 2w_2,$$

$$\Phi_{L(5)}(\bullet\bullet\circ\bullet\circ) = \frac{5}{2}w_2.$$

Konfigurace obsahující sekvenci vrstev šířky 1, 1, 2 jsou tedy touto excitací potlačeny a výše uvedený m -potenciál ekvivalentní efektivnímu potenciálu řádu 2 má pouze konečně mnoho lokálních základních stavů (je jednoduché vidět, že minimalizující konfigurace mají jednoznačné prodloužení na $\langle 1 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$). Existuje tedy křivka $\beta \varepsilon = 2w_1 + o(w_1)$, na jejímž malém okolí je fázový diagram \mathcal{F} -úplný vzhledem k fázím typu $\langle 1 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$.

Nyní se budeme věnovat fázovému přechodu mezi $\langle 1, 2 \rangle$ a $\langle 2 \rangle$. K tomu přepíšeme efektivní potenciál 1. řádu ještě jiným způsobem, než jsme učinili výše:

$$\beta H_1^{*(1)}(x) = \sum_{L(4)} \Phi_{L(4)}(x_{L(4)}),$$

$$\Phi_{L(4)}(x_{L(4)}) = -\frac{1}{4} \sum_{\bullet \circ ** \in x_{L(4)}} \beta \varepsilon^{(1)} - \frac{1}{2} \sum_{** \circ * \in x_{L(4)}} \beta \varepsilon^{(1)} - \sum_{\bullet \bullet \bullet \in x_{L(4)}} w_1.$$

Potom totiž na křivce $\beta \varepsilon^{(1)} = -4w_1$ platí

$$\Phi_{L(4)}(\bullet \bullet \circ \circ) = \Phi_{L(4)}(\bullet \circ \circ \bullet) = \Phi_{L(4)}(\bullet \bullet \circ \bullet) = 2w_1,$$

$$\Phi_{L(4)}(\bullet \circ \bullet \circ) = 4w_1$$

a dostáváme tak m-potenciál, jehož lokální základní stavy jsou konfigurace neobsahující dvojici sousedních vrstev o šířce 1.

Uvědomíme-li si nyní platnost formálních identit pro uvažované konfigurace neobsahující sousední vrstvy o šířce 1

$$\sum_{\bullet \in x} = \sum_{\bullet \circ \in x} + \sum_{\bullet \bullet \in x}, \quad \sum_{\bullet \circ \in x} = \sum_{\bullet \circ \bullet \in x} + \sum_{\bullet \bullet \in x},$$

$$\sum_{\bullet \bullet \in x} = \sum_{\bullet \bullet \bullet \in x} + \sum_{\bullet \bullet \circ \bullet \in x},$$

je zřejmé, že efektivní potenciál do řádu 4 lze vyjádřit prostřednictvím sum přes sekvence \bullet a $\bullet \circ$ (relevantní excitace do řádu 4 jsou totiž vázány pouze na sekvence typu $\bullet \bullet \circ \circ$ a $\bullet \bullet \circ \bullet$). Efektivní potenciál do řádu 4 obecné konfigurace je potom nutně konvexní kombinace efektivního potenciálu pro ty konfigurace, které obsahují extrémální počet sekvencí typu $\bullet \bullet$ a $\bullet \circ$, tedy $\langle 2 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$. Excitace tohoto typu tedy nemohou sejmout nekonečnou degeneraci na křivce koexistence $\langle 2 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$.

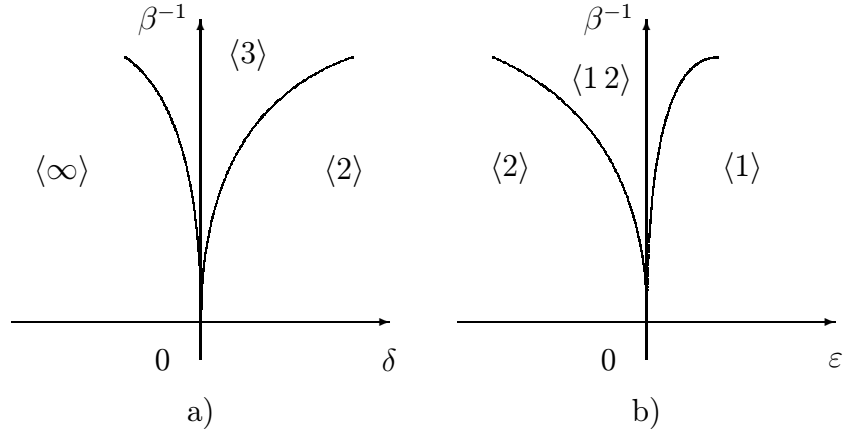
Nejnižší vícespinová excitace pochází podle úvah ze začátku této kapitoly z překlopení dvojice sousedních spinů téhož znaménka. Vezmeme-li v úvahu dekorativní část potenciálu, obdržíme jako nejnižší excitaci tohoto typu excitaci znázorněnou na obr. 3.6f; její energii označíme E . Efektivní potenciál řádu E opět přepíšeme jako m-potenciál:

$$\beta H_1^{*(E)}(x) = - \sum_{\bullet \circ \in x} \beta \varepsilon^{(E)} - \sum_{\bullet \circ \bullet \circ \bullet} w = \sum_{L(6)} \Phi_{L(6)}(x_{L(6)}),$$

$$\Phi_{L(6)}(x_{L(6)}) = -\frac{1}{4} \sum_{\bullet \circ ****, * \bullet \circ **** \in x_{L(6)}} \beta \varepsilon^{(E)} - \sum_{\bullet \circ \bullet \circ \bullet \in x_{L(6)}} w.$$

Na křivce $\beta \varepsilon^{(E)} = -2w$ potom máme

$$\Phi_{L(6)}(\bullet \bullet \circ \bullet \bullet \bullet) = \Phi_{L(6)}(\bullet \circ \bullet \bullet \bullet \circ) = \Phi_{L(6)}(\bullet \bullet \circ \bullet \bullet \circ) = \Phi_{L(6)}(\bullet \circ \bullet \bullet \circ \bullet) = w,$$



Obrázek 3.7: Fázový diagram a) na okolí plochy C_2 , b) na okolí plochy C_3 v řezu $S, p, r = \text{konst.}$

$$\Phi_{L(6)}(\bullet\bullet\circ\circ\bullet\circ) = \frac{3}{2}w.$$

Tato excitace tedy na křivce koexistence diskriminuje netriviální kombinace konfigurací $\langle 2 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$ a dokazuje tak existenci konečného počtu lokálně dominantních základních stavů v řádu E . Existuje tedy křivka $\beta\varepsilon = -4w_1 + O(w_1)$, na jejímž malém okolí pro $\beta > \beta_0$ existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram vzhledem k fázím typu $\langle 2 \rangle$ a $\langle 1, 2 \rangle$.

Závěr. Řez fázového diagramu rovinou $S, p, r = \text{konst.}$, kde $r < 0$, $S \gg |r|, |p|$, obsahuje na malém okolí bodu $\delta = -2r$, $\beta = \infty$ pouze fáze třídy $\langle 1 \rangle$, $\langle 1, 2 \rangle$ a $\langle 2 \rangle$.

Analogicky jako v případě ploch koexistence C_2, C_3 lze provést rozbor fázového diagramu na okolí variety T , která je určena rovnicí $r = 0$, $\delta = 0$. Ukazuje se, že existuje křivka koexistence lamelárních fází třídy $\langle \infty \rangle$, $\langle 1 \rangle$, $\langle 2 \rangle$ a \mathcal{F} -úplný fázový diagram vzhledem k těmto třídám \mathcal{F} -ekvivalentních fází.

3.2 Blokové fáze

V tomto odstavci se budeme věnovat blokovým fázím představujícím trojrozměrné zobecnění lamelárních fází studovaných v předchozí části. Lamelární konfigurace jsou tvořeny sekvencí rovnoběžných rovin konstantního spinu a jsou tedy jednoznačně zadány restrikcí na svou vertikální osu. Tento požadavek nyní poněkud zeslabíme. Všimneme si přitom jiné podstatné charakteristiky lamelárních konfigurací, totiž, že překlopením souboru rovnoběžných rovin je lze transformovat na konstantní konfigurace. Vynecháme požadavek rovnoběžnosti těchto rovin a budeme se zabývat obecnější třídou konfigurací, které lze získat z konstantních ('ferromagnetických') konfigurací překlopením libovolného souboru rovin. Struktura těchto konfigurací je zřejmá: mají charakter 'trojrozměrné šachovnice' s políčky libovolných typů včetně 2D-struktur ('válcové' konfigurace) a 1D-struktur

(lamelární konfigurace). Tyto konfigurace jsou jednoznačně určeny restrikcí na trojici navzájem kolmých přímk a splňují jeden z předpokladu použitelnosti BS-teorie, totiž Podmínku L – překlopení spinu v jednom bodě implikuje překlopení jisté roviny, má-li výchozí stav zůstat blokovou konfigurací. Blokové konfigurace jsou tedy další třídou, pro níž lze rozvinout uvedenou techniku rozboru nízkoteplotního fázového diagramu.

Z hlediska amfifilických ternárních systémů fáze blokového typu pokrývají určitý soubor lyotropických fází, včetně krychlových fází uvedených v přehledu.

3.2.1 Základní pojmy

Označme \mathcal{W} grupu všech transformací nad konfiguračním prostorem, jejímiž generátory jsou operace překlopení spinu na souřadnicových rovinách $\{i \in \mathbb{Z}^\nu : i_k = \text{konst}\}$ pro $k = 1, \dots, \nu$. Jinou množinu generátorů této grupy tvoří operace překlopení spinu na poloprostorech $M = \{i \in \mathbb{Z}^\nu : i_k > \text{konst}\}$ pro $k = 1, \dots, \nu$ mající za následek zobrazení na konfiguračním prostoru surfactantů⁹

$$\sigma_{ij} \rightarrow \begin{cases} 1 - \sigma_{ij} & \text{pro } \langle i, j \rangle \cap M \neq \emptyset, \langle i, j \rangle \cap M^c \neq \emptyset, \\ \sigma_{ij} & \text{jinak.} \end{cases} \quad (3.21)$$

Množinu hran $\{\langle i, j \rangle : i_k = \text{konst}_1, j_k = \text{konst}_2\}$, kde $k = 1, \dots, \nu$, nazveme *surfactantovou rovinou* konfigurace $x \in \Omega$, jestliže pro každou hranu z této množiny platí $\sigma_{ij} = 1$. Zformulujeme nejprve následující jednoduché

Lemma. *Nechť $x \in \Omega$. Potom následující tvrzení jsou ekvivalentní:*

1. *existuje transformace $\mathcal{T} \in \mathcal{W}$, pro níž platí $(\mathcal{T}x)_i = \text{konst}$ pro všechna $i \in \mathbb{Z}^\nu$, tzn. konfigurace x je ekvivalentní konstantním konfiguracím vzhledem ke grupě \mathcal{W} ,*
2. *je-li některá hrana zaplněna surfactantem, obsahuje konfigurace celou surfactantovou rovinu určenou touto hranou,*
3. *restrikce konfigurace x na čtverce C o straně 2 mají tvar*

$$x_C \in \left\{ \begin{pmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bullet & \circ \\ \circ & \bullet \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bullet & \circ \\ \bullet & \circ \end{pmatrix} \right\}.$$

Důkaz. 1) a 2) jsou zřejmě ekvivalentní podle úvah výše. Množina konfigurací na C uvedených v 3) je invariantní vzhledem ke grupě \mathcal{W} , odtud plyne ekvivalence 1) a 3).

◇

Konfigurace, o kterých je v Lemmatu řeč, nazveme *blokové*. Je zřejmé, že tato třída konfigurací obsahuje lamelární konfigurace jako speciální případ.

⁹Připomeňme, že $\sigma_{ij} = (1 - x_i x_j)/2$.

Konfigurace čtverce C , které mohou být restrikcemi blokových konfigurací, mají tu vlastnost, že jsou jednoznačně zadány zúžením na libovolnou trojici bodů. Důsledkem této skutečnosti je, že blokové konfigurace jsou jednoznačně určeny restrikcí na souřadnicové osy.

Blokovou konfiguraci (obecně na podmnožině mříže tvaru kvádrů) lze tedy určit sekvencemi spinů na ν -tici navzájem kolmých protínajících se přímkách, vyznačíme-li na každé sekvenci průsečík. Je tedy zřejmý význam zápisu např. $x = (+ + \hat{-} + +; + - \hat{-} + +; + + \hat{-} - +)$ pro konfiguraci $x \in \Omega$ na krychli o hraně 5. Pro třídu \mathcal{F} -ekvivalentních periodických blokových konfigurací lze potom zavést analogické označení jako pro periodické lamelární konfigurace. Symbolem

$$\langle l_1^1, \dots, l_{k_1}^1; \dots, l_1^\nu, \dots, l_{k_\nu}^\nu \rangle$$

budeme označovat blokovou konfiguraci, jejíž restrikce na jednotlivé souřadnicové osy jsou 1D-periodické konfigurace složené z konstantních sekvencí délky $l_1^j, \dots, l_{k_j}^j$, kde $0 < j \leq \nu$, v uvedeném pořadí. Lamelární konfigurace s ν -tou vertikální osou jsou v uvedené symbolice dány jako $\langle \infty; \dots; \infty; l_1 \dots l_k \rangle$, ‘antiferomagnetická’ konfigurace je označena symbolem $\langle 1; \dots; 1 \rangle$, apod.

3.2.2 Základní stavy blokového typu

Vraťme se k Alexanderovu modelu a omezme se opět na dimenzi 3. Naším cílem je najít oblast v množině parametrů, ve které základní stavy jsou blokové konfigurace. Analogicky jako v případě lamelárních základních stavů se nám nepodaří nalézt úplnou množinu parametrů tohoto typu, ale prostřednictvím metody m-potenciálu identifikujeme alespoň její podmnožinu, která bude vhodná k nízkoteplotnímu rozboru.

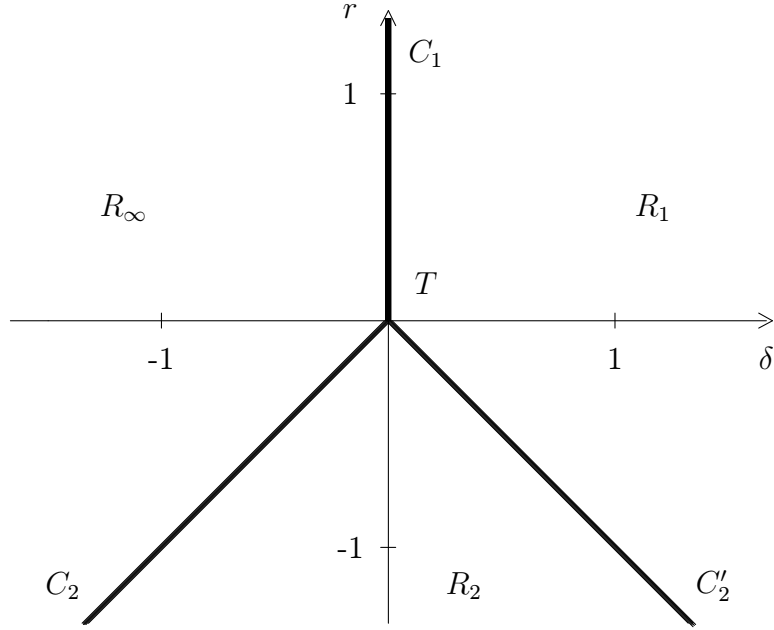
Připomeňme, že model je zadán formálním hamiltoniánem

$$H(x) = -r \sum_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - s \sum'_{\langle i,j \rangle \langle j,k \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{jk} - p \sum''_{\langle i,j \rangle \langle k,l \rangle} \sigma_{ij} \sigma_{kl} - \mu \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{ij}, \quad (3.22)$$

kde

$$\sigma_{ij} = \frac{1 - x_i x_j}{2}. \quad (3.23)$$

Vhodný ekvivalentní potenciál lze hledat v různých tvarech, díky charakteru potenciálu se nabízí například přepsat hamiltonián jako sumu přes obdélníky o stranách 2 a 3. Při tomto přepisu bychom si ponechali jistou volnost podobně jako jsme postupovali v minulém odstavci při hledání lokálně dominantních základních stavů. Tuto volnost bychom využili k tomu, aby restrikce vybraných blokových konfigurací na tyto obdélníky měly stejné energie a podmínka minimálnosti těchto konfigurací by poskytla hledanou oblast parametrů. Ukazuje se však, že v daném případě je podstatně jednodušší jiný způsob, kterým také budeme postupovat.



Obrázek 3.8: Fázový diagram při nulové teplotě v řezu $s = 0$, $p > 0$.

3.2.3 Nízkoteplotní fázový diagram

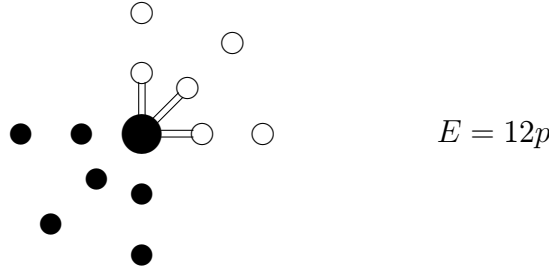
V tomto odstavci se budeme zabývat nízkoteplotní deformací fázového diagramu při nulové teplotě. Některé závěry můžeme provést okamžitě.

Protože na každé z oblastí R_∞ , R_1 , R_2 existuje pouze konečný počet \mathcal{F} -ekvivalentních lokálních základních stavů, je splněna Podmínka M a podle Tvzení 8 existuje na malém okolí libovolného bodu soubor stabilních fází jednoznačně přiřazený množině lokálních základních stavů. Tyto oblasti tedy nevykazují nízkoteplotní fázové přechody.

Na ploše C_1 dané podmínkami $s = 0$, $p > 0$, $r > 0$, $\delta = 0$ existují 4 lokální základní stavy třídy $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a $\langle 1; 1; 1 \rangle$, je splněna Podmínka M a řez diagramu 3.8 rovinou $s, p, r = \text{konst}$, kde $s = 0$, $p > 0$, $r > 0$, je \mathcal{F} -úplný fázový diagram při nulové teplotě. Podle Tvzení 10 potom existuje na okolí bodu $\delta = 0$, $\beta = \infty$ úplný fázový diagram vzhledem k fázím typu $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a $\langle 1; 1; 1 \rangle$. Užitím symetrie diagramu můžeme dokonce tvrdit, že křivka koexistence má tvar $\delta = 0$.

Na varietě T určené podmínkami $s = r = \delta = 0$, $p > 0$ jsou základními stavy všechny blokové konfigurace ($|g| = \infty$) a tvoří \mathcal{F} -ekvivalentní množinu. Mají tedy nutně ekvivalentní excitace a selhává BS-teorie, neboť se v žádném řádu nepodaří nalézt konečný počet dominantních základních stavů. O tomto ‘degenerovaném’ bodě tedy BS-teorie není schopna provést žádnou predikci.

Netriviální zůstává pouze rozbor plochy C_2 koexistence blokových základních stavů, jejichž restrikce na jednotlivé souřadnicové osy neobsahují konstantní sek-



Obrázek 3.9: Excitace 1. řádu na okolí plochy C_2 .

vence délky 1.

Po substituci $r = -R$, $\delta = r + \varepsilon$ má plocha C_2 tvar $s = 0$, $p > 0$, $R > 0$, $\varepsilon = 0$. Budeme vyšetřovat řez $s, p, r = \text{konst.}$ K nalezení excitace nejnižšího řádu provedeme standardní úvahu. Každý defekt ($l \geq 2$) musí obsahovat alespoň trojici excitovaných rovin (podrobně viz předchozí odstavec) a každá excitovaná rovina nejméně 4 excitované čtverce C . Je tedy zřejmé, že defekt $\mathcal{D} = (\text{dom } \mathcal{D}, x_{\text{dom } \mathcal{D}})$ nejnižšího řádu z hlediska části potenciálu určené množinami typu C je zadán konfigurací $x_{\text{dom } \mathcal{D}}$, která se liší od lokálního základního stavu na dom \mathcal{D} pouze překlacením jednoho spinu. Má tedy charakter excitace. Analogickými argumenty jako v minulém odstavci lze dokázat splnění Podmínky R pro libovolnou hladinu energie D , ale ve skutečnosti nám postačí pouze excitace nejnižšího řádu.

Vezmeme-li nyní v úvahu část potenciálu definovanou množinami P , obdržíme excitaci nejnižšího řádu znázorněnou na obr. 3.9. Pro tuto excitaci $\mathcal{E} = (\text{dom } \mathcal{E}, x_{\text{dom } \mathcal{E}})$ je dom \mathcal{E} krychle o hraně 4 a nechť $y_{\text{dom } \mathcal{E}}$ označuje příslušný lokální základní stav na dom \mathcal{E} . Uvedená excitace je vázána na konfiguraci

$$y_{\text{dom } \mathcal{E}} = (\bullet\bullet\hat{\circ}; \bullet\bullet\hat{\circ}; \bullet\bullet\hat{\circ})$$

ve smyslu označení výše.

Efektivní potenciál řádu 1 je dán vztahem

$$\beta H^{*(1)}(x) = \beta \sum_P \Phi_P(x_P) - \sum_{\pi \in \mathcal{C}_{(1)}(x)} q(\pi). \quad (3.28)$$

Jediné clustery, přes něž se počítá v této rovnici, jsou tvořeny excitacemi 1. řádu s násobností jedna. Nyní se pokusíme přepsat efektivní potenciál do tvaru, který bude vhodný pro následné reformulace v termínech m-potenciálu.

Začneme vysvětlením obecného schematu. Efektivní potenciál má obecně tvar

$$\beta H^*(x) = \sum_B \Phi_B(x_B). \quad (3.29)$$

Využíváme ekvivalentní přepis (viz odst. 1.2)

$$\beta H^*(x) = \sum_K \Phi_K(x_K), \quad (3.30)$$

kde

$$\Phi_K(x_K) = \sum_{B \subset K} \chi_B(K) \Phi_B(x_B) \quad (3.31)$$

s podmínkou pro váhovou funkci

$$\sum_{K: B \subset K} \chi_B(K) = 1 \quad \text{pro všechna } B. \quad (3.32)$$

Je výhodné pracovat ještě s poněkud odlišným vyjádřením. Obecný příspěvek do efektivního potenciálu je vázán na nějaký kvádr B a konfiguraci ψ_B určenou trojicí sekvencí na souřadnicových osách ('projekce' konfigurace ψ_B na souřadnicové osy) $(\psi_B^1; \psi_B^2; \psi_B^3)$, váhu tohoto příspěvku označíme $\Phi_B(\psi_B)$. Efektivní potenciál má tedy následující strukturu:

$$\beta H^*(x) = \sum_{(B, \psi_B)} \left[\sum_{\psi_B^1 \in x_1} \sum_{\psi_B^2 \in x_2} \sum_{\psi_B^3 \in x_3} \Phi_B(\psi_B) \right], \quad (3.33)$$

kde první suma jde přes všechny kvádry B a konfigurace na těchto kvádrech ψ_B modulo symetrie potenciálu a zbývající sumy počítají pro každou konfiguraci určenou projekcemi $(\psi_B^1; \psi_B^2; \psi_B^3)$ počet výskytů v konfiguraci x . Uvedený zápis představuje alternativní vyjádření pro (3.29). Zatímco v původním vyjádření jsme sčítali přes všechny kvádry B , zde sčítáme přes všechny sekvence (modulo symetrie) dávající netriviální příspěvek do potenciálu.

Hledáme-li ekvivalentní potenciál ve tvaru (K označuje libovolné kvádry)

$$\beta H^*(x) = \sum_K \Phi_K(x_K), \quad (3.34)$$

kde

$$\Phi_K(x_K) = \sum_{(B, \psi_B): B \subset K} \left[\sum_{\psi_B^1 \in x_K^1} \sum_{\psi_B^2 \in x_K^2} \sum_{\psi_B^3 \in x_K^3} \chi_{(B, \psi_B)}(K) \Phi_B(\psi_B) \right], \quad (3.35)$$

musíme splnit podmínku ekvivalence

$$\sum_{K: B \subset K} \chi_{(B, \psi_B)}(K) = 1 \quad \text{pro všechna } (B, \psi_B). \quad (3.36)$$

Tento zápis přechodu k ekvivalentnímu potenciálu umožňuje pracovat s váhovou funkcí, která může například záviset na poloze množiny B v K , apod. To s výhodou využíváme při konstrukci ekvivalentního m-potenciálu v konkrétních případech.

Jako dostačující se ukáže předpokládat váhovou funkci v separovaném tvaru

$$\chi_{(B, \psi_B)}(K) = \prod_{i=1}^3 \chi_{(B^i, \psi_{B^i})}(K^i) \quad (3.37)$$

s podmínkou

$$\sum_{K^i: B^i \subset K^i} \chi_{(B^i, \psi_B^i)}(K^i) = 1. \quad (3.38)$$

V dalším budeme používat uvedenou strategii, pouze v konkrétních případech zjednodušíme označení. Poznamenejme, že tato metoda byla již použita v odstavci věnovaném lamelárním fázím, zde jsme ji pouze zapsali formálním způsobem v obecnějším případě blokových fází. Efektivní potenciál 1. řádu (3.28) lze tedy psát ve tvaru

$$\begin{aligned} \beta H^{*(1)}(x) = & - \sum_{\bullet\bullet\circ \in x_1} \sum_{\bullet \in x_2} \sum_{\bullet \in x_3} \frac{\beta \varepsilon^{(1)}}{2} - \sum_{\bullet \in x_1} \sum_{\bullet\bullet\circ \in x_2} \sum_{\bullet \in x_3} \frac{\beta \varepsilon^{(1)}}{2} - \sum_{\bullet \in x_1} \sum_{\bullet \in x_2} \sum_{\bullet\bullet\circ \in x_3} \frac{\beta \varepsilon^{(1)}}{2} - \\ & - \sum_{\bullet\bullet\circ \in x_1} \sum_{\bullet\bullet\bullet\circ \in x_2} \sum_{\bullet\bullet\bullet\circ \in x_3} w. \end{aligned}$$

Nejprve dokážeme existenci $\langle 3; 3; 3 \rangle$ -fáze na okolí křivky $\varepsilon = 0$.

Označme krychle o hraně n symbolem $K(n)$. Efektivní potenciál 1. řádu přepíšeme pro $\varepsilon = 0$ jako

$$\begin{aligned} \beta H^{*(1)}(x) &= \sum_{K(5)} \Phi_{K(5)}(x_{K(5)}), \\ \Phi_{K(5)}(x_{K(5)}) &= - \prod_{i=1}^3 \left[\sum_{\bullet\bullet\bullet\circ * \in x_{K(5)}^i} \chi_1 + \sum_{* \bullet\bullet\bullet\circ \in x_{K(5)}^i} \chi_2 \right] w, \\ \chi_1 + \chi_2 &= 1. \end{aligned}$$

V tomto případě je situace velmi jednoduchá, neboť potenciál má separovaný tvar

$$\Phi_{K(5)}(x_{K(5)}) = \prod_{i=1}^3 \Phi_{K(5)^i}^i(x_{K(5)}^i)$$

a z obdobné situace v případě lamelárních fází víme, že volbou $\chi_1 = \frac{2}{3}$, $\chi_2 = \frac{1}{3}$ dosáhneme toho, že 1D-potenciál Φ^i je m-potenciál s lokálními základními stavy typu $\langle 3 \rangle$. Odtud je zřejmé, že stejnou vlastnost má i potenciál Φ a lokálně dominantní základní stavy řádu 1 jsou blokové konfigurace třídy $\langle 3; 3; 3 \rangle$. To dokazuje existenci $\langle 3; 3; 3 \rangle$ -fáze na okolí křivky $\varepsilon = 0$; $\beta = \infty$ ve smyslu Tvzení 11.

Nyní se budeme věnovat fázovému přechodu mezi $\langle 3; 3; 3 \rangle$ a $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$. Užijeme-li formální identity

$$\sum_{\bullet\bullet\circ \in x_i} = 2 \sum_{\bullet \in x_i},$$

lze efektivní potenciál 1. řádu zapsat v ekvivalentním tvaru

$$\beta H^{*(1)} = \sum_{K(5)} \Phi_{K(5)}(x_{K(5)}),$$

$$\begin{aligned}\Phi_{K(5)}(x_{K(5)}) = & -\beta\varepsilon^{(1)} \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{\bullet\circ\ast\ast\ast\in x_{K(5)}^i} \chi_1 + \sum_{\ast\bullet\circ\ast\ast\in x_{K(5)}^i} \chi_2 \right] \\ & - \prod_{i=1}^3 \left[\sum_{\bullet\bullet\bullet\circ\ast\in x_{K(5)}^i} \chi_3 + \sum_{\ast\bullet\bullet\bullet\circ\in x_{K(5)}^i} \chi_4 \right] w\end{aligned}$$

s podmínkami

$$2(\chi_1 + \chi_2) = 1, \quad \chi_3 + \chi_4 = 1.$$

Označíme-li pro zjednodušení zápisu jednotlivé 1D-sekvence řeckými písmeny

$$\kappa = \bullet\bullet\bullet\circ\circ, \quad \lambda = \bullet\circ\circ\circ\bullet, \quad \mu = \bullet\bullet\bullet\bullet\bullet, \quad \nu = \bullet\bullet\bullet\bullet\circ, \quad \pi = \bullet\bullet\circ\circ\bullet$$

a zvolíme-li

$$\chi_1 = \frac{1}{6}, \quad \chi_2 = \frac{1}{3}, \quad \chi_3 = \frac{2}{3}, \quad \chi_4 = \frac{1}{3},$$

platí na křivce $\beta\varepsilon^{(1)} = -\frac{8}{27}w$ rovnosti

$$\Phi_{K(5)}(\kappa; \kappa; \kappa) = \Phi_{K(5)}(\kappa; \kappa; \lambda) = \Phi_{K(5)}(\kappa; \lambda; \lambda) = \Phi_{K(5)}(\lambda; \lambda; \lambda) = \Phi_{K(5)}(\mu; \mu; \mu) = 0$$

a ve všech ostatních případech

$$\Phi_{K(5)}(\psi_{K(5)}) > 0.$$

Protože minimalizující konfigurace na $K(5)$ mají jednoznačné prodloužení na konfigurace třídy $\langle 3; 3; 3 \rangle$ a $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$, dokazujeme tím jejich lokální dominanci. Existuje tedy křivka $\beta\varepsilon = -\frac{8}{27}w + o(w)$ koexistence fází třídy $\langle 3; 3; 3 \rangle$ a $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a \mathcal{F} -úplný fázový diagram vzhledem k těmto fázím na malém okolí bodu $\varepsilon = 0$, $\beta = \infty$.

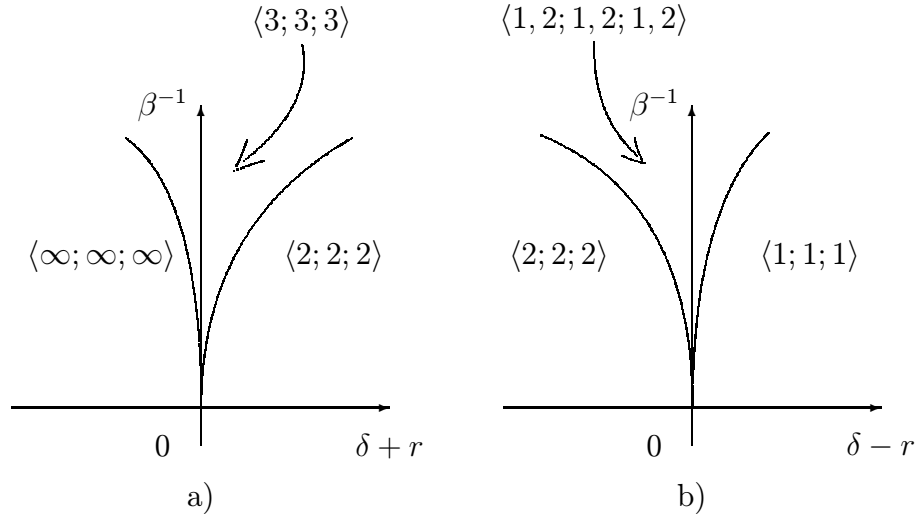
K důkazu existence křivky koexistence fází $\langle 2; 2; 2 \rangle$ a $\langle 3; 3; 3 \rangle$ je nutno použít větších množin, a to krychlí o hraně 6. Ukazuje se totiž, že Podmínka D je opět splněna v 1. řádu, ale k důkazu této skutečnosti nestačí použít krychle $K(5)$. Jednoduchý ‘1D-argument’ spočívá v tom, že na úsečkách délky 5 nelze diskriminovat netriviální kombinace konfigurací typu $\langle 2 \rangle$ a $\langle 3 \rangle$; v 3D-případě je situace obdobná. Nepodařilo by se tedy zkonstruovat m-potenciál pomocí krychlí $K(5)$.

Efektivní potenciál 1. řádu proto napíšeme následujícím způsobem:

$$\beta H^{*(1)}(x) = \sum_{K(6)} \Phi_{K(6)}(x_{K(6)}),$$

$$\begin{aligned}\Phi_{K(6)}(x_{K(6)}) = & -\beta\varepsilon^{(1)} \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{\bullet\circ\ast\ast\ast\ast\in x_{K(6)}^i} \frac{1}{12} + \sum_{\ast\bullet\circ\ast\ast\ast\in x_{K(6)}^i} \frac{1}{4} + \sum_{\ast\ast\bullet\circ\ast\ast\in x_{K(6)}^i} \frac{1}{3} \right] \\ & - \prod_{i=1}^3 \left[\sum_{\bullet\bullet\bullet\circ\circ\in x_{K(6)}^i} \frac{1}{3} \right] w.\end{aligned}$$

Konstrukce tohoto potenciálu vychází z výše uvedeného obecného schématu a lze snadno ověřit jeho ekvivalenci původnímu modelu. Označme opět jednotlivé



Obrázek 3.10: Fázový diagram a) na okolí plochy C_2 , b) na okolí plochy C'_2 v řezu $s = 0$, $p > 0$, $r < 0$.

1D-sekvence

$$\begin{aligned} \alpha &= \bullet\bullet\bullet\circ\circ\circ, & \beta &= \bullet\circ\circ\circ\bullet, & \gamma &= \bullet\bullet\circ\circ\bullet\bullet, & \delta &= \bullet\circ\circ\bullet\circ, \\ \mu &= \bullet\bullet\bullet\bullet\bullet, & \nu &= \bullet\bullet\bullet\bullet\circ, & \pi &= \bullet\bullet\bullet\circ\circ, & \rho &= \bullet\bullet\bullet\circ\circ\bullet, \\ & & & & \sigma &= \bullet\circ\circ\circ\bullet. \end{aligned}$$

Potom na křivce $\beta\varepsilon^{(1)} = \frac{16}{27}w$ dostáváme

$$\Phi_{K(6)}(\alpha; \alpha; \alpha) = \Phi_{K(6)}(\alpha; \alpha; \beta) = \Phi_{K(6)}(\alpha; \beta; \beta) = \Phi_{K(6)}(\beta; \beta; \beta) = -\frac{24}{27}w,$$

$$\Phi_{K(6)}(\gamma; \gamma; \gamma) = \Phi_{K(6)}(\gamma; \delta; \delta) = \Phi_{K(6)}(\delta; \delta; \delta) = -\frac{24}{27}w$$

a ve všech ostatních případech

$$\Phi_{K(6)}(\psi_{K(6)}) > -\frac{24}{27}w.$$

Tím jsme zkonstruovali hledaný m-potenciál a uvážíme-li jednoznačnost prodloužení minimalizujících konfigurací, dokazujeme splnění Podmínky D. Podle Tvzení 11 potom na okolí nalezené křivky existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram vzhledem k fázím $\langle 2; 2; 2 \rangle$ a $\langle 3; 3; 3 \rangle$.

Vzhledem k symetrii fázového diagramu lze potom formulovat následující

Závěr. Řez fázového diagramu $s = 0$, $p = \text{konst} > 0$, $r = \text{konst} < 0$, obsahuje na malém okolí bodu $\delta = r$, $\beta = \infty$ pouze fáze třídy $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$, $\langle 2; 2; 2 \rangle$, $\langle 3; 3; 3 \rangle$ a na malém okolí bodu $\delta = -r$, $\beta = \infty$ fáze třídy $\langle 1; 1; 1 \rangle$, $\langle 2; 2; 2 \rangle$ a $\langle 1, 2; 1, 2; 1, 2 \rangle$.

3.3 Řez fázového diagramu rovinou $r = 0$

V tomto odstavci si zvolíme oblast v množině parametrů zadanou rovnicí $r = 0$ a budeme se zabývat některými aspekty nízkoteplotního chování takového systému. Výběr právě této oblasti je spíše než fyzikálními důvody ovlivněn relativní jednoduchostí rozboru v tomto případě. Položíme-li totiž $r = 0$, bude dosah potenciálu roven 1 a lze jej ekvivalentně přepsat prostřednictvím energie konfigurací na elementárních krychlích. To nám umožní nalézt fázový diagram při nulové teplotě — to bude provedeno v následujícím paragrafu. Jeho nízkoteplotní deformaci je potom věnován paragraf 3.4.3.

3.3.1 Základní stavy

Jestliže $r = 0$ a $\nu = 3$, lze model ekvivalentně zadat následujícím způsobem:

$$H(x) = \sum_{P \subset \mathbb{Z}^3} \Phi_P(x_P), \quad (3.39)$$

kde P označuje čtverce o straně 2 a potenciál je určen vztahem

$$\Phi_P(x_P) = -s \sum'_{b, b' \subset P} \sigma_b \sigma_{b'} - p \sum''_{b, b' \subset P} \sigma_b \sigma_{b'} - \frac{\mu}{4} \sum_{b \subset P} \sigma_b, \quad (3.40)$$

kde

$$\sigma_{ij} = \frac{1 - x_i x_j}{2}.$$

Jak víme z diskuse symetrií modelu v kap. 2, je vhodné místo chemického potenciálu μ pracovat s parametrem δ , který s μ souvisí vztahem

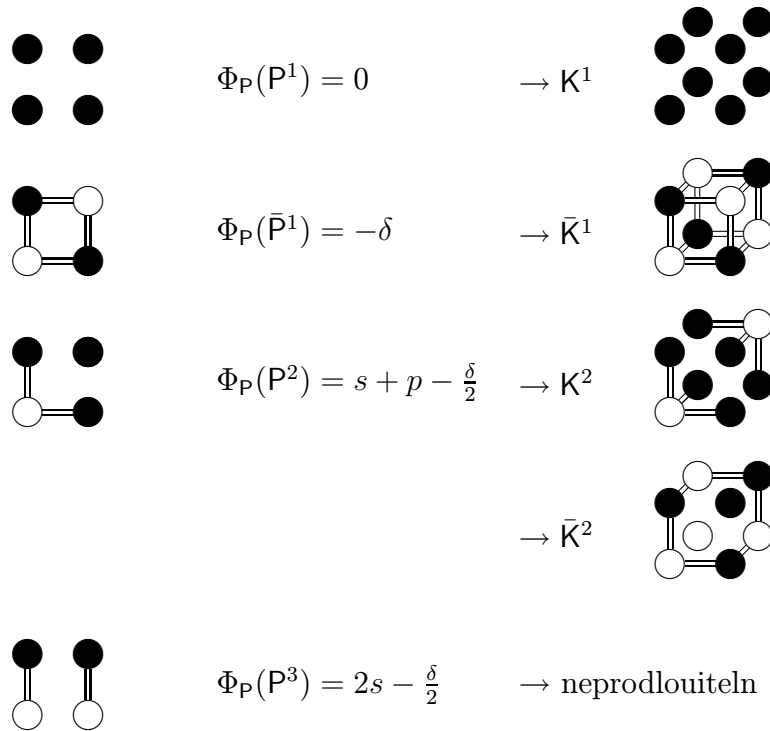
$$\mu = -4s - 2p + \delta$$

a využít tak \mathcal{S} -symetrie fázového diagramu. Připomeňme, že \mathcal{S} -symetrií fázového diagramu rozumíme jeho invarianci vzhledem k zobrazení

$$x \rightarrow \bar{x}, \quad \text{kde } \bar{x}_i = (-1)^{|i|} x_i \quad \text{pro všechna } i \in \mathbb{Z}^3,$$

$$\delta \rightarrow -\delta.$$

Na obr. 3.11 jsou uvedeny všechny konfigurace (s ohledem na symetrie modelu) čtverce P s příslušnými energiemi. Je zřejmé, že pro konfigurace P^1 existuje jednoznačné prodloužení na konfigurace třídy $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$, podobně \bar{P}^1 lze jednoznačně prodloužit na $\langle 1; 1; 1 \rangle$. Protože tyto konfigurace jsou \mathcal{S} -ekvivalentní, jsou příslušné oblasti základních stavů $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a $\langle 1; 1; 1 \rangle$ symetricky sdružené vzhledem k rovině $\delta = 0$. Konfigurace P^2 má nekonečně mnoho prodloužení na lokální základní stav na \mathbb{Z}^3 , každé však má tu vlastnost, že pro libovolnou



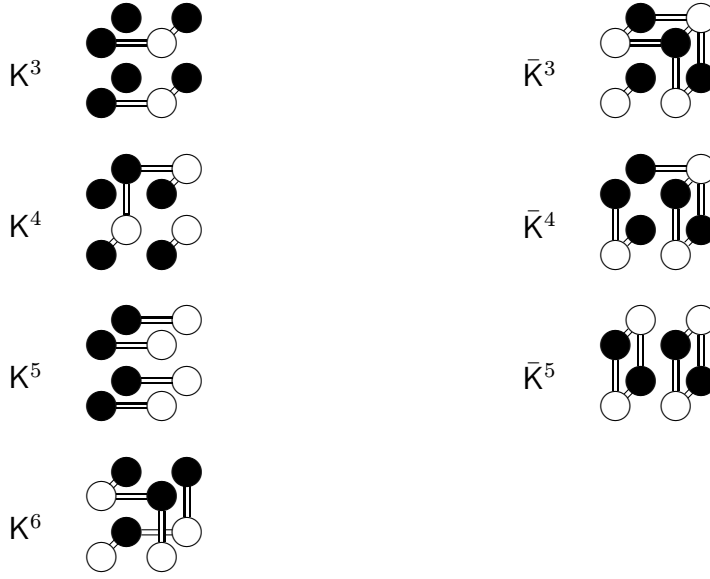
Obrázek 3.11: Konfigurace elementárního čtverce P a jejich prodloužení na elementární krychli.

konečnou množinu Λ je jednoznačně určeno restrikcí na Λ^c a je tedy rigidním základním stavem. Díky \mathcal{S} -symetrii je oblast, kde tyto konfigurace tvoří základní stavy, symetrická vzhledem k rovině $\delta = 0$.

Problémem je konfigurace P^3 , signalizující, že existuje oblast v množině parametrů, kde (3.40) není m -potenciál. Nebudeme problém řešit v celé obecnosti, ale použijeme jednoduchého triku, který nám umožní nalézt kompletní fázový diagram při nulové teplotě s výjimkou některých variet nižší dimenze v prostoru parametrů, jejichž rozbor je nutno provést zvlášť.

Model ekvivalentně přepíšeme pomocí krychlí o hraně 2 a pokusíme se nalézt lokální základní stavy. Nebudeme však uvažovat všechny konfigurace krychle, ale pouze takové, které obsahují alespoň jednu destičku typu P^3 a navíc konfigurace znázorněné na obr. 3.11. Předem tedy vyloučíme konfigurace krychle, které obsahují současně alespoň dvě různé destičky P , ale není mezi nimi žádná destička P^3 (viz obr. 3.12). Je totiž zřejmé, že tyto konfigurace krychle nemohou minimalizovat potenciál na otevřené množině v prostoru parametrů, protože vhodná ‘porucha’ zvýhodní jednu z destiček a ta má (samostatně) globální prodloužení.

Lze učinit tento závěr. Nalezneme ‘nedegenerované’ oblasti v prostoru parametrů, na kterých bude minimalizovat potenciál jediná z výše uvedených konfi-



Obrázek 3.12: Konfigurace elementární krychle obsahující destičku typu P^3 .

gurací krychle. Potom je totiž zřejmé, že vynechané konfigurace nutně musí mít vyšší energii a jsou tedy irrelevantní.

Hamiltonián lze psát ve tvaru

$$H(x) = \sum_{K \in \mathbb{Z}^3} \Phi_K(x_K), \quad (3.41)$$

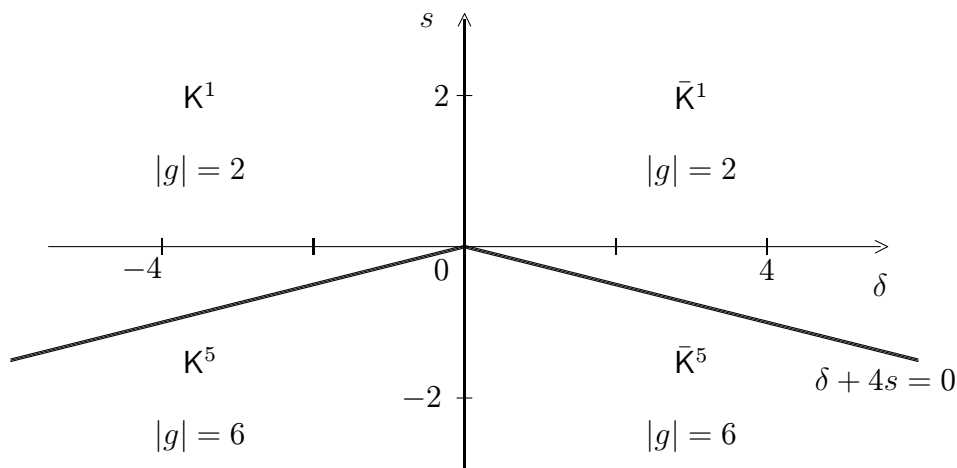
kde

$$\Phi_K(x_K) = \frac{1}{2} \sum_{P \in K} \Phi_P(x_P). \quad (3.42)$$

Víme, že stačí určit fázový diagram pouze na poloprostoru $\delta < 0$ a využít \mathcal{S} -symetrie diagramu. Budeme uvažovat pouze konfigurace, které nejsou označeny pruhem. Je totiž zřejmé, že konfigurace krychle s nižším počtem surfactantů — to jsou právě výše zmíněné konfigurace — budou ze dvou symetricky sdružených oblastí zaujímat tu v poloprostoru $\delta < 0$. \mathcal{S} -ekvivalentní konfigurace krychle typu K^2 a \bar{K}^2 , které jsou složeny z destiček typu P^2 , nabývají evidentně téže energie. Energie relevantních konfigurací na K :

$$\begin{aligned} \Phi_K(K^1) &= 0 & \Phi_K(K^4) &= \frac{7}{2}s + \frac{3}{2}p - \frac{5}{4}\delta \\ \Phi_K(K^2) &= \Phi_K(\bar{K}^2) = 3s + 3p - \frac{3}{2}\delta & \Phi_K(K^5) &= 4s - \delta \\ \Phi_K(K^3) &= 3s + p - \delta & \Phi_K(K^6) &= 4s + 2p - \frac{3}{2}\delta \end{aligned} \quad (3.43)$$

Porovnáním těchto energií obdržíme hledané oblasti, na kterých potenciál minimalizuje jediná konfigurace krychle. Protože se ukazuje, že pouze konfigurace typu K^1 , K^2 , K^5 a K^6 vyhovují výše diskutovanému omezení a tyto konfigurace



Obrázek 3.13: Fázový diagram při nulové teplotě v řezu $p = \text{konst} > 0$.

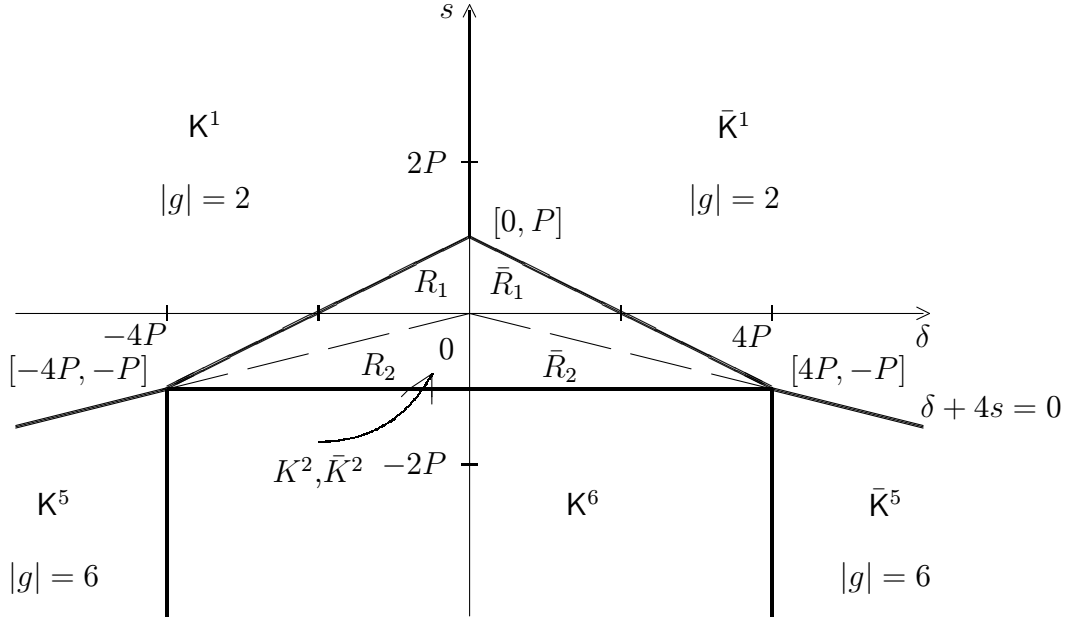
jsou prodloužitelné na lokální základní stavy, je (3.42) m -potenciál na nalezených oblastech. Fázový diagram při nulové teplotě je znázorněn na obr. 3.13 (případ $p > 0$) a na obr. 3.14 (případ $p < 0$). Speciální případ $p = 0$ by zasluhoval samostatný rozbor pro $r \neq 0$ a zde se jím nebudeme zabývat.

Konfigurace krychle K^1 mají jednoznačné prodloužení na $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a konfigurace \bar{K}^1 na $\langle 1; 1; 1 \rangle$. Analogicky prodloužením \mathcal{S} -ekvivalentních konfigurací krychle typu K^5 a \bar{K}^5 dostaneme konfigurace třídy $\langle \infty; \infty; 1 \rangle$ a $\langle \infty; 1; 1 \rangle$ v uvedeném pořadí. Existuje nekonečně mnoho konfigurací složených z krychlí typu K^2 , \bar{K}^2 (je zajímavé, že každá z těchto krychlí má jednoznačné prodloužení a nekonečná degenerace je způsobena pouze existencí konfigurací obsahujících krychle obou typů, viz též následující paragraf). Analogicky konfigurace typu K^6 má nekonečně mnoho globálních prodloužení. Silně vytažené čáry znázorňují variety, které uvedený zjednodušený rozbor nedokázal postihnout.

3.3.2 Nízkoteplotní fázový diagram

K analýze nízkoteplotního fázového diagramu použijeme stejné prostředky jako v předchozích odstavcích, nepůjde přitom o úplný rozbor, ale všimneme si pouze některých aspektů. Je třeba si uvědomit, že zatím nemáme proveden rozbor základních stavů na některých křivkách vyznačených ve fázových diagramech silnou čarou.

Protože na oblastech, na nichž je potenciál minimalizován konfiguracemi typu K^1 , \bar{K}^1 , K^5 a \bar{K}^5 , existuje konečný počet lokálních základních stavů, je splněna podmínka M a můžeme přímo užít Tvzení 8, podle něhož na těchto oblastech existují fáze třídy $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$, $\langle 1; 1; 1 \rangle$, $\langle \infty; \infty; 1 \rangle$, $\langle \infty; 1; 1 \rangle$ pro dostatečně nízké teploty (závisí na parametrech p, s, δ). Tento soubor zahrnuje fázi bohatou na vodu (resp.



Obrázek 3.14: Fázový diagram při nulové teplotě v řezu $p = \text{konst} < 0$ ($P \equiv -p$).

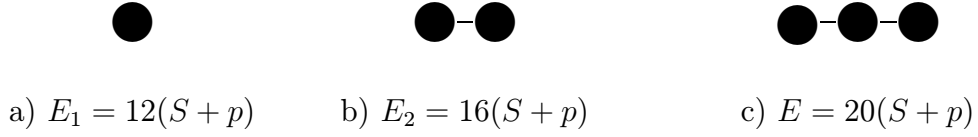
na olej), uspořádané ‘antiferromagnetické’ fáze, lamelární fáze obsahující vrstvy šířky 1 a elementární válcové fáze.

Nyní se věnujme varietě $\delta = 0$, $s > \max\{0, -p\}$. Vrátime-li se k potenciálu (3.40), vidíme, že na uvedené množině je to m -potenciál a množina g lokálních základních stavů obsahuje pouze konfigurace typu $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a $\langle 1; 1; 1 \rangle$, tedy $|g| = 4$. Je tedy splněna Podmínka M. Položíme-li $s = \text{konst}$, $p = \text{konst}$ a uvažujeme parametrický model definovaný potenciálem Φ_δ závislým na parametru δ , je zřejmě fázový diagram při nulové teplotě \mathcal{F} -úplný na okolí bodu $\delta = 0$ a podle Tvzení 10 potom existuje \mathcal{F} -úplný fázový diagram na okolí bodu $\delta = 0$, $\beta = \infty$. Přihlédneme-li k \mathcal{S} -symetrii fázového diagramu, je křivka koexistence fází $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a $\langle 1; 1; 1 \rangle$ dána jako $\delta = 0$, $\beta > \beta_0$. Hodnota β_0 závisí na parametrech p , s a lze též jednoduše učinit kvantitativní odhad na její velikost. Definujeme-li irregulární body s konstantou $l = 1$, tzn. $t \in \mathbb{Z}^3$ je irregulární bod konfigurace $x \in \Omega$, právě když $x_{R_1(t)}$ není restrikcí lokálního základního stavu (viz kap. 1), máme pro energii kontury $\Gamma = (\text{dom } \Gamma, x_{\text{dom } \Gamma})$ odhad

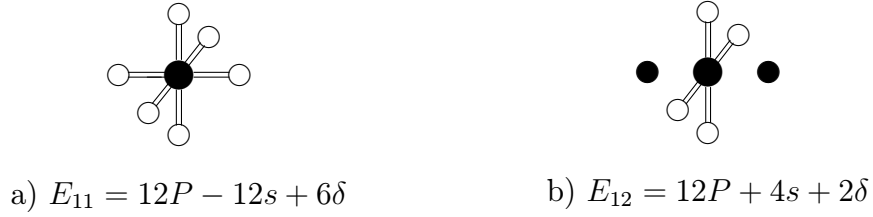
$$E(\Gamma) = \sum_{P \subset \text{dom } \Gamma} \left[\Phi_P(x_P) - \min_y \Phi_P(y_P) \right] \geq \frac{1}{4} \min\{2s, p + s\} |\text{dom } \Gamma|.$$

Jestliže τ je konstanta vystupující v Peierlsově podmínce

$$w(\Gamma) \leq e^{-\tau |\text{dom } \Gamma|},$$



Obrázek 3.15: Relevantní excitace na okolí křivky $4s - \delta = 0$.



Obrázek 3.16: Excitace 1. řádu a) na oblasti R_1 , b) na oblasti R_2 .

potom pro teplotu β_0 máme dolní odhad

$$\beta_0 \geq \frac{4\tau}{\min\{2s, p + s\}}.$$

Závěr. Necht $\tau > 0$ je dost velké. Potom na nadploše

$$r = 0, \quad s > \max\{0, -p\}, \quad \delta = 0, \quad \beta > \frac{4\tau}{\min\{2s, p + s\}} \quad (3.44)$$

koexistují čisté fáze třídy $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$ a $\langle 1; 1; 1 \rangle$.

◇

Dále provedeme rozbor variety $s < \min\{0, p\}$, $\delta = 4s$. Po substituci $S = -s$, $\delta = 4s + \varepsilon$ je tato množina určena jako

$$S > \max\{0, -p\}, \quad \varepsilon = 0. \quad (3.45)$$

Explicitní tvar potenciálu:

$$\Phi_P(P^1) = 0, \quad \Phi_P(P^3) = -\frac{\varepsilon}{2}, \quad \Phi_P(P^2) = p + S - \frac{\varepsilon}{2}, \quad \Phi_P(\bar{P}^1) = 4S - \varepsilon. \quad (3.46)$$

Na uvedené varietě je to zřejmě m-potenciál s minimalizujícími konfiguracemi P^1 a P^3 . Lze snadno ověřit, že lokální základní stavy získané prodloužením těchto destiček jsou právě všechny lamelární konfigurace. Fixujeme hodnoty S , p a budeme se zabývat parametrickým modelem s řídicím parametrem ε .

Z odstavce 3.2 věnovaného lamelárním fázím víme, že lamelární konfigurace splňují Podmínky R a L vyžadované BS-teorií a je výhodné přejít k ekvivalentnímu, formálně 1D-modelu. Efektivní potenciál řádu D lze tedy psát ve tvaru

$$\beta H^*(x) = \beta \sum_{\mathbf{P}} \Phi_{\mathbf{P}}(x_{\mathbf{P}}) - \sum_{\pi \in \mathcal{C}_D(x)} q(\pi) \equiv \sum_B \Phi_B^*(x_B) = \sum_{\mathbb{Z} \subset \mathbb{Z}^3} \beta H_1^*(x_{\mathbb{Z}}),$$

$$\beta H_1^*(x_{\mathbb{Z}}) = \sum_B \frac{|B \cap \mathbb{Z}|}{|B|} \Phi_B^*(x_B),$$

kde \mathbb{Z} označuje vertikální osu lamelární konfigurace x . Efektivní potenciál si opět rozepíšeme do poruchové řady

$$\beta H_1^*(x) = \beta H_1^{*(1)} + \beta H_2^{*(2)} + \dots$$

Rozbor excitací je standardní a nebudu opakovat strategii jejich nalezení. V daném případě energie excitace $\mathcal{E} = (\text{dom } \mathcal{E}, x_{\text{dom } \mathcal{E}})$ závisí pouze na konfiguraci $x_{\text{supp } \mathcal{E}}$ (připomeňme, že nosič excitace $\text{supp } \mathcal{E}$ je definován jako podmnožina $\text{dom } \mathcal{E}$, na níž se konfigurace odlišuje od lokálního základního stavu $y_{\text{dom } \mathcal{E}}$, $y_{\partial_l(\text{dom } \mathcal{E})} = x_{\partial_l(\text{dom } \mathcal{E})}$).

Na obr. 3.15 jsou znázorněny a) excitace řádu 1, b) řádu 2 a c) nejnižší excitace výšky alespoň 3 (výškou v daném případě rozumíme vertikální rozměr množiny $\text{supp } \mathcal{E}$). Lze snadno nahlédnout, že excitace s výškou ≤ 2 nemohou sejmout nekonečnou degeneraci na křivce koexistence konfigurací $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$. Tyto excitace stejně jako destičky \mathbf{P} jsou totiž vázány na sekvence $\bullet\bullet$ a $\bullet\circ$ a díky formální identitě

$$\sum_{\bullet \in x} = \sum_{\bullet\bullet \in x} + \sum_{\bullet\circ \in x}$$

lze příspěvky těchto množin do efektivního potenciálu vyjádřit prostřednictvím sumy přes sekvence $\bullet\circ$. Nyní můžeme užít argument, podle něhož efektivní potenciál obecné lamelární konfigurace je konvexní kombinací efektivního potenciálu pro extrémální konfigurace, jimiž jsou právě $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$ a na křivce koexistence se tudíž nutně objeví degenerace.

Relevantní část efektivního potenciálu řádu E (tzn. zahrnujeme pouze excitaci znázorněnou na obr. 3.15c) je dána takto:

$$\beta H_1^{*(E)}(x) = - \sum_{\bullet\circ \in x} \beta \varepsilon^{(E)} - \sum_{\bullet\bullet\bullet \in x} w = \sum_{L(3)} \Phi_{L(3)}(x_{L(3)}),$$

$$\Phi_{L(3)}(x_{L(3)}) = -\frac{1}{2} \sum_{\bullet\circ \in x_{L(3)}} \beta \varepsilon^{(E)} - \sum_{\bullet\bullet\bullet \in x_{L(3)}} w.$$

Na křivce $\beta \varepsilon^{(E)} = w$ evidentně platí

$$\Phi_{L(3)}(\bullet\bullet\bullet) = \Phi_{L(3)}(\bullet\circ\bullet) = -w, \quad \Phi_{L(3)}(\bullet\circ\circ) = -\frac{w}{2},$$

což dokazuje lokální dominanci základních stavů $\langle \infty; \infty; \infty \rangle$, $\langle 1; 1; 1 \rangle$ v řádu E na uvedené křivce. Protože parametrický model daný potenciálem Φ_ε má zřejmě \mathcal{F} -úplný fázový diagram při nulové teplotě na okolí bodu $\varepsilon = 0$, můžeme užít Tvzení 11, podle něhož existuje křivka $\varepsilon = \varepsilon(\beta)$, na jejímž malém okolí pro $\beta > \beta_0$ je fázový diagram \mathcal{F} -úplný. Porovnáme-li efektivní potenciál do řádu 2 konfigurací $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$, dostaneme vedoucí asymptotiku křivky koexistence

$$\beta_\varepsilon^{\langle \infty \rangle \langle 1 \rangle} = w_2 + o(w_2). \quad (3.47)$$

Můžeme formulovat následující

Závěr. *Fixujme parametry $p, s < \min\{0; p\}, r = 0$. Potom na malém okolí bodu $\delta = 4s, \beta = \infty$ existují pouze fáze třídy $\langle \infty \rangle$ a $\langle 1 \rangle$.*

◇

Další rozbor se bude týkat množiny parametrů $p < s < -p, \max\{\delta, -\delta\} > 2s + 2p$, na níž lokálními základními stavy jsou všechny konfigurace složené ze čtverců typu P^2 . Označíme-li $P = -p$ a uvážíme-li \mathcal{S} -symetrii fázového diagramu, stačí se omezit na vyšetřování oblasti

$$-P < s < P, \quad 2s - 2P < \delta < 0. \quad (3.48)$$

Protože konfigurace čtverce P^2 je jednoznačně určena restrikcí na libovolnou podmnožinu čtverce obsahující tři body, je zřejmé, že každý lokální základní stav je zadán projekcemi na trojici navzájem kolmých os, podobně jako tomu bylo v případě blokových konfigurací. To je zřejmě dostačující ke splnění Podmínky L. Budeme užívat analogického označení jako v odstavci 3.3, tzn. např. $(\hat{\bullet}\bullet\bullet; \hat{\bullet}\bullet\bullet; \hat{\bullet}\bullet\bullet)$ jednoznačně (až na ‘spin-flip’ symetrii) určuje konfiguraci na krychli $K(3)$ o hraně 3 (stejná konfigurace však může být zapsána různými způsoby, konfigurace uvedená výše může být ekvivalentně zadána např. jako $(\bullet\bullet\bullet; \hat{\bullet}\bullet\bullet; \hat{\bullet}\bullet\bullet)$).

Excitace nejnižšího řádu na oblasti R_1 (viz obr. 3.14) určené podmínkami

$$-P < s < P, \quad 2s - 2P < \delta < \min\{0, 4s\}$$

je znázorněna na obr. 3.16a a je vázána na konfiguraci

$$\psi_1 = (\circ\hat{\bullet}\circ; \circ\hat{\bullet}\circ; \circ\hat{\bullet}\circ).$$

Podobně na oblasti R_2 (viz 3.14 zadané jako

$$-P < s < P, \quad \max\{2s - 2P, 4s\} < \delta < 0$$

je excitací nejnižšího řádu ta na obr. 3.16b, která je vázána na konfiguraci

$$\psi_{1'} = (\bullet\hat{\bullet}\bullet; \circ\hat{\bullet}\circ; \circ\hat{\bullet}\circ).$$

Nyní najdeme lokálně dominantní základní stavy na oblastech R_1, R_2 . Zapišeme-li efektivní potenciál řádu 1 ve tvaru

$$\beta H^{*(1)}(x) = - \sum_{\psi_1 \in x} w_{11} = \sum_{K(4)} \Phi_{K(4)}(x_{K(4)}),$$

$$\Phi_{K(4)}(x_{K(4)}) = -\frac{1}{8} \sum_{\psi_1 \in x_{K(4)}} w_{11},$$

lze snadno ověřit, že minimalizující konfigurace tohoto potenciálu je jednoznačně určena (modulo \mathcal{F} -symetrie potenciálu) takto:

$$x_{K(4)} = (\hat{\bullet}\circ\bullet\circ; \hat{\bullet}\circ\bullet\circ; \hat{\bullet}\circ\bullet\circ)$$

Podstata důkazu: Libovolná konfigurace na $K(4)$ může potenciálně obsahovat nejvýše dvě excitace 1. řádu. Bez újmy na obecnosti lze předpokládat, že bod o souřadnicích $[2;2;2]$ (v přirozeném smyslu) je možný nosič jedné excitace. Potom je jednoznačně určena konfigurace krychle o hraně 3 se středem $[2;2;2]$ a další excitace již může mít nosič pouze v bodě $[3;3;3]$, což jednoznačně zadává konfiguraci na $K(4)$ výše uvedeného typu.

Tato konfigurace obsahuje pouze krychle K^2 . Protože existuje jednoznačné prodloužení této krychle na lokální základní stav, dokazujeme lokální dominanci tohoto základního stavu v řádu 1. Označme pro určitost třídu uvedených základních stavů M . Charakter těchto základních stavů je následující: Molekula oleje je do vzdálenosti $\sqrt{2}$ obklopena molekulami vody a ve vzdálenosti $\sqrt{3}$ se nachází právě 8 dalších molekul oleje ('spin-flip' symetrie odpovídá záměně voda \leftrightarrow olej). Dokázali jsme tak existenci další lyotropické fáze s micelami jiného typu, než jsme poznali dříve.

Množina \bar{M} lokálně dominantních základních stavů na oblasti \bar{R}^1 symetricky sdužené k R^1 evidentně obsahuje konfigurace \bar{x} získané z $x \in M$ překlopením spinů v sudých bodech mříže. Tyto konfigurace jsou získány prodloužením konfigurace \bar{K}^2 .

Analogicky lze provést rozbor symetricky sdužených oblastí R_2, \bar{R}_2 . Zapišeme-li efektivní potenciál řádu 1 jako

$$\beta H^{*(1)}(x) = \sum_{K(4)} \Phi_{K(4)}(x_{K(4)}),$$

$$\Phi_{K(4)}(x_{K(4)}) = -\frac{1}{8} \sum_{\psi_{1'} \in x_{K(4)}} w_{12},$$

lze analogicky jako výše dokázat, že minimalizující konfigurace je

$$x_{K(4)} = (\hat{\bullet}\bullet\bullet\bullet; \hat{\bullet}\bullet\bullet\bullet; \hat{\bullet}\bullet\bullet\bullet)$$

a obsahuje pouze krychle typu \bar{K}^2 . Jejím prodloužením dostaneme konfigurace třídy \bar{M} . Lokálně dominantní základní stavy v oblasti \bar{R}_2 jsou potom nutně konfigurace třídy \bar{M} .

Závěr. Lokálně dominantní základní stavy na oblastech R_1, \bar{R}_2 jsou konfigurace třídy M , což dokazuje existenci příslušných fází při dost nízkých teplotách. Podobně na oblastech \bar{R}_1, R_2 existují \bar{M} -fáze při dost nízkých teplotách.

◇

Lze také ukázat koexistenci fází třídy M a \bar{M} na množinách $\partial R_1 \cap \partial \bar{R}_1, \partial R_2 \cap \partial \bar{R}_2$ důkazem lokální dominance konfigurací třídy M a \bar{M} v řádu 1 stejnými prostředky jako výše.

Další problémy, které by bylo možno řešit uvedenou technikou, zahrnují např. fázový přechod mezi M a \bar{M} (zvlášť zajímavý je ‘degenerovaný’ bod $s = 0, \delta = 0, p < 0$) nebo rozbor oblasti, na níž základní stavy jsou konfigurace získané prodloužením krychle K^6 .

Lze ukázat, že lokální základní stavy na varietě $p > 0, s < 0, \delta = 0$ jsou všechny blokové konfigurace typu $\langle \infty; 1; \dots \rangle$. Fázový diagram na okolí této variety je rovněž dostupný BS-teorii, naopak oblast ‘maximální degenerace’ $p > 0, s = 0, \delta = 0$ jde za její rámec, neboť množina všech lokálně dominantních základních stavů obsahuje všechny blokové konfigurace a tyto konfigurace jsou ekvivalentní (viz též odst. 3.3).

Kapitola 4

Závěr

V této práci byl rigorózně studován nízkoteplotní fázový diagram Alexanderova modelu trojsložkových amfifilických směsí, který byl doposud vyšetřován jen heuristicky, případně použitím počítačových simulací (to se ostatně, s výjimkou práce [11], týká i ostatních mřížových modelů amfifilických směsí). Model jsme zobecnili přidáním interakce mezi amfifilickými molekulami obsazujícími sousední rovnoběžné hrany mříže, omezili jsme se na vyšetřování plochy koexistence obou základních komponent a použili přiblížení slabého amfifilického systému. To nám umožnilo přepsat Alexanderův model na 1/2-spinový model Isingova typu.

Výpočetním prostředkem byla standardní Pirogov-Sinajova teorie a její rozšíření na systémy s nekonečným počtem základních stavů.

Jejich užitím jsme ukázali existenci oblastí nízkoperiodických lamelárních fází a existenci ploch koexistence fází těchto typů. Na studované množině parametrů jsme vyloučili vysokoperiodické fáze objevující se např. v ANNNI modelu. Tyto výsledky jsou ve shodě s těmi, které byly pro Widom-Wheelerův model získány v článku [11] rovněž prostřednictvím BS-teorie.

Zobecnili jsme dále pojem lamelárních fází a našli vlastnosti a způsob popisu obecné třídy fází, které jsme nazvali blokové. Struktura odpovídajících blokových konfigurací je taková, že je lze prostřednictvím překlopení souboru rovin transformovat na konstantní konfigurace. Našli jsme také oblast v množině parametrů existence nízkoperiodických blokových fází a podobně jako v případě lamelárních fází vyloučili vysokoperiodické fáze na studované oblasti. Fáze tohoto typu nebyly dosud pro Alexanderův model studovány.

Byla také provedena částečná analýza řezu fázového diagramu vhodně zvolenou rovinou, na které má potenciál jednotkový dosah. Při tomto rozboru byly rovněž nalezeny nízkoperiodické lyotropické fáze nových typů.

Je však známo, že reálné amfifilické systémy vykazují lyotropické fáze s periodou mezoskopické velikosti. Nepodařilo se nám ukázat, že Alexanderův model je schopen tuto skutečnost zachytit. Analýza ostatních mřížových modelů méně rigorózními prostředky ukazuje, že trpí stejným nedostatkem. Lze pouze doufat, že realističtější modely budou v tomto ohledu úspěšnější.

Literatura

- [1] A. C. D. van Enter, R. Fernandez and A. D. Sokal, Regularity Properties and Pathologies of Position-Space Renormalization-Group Transformations: Scope and Limitations of Gibbsian Theory, *J. Stat. Phys.* **72** (1993).
- [2] M. Zahradník, An alternate version of Pirogov-Sinai theory, *Commun. Math. Phys.* **93**:559-581 (1984).
- [3] Ya. G. Sinai, *Theory of Phase Transitions: Rigorous Results* (Pergamon Press, Oxford, 1982).
- [4] R. L. Dobrushin, *Estimates of Semiinvariants for the Ising Model at Low Temperatures* (Preprint, Vienna, 1994).
- [5] R. Kotecký and D. Preiss, Cluster Expansion for Abstract Polymer Models, *Commun. Math. Phys.* **103**:491-498 (1986).
- [6] Ch. Borgs and J. Z. Imbrie, A Unified Approach to Phase Diagrams in Field Theory and Statistical Mechanics, *Commun. Math. Phys.* **123**:305-328 (1989).
- [7] J. Bricmont and J. Slawny, Phase transitions in systems with a finite number of dominant ground states, *J. Stat. Phys.* **54**:89-161 (1989).
- [8] G. Gompper and M. Schick, Self-Assembling Amphiphilic Systems, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 15, C. Domb and J. L. Lebowitz, eds. (Academic Press, New York, 1993).
- [9] M. Laradji, H. Guo, M. Grant, and M. J. Zuckermann, Ternary Systems Containing Surfactants, in *Advances in Chemical Physics*, Vol. 89, I. Prigogine and S. A. Rice, eds. (John Wiley & Sons, Inc., 1994).
- [10] R. Kotecký, *Geometric Representation of Lattice Models and Large Volume Asymptotics* (Preprint, CTS UK, Praha, 1994).
- [11] E. L. Dinaburg and A. E. Mazel, Analysis of low-temperature phase diagram of the microemulsion model, *Commun. Math. Phys.* **125**:25-42 (1989).

- [12] J. Bricmont and J. Slawny, First order phase transitions and perturbation theory, in *Statistical Mechanics and Field Theory: Mathematical Aspects (Proceedings, Groningen 1985)*, Lecture Notes in Physics #257, T. C. Dorlas, N. M. Hugenholtz, and M. Winnink, eds. (Springer-Verlag, Berlin, 1986).