Alma Mater Studiorum · Università di Bologna

Scuola di Scienze Corso di Laurea in Fisica

Transizioni di fase nel modello di Ising

Relatore: Prof. Elisa Ercolessi Presentata da: Octavio Pomponio

Sessione II Anno Accademico 2014/2015

 $A \ Thijs,$ e a ogni sua spinta che mi ha fatto andare avanti.

Ringraziamenti

Ringrazio in primo luogo la Prof. Elisa Ercolessi. La sua pazienza e la sua disponibilità si sono rivelate fondamentali lungo tutta la stesura di questa tesi. Ringrazio inoltre la Prof. Rita Fioresi e il Prof. Fabio Ortolani per aver determinato in modo così significativo il mio percorso accademico. Non so dove sarei senza la loro ispirazione. Vorrei anche ringraziare il Prof. Servizi per avermi fornito, forse a sua insaputa, importanti insegnamenti, anche quando non richiesti.

Ringrazio i miei amici e colleghi tutti. In particolare gli abitanti di via Murri 65/5, Pietro ed Emanuele, per essere diventati la mia famiglia fuori sede e Michelangelo e Alessandra, ai quali devo molto più di un grazie; ringrazio Lorenzo, Marina, Pit, Marco, Arturo, Laura, Mauro, Paolo, Simone, Alejandra, Simon, Federico, Giacomo, Matteo e Sofia. Un ringraziamento speciale va a Sunny, che mi ha risparmiato parecchie notti insonni aiutandomi con i grafici della tesi.

Un grazie immenso a Caterina, spero lei conosca già tutti i perché.

Il grazie più grande va alla mia famiglia, per aver sacrificato molto per il nostro futuro e per non aver mai cessato di essere un grandissimo sostegno.

Introduzione

Un'area di ricerca relativamente recente della fisica statistica è quella delle transizioni di fase. Questi fenomeni sono in assoluto tra i più interessanti e affascinanti della natura. Da un punto di vista sperimentale essi hanno una fenomenologia estremamente vasta che si manifesta solo al variare della temperatura. Ad altissime temperature l'unica fase possibile della materia sarebbe quella gassosa e solo abbassando la temperatura risulta possibile osservare i vari stati di aggregazione della materia. Abbassando ulteriormente la temperatura si manifestano fenomeni quali la superfluidità e la superconduttività di certi materiali, si evidenziano proprietà magnetiche di altri e si osservano stati condensati di bosoni.

Una guida ideale per la fisica delle transizioni di fase è il modello elaborato dal fisico tedesco Ernst Ising (1900-1998). Nella sua tesi di laurea del 1924 Ising discusse il modello dei materiali ferromagnetici per sistemi unidimensionali. Egli ritenne il suo lavoro insoddisfacente in quanto dimostrava che non poteva esistere una temperatura finita sotto alle quale il sistema presentava una magnetizzazione spontanea. Nel 1936 Rudolf Peierls, nel suo articolo "Sul modello di Ising per i ferromagneti", dimostrò che tale temperatura esisteva invece per i reticoli planari e nel 1944 Lars Onsager pubblicò la soluzione esatta di tali sistemi.

Il modello di Ising apre così la strada alla comprensione dei fenomeni critici. Lo stesso Pauli, in una missiva inviata a Casimir, afferma la sua importanza sostenendo che durante la seconda guerra mondiale dal punto di vista scientificonon è successo niente di importante, tranne la soluzione del modello di Ising bidimensionale da parte di Lars Onsager", non citando la fissione nucleare, la bomba atomica e il suo stesso premio Nobel.

Una delle caratteristiche del modello è la sua semplicità: attraverso pochi principi

esso è in grado di illustrare le caratteristiche fisiche chiave delle transizioni di fase. Tale sintesi teorica è possibile grazie a un aspetto fondamentale dei fenomeni critici: la loro universalità. Sistemi diversi risultano infatti simili in prossimità di punti critici grazie a caratteristiche comuni quali la loro simmetria e dimensionalità.

La successiva trattazione vuole essere un'introduzione al modello e alle idee che sono alla base della comprensione di molti meccanismi della natura.

Nel primo capitolo vengono illustrati gli aspetti fondamentali delle transizioni di fase e della loro classificazione. Vengono in particolare introdotte le nozioni di parametro d'ordine e di funzione e lunghezza di correlazione. Il capitolo si conclude con la definizione degli *esponenti critici*, vere e proprie impronte digitali delle classi di universalità alle quali è possibile ricondurre i vari fenomeni, definiti a partire dal comportamento anomalo delle funzioni termodinamiche in prossimità dei punti critici.

Nel capitolo secondo vengono trattati in particolare i sistemi magnetici e viene introdotto il modello di Ising per descriverli. Viene inoltre riportata un'argomentazione qualitativa, *l'argomento di Landau*, per l'esistenza (o inesistenza) della temperatura critica. Infine viene mostrata l'equivalenza tra il modello di Ising con un altro sistema, il gas forzato su reticolo, fornendo un esempio di sistemi appartenenti alla stessa classe di universalità.

Con il terzo capitolo si introduce il modello unidimensionale e si mostrano due diversi approcci per il calcolo della sua soluzione esatta. Uno di questi, il metodo delle matrici di trasferimento, risulta fondamentale per la soluzione esatta dei sistemi bidimensionali. Viene inoltre dimostrata con i due approcci l'inesistenza di una temperatura critica finita. Tuttavia l'origine del diagramma di fase (temperatura e campo magnetico esterno nulli) può essere trattato come punto critico e vengono calcolati in tale punto gli esponenti critici del sistema.

La risoluzione esatta per sistemi a dimensionalità maggiore risulta molto più complessa (e in molte situazioni addirittura non esiste). Nel capitolo quarto viene quindi introdotto un particolare metodo per il calcolo di soluzioni approssimate, ovvero il metodo di campo medio. In tale approssimazione si mostra l'esitenza di una temperatura critica, dipendente dalla dimensionalità, sotto alla quale il sistema mostra una magnetizzazione spontanea. Vengono calcolati infine gli esponenti critici. Il quinto e ultimo capitolo tratta i sistemi bidimensionali. Questi sono i sistemi a dimensionalità più bassa nei quali si osserva una transizione di fase. Per campi magnetici esterni nulli viene calcolata la temperatura critica grazie alla *relazione di dualità*. Per concludere viene citata la soluzione di Lars Onsager e vengono mostrati gli esponenti critici.

Indice

In	trod	uzione	i
1	Di	punti critici, discontinuità e transizioni di fase	1
	1.1	Classificazione delle transizioni di fase	1
	1.2	Parametro d'ordine e funzione di correlazione	2
	1.3	Esponenti critici	3
2	Il m	odello di Ising	7
	2.1	Materiali ferromagnetici	7
	2.2	Introduzione al modello di Ising	8
		2.2.1 Degenerazione dell'energia	10
	2.3	Magnetizzazione spontanea e argomento	
		di Landau	12
	2.4	Equivalenza del modello con un gas forzato su reticolo	14
3	\mathbf{Sist}	emi unidimensionali	23
	3.1	Catene di spin e approccio ricorsivo	23
		3.1.1 Ancora sull'inesistenza della fase ferromagnetica	24
	3.2	Anelli e matrici di trasferimento	28
		3.2.1 Funzione di correlazione con matrice di trasferimento	31
	3.3	Calcolo degli esponenti critici 1D	32
4	Solı	uzioni approssimate	35
	4.1	Teoria di campo medio	35

	4.2	Espon	enti critici per il campo medio	38
5	Dua	alità de	el modello di Ising bidimensionale e soluzione di Onsager	41
	5.1	Relazi	one di dualità in reticoli quadrati	41
		5.1.1	Rappresentazione grafica a bassa temperatura $\ . \ . \ . \ . \ .$	42
		5.1.2	Rappresentazione grafica ad alta temperatura $\ . \ . \ . \ . \ .$	44
		5.1.3	Relazione di dualità	46
	5.2	Soluzi	one di Onsager	48
Co	onclu	isioni		53
Bi	bliog	grafia		55

Capitolo 1

Di punti critici, discontinuità e transizioni di fase

1.1 Classificazione delle transizioni di fase

Le transizioni di fase si mostrano in molte quantità termodinamiche sotto forma di discontinutà. Per esempio le entropie della fase liquida e di quella gassosa sono molto diverse nell'evaporazione a pressione e temperatura costanti: ciò si traduce in una discontinuità dell'entropia alla temperatura T_f di evaporazione. La differenza di entropia $S_g - S_l$ corrisponde a una quantità di calore $\Delta Q = T_f(S_g - S_l)$ che deve essere apportato al sistema per concludere l'evaporazione. Questo calore non ha effetto sulla temperatura ma tale energia serve a incrementare l'entropia dal valore S_l a S_g .

Nella classificazione moderna le transizioni di fase sono suddivise in due principali categorie: transizioni del *primo ordine* e transizioni del *secondo ordine*. Le transizioni di fase del *primo ordine* sono quelle che coinvolgono un calore latente: al punto della transizione il sistema assorbe o rilascia energia pur mantenendo la temperatura costante. Transizioni di fase che sono collegate alla discontinuità dell'entropia appartengono quindi a tale categoria. Le transizioni al primo ordine sono caratterizzate da un valore finito della *lunghezza di correlazione* (che verrà introdotta nella sezione successiva). Ciò implica la presenza di un regime in cui si ha la miscela tra le fasi, in cui parti del sistema hanno superato la transizione mentre altri parti devono ancora ultimarla. Oltre a transizioni come quelle *solido-liquido* o *liquido-gas*, altre transizioni appartengono a questa categoria, come ad esempio la condensazione di Bose-Einstein.

La seconda classe di transizioni è costituita dalle cosiddette transizioni continue in cui non abbiamo discontinuità dell'entropia ma tale funzione risulta non analitica per un certo valore T_c . Questo tipo di transizioni non ha un calore latente associato e sono caratterizzate dalla divergenza della *lunghezza di correlazione* al punto critico. Esempi di transizioni del secondo ordine sono le transizioni ferromagnetiche e i fenomeni della superfluidità e superconduttività.

1.2 Parametro d'ordine e funzione di correlazione

Per caratterizzare una transizione di fase è necessario un *parametro d'ordine* \mathcal{M} , cioè una quantità fisica che rappresenti la principale differenza qualitativa tra le varie fasi del sistema. Ciò implica che il parametro d'ordine deve essere nullo nei punti critici, poiché in questi risulta impossibile una distinzione tra le fasi. Per le transizioni del tipo *liquido-gas* il parametro d'ordine può essere la differenza di densità tra le fasi; per sistemi magnetici la scelta più naturale risulta essere legata alla magnetizzazione. La determinazione di tali parametri non è sempre banale, ma si riscontra, come sarà chiaro nella trattazione successiva, una relazione tra il parametro d'ordine di un sistema e le proprietà di simmetria della sua hamiltoniana.

Assumiamo ci sia una densità del parametro d'ordine $m(\vec{r})$ tale che \mathcal{M} possa essere espresso come

$$\mathcal{M} = \left\langle \int \mathrm{d}^3 r \ m(\vec{r}) \right\rangle, \tag{1.1}$$

dove le parentesi angolari denotano il valor medio dell'ensemble. Definiamo allora la *funzione di correlazione* come

$$G^{(2)}(\vec{r}) = \left\langle m(\vec{r})m(0) \right\rangle - \left\langle m(\vec{r}) \right\rangle \left\langle m(0) \right\rangle, \tag{1.2}$$

che intuitivamente misura la "persistenza di memoria" sotto variazioni spaziali. Per sistemi invarianti sotto traslazione l'ultimo termine può essere riscritto come $\langle m(0) \rangle^2$ in quanto $\langle m(\vec{r}) \rangle = \langle m(0) \rangle$. Inoltre in sistemi invarianti per rotazione la funzione di correlazione

è funzione del modulo r del vettore \vec{r} . Ci mettiamo ora in tale situazione. Punti vicini nel sistema tendono generalemente ad essere correlati. Lontano dal punto critico T_c la loro correlazione si estende a una certa distanza ξ , detta *lunghezza di correlazione*. Tale grandezza può essere definita più accuratamente tramite il comportamento asintotico della funzione di correlazione:

$$G^{(2)}(r) \simeq e^{-r/\xi}, \qquad T \neq T_c.$$
 (1.3)

Al punto critico c'è un cambio significativo nel sistema e la funzione di correlazione ha un comportamento del tipo

$$G^{(2)}(r) \simeq \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \qquad T = T_c$$
 (1.4)

Il parametro η è la dimensione anomala del parametro d'ordine ed è il primo esempio di esponente critico, argomento trattato nella prossima sezione. Nel caso di transizioni del secondo ordine la funzione di correlazione diverge. Denotando con $t = \frac{T-T_c}{T_c}$, vicino alla temperatura critica ξ si comporta come

$$\xi(t) = \begin{cases} \xi_+ t^{-\nu} & \text{se } t >;\\ \xi_- (-t)^{-\nu} & \text{se } t < 0, \end{cases}$$
(1.5)

dove ν è un altro esponente critico.

1.3 Esponenti critici

In fenomeni come le transizioni di fase si osservano importanti proprietà di universalità. Vicino ai punti critici il sistema presenta un comportamento anomalo caratterizzato dal fatto che le quantità termodinamiche seguono leggi di potenza, parametrizzate da un insieme di *esponenti critici*. Le proprietà di universalità mostrate nelle transizioni di fase si esplicita attraverso l'uguaglianza degli esponenti critici dei sistemi, sebbene questi siano diversi sia su scala macroscopica che microscopica. Da questo punto di vista lo studio delle transizioni di fase si traduce nella classificazione di tutte le possibili classi di universalità.

Oltre a $\eta \in \nu$ incontrati nella sezione precedente ci sono altri esponenti critici legati al parametro d'ordine e ad alcune quantità termodinamiche. Poiché la successiva trattazione

riguarderà in particolare i sistemi magnetici identificheremo, senza perdita di generalità, la magnetizzazione con il parametro d'ordine, che risulta variabile coniugata del campo magnetico esterno H. Come mostrato in [1] definiamo gli altri esponenti critici come segue: La magnetizzazione spontanea M è una funzione solo della temperatura T definita da

$$M(T) = \lim_{H \to 0} \mathcal{M}(H, T).$$
(1.6)

Vicino al punto critico T_c essa ha un comportamento anomalo parametrizzato dall'esponente critico β

$$M = M_0(-t)^{\beta}.$$
 (1.7)

Un esponente critico δ è definito dal comportamento anomalo della magnetizzazione quando la temperatura è mantenuta fissa al suo valore critico T_c ma il campo magnetico è non nullo

$$\mathcal{M}(H, T = T_c) = \mathcal{M}_0 H^{1/\delta}.$$
(1.8)

La *suscettività magnetica* è la funzione di risposta del sistema al cambiamento del campo magnetico

$$\chi(H,T) = \frac{\partial \mathcal{M}(H,T)}{\partial H}.$$
(1.9)

Questa grandezza presenta una singolarità al punto critico espressa dall'esponente γ

$$\chi(H=0,T) = \begin{cases} \chi_{+}t^{-\gamma} & \text{se } t > 0; \\ \chi_{-}(-t)^{-\gamma} & \text{se } t < 0. \end{cases}$$
(1.10)

Infine l'ultimo esponente critico rilevante è associato al comportamento del calore specifico a volume costante. Questa quantità presenta una singolarità vicino a T_c parametrizzata dall'esponente α

$$C(T) = \begin{cases} C_{+}t^{-\alpha} & \text{se } t > 0; \\ C_{-}(-t)^{-\alpha} & \text{se } t < 0. \end{cases}$$
(1.11)

Un riassunto degli esponenti critici è riportato nella tabella 1.1.

Concludiamo la discussione sul comportamento dei sistemi nella vicinanza di punti critici notando che, come spiegato in [2], non esistono transizioni di fase in sistemi costituiti da poche particelle. Yang e Lee dimostrarono infatti che la non analiticità delle funzioni

Esponente	Definizione	Condizione
α	$C \sim T - T_c ^{-\alpha}$	H = 0
β	$M \sim (T_c - T)^{\beta}$	$T < T_c, \ H = 0$
γ	$\chi \sim T-T_c ^{-\gamma}$	H = 0
δ	$H \sim M ^{\delta}$	$T = T_c$
ν	$\xi \sim T - T_c ^{-\nu}$	H = 0
η	$G^{(2)} \sim r^{-(d-2+\eta)}$	$T = T_c$

Tabella 1.1: Definizione degli esponenti critici.

termodinamiche (come il gran potenziale o l'energia libera), che segna la presenza di una transizione di fase, è possibile solo nel limite termodinamico, ovvero

$$V \to \infty, \qquad N \to \infty,$$

 $\frac{N}{V} = \text{costante.}$

Si presterà quindi particolare interesse alle grandezze termodinamiche per unità di particella.

Capitolo 2

Il modello di Ising

2.1 Materiali ferromagnetici

Gli atomi possiedono un dipolo magnetico dovuto allo spin degli elettroni o al moto di questi attorno al nucleo. In alcuni materiali i dipoli magnetici degli atomi sono orientati in modo casuale e il campo magnetico totale prodotto da essi risulta nullo. Tuttavia in certi composti come ferro o cobalto, per effetto delle interazioni tra i dipoli degli atomi, si può osservare una magnetizzazione totale diversa da zero. In questi materiali, detti ferromagnetici, questo fenomeno è osservato per valori di temperatura inferiori a un valore critico T_c , noto come temperatura di Curie. A temperatura $T = T_c$ il composto è soggetto ad una transizione di fase, cioè a un cambio delle proprietà fisiche del sistema: nello specifico la magnetizzazione spontanea su scale macroscopiche.

Una valida interpretazione delle proprietà dei materiali ferromagnetici è che i dipoli atomici risultano allineati in delle aree più grandi (dell'ordine del decimo di millimetro), note come domini di Weiss. Questo allineamento spontaneo è dovuto all'interazione di scambio degli elettroni, la cui energia è dell'ordine di 0.1 eV. Se la temperatura supera un valore corrispondente all'energia termica k_BT_c , i legami sono dissolti e i dipoli diventano statisticamente indipendenti.

Solo tra gli spin degli elettroni c'è un'interazione che è sufficientemente forte da generare un allineamento dei momenti di dipolo magnetici, che è appunto quella di scambio, di natura quanto-meccanica, derivata dalla natura antisimmetrica della funzione d'onda dei due elettroni. Trascurando la repulsione coulombiana, l'energia derivata da tale interazione è espressa dall'integrale

$$I_{ij} = \int \Psi_j^*(1) \Psi_i^*(2) U_{ij} \Psi_j(2) \Psi_i(1) d^3 \vec{r_1} d^3 \vec{r_2}, \qquad (2.1)$$

dove ψ_i rappresenta la funzione d'onda dell'*i*-esimo elettrone e U_{ij} è il potenziale coulombiano tra gli elettroni. Essa ha un contributo positivo se gli spin risultano antiparalleli e un contributo negativo se gli spin sono paralleli. La differenza di energia tra le due configurazioni è

$$\epsilon_{\uparrow\uparrow} - \epsilon_{\uparrow\downarrow} = -2I_{ij}.\tag{2.2}$$

L'interazione di scambio decresce molto rapidamente in funzione della distanza tra gli elettroni e sostanzialemente solo gli atomi più vicini ad un dato atomo in un reticolo contribuiscono ad essa.

2.2 Introduzione al modello di Ising

Il modello di Ising è un valido modello teorico per la descrizione di materiali ferromagnetici. In questo modello possiamo approssimare il sistema con un insieme di N siti fissi che formano un reticolo periodico d-dimensionale (d = 1, 2, 3). A ogni sito reticolare è associata una variabile di spin σ_i (n = 1, ..., N) che può assumere solo i valori ±1. Se $\sigma_i = +1$, allora si dirà che l'*i*-esimo sito ha *spin up*; se $\sigma_i = -1$, si dirà che l'*i*-esimo sito ha *spin down*. Esistono quindi 2ⁿ configurazioni diverse del sistema. L'energia del sistema in una certa configurazione può essere allora espressa come

$$\mathcal{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -\sum_{\langle ij \rangle} I_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N H_i \sigma_i, \qquad (2.3)$$

dove I_{ij} è l'integrale di scambio dell'equazione (2.1) e H_i corrisponde a un eventuale campo magnetico esterno al quale l'*i*-esimo spin è soggetto. Da ora in avanti si assumerà tale campo uniforme e uguale a un valore H per tutti gli spin.

Poiché l'interazione di scambio decresce rapidamente con la distanza, la sommatoria si estende solo ai siti vicini. Ciò viene denotato dal simbolo $\langle ij \rangle$. Poiché non c'è distinzione tra $\langle ij \rangle$ e $\langle ji \rangle$, si noti che la sommatoria contiene $\gamma N/2$ termini, dove

 γ è il numero dei siti più vicini a un dato sito reticolare. Ad esempio γ vale 2 per un reticolo unidimensionale e 4 per un reticolo bidimensionale quadrato; il secondo termine nell'energia è dovuto al potenziale di orientamento dei dipoli magnetici rispetto al campo esterno. Si noti che in assenza di questo l'hamiltoniana ha una simmetria discreta rispetto al gruppo Z_2 , identificato dalla trasformazione globale degli spin $\sigma_i \to -\sigma_i$.

Possiamo ora calcolare la funzione di partizione del sistema come

$$Z_N(H,T) = \sum_{\sigma_1=-1}^{1} \sum_{\sigma_2=-1}^{1} \cdots \sum_{\sigma_N=-1}^{1} \exp(-\beta \mathcal{H}(\sigma_1,\dots,\sigma_N)), \qquad (2.4)$$

con $\beta = (k_B T)^{-1}$. Da qui possiamo ricavare le altre funzioni termodinamiche, in particolare l'energia libera di Helmholtz:

$$F = -\beta^{-1} \ln Z_N(H, T).$$
 (2.5)

Altre funzioni rilevanti per la successiva trattazione sono

$$E(H,T) = -\frac{\partial \ln Z_N(H,T)}{\partial \beta} \quad \text{[Energia interna]} \tag{2.6}$$

$$C(H,T) = \frac{\partial E}{\partial T} \qquad [\text{Calore specifico a volume costante}] \tag{2.7}$$

$$M(H,T) = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial H} = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right\rangle \quad [\text{Magnetizzazione}] \tag{2.8}$$

dove le parentesi angolari nell'ultima formula denotano il valor medio dell'ensemble. La quantità M(0,T) è chiamata magnetizzazione spontanea e se il suo valore è non nullo il sistema risulta ferromagnetico.

Come menzionato nel capitolo precedente, la magnetizzazione spontanea è il parametro d'ordine delle transizioni di fase per sistemi magnetici. Per quanto riguarda le proprietà di simmetria, per $T > T_c$ non esiste alcuna magnetizzazione spontanea e in assenza di campo magnetico esterno il sistema non ha una direzione privilegiata; per $T < T_c$, il sistema acquisisce una direzione privilegiata lungo la quale risultano allineati la maggior parte degli spin. In questa fase il sistema ha perso la sua simmetria originaria. Questo fenomeno è noto come rottura spontanea della simmetria. Si noti che la perdita di una certa simmetria viene in un certo senso compensata dalla presenza del parametro d'ordine. Le fasi del sistema possono essere riassunte in un diagramma di fase (H, T) (figura2.1), dove con m è stata indicata la magnetizzazione per unità di spin.



Figura 2.1: Diagramma di fase (H,T) per sistemi magnetici. La fase ferromagnetica si ha per H = 0 e $T < T_c$; quella paramagnetica H = 0 e $T > T_c$.

2.2.1 Degenerazione dell'energia

Sebbene la configurazione sia specificata dagli N valori che gli spin assumono nei siti reticolari il valore assunto dall'energia è in generale degenere. Abbiamo già visto che in assenza di campo magnetico esterno l'hamiltoniana è simmetrica rispetto al cambio globale del valore degli spin. Per H generico possiamo rendere evidente la degenerazione passando alla descrizione del sistema attraverso il numero di siti con un determinato spin. Siano allora

> N_+ = numero di siti con spin up N_- = numero di siti con spin down

Questi due numeri non sono indipendeti in quanto devono soddisfare il vincolo dato dal numero totale di siti, ovvero

$$N = N_{+} + N_{-}. (2.9)$$

Esistono inoltre tre tipi di link che i siti possono stabilire con i siti vicini: (up-up), (up-down) e (down-down), dove (up-down) non è distinguibile da (down-up). Siano dunque N_{++} , N_{+-} e N_{--} il numero dei rispettivi tipi di link. Di nuovo, questi numeri non sono tutti indipendenti. Una relazione può essere trovata nel modo seguente: per ogni sito con



Figura 2.2: Costruzione della derivazione dei vincoli (2.10) nel caso di un reticolo bidimensionale quadrato.

spin up si disegnano i γ collegamenti con gli spin vicini per un totale di γN_+ linee totali (si veda figura 2.2). Il numero totale di linee disegnate può essere contato notando che tra ogni coppia del tipo (up-up) ci sono due linee, tra coppie del tipo (up-down) ce n'è una, mentre tra coppie del tipo (down-down) non ce n'è alcuna. Troviamo relazioni del genere se scambiamo gli spin up con gli spin down. Risultano quindi validi i vincoli

$$\gamma N_{+} = 2N_{++} + N_{+-}$$

$$\gamma N_{-} = 2N_{--} + N_{+-}$$
(2.10)

Volendo esprimere lo stato del sistema in funzione del numero dei siti con spin up e il numero di link (up-up) possiamo invertire le relazioni (2.9) e (2.10) e ricaviamo che il primo termine della (2.3) può essere espresso come

$$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-} = 4N_{++} - 2\gamma N_+ + \frac{\gamma N}{2}, \qquad (2.11)$$

mentre il secondo diventa

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_i = N_+ - N_- = 2N_+ - N.$$
(2.12)

La (2.3), assumendo che i termini di interazione siano tutti uguali a un certo valore I, può essere allora scritta come

$$\mathcal{H}(N_+, N_{++}) = -4IN_{++} + 2(I\gamma - H)N_+ - (\frac{\gamma I}{2} - H)N.$$
(2.13)

Risulta ora evidente che sebbene la configurazione del sistema dipenda da N numeri, l'energia può essere espressa in funzione di solo due numeri, N_+ e N_{++} .

2.3 Magnetizzazione spontanea e argomento di Landau

Dall'espressione della funzione di Hamilton (2.3) si nota che per un campo magnetico esterno non nullo tutti gli spin tendono ad allinearsi nella direzione del campo, con una conseguente magnetizzazione non nulla. Ci poniamo ora il problema dell'esistenza di una temperatura finita T_c alla quale il sistema è sottoposto a una rottura della simmetria anche in assenza di campo magnetico esterno. La seguente discussione qualitativa è nota in letteratura come argomento di Landau.

Il manifestarsi di una transizione di fase è il risultato di due prinicipi generali che entrano in competizione. Il sistema tende cioè sia a minimizzare l'energia che a massimizzare l'entropia.

- Principio di minima energia Nei materiali ferromagnetici la configurazione dei dipoli magnetici di ogni atomo tende a minimizzare l'energia totale del sistema. La minimizzazione, presa in considerazione la formula (2.3) è raggiunta quando tutti gli spin sono allineati. Se questo fosse l'unico prinicipio che gli spin devono seguire, tuttavia, si osserverebbero grandi campi magnetici in molte sostanze.
- Principio di massima entropia Tra tutte le configurazioni possibili del sistema, quella in cui tutti gli spin sono allineati è un caso molto particolare. Infatti il numero di configurazioni in cui gli spin sono orientati in modo casuale è molto maggiore rispetto a quello in cui essi sono allineati. Denotando con $\omega(E)$ il numero di stati del sistema ad energia E, possiamo esprimere l'entropia con la formula di Boltzmann

$$S = k_B \ln \omega(E) \tag{2.14}$$

Se la tendenza a raggiungere lo stato di massimo disordine fosse l'unico principio fisico da tenere in considerazione non si osserverebbe alcuna magnetizzazione spontanea a nessuna temperatura. Considerando l'energia libera di Helmholtz definita tramite la trasformata di Legendre

$$\mathbf{F} = E - TS \tag{2.15}$$

e tenendo a mente che l'equilibrio del sistema è determinato dal suo punto di minimo, risulta chiaro che ad alte temperature predomina il termine entropico e il sistema risulta disordinato (*fase paramagnetica* m = 0); al contrario per basse temperature domina il termine energetico e il sistema tende all'ordine (*fase ferromagnetica* $m \neq 0$). L'inversione tra un comportamento e l'altro si ha alla temperatura di Curie T_c .

Vediamo ora che l'esistenza della magnetizzazione spontanea nel modello di Ising dipende dalla dimensione del sistema.

Assenza di magnetizzazione spontanea in una dimensione

Si può notare l'inesistenza di una temperatura T_c per un sistema unidimensionale analizzando la differenza di energia libera tra il suo stato fondamentale e il suo primo stato eccitato. Quando tutti gli spin sono allineati il sistema si trova ad un minimo dell'energia $E_0 = -(N-1)I$ ma tale valore è fornito da un unico stato (a meno della degenerazione data dalla trasformazione globale degli spin) e la sua entropia è dunque zero. Se ora viene creato un *muro di dominio* invertendeo tutto gli spin a destra di un determinato sito si ha che l'energia diventa $E_1 = -(N-2)I + I = E_0 + 2I$, ma l'entropia aumenta a un valore $S = k_B \ln(N-1)$ (abbiamo N-1 modi per creare il muro). La differenza tra le due configurazioni è mostrata in figura 2.3. Nel limite termodinamico e per T > 0 la creazione di domini viene favorita in quanto essi abbassano l'energia libera:

$$\Delta F_{1D} = 2I - k_B T \ln(N - 1).$$
(2.16)

Transizioni di fase in una dimensione possono comunque avvenire per $T_c = 0$.

Esistenza di magnetizzazione spontanea in due dimensioni

Come per il caso precedente abbiamo che il livello fondamentale è caratterizzato da un valore di energia libera $F = E_0$. Creiamo ora un muro di dominio, che nel caso del reticolo quadrato a due dimensioni corrisponde a una curva poligonale chiusa (figura



Figura 2.3: (a) Sistema unidimensionale di spin al livello fondamentale. (b) Muro di dominio in una dimensione e primo stato eccitato del sistema.

2.4), e invertiamo tutti gli spin al suo interno. Definiamo la lunghezza L del muro come numero di segmenti verticali o orizzontali di lunghezza unitaria dai quali la poligonale è composta. Abbiamo che la sua energia vale ora $E_1 = E_0 + 2LI$ e la sua entropia diventa $S_1 \simeq k_B \ln 2^L$ (per avere una curva chiusa si hanno, in media, due modi per tracciare il passo successivo). Entrambi i termini aumentano quindi linearmente rispetto al parametro L e dalla variazione dell'energia libera

$$\Delta F_{2D} = 2LI - Tk_B L \ln 2 \tag{2.17}$$

ricaviamo

$$T_c = \frac{2I}{k_B \ln 2} \simeq 2.885 \ I/k_B,$$
 (2.18)

temperatura alla quale il termine energetico e il termine entropico contribuiscono in egual modo nell'energia libera.

L'argomento di Landau può essere esteso a sistemi con dimensione maggiore di due con gli stessi ragionamenti citati.

2.4 Equivalenza del modello con un gas forzato su reticolo

Nonostante la semplicità del modello di Ising, esso rivela una notevole versatilità nel descrivere varie situazioni fisiche. Con opportuni accorgimenti tale modello può infatti

1	1	1	↑	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1	↓	¥	¥	¥		1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	¦↓	¥	¥	¥	¦↑	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	¦↓	¥	¥	¥	¦↑	1
1	1	1	↑	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1	¦↓	¥	¥	¥	¦↑	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	¦↓	¥	¦ ↑	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1	¦↓	¥	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	` _ ↑	1	1	1	1	1
↑	1	1	↑	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1	↑	1	1	1	1	1
				(a	ı)									(b)				

Figura 2.4: (a)Livello fondamentale e (b) muro di dominio in un reticolo quadrato bidimensionale.

simulare altri sistemi oltre a quello ferromagnetico. Tra questi un gas forzato su reticolo. Consideriamo un gas composto da molecole che interagiscono tra loro tramite un potenziale Φ . Tipicamente Φ dipende solo dalla distanza tra le molecole e risulta repulsivo per $r \to 0$, presenta un minimo ad un valore r_0 e va a zero abbastanza rapidamente. Un potenziale che soddisfa tali requisiti è, ad esempio, il potenziale di Lennard-Jones.

Possiamo ora immaginare di dividere lo spazio in un reticolo i cui siti sono occupati dalle molecole del gas. Esse sono fisse (trascuriamo quindi la parte cinetica) e ogni sito può essere occupato al più da una molecola. Ogni configurazione è quindi specificata, se i siti del reticolo sono N, da una N-upla $s = (s_1, \ldots, s_N)$ dove

 $s_i = \begin{cases} 0 & \text{se il sito è libero} \\ 1 & \text{se il sito è occupato da una molecola} \end{cases}$

La figura 2.5 illustra una configurazione di un gas forzato su reticolo a due dimensioni dove le molecole sono rappresentate da cerchi pieni mentre i siti vuoti da cerchi vuoti.

Sebbene il numero di siti sia fissato, il numero di particelle nel reticolo $n = \sum s_i$ è variabile. L'ensemble è quindi gran-canonico. Il potenziale Φ può essere approssimato, per il nostro modello, nel modo seguente (si veda la figura 2.6):



Figura 2.5: Esempio di configurazione del gas forzato su reticolo.

$$\Phi_{ij} = \begin{cases}
+\infty & i = j \\
-\epsilon & \langle ij \rangle \\
0 & \text{altrove.}
\end{cases}$$
(2.19)

L'hamiltoniana può essere dunque espressa come

$$\mathcal{H}_g(s_1, \dots, s_N) = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j.$$
(2.20)

Risulta ora facile fare un confronto con l'hamiltoniana (2.3) del modello di Ising ponendo in corrispondenza la variabile di spin σ_i con la variabile di occupazione del sito s_i facendo coincidere il sito vuoto con lo *spin down* e il sito occupato con lo *spin up* nel seguente modo:

$$\sigma_i = 2s_i - 1 \tag{2.21}$$

Possiamo quindi esprimere la sommatoria nell'hamiltoniana del gas in funzione delle variabili di spin

$$\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{1}{4},$$
(2.22)

dove il secondo e il terzo termine a destra dell'equazione possono essere espressi tramite il numero γ di link come

$$\frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}(\sigma_i+\sigma_j) = \frac{1}{2}\left(\sum_i \sigma_i + \sum_j \sigma_j\right)\frac{\gamma}{4} = \frac{\gamma}{4}\sum_i \sigma_i;$$
(2.23)

$$\sum_{\langle ij \rangle} \frac{1}{4} = \frac{1}{4} \left(\frac{N\gamma}{2} \right).$$
 (2.24)



Figura 2.6: Potenziali di interazioni tra le molecole: (a) Lennard-Jones e (b) approssimazione per il gas su reticolo.

Possiamo inoltre scrivere il numero n di particelle nel reticolo come

$$n = \sum_{i} s_{i} = \sum_{i} \frac{\sigma_{i} + 1}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i} \sigma_{i} + \frac{N}{2}.$$
 (2.25)

Vogliamo ora calcolare la funzione di partizione, che per un ensemble gran-canonico è esprimibile tramite il potenziale chimico μ come

$$\mathcal{Z} = \sum_{s} \exp\{-\beta[\mathcal{H}_g - \mu n]\}.$$
(2.26)

Inserendo l'hamiltoniana (2.20) con le sostituzioni (2.23), (2.24) e (2.25) nell'espressione della funzione di partizione gran-canonica otteniamo

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma} \exp\left\{\frac{\beta}{4} \left[\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + (2\mu + \epsilon\gamma) \sum_i \sigma_i + N(2\mu + \frac{\epsilon\gamma}{2})\right]\right\}.$$
 (2.27)

L'analogia con la funzione di partizione definita da (2.4) per il modello di Ising diventa evidente se si operano le sostituzioni

$$\frac{\frac{\epsilon}{4} \to I}{\frac{2\mu + \epsilon\gamma}{4} \to H}$$
(2.28)

Allora la (2.27) diventa

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma} \exp\left(\beta I \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \sigma_i\right) \exp\left[\frac{N\beta}{4} \left(2\mu + \frac{\epsilon\gamma}{2}\right)\right]$$
(2.29)

o in altre parole, invertendo le sostituzioni (2.28),

$$\mathcal{Z} = \exp\left[\frac{N\beta}{4}\left(4H - 2\gamma I\right)\right]Z_I,\tag{2.30}$$

dove il pedice I fa riferimento alla funzione di partizione di Ising. Risulta ora facile calcolare le funzioni termodinamiche a partire dalla funzione di partizione, pur lasciando irrosolto il problema di un'espressione esplicita della Z_I . Calcoliamo in particolare la pressione, la densità e la compressibilità isoterma ed esplicitiamole in funzione delle variabili del modello di Ising.

Pressione

Per un emsemble gran-canonico si ha che la funzione di partizione può essere espressa tramite il gran-potenziale Ω come

$$\mathcal{Z} = \exp(-\beta\Omega),\tag{2.31}$$

con $\Omega = \mathbf{F} - \mu N = -PV$. Se si sceglie che il volume di un sito reticolare sia il volume unitario, allora il volume del sistema coincide con il numero di siti N. La pressione del gas su reticolo risulta quindi

$$P = -\frac{\Omega}{N} = \frac{k_B T}{N} \ln \mathcal{Z} = \frac{k_B T}{N} \left[\frac{N}{4k_B T} (4H - 2\gamma I) \right] + \frac{k_B T}{N} \ln Z_I.$$
(2.32)

Nel limite termodinamico $(N \to \infty)$, definendo f_I come energia libera di Helmholtz per particella del modello di Ising, troviamo l'espressione per la pressione

$$P = H - \frac{\gamma I}{2} - \mathbf{f}_I. \tag{2.33}$$

Densità

La densità è definita come il numero medio di particelle per sito, ovvero

$$\rho = \frac{\langle n \rangle}{N},\tag{2.34}$$

dove il valor medio è da intendersi rispetto all'ensemble gran-canonico. Sostituendo a n l'espressione (2.25) ricaviamo

$$\rho = \frac{1}{N} \left(\frac{1}{2} \left\langle \sum_{i} \sigma_{i} \right\rangle + \frac{N}{2} \right), \tag{2.35}$$

ovvero

$$\rho = \frac{1}{2}(m+1). \tag{2.36}$$

Tale espressione lega la densità del gas forzato su reticolo con la magnetizzazione. In particolare la magnetizzazione nulla corrisponde allo stato del gas in cui la metà dei siti risulta occupato, mentre per $m \ge 0$ si ha $\rho \ge \frac{1}{2}$.

La densità può essere anche calcolata come segue:

$$\rho = \frac{k_B T}{N} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{Z} = \frac{\partial P}{\partial \mu}, \qquad (2.37)$$

dove è stato eplicitato il valor medio di n rispetto all'ensemble gran-canonico.

Compressibilità isoterma

La compressibilità isoterma è definita come

$$\kappa_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu},\tag{2.38}$$

dove l'ultima uguaglianza segue dalla (2.37). Poiché il potenziale chimico è legato al campo magnetico esterno, all'energia di scambio e alla geometria del modello di Ising dalla seconda delle relazioni (2.28), ricaviamo che la compressibilità è legata alla suscettività nel seguente modo:

$$\rho^2 \kappa_T = \frac{\partial \rho}{\partial \mu} = \frac{1}{4} \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{1}{4} \chi.$$
(2.39)

Diagramma di fase P-T di un gas su reticolo ed esponenti critici

Come mostrato in [3] il comportamento del modello di Ising, dato per noto, può essere usato per ottenere gli esponenti critici per un gas su reticolo, introducendo così due sistemi appartenenti alla stessa classe di universalità. Dalla relazione tra $P \in H$ notiamo che il diagramma di fase (H,T) viene sostituito dal diagramma (P,T), mostrato



Figura 2.7: Diagramma (P,T) per gas forzati su reticolo.

qualitativamente in figura 2.7. Il punto (T_c, P_c) del grafico corrisponde al punto critico $(H = 0, T = T_c)$ nella figura 2.1. Poiché in questo punto anche m = 0, ricaviamo da (2.28) e (2.36) che i valori critici di $\mu \in \rho$ sono dati da

$$\mu_c = -2\gamma I, \qquad \rho_c = 1/2 \tag{2.40}$$

e introducendo il volume per molecola

$$v = \rho^{-1} \qquad \Rightarrow \qquad v_c = 2.$$
 (2.41)

A $T = T_c$, sempre dalla (2.36) e dalla (1.8) ricaviamo

$$\rho - \rho_c \sim m \sim H^{1/\delta},\tag{2.42}$$

e dalla (2.41) otteniamo analogamente

$$\frac{1}{v} - \frac{1}{v_c} = \frac{v_c - v}{v v_c} \sim \frac{1}{v_c^2} (v_c - v) \quad \Rightarrow \quad v_c - v \sim H^{1/\delta}.$$
(2.43)

Poiché inoltre $P - P_c$ è proporzionale ad H per piccoli H, ne consegue che vicino al punto critico l'equazione della curva isoterma ha un comportamento del tipo

$$P - P_c \sim (v_c - v)^\delta \tag{2.44}$$

Ancora dalla (2.36) e dalla definizione (2.41), combinandola con la (1.7) otteniamo un'altra legge di potenza per per v, valida per $T < T_c$

$$|v - v_c| \sim (T_c - T)^{\beta}.$$
 (2.45)

Infine $P - P_c$ vicino al punto critico è proporzionale a t, quindi dalla formula precedente ricaviamo

$$P_c - P \sim |v - v_c|^{1/\beta}.$$
 (2.46)

Per concludere, il modello di Ising di un sistema magnetico può facilmente essere trasformato in un modello di un gas forzato su reticolo. Le variabili di spin si traducono in variabili di occupazione di siti reticolari. In quest'ultimo linguaggio gli esponenti critici sono definiti dalla precedenti relazioni.

Il modello del sistema magnetico rimane tuttavia più conveniente da un punto di vista teorico per le simmetrie che esso presenta.

Capitolo 3

Sistemi unidimensionali

3.1 Catene di spin e approccio ricorsivo

L'approccio ricorsivo, trattato in [1], permette di ottenere la soluzione esatta del modello di Ising unidimensionale in assenza di campo magnetico esterno (poiché siamo interessati alla magnetizzazione spontanea l'assenza di campo esterno non costituisce una limitazione).

Consideriamo una catena lineare di N spin senza condizioni sul primo e ultimo sito (figura 3.1). L'hamiltoniana più generale di tale sistema è data da

$$\mathcal{H}(\sigma_1,\ldots,\sigma_N) = -\sum_{i=1}^{N-1} I_i \sigma_i \sigma_{i+1}, \qquad (3.1)$$

con un interazione di scambio I_i che potrebbe cambiare da sito a sito. La funzione di partizione è espressa da

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 = -1}^{1} \sum_{\sigma_2 = -1}^{1} \cdots \sum_{\sigma_N = -1}^{1} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{I}_i \sigma_i \sigma_{i+1}\right),$$
(3.2)

dove è stata introdotta la notazione compatta $\mathcal{I}_i = \beta I_i$. L'approccio ricorsivo consiste nell'aggiungere uno spin alla catena per poi esprimere la nuova funzione di partizione Z_{N+1} in funzione della (3.2). Aggiungendo un altro spin abbiamo

$$Z_{N+1} = \sum_{\sigma_1 = -1}^{1} \sum_{\sigma_2 = -1}^{1} \cdots \sum_{\sigma_N = -1}^{1} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{I}_i \sigma_i \sigma_{i+1}\right) \sum_{\sigma_{N+1} = -1}^{1} \exp(\mathcal{I}_N \sigma_N \sigma_{N+1}).$$
(3.3)



Figura 3.1: Catena lineare di N spin.

L'ultima somma può essere espressa mediante funzioni iperboliche come

$$\sum_{\sigma_{N+1}=-1}^{1} \exp(\mathcal{I}_N \sigma_N \sigma_{N+1}) = \exp(\mathcal{I}_N \sigma_N) + \exp(-\mathcal{I}_N \sigma_N)$$

= $2 \cosh(\mathcal{I}_N \sigma_N) = 2 \cosh \mathcal{I}_N,$ (3.4)

dove nell'ultima uguaglianza è stata sfruttata la parità della funzione $\cosh x$. La (3.4) è quindi indipendente dal valore della variabile di spin assunto nell'*n*-esimo sito. Questo risultato ci permette di scrivere

$$Z_{N+1} = (2\cosh \mathcal{I}_N) Z_N. \tag{3.5}$$

Iterando tale procedimento otteniamo

$$Z_{N+1} = \left(2^N \prod_{i=1}^N \cosh \mathcal{I}_i\right) Z_1,\tag{3.6}$$

dove Z_1 è la funzione di partizione del singolo sito (isolato) e corrisponde quindi al numero dei suoi stati, cioè $Z_1 = 2$.

L'espressione esatta della funzione di partizione per una catena di N spin risulta allora:

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh \mathcal{I}_i \tag{3.7}$$

3.1.1 Ancora sull'inesistenza della fase ferromagnetica

Come spiegato qualitativamente dall'argomento di Landau nella sezione 2.3, vogliamo ora dimostrare l'inesistenza di una temperatura critica finita sotto alla quale il sistema unidimensionale dovrebbe avere una magnetizzazione spontanea. A tale scopo risulta comodo calcolare la funzione di correlazione tra due spin a distanza r l'uno dall'altro (assumendo come distanza unitaria la distanza tra due spin vicini)

$$G^{(2)}(r) = \left\langle \sigma_k \sigma_{k+r} \right\rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k \sigma_{k+r} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{I}_i \sigma_i \sigma_{i+1}\right), \tag{3.8}$$

dove la prima sommatoria si estende alle 2^N configurazioni del sistema.

Se ora consideriamo la funzione di correlazione tra due spin vicini possiamo sfruttare il k-esimo termine nella sommatoria dell'hamiltoniana per scrivere

$$G^{(2)}(1) = \left\langle \sigma_k \sigma_{k+1} \right\rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial \mathcal{I}_k} \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{I}_i \sigma_i \sigma_{i+1}\right).$$
(3.9)

Si nota inoltre, grazie all'identità valida per gli spin nel modello di Ising $\sigma_i^2 = 1$,

$$\sigma_k \sigma_{k+1} \sigma_{k+1} \sigma_{k+2} \dots \sigma_{k+r-1} \sigma_{k+r-1} \sigma_{k+r} = \sigma_k \sigma_{k+r}.$$
(3.10)

Possiamo quindi scrivere al funzione di correlazione come

$$G^{(2)}(r) = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial \mathcal{I}_k} \frac{\partial}{\partial \mathcal{I}_{k+1}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{I}_{k+r-1}} Z_N.$$
(3.11)

Sostituendo infine l'espressione esplicita della funzione di partizione (3.7) otteniamo

$$G^{(2)}(r) = \prod_{i=1}^{r} \tanh \mathcal{I}_{k+i-1}.$$
(3.12)

Tale espressione ci premette di rendere esplicito il significato intuitivo della funzione di correlazione. Supponiamo infatti che l'energia di scambio tra due spin vicini tenda a zero $(\mathcal{I}_i \to 0)$. Ciò corrisponde a spezzare la catena di spin in due catene non interagenti. Se il sito i è tra il sito k e il sito k + r allora la (3.12) si annulla, indicando l'assenza di correlazione tra i due spin; se invece l'*i*-esimo sito è esterno all'intervallo (k, k + r), la funzione risulta inalterata nel limite $\mathcal{I}_i \to 0$.

Per sistemi isotropi possiamo porre $\mathcal{I}_i = \mathcal{I}$ e la (3.12) assume la forma semplificata

$$G^{(2)}(r) = \left(\tanh \mathcal{I}\right)^r,\tag{3.13}$$

o, in forma esponenziale,

$$G^{(2)}(r) = \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right),\tag{3.14}$$

dove la lunghezza di correlazione è espressa da

$$\xi(\mathcal{I}) = -\frac{1}{\ln \tanh \mathcal{I}}.$$
(3.15)

Poiché la lunghezza di correlazione diverge nei punti critici, possiamo studiare l'andamento della funzione (3.15) per vedere se esiste o meno una fase ferromagnetica. Tale funzione diverge se l'argomento del logaritmo è uguale a 1, ovvero

$$\tanh \mathcal{I} = 1 \quad \text{ovvero} \quad \frac{I}{k_B T} \to \infty.$$
 (3.16)

Poiché I è una quantità finita, ciò implica T = 0.

Si può arrivare alla stessa conclusione calcolando il valore della funzione di correlazione tra due spin infinitamente lontani come come

$$\lim_{r \to \infty} \left\langle \sigma_k \sigma_{k+r} \right\rangle = \lim_{r \to \infty} \left(\tanh \mathcal{I} \right)^r, \tag{3.17}$$

ma $\tanh \mathcal{I} \leq 1$, e il limite risulta quindi nullo a meno che $\tanh \mathcal{I} = 1$, ovvero, di nuovo, T = 0.

Usando le formule precedenti possiamo calcolare le funzioni termodinamiche (2.6) e (2.7) con H esterno nullo. In particolare, per l'energia

$$E(H = 0, T) = -\frac{\partial \ln Z_N(H = 0, T)}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh \mathcal{I}_i \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N-1} -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \cosh \beta I_i = -\sum_{i=1}^{N-1} I_i \tanh \mathcal{I}_i$$
(3.18)

e nel caso in cui valga l'isotropia delle interazioni

$$E(H = 0, T) = -I(N - 1) \tanh \mathcal{I}.$$
 (3.19)

Il calcolo della suscettività è mostrato in [1] e si ottiene, nel limite termodinamico,

$$\chi(H=0,T) = \beta e^{2\mathcal{I}} \tag{3.20}$$

Per il calore specifico ricaviamo, sempre nel caso isotropo

$$C(H = 0, T) = \frac{\partial E}{\partial T} = k_B (N - 1) \left(\frac{\mathcal{I}}{\cosh \mathcal{I}}\right)^2$$
(3.21)



Figura 3.2: Calore specifico a volume costante del modello di Ising unidimensionale in funzione della temperatura.



Figura 3.3: Entropia in funzione della temperatura.

Possiamo anche calcolare l'entropia del sistema, ricavando

$$S(H = 0, T) = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{\beta} \ln Z_N \right]$$

= $k[N \ln 2 + (N - 1) \ln \cosh \mathcal{I} - (N - 1)\mathcal{I} \tanh \mathcal{I}]$ (3.22)

Gli andamenti delle ultime due funzioni termodinamiche sono riportati nelle figure 3.2 e 3.3. Si noti che, come ci si aspettava, l'andamento del calore specifico risulta regolare e non presenta discontinuità.

Per quando riguarda l'entropia invece, nel limite $T \to 0$, essa tende al valore $k \ln 2$, ovvero il logaritmo del numero di stati ad energia minima; nel limite $T \to \infty$ invece, Stende a $Nk \ln 2$. In questo limite, infatti, tutti gli spin risultano indipendenti e il numero di stati del sistema è dato dalla totalità delle sue 2^N configurazioni.

3.2 Anelli e matrici di trasferimento

Un metodo alternativo per il calcolo della soluzione esatta del modello di Ising unidimensionale è quello delle *matrici di trasferimento*. Il vantaggio di questo metodo risiede nel fatto che esso risulta applicabile anche nel caso di un campo magnetico esterno non nullo. Tuttavia è necessario assumere l'isotropia delle interazioni ($I_{ij} \equiv I = costante$).

Consideriamo allora una catena di N spin σ_i (figura 3.4). Ognuno di essi interagisce con il campo esterno H e con i suoi due vicini in modo isotropo tramite la costante di accoppiamento I dando origine all'hamiltoniana

$$\mathcal{H}(\sigma_1,\ldots,\sigma_N) = -I\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i\sigma_j - H\sum_{i=1}^N\sigma_i.$$
(3.23)

Imponendo condizioni periodiche

$$\sigma_{N+i} = \sigma_i, \tag{3.24}$$

la catena assume la topologia di una circonferenza. La funzione di partizione è allora

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta \sum_{i=1}^N (I\sigma_i \sigma_{i+1} + H\sigma_i)\right].$$
(3.25)

Il metodo delle matrici di trasferimento è basato sull'osservazione che la somma sulle



Figura 3.4: Topologia del reticolo di Ising unidimensionale con la condizione $\sigma_{N+i} = \sigma_i$.

configurazioni degli spin può essere espressa in termini di un prodotto di matrici 2x2. Il termine nell'hamiltoniana dovuto al campo magnetico esterno può infatti essere scritto come

$$H\sum_{i=1}^{N}\sigma_{i} = \frac{H}{2}\sum_{i=1}^{N}(\sigma_{i} + \sigma_{i+1}).$$
(3.26)

Defiamo allora la matrice di trasferimento ${f P}$ tramite i suoi elementi come

$$\langle \sigma_i | \mathbf{P} | \sigma_j \rangle = \exp\left\{ \beta \left[I \sigma_i \sigma_j + \frac{H}{2} (\sigma_i + \sigma_j) \right] \right\},$$
 (3.27)

dove σ_i e σ_j prendono indipendentemente i valori ±1. Una rappresentazione esplicita della matrice di traferimento è quindi data da

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(I+H)} & e^{-\beta I} \\ e^{-\beta I} & e^{\beta(I-H)} \end{pmatrix}, \qquad (3.28)$$

dove

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{12} &= \left\langle +1|\mathbf{P}|+1 \right\rangle \\ \mathbf{P}_{11} &= \left\langle +1|\mathbf{P}|-1 \right\rangle \\ \mathbf{P}_{21} &= \left\langle -1|\mathbf{P}|+1 \right\rangle \\ \mathbf{P}_{22} &= \left\langle -1|\mathbf{P}|-1 \right\rangle. \end{aligned}$$

Con tali definizioni possiamo riscrivere la funzione di partizione come

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \langle \sigma_1 | \mathbf{P} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \mathbf{P} | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle$$
(3.29)

Con questo metodo lo spazio delle configurazioni di un singolo spin può essere visto come lo spazio di Hilbert di un sistema quantisico a due stati. Vale quindi la relazione di completezza

$$\sum_{\sigma=-1}^{+1} |\sigma\rangle\langle\sigma| = \mathbb{1}$$
(3.30)

e la funzione di partizione, grazie alla condizione di periodicità, diventa

$$Z_N = \sum_{\sigma=-1}^{+1} \left\langle \sigma_1 | \mathbf{P}^N | \sigma_1 \right\rangle = \operatorname{Tr} \mathbf{P}^N$$
(3.31)

Il modo più facile per calcolare la traccia della potenza ennesima della matrice di trasferimento è quello di portare \mathbf{P} in forma diagonale. Poiché \mathbf{P} è simmetrica allora esiste sempre una base ortonormale e una trasformazione unitaria U tali che

$$U^{-1}\mathbf{P} U = \mathcal{D} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0\\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \qquad (3.32)$$

con $\lambda_+ \geq \lambda_-$. Poiché la traccia del prodotto di matrici è ciclica,

$$\operatorname{Tr} \mathbf{P}^{N} = \operatorname{Tr} \mathbb{1} \mathbf{P}^{N} = \operatorname{Tr} U^{-1} U \mathbf{P}^{N} = \operatorname{Tr} U^{-1} \mathbf{P}^{N} U$$

=
$$\operatorname{Tr} \mathcal{D}^{N} = \lambda_{+}^{N} + \lambda_{-}^{N}$$
(3.33)

(la traccia è infatti invariante sotto cambio di coordinate).

Per trovare esplicitamente gli autovalori di \mathbf{P} risolviamo l'equazione

$$\det(\mathbf{P} - \lambda \mathbb{1}) = 0, \tag{3.34}$$

trovando

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta I} \cosh\beta H \pm \sqrt{e^{2\beta I} \cosh^2\beta H - 2\sinh 2\beta I}$$
(3.35)

L'energia libera per unità di particella è allora espressa da

$$\mathbf{f} = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = -\frac{1}{\beta} \left\{ \ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\}$$
(3.36)

e poiché $\lambda_+ > \lambda_-$, si ha che nel limite termodinamico le funzioni termodinamiche sono determinate unicamente da λ_+ . Nello specifico

$$\lim_{N \to \infty} \mathbf{f} = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+. \tag{3.37}$$



Figura 3.5: Magnetizzazione in funzione del campo magnetico esterno H. La curva in blu è plottata con un valore di temperatura minore rispetto alla curva rossa.

Inoltre la magnetizzazione per unità di particella è espressa dam considerata la (2.8)

$$m(H,T) = -\frac{\partial f}{\partial H} = \frac{e^{\beta I} \sinh \beta H}{\sqrt{e^{2\beta I} \cosh^2 \beta H - 2 \sinh 2\beta I}}.$$
(3.38)

Nella figura 3.5 è riportato l'andamento della (3.38) per diversi valori della temperatura.

Con il metodo della matrice di trasferimento troviamo quindi un'ulteriore conferma dell'inesistenza di una fase ferromagnetica per sistemi unidimensionali. Sia l'energia libera che la magnetizzazione, infatti, risultano funzioni analitiche di $H \in T$. In particolare la magnetizzazione si annulla per H = 0. Tuttavia, nel limite $T \rightarrow 0$ e H non nullo, la magnetizzazione presenta una discontinuità del tipo

$$m(H) = \begin{cases} 1 & \text{se } H > 0; \\ 0 & \text{se } H = 0; \\ -1 & \text{se } H < 0. \end{cases}$$

3.2.1 Funzione di correlazione con matrice di trasferimento

Il metodo della matrice di trasferimento può essere applicato anche per il calcolo della funzione di correlazione. Calcoliamo quindi

$$\left\langle \sigma_{1}\sigma_{1+r}\right\rangle = \frac{1}{Z_{N}}\sum_{\{\sigma\}}\sigma_{1}\mathbf{P}(\sigma_{1}\sigma_{2})\dots\sigma_{r+1}\mathbf{P}(\sigma_{r+1}\sigma_{r+2})\dots\mathbf{P}(\sigma_{N},\sigma_{1}).$$
 (3.39)

Introducendo la matrice ${\mathcal S}$ definita da

$$\mathcal{S}_{\sigma\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma,\sigma'},\tag{3.40}$$

l'equazione (3.39) può essere espressa come

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \operatorname{Tr} (\mathcal{S} \mathbf{P}^r \mathcal{S} \mathbf{P}^{N-r}).$$
 (3.41)

Usando la matrice unitaria $U(\phi)$ che diagonalizza **P** otteniamo

$$U^{-1}\mathcal{S} U = \begin{pmatrix} \cos 2\phi & -\sin 2\phi \\ -\sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{pmatrix}$$
(3.42)

e sostituendo tale espressione e la forma diagonale di \mathbf{P} nella (3.41) otteniamo, nel limite termodinamico,

$$\left\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \right\rangle = \cos^2 2\phi + \sin^2 2\phi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^r,$$
(3.43)

da cui ricaviamo

$$\left\langle \sigma_i \right\rangle = \cos 2\phi. \tag{3.44}$$

La funzione di correlazione è quindi data da

$$G^{(2)}(r) = \left\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \right\rangle - \left\langle \sigma_i \right\rangle \left\langle \sigma_i \right\rangle = \sin^2 2\phi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^r.$$
(3.45)

Si nota quindi che sebbene le funzioni termodinamiche siano determinate solo dall'autovalore maggiore, la correlazioni è legata a entrambi gli autovalori e quindi alle proprietà globali della matrice di trasferimento. Si ricava infatti che la lunghezza di correlazione è data da

$$\xi = \frac{1}{\ln \lambda_+ / \lambda_-} \tag{3.46}$$

3.3 Calcolo degli esponenti critici 1D

Il modello di Ising unidimensionale non possiede transizioni di fase. Tuttavia il punto (H = 0, T = 0) del diagramma di fase può essere trattato come punto critico del sistema poiché in tale punto la lunghezza di correlazione diverge. Nel primo capitolo gli esponenti

critici erano stati definiti dalla variabile $t = (T - T_c)/T_c$. In questo caso, data la condizione $T_c = 0$, conviene utilizzare la variabile

$$\tau = \exp(-2\mathcal{I}). \tag{3.47}$$

Osservando la divergenza di ξ rispetto alla nuova variabile, $\xi \sim (2\tau)^{-1}$, otteniamo

$$\nu = 1.$$

Analogamente, la divergenza della suscettività mostrata dalla (3.20) fissa il valore dell'esponente γ

$$\gamma = 1.$$

Inoltre la funzione di correlazione degli spin al punto critico risulta costante, cioè

$$\eta = 1.$$

Poiché la magnetizzazione spontanea è sempre nulla per campi esterni nulli, anche l'esponente β è identicamente nullo:

$$\beta = 0.$$

In un campo magnetico esterno non nullo invece, la magnetizzazione per T = 0 è una funzione discontinua e quindi

$$\delta = \infty$$
.

L'ultimo esponente critico α è ricavabile tramite *leggi di scala*, mostrate in [1] e [4]. Da queste si ricava

$$\alpha = 1, \qquad \beta \delta = 1.$$

Capitolo 4

Soluzioni approssimate

4.1 Teoria di campo medio

Per reticoli a dimensioni maggiori di uno il calcolo della funzione di partizione presenta notevoli difficoltà di calcolo. Risulta quindi utile elaborare metodi per ricavare soluzioni approssimate, che pur non essendo esatte, descrivano un modo qualitativamente corretto il fenomeno fisico.

Nel modello di Ising ogni spin interagisce con il campo magnetico esterno e con il campo generato dai γ spin vicini. Quest'ultimo è ovviamente una variabile dinamica non controllabile dall'esterno e il suo valore varia al variare delle configurazioni.

Consideriamo ora l'hamiltoniana (2.3) nel caso isotropo

$$\mathcal{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -I \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$
(4.1)

ed esprimiamo il prodotto degli spin come

$$\sigma_i \sigma_j = (\sigma_i - m + m)(\sigma_j - m + m)$$

= $m^2 + m(\sigma_i - m) + m(\sigma_j - m) + (\sigma_i - m)(\sigma_j - m).$ (4.2)

L'approssimazione di campo medio consiste nel trascurare il termine quadratico negli spin, sostituendo quindi all'hamiltoniana (4.1)

$$\mathcal{H} \simeq -I \sum_{\langle ij \rangle} [-m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j)] - H \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$
(4.3)

Possiamo esprimere i vari termini in funzione del numero di link γ nel seguente modo

$$-I\sum_{\langle ij\rangle}(-m^2) = Im^2\frac{\gamma N}{2}$$

$$-I\sum_{\langle ij\rangle}m(\sigma_i + \sigma_j) = -I\gamma m\sum_{i=1}^N \sigma_i.$$
(4.4)

N T

Ciò ci permette di definire l'hamiltoniana di campo medio

$$\mathcal{H}^{cm} = Im^2 \frac{\gamma N}{2} - (Im\gamma + H) \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$
(4.5)

Tale funzione risulta in funzione dei singoli spin e non degli spin accoppiati. Il calcolo della funzione di partizione è quindi agevolato e possiamo scrivere

$$Z_N^{cm}(H,T) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}^{cm}} = e^{-\frac{\gamma N}{2}\mathcal{I}m^2} [2\cosh(\gamma \mathcal{I}m + \beta H)]^N.$$
(4.6)

L'energia libera per unità di particella è allora data da

$$\mathbf{f} = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N^{cm} = \frac{\gamma}{2} \mathcal{I} m^2 - \frac{1}{\beta} \ln[2 \cosh(\gamma \mathcal{I} m + \beta H)], \qquad (4.7)$$

mentre la magnetizzazione deve soddisfare l'equazione

$$m = -\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial H} = \tanh(\gamma \mathcal{I}m + \beta H) \tag{4.8}$$

Siamo in particolare interessati alla magnetizzazione spontanea e cerchiamo dunque soluzioni non banali dell'equazione trascendente

$$m = \tanh(\gamma \mathcal{I}m) \tag{4.9}$$

Questo problema può essere risolto per via grafica, ovvero vedendo dove il grafico della funzione a sinistra dell'uguale interseca il grafico della funzione a destra. In figura 4.1 è riportato l'andamento delle due funzioni. Il valore m = 0 è sempre una soluzione che equivale all'assenza di magnetizzazione spontanea. Tuttavia se la derivata della funzione $\tanh(\gamma \mathcal{I}m)$ come funzione di m è maggiore di uno nell'origine, allora esistono altre due soluzioni, simmetriche rispetto all'origine, che possiamo porre uguali a dei valori $+m_0$ e $-m_0$. Quindi per $\gamma \mathcal{I} = 1$, cioè quando la temperatura è uguale a



Figura 4.1: Soluzione grafica dell'equazione (4.9).

$$T_c = \frac{\gamma I}{k_B},\tag{4.10}$$

il sistema è sottoposto a una transizione di fase. L'equazione (4.9) deve essere considerata come limite per $H \to 0^{\pm}$: ciò spiega il doppio segno nella magnetizzazione spontanea. Per temperature minori alla temperatura critica, infatti, gli spin sono orientati nella direzione del campo esterno prima che esso venga mandato a zero. Si avrà allora $m = m_0$ se $H \to 0^+$, mentre $m = -m_0$ se $H \to 0^-$.

Se la magnetizzazione spontanea è non nulla, tuttavia, il sistema ha ora una direzione privilegiata nello spazio (ovvero quella del campo esterno prima che questo vada a zero) e la simmetria Z_2 del modello è rotta spontaneamente. Nella fase ferromagnetica l'unico effetto rimasto della simmetria è quello di mappare m_0 in $-m_0$ e viceversa.

Il campo medio riproduce quindi proprio il diagramma di fase della figura 2.1. In particolare si osserva una transizione del primo ordine se si passa da un valore positivo a uno negativo del campo esterno H, o viceversa, per $T < T_c$; la transizione è invece di second'ordine a $T = T_c$ e H = 0.

Si noti che la degenerazione $\pm m_0$ non ha effetto nella funzione di partizione (4.6) che risulta una funzione pari della magnetizzazione. Anche l'energia libera e le altre funzioni termodinamiche rimangono inalterate. In particolare calcoliamo

$$\frac{1}{N}E(H=0,T) = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c; \\ -\frac{\gamma}{2}Im^2 & \text{se } T < T_c \end{cases}$$
(4.11)

 \mathbf{e}

$$\frac{1}{N}C(H=0,T) = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c; \\ -\frac{\gamma I}{2} \frac{\mathrm{d}m^2}{\mathrm{d}T} & \text{se } T < T_c. \end{cases}$$
(4.12)

Il calore specifico risulta quindi discontinuo.

4.2 Esponenti critici per il campo medio

Calcoliamo ora gli esponenti critici nell'approssimazione di campo medio utilizzando la variabile

$$t = \frac{(T - T_c)}{T_c},$$
 (4.13)

con T_c data dalla (4.10). L'equazione (4.9) può essere riscritta come

$$m = -\frac{H}{k_B T_c} + (1+t) \tanh^{-1} m.$$
(4.14)

Consideriamo prima il caso B = 0. Vicino al punto critico anche la magnetizzazione spontanea risulta piccola. Possiamo espandere allora il lato destro della precedente relazione come

$$m_0 = (1+t) \tanh^{-1} m_0 = (1+t) \left[m_0 + \frac{1}{3} m_0^3 + \frac{1}{5} m_0^5 + \dots \right].$$
(4.15)

Risolvendola per m_0 otteniamo

$$m_0 = (-3t)^{1/2} \{ 1 + \mathcal{O}(t) \}$$
(4.16)

Quindi l'esponente critico β è dato da

$$\beta = \frac{1}{2}.\tag{4.17}$$

Per ottenere la suscettività magnetica deriviamo entrambi i termini della (4.14) rispetto al campo magnetico. Abbiamo

$$\frac{\partial m}{\partial H} = \chi = -\frac{1}{k_B T_c} + (1+t)(\frac{1}{1+m^2})\chi, \qquad (4.18)$$

cioè

$$\chi = \frac{1}{kT_c} (-t)^{-1}.$$
(4.19)

Percioè abbiamo ottenuto il valore dell'esponente γ

$$\gamma = 1. \tag{4.20}$$

Per ottenere δ consideriamo l'equazione (4.14) a t = 0. Espandendo in serie la funzione iperbolica abbiamo

$$\frac{H}{k_B T_c} = \frac{1}{3}m^3 + \mathcal{O}(m^5), \qquad \text{cioè } m \sim H^{1/3}$$
 (4.21)

e quindi

$$\delta = 3. \tag{4.22}$$

Infine per ricavare α consideriamo l'energia libera di campo medio (4.7) vicino al punto critico. Usando la (4.9) e l'identità

$$\cosh x = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 x}},\tag{4.23}$$

l'energia libera può essere espressa come

$$f = \frac{1}{2}I\gamma m^2 - \frac{1}{2\beta}\ln\left[\frac{4}{(1-m_0^2)}\right].$$
(4.24)

Prendiamo or
aH=0. per $T>T_c$ la magnetizzazione spontanea è nulla
e l'energia libera è semplicemente espressa da

$$f(H = 0, T) = -\frac{1}{\beta} \ln 2.$$
(4.25)

Per $T < T_c, m_0 \neq 0$ ed espandendo in serie la (4.24) otteniamo

$$f(H = 0, T) = -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{1}{2\beta} m_0^2 (1 - \mathcal{I}\gamma) + \dots$$
(4.26)

Usando la (4.16), per $|t| \ll 1$, l'energia libera è data da

$$f(H = 0, T) \simeq -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{3}{4}t^2 + \dots$$
 (4.27)

Si ricava inoltre $f \simeq t^{2-\alpha}$. Il calore specifico può essere infatti visto, a meno di costanti, come derivata seconda rispetto a T (e quindi rispetto a t) dell'energia libera. Con questa osservazione concludiamo che

$$\alpha = 0. \tag{4.28}$$

L'ultimo esponente ν può essere dedotto da leggi di scala (mostrate in [1]) e il suo valore è

$$\nu = 1/2. \tag{4.29}$$

Capitolo 5

Dualità del modello di Ising bidimensionale e soluzione di Onsager

5.1 Relazione di dualità in reticoli quadrati

L'argomento di Landau trattato nella sezione 2.3 mostra che il modello di Ising bidimensionale ha due fasi: una fase ad alta temperatura nella quale il sistema risulta disordinato e una fase a bassa temperatura nella quale il sistema risulta ordinato, con una magnetizzazione spontanea non nulla.

Vogliamo ora determinare il valore della temperatura critica T_c alla quale si avverte il passaggio da una fase all'altra. Il valore esatto fu determinato, in assenza di campo magnetico esterno, da H. A. Kramers e G. H. Wannier usando una relazione di equivalenza tra le funzioni di partizione ricavate in regimi di alta e bassa temperatura. Per farlo è necessario studiare le loro espansioni in serie nelle varie fasi. Queste espansioni hanno un'interpretazione geometrica in termini dei poligoni che possono essere costruiti sul reticolo.

Consideriamo un reticolo quadrato \mathscr{R} formato da N siti e ipotizziamo che le costanti di accoppiamento derivate dall'interazione di scambio possano assumere due valori: I per le interazioni orizzontali e J per le interazioni verticali. In assenza di campi esterni la funzione di partizione è quindi data da

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[K\sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + L\sum_{(i,k)} \sigma_i \sigma_k\right],\tag{5.1}$$

dove $K = \beta I$ e $L = \beta J$. La prima sommatoria tra le parentesi si estende quindi alle coppie orizzontali mentre la seconda si estende alle coppie verticali. Definiamo ora le due rappresentazioni grafiche.

5.1.1 Rappresentazione grafica a bassa temperatura

Iniziando da una certa configurazione di spin $\{\sigma\}$ denotiamo con r ed s il numero di coppie di spin rispettivamente verticali e orizzontali con valori diversi. Se indichiamo con M il numero di coppie orizzontali o verticali avremo M - r(s) coppie verticali (orizzontali) di spin con valori uguali. Il contributo alla funzione di partizione apportato dalla singola configurazione è quindi dato da

$$\exp[K(M-2s) + L(M-2r)].$$
(5.2)

Introduciamo ora il concetto di *reticolo duale*: da ogni reticolo bidimensionale \mathscr{R} possiamo ricavare un altro reticolo \mathscr{R}_D ottenuto posizionando i suoi siti al centro delle facce del reticolo originario \mathscr{R} e collegandoli se le facce corrispondenti hanno un lato in comune (figura 5.1). Se il reticolo di partenza è quadrato lo sarà anche il suo duale \mathscr{R}_D . Questo differisce da \mathscr{R} per una traslazione di mezza unità reticolare in entrambe le direzioni. Grazie al reticolo duale possiamo vedere gli spin non come siti di \mathscr{R} ma come facce di \mathscr{R}_D . Data una configurazione possiamo rappresentare coppie di spin con valori diversi con delle linee su \mathscr{R}_D .

Questa costruzione genera un insieme di r linee orizzontali ed s linee verticali. Tali linee possono essere unite per formare dei poligoni chiusi (figura 5.2). Per ogni insieme di poligoni abbiamo una degenerazione data dall'inversione globale degli spin (essendo nullo il campo esterno il sistema ha la solita simmetria Z_2). Possiamo quindi calcolare la funzione di partizione etichettando le configurazioni con insiemi di poligoni chiusi sul reticolo (e quindi formati da un numero pari di linee) ognuno con molteplicità due:

$$Z_N = 2 \exp[M(K+L)] \sum_P \exp(-2Lr - 2Ks).$$
(5.3)



Figura 5.1: Reticolo quadrato \mathscr{R} (rappresentato da cerchi pieni e linee) e il suo duale \mathscr{R}_D (rappresentato da cerchi vuoti e linee tratteggiate).

Si noti che nel reticolo duale r(s) fa riferimento alle linee orizzontali (verticali) a differenza del reticolo originario, nel quale i ruoli delle variabili risultano invertiti.

L'espressione (5.3) è valida per qualunque valore di temperatura. La costruzione è tuttavia nota come rappresentazione di *bassa temperatura* perché in questo caso K ed L sono grandi e il termine dominante nella sommatoria deriva da piccoli valori di r ed s.

La funzione di partizione risulta espressa dalla quantità geometrica

$$\Phi(e^{-2L}, e^{-2K}) = \sum_{P} \exp[-(2Lr + 2Ks)].$$
(5.4)

Consideriamo i primi termini della serie. Il primo termine viene dal poligono di lunghezza nulla e vale quindi 1. Il secondo termine corrisponde alla configurazione con solo uno spin diverso dal resto: in questo caso il poligono è costituito da due linee orizzontali e due linee verticali e sono collegate tra di loro in modo da formare un quadrato. La degenerazione del termine è N in quanto lo spin invertito può essere situato ovunque nel reticolo. Il terzo termine è dato dal poligono costituito da sei linee, ovvero un rettangolo. Le linee costituenti possono essere due verticali e quattro orizzontali o due orizzontali e quattro verticali. Anche la degnerazione di questo termine è N. Possiamo quindi esprimere la (5.4) con i primi tre termini come

$$\Phi(e^{-2L}, e^{-2K}) = 1 + Ne^{-4L - 4K} + N(e^{-4L - 8K} + e^{-8L - 4K}) + \dots$$
(5.5)

+	+	+	+	+	+	+
+	—	_	+	+	—	+
+	—	_	+	+	—	+
+	_	+	+	+	_	+
+	+	+	+	+	+	+
+	+	+	+	—	+	+
+	+	+	+	+	+	+

Figura 5.2: Una configurazione degli spin sulle facce di un reticolo quadrato.

5.1.2 Rappresentazione grafica ad alta temperatura

La rappresentazione per alte temperature si ottiene notando che

$$\exp[K\sigma_i\sigma_j] = \cosh K + \sigma_i\sigma_j \sinh K$$

$$\exp[L\sigma_i\sigma_j] = \cosh L + \sigma_i\sigma_j \sinh L.$$
(5.6)

La funzione di partizione può allora essere espressa come

$$Z_N = (\cosh K \cosh L)^M \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k)$$
(5.7)

con $v = \tanh K$ e $w = \tanh L$. La prima produttoria si estende alle coppie di spin orizzontali mentre la seconda alle coppie verticali. I parametri $v \in w$ sono piccoli ad alte temperature e risulta naturale cercare un'espansione in serie della funzione di partizione per $T \to \infty$.

Esplicitando i prodotti avremo per ogni configurazione 2^{2M} termini. A ognuno di questi termini possiamo associare una rappresentazione grafica: per ogni fattore $v\sigma_i\sigma_j$ che compare nel termine disegnamo una linea tra il sito *i* e il sito *j*; si applica lo stesso procedimento per i fattori del tipo $w\sigma_i\sigma_k$ mentre non si disegna alcuna linea per il fattore 1 presente nei termini. Così facendo viene stabilita una corrispondenza tra tali termini e una data configurazione di spin sul reticolo \mathscr{R} . La loro espressione generica è del tipo

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \dots,$$

dove r è il numero di linee orizzontali ed s il numero totale di quelle verticali, mentre n_i è il numero di linee che giungono all'*i*-esimo sito reticolare.

A ogni configurazione corrispondono quindi 2^{2M} di questi termini. Sommando ora su tutte le configurazioni troviamo che se almeno uno degli n_i è un numero dispari abbiamo i due contributi

$$\sigma_i = +1 \qquad v^r w^s \sigma_1^{n_1} \dots (\sigma_i = +1)^{n_i} \dots$$

$$\sigma_i = -1 \qquad v^r w^s \sigma_1^{n_1} \dots (\sigma_i = -1)^{n_i} \dots$$

che si annullano nella somma. Tutti i contributi alla sommatoria vengono quindi dagli n_i pari ognungo dei quali contribuisce con due termini uguali. Abbiamo quindi

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \dots = v^r w^s 2^N$$

e la funzione di partizione diventa

$$Z_N = (\cosh K \cosh L)^M 2^N \sum_{\tilde{P}} v^r w^s, \qquad (5.8)$$

dove la sommatoria si estende a tutte le configurazioni con un numero pari di collegamenti per ogni sito, cioè a tutte le linee poligonali chiuse \tilde{P} sul reticolo \mathscr{R} .

La funzione di partizione è di nuovo espressa dalla quantità geometrica

$$\tilde{\Phi}(v,w) = \sum_{\tilde{P}} v^r w^s.$$
(5.9)

Come nel caso precedente il primo termine è uguale a 1 e corrisponde al caso in cui non ci sono poligoni sul reticolo. Il secondo termine corrisponde al quadrato di lunghezza unitaria e ha degenerazione N. La linea poligonale chiusa successiva nella serie è il rettangolo di lunghezza totale sei e ne abbiamo di due tipi: due linee verticali e quattro orizzontali o due linee orizzontali e quattro verticali. Anche la loro degenerazione è pari a N (si veda la figura 5.3). Sviluppando la serie (5.9) con i primi termini otteniamo

$$\tilde{\Phi}(v,w) = 1 + N(vw)^2 + N(v^4w^2 + v^2w^4) + \dots$$
(5.10)



Figura 5.3: Secondo (a) e terzo (b) termine dell'espansione per alte temperature.

5.1.3 Relazione di dualità

Nelle precedenti sezioni è stato mostrato che la funzione di partizione del modello di Ising bidimensionale può essere espansa in due diverse serie: la (5.3) è una valida per basse temperature mentre la (5.8) è usata per alte temperature. Le espressioni finali coinvolgono due funzioni geometriche, $\Phi \in \tilde{\Phi}$, che rappresentano entrambe la somma su tutte le configurazioni poligonali che possono essere disegnate sul reticolo e sul suo duale. Per reticoli finiti $\mathscr{R} \in \mathscr{R}_D$ differiscono solo al contorno. Nel limite termodinamico tuttavia tale differenza svanisce e le due espressioni possono essere ottenute l'una dall'altra semplicemente con un cambio di variabile. Per $N \to \infty$ il rapporto M/N si mantiene costante (ovvero uguale a 1): sostituendo K edL in (5.3) con $\tilde{K} \in \tilde{L}$ definiti da

$$\tanh \tilde{K} = e^{-2L}; \qquad \qquad \tanh \tilde{L} = e^{-2K}, \qquad (5.11)$$

e tenendo in conto la (5.8) abbiamo

$$\tilde{\Phi}(v,w) = \Phi(e^{-2\tilde{L}}, e^{-2\tilde{K}}).$$
(5.12)

Abbiamo quindi la seguente identità tra le funzioni di partizione nei due regimi

$$\frac{Z_N[K,L]}{2^N \left(\cosh K \cosh L\right)^N} = \frac{Z_N[\tilde{K},\tilde{L}]}{2\exp\left[N(\tilde{K}+\tilde{L})\right]}.$$
(5.13)

Se K e L sono grandi, \tilde{K} e \tilde{L} sono piccoli. Ricordando che K e L dipendono da T, l'equazione (5.13) mette quindi in relazione la funzione di partizione ad alta temperatura

con quella a bassa temperatura ed è nota come *relazione di dualità*. Per rendere più esplicita la simmetria è possibile scrivere le sostituzioni (5.11) in un modo algebrico diverso, ovvero

$$\sinh 2\tilde{K}\sinh 2L = 1; \qquad \sinh 2\tilde{L}\sinh 2K = 1. \tag{5.14}$$

Analogamente la relazione di dualità diventa

$$\frac{Z_N[K,L]}{(\sinh 2K \sinh 2L)^{N/4}} = \frac{Z_N[\tilde{K},\tilde{L}]}{(\sinh 2\tilde{K} \sinh 2\tilde{L})^{N/4}}.$$
 (5.15)

Possiamo ora individuare il punto critico. Consideriamo prima il caso isotropo K = L(e di conseguenza anche $\tilde{K} = \tilde{L}$). Al punto critico l'energia libera non è analitica e ciò implica una divergenza nella funzione di partizione: assumendo che questo accada per un valore $K = K_c$ lo stesso deve accadere per $\tilde{K} = K_c$. Generalmente questi due valori sono diversi ma assumendo che esista solo un punto critico, ipotesi giustificata dal punto di vista fisico, questi due valori devono coincidere e il punto critico è identificato dalla condizione

$$\sinh 2K_c = 1 \tag{5.16}$$

che corrisponde a una temperatura critica

$$T_c \simeq 2.269 \ I/k_B.$$
 (5.17)

Confrontando tale risultato con la (2.18) notiamo che l'argomento di Landau, pur avendo una natura qualitativa, individua molto bene l'ordine di grandezza di T_c . Consideriamo ora il caso in cui ci sia una costante di accoppiamento per ogni direzione reticolare. Dalle condizioni (5.14) otteniamo

$$\sinh 2K \sinh 2L = \frac{1}{\sinh 2\tilde{K} \sinh 2\tilde{L}}.$$
(5.18)

Questa equazione implica che mappando (K, L) in (\tilde{K}, \tilde{L}) , la regione I nella figura 5.4 viene trasformata nella regione II lasciando invariata la curva definita da

$$\sinh 2K \sinh 2L = 1. \tag{5.19}$$

Questa è la condizione che assicura la criticità del modello di Ising per un reticolo bidimensionale con diverse costanti di accoppiamento lungo la direzione verticale e quella orizzontale.



Figura 5.4: Curva critica.

5.2 Soluzione di Onsager

La soluzione di Onsager deriva da una generalizzazione della soluzione unidimensionale ottenuta tramite le matrici di trasferimento. Mentre quest'ultima è un problema relativamente semplice da risolvere, il modello di Ising bidimensionale è tutt'altro che banale. La soluzione verrà solo delineata e verranno mostrati i risultati e le funzioni termodinamiche ottenuti.

Consideriamo un reticolo quadrato composto da N siti che possiamo immaginare divisi in n righe e n colonne. Come per il caso unidimensionale tramite una condizione di periodicità cerchiamo di ricondurci a un sistema di una dimensionalità inferiore. Richiediamo allora che la configurazione della (n + 1)-esima riga sia uguale a quella della prima; imponiamo la stessa condizione sulle colonne. Il sistema assume questa volta la topologia di un toroide.

Sia ora μ_{α} ($\alpha = 1, ..., n$) la collezione degli spin della α -esima riga:

$$\mu_{\alpha} \equiv \{\sigma_1, \dots, \sigma_n\} \qquad \sigma_i \in \alpha \text{-esima riga.} \tag{5.20}$$

Le condizioni al contorno implicano che $\mu_{n+1} \equiv \mu_1$ e la configurazione del reticolo è specificata da una *n*-upla di multi-indici $\{\mu_1, \ldots, \mu_n\}$. Poiché ogni spin interagisce solo con gli spin vicini avremo anche che la α -esima riga interagisce solo con le righe ($\alpha + 1$) e

 $(\alpha - 1)$. Possiamo allora scomporre le interazioni del sistema nell'interazione tra le righe e l'interazione degli spin all'interno di ogni riga con il campo magnetico esterno e con gli spin vicini.

$$E(\mu, \mu') = -I \sum_{k=1}^{n} \sigma_{k} \sigma'_{k} \qquad \text{energia di interazione tra } \mu$$

$$e \ \mu' \text{ righe vicine} \qquad (5.21)$$

$$E(\mu) = -I \sum_{k=1}^{n} \sigma_{k} \sigma_{k+1} - H \sum_{k=1}^{n} \sigma_{k} \qquad \text{energia di interazione degli}$$

spin all'interno di una riga

Le condizioni al contorno implicano anche che per ogni riga si abbia $\sigma_{n+1} = \sigma_1$.

L'energia del sistema per una configurazione $\{\mu_1, \dots, \mu_n\}$, che denotiamo sinteticamente con $\{\mu\}$, è quindi data da

$$E\{\mu\} = \sum_{\alpha=1}^{n} [E(\mu_{\alpha}, \mu_{\alpha+1}) + E(\mu_{\alpha})], \qquad (5.22)$$

e la funzione di partizione risulta

$$Z_N = \sum_{\{\mu\}} \exp\left\{-\beta \sum_{\alpha=1}^n [E(\mu_{\alpha}, \mu_{\alpha+1}) + E(\mu_{\alpha})]\right\}.$$
 (5.23)

Definiamo ora l'analogo della matrice di trasferimento nel caso bidimensionale come una matrice $\mathbf{P} \ 2^n \times 2^n$ a coefficienti reali i cui elementi sono

$$\left\langle \mu | \mathbf{P} | \mu' \right\rangle \equiv e^{-\beta [E(\mu,\mu') + E(\mu)]}.$$
(5.24)

Allora la funzione di partizione è espressa, come nel caso unidimensionale, dalla traccia della potenza n-esima di \mathbf{P} :

$$Z_N = \sum_{\mu_1} \cdots \sum_{\mu_n} \langle \mu_1 | \mathbf{P} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | \mathbf{P} | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_n | \mathbf{P} | \mu_1 \rangle$$

=
$$\sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | \mathbf{P}^n | \mu_1 \rangle = \operatorname{Tr} \mathbf{P}^n.$$
 (5.25)

Esponente	Ising 1D	Campo medio	Ising 2D
α	1	0	0
β	0	1/2	1/8
γ	1	1	7/4
δ	∞	3	15
ν	1	1/2	1
η	1	0	1/4

Tabella 5.1: Esponenti critici del modello di Ising.

Poiché la traccia è invariante per cambiamento di base possiamo portarla in forma diagonale e indichiamo i suoi autovalori con $\lambda_1, \ldots, \lambda_{2^n}$. Anche la sua potenza *n*-esima sarà diagonale e la funzione di partizione sarà data da

$$Z_N = \sum_{\alpha=1}^{2^n} (\lambda_\alpha)^n \tag{5.26}$$

Anche per il caso bidimensionale si ha che per $N \to \infty$ le funzioni termodinamiche sono determinate dall'autovalore più grande λ_{max} . È possibile diagonalizzare analiticamente la matrice **P** e quindi trovare l'autovalore solo nel caso di campo nullo. La trattazione di questo problema si trova in [4] e porta alle seguenti funzioni termodianiche:

Energia libera per unità di particella

$$f(H = 0, T) = -\frac{1}{\beta} \ln(2\cosh 2\beta I) - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi} \right), \quad (5.27)$$

con

$$K = \frac{2}{\cosh 2\mathcal{I} \coth 2\mathcal{I}} \tag{5.28}$$

Energia per unità di particella

$$\epsilon(H=0,T) = -2I \tanh 2\mathcal{I} \frac{K}{2\pi} \frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}\beta} \int_0^\pi \mathrm{d}\phi \frac{\sin^2 \phi}{\Delta(1+\Delta)},\tag{5.29}$$

con

$$\Delta = \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi} \tag{5.30}$$

Magnetizzazione

$$m = \{1 - [\sinh(2\mathcal{I})]^{-4}\}^{1/8} \quad \text{per } T < T_c \tag{5.31}$$

e m = 0 per $T > T_c$, indicando una transizione di fase ordine-disordine. La condizione per la determinazione della temperatura critica nella soluzione di Onsager risulta essere la stessa della relazione di dualità, ovvero

$$2 \tanh^2 2\mathcal{I} = 1$$
 cioè $T_c \simeq 2.269 \ I/k_B.$ (5.32)

Calore specifico

Vicino a $T = T_c$ il calore specifico per spin è dato da

$$C(H = 0, T) = \frac{2k_B}{\pi} \left(\frac{2I}{k_B T_c}\right)^2 \left[-\ln\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) + \ln\left(\frac{k_B T_c}{2I}\right) - \left(1 + \frac{\pi}{4}\right) \right].$$
 (5.33)

Si noti che per $T \to T_c$ il calore specifico diverge logaritmicamente.

Viene omesso il calcolo degli esponenti critici, che sono riportati in tabella 5.1 insieme agli altri esponenti critici ottenuti nel corso della trattazione.

Conclusioni

Il modello di Ising mostra il problema della dimensionalità dei sistemi fisici. Essa gioca infatti un ruolo importante nelle transizioni di fase: come per i condensati di bosoni, che non possono formarsi per dimensioni fisiche $d \leq 2$, anche per i sistemi magnetici si ricava che la magnetizzazione spontanea è possibile solo per sistemi con più di una dimensione spaziale. L'argomento di Landau si dimostra un metodo sì qualitativo, ma anche molto efficace per il raggiungimento di tale risultato. Esso predice non solo l'inesistenza della fase magnetica per sistemi unidimensionali, ma fornisce anche una stima della temperatura critica per reticoli bidimensionali $(T_c^{Land.} \simeq 2.885 I/k_B)$ sorprendentemente vicina a quella della soluzione esatta $(T_c^{esatta} \simeq 2.269 I/k_B)$.

L'approssimazione di campo medio fallisce invece sotto questo punto di vista. La temperatura critica calcolata con questo metodo risulta pari al valore

$$T_c^{cm} = \frac{\gamma I}{k_B}.$$
(5.34)

Per il caso unidimensionale la teoria prevede quindi una temperatura critica non nulla e per d = 2 essa risulta maggiore (pari a 4 I/k_B per reticoli quadrati) di quella effettiva. Avendo infatti sostituito la magnetizzazione con la sua media termica, la correlazione a lungo raggio tra gli spin prevale sulle fluttuazioni rispetto al loro valor medio. Questo ordine a lungo raggio favorisce il contributo energetico nell'energia libera ma non influenza l'entropia, alzando il valore della temperatura critica. Inoltre, sempre nel caso bidimensionale, gli esponenti critici che ne derivano risultano incompatibili con quelli della soluzione di Onsager.

Escluso il caso d = 1, tuttavia, la teoria di campo medio è efficace nel mostrare e prevedere le principali caratteristiche fisiche delle transizioni di fase nel modello di Ising. Inoltre l'approssimazione risulta sempre più buona con l'aumentare delle dimensioni. Aumentando infatti il numero link di ogni sito, la media termica risulta più accurata e i termini trascurati nell'approssimazione tendono a zero. La soluzione di campo medio è quindi essenzialmente equivalente alla risoluzione del modello di Ising nel limite $d \to \infty$.

Bibliografia

- G. Mussardo, Statistical Field Theory An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics, Oxford University Press, 2010.
- [2] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Springer, 1995.
- [3] R. J. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, 1982.
- [4] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, 1928.