

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Corso di Laurea in Fisica

Il Modello di Ising

Relatore:
Prof. Elisa Ercolessi

Presentata da:
Lorenzo Varrassi

Correlatore:
Prof. Fabio Ortolani

Sessione III
Anno Accademico 2014/2015

Indice

Abstract	4
Introduzione	6
1 Comportamento magnetico dei materiali e transizioni di fase	8
1.1 Materiali ferromagnetici e paramagnetici	8
1.2 Le transizioni di fase e la loro classificazione	9
2 Generalità sul modello di Ising	12
2.1 Definizione del modello di Ising	12
2.2 Stima della temperatura critica attraverso un argomento termodinamico .	14
3 Modello di Ising unidimensionale	18
3.1 Risoluzione tramite le matrici di trasferimento	18
3.1.1 Primo tipo di condizioni al contorno: condizioni al contorno perio- diche	18
3.1.2 Secondo tipo di condizioni al contorno: stati al contorno fissati . .	21
3.2 Funzioni Termodinamiche	23
3.2.1 Energia libera e magnetizzazione	23
3.2.2 Suscettibilità magnetica	25
3.2.3 Calore specifico ed energia interna	26
3.2.4 Funzione di correlazione e lunghezza di correlazione	28
3.2.5 Spiegazione intuitiva della transizione di fase tramite la lunghezza di correlazione	31
3.2.6 Legame tra la lunghezza di correlazione e la suscettibilità magnetica	32
4 Modello di Ising bidimensionale	34
4.1 La relazione di dualità di Kramers-Wannier per reticoli quadrati	34
4.1.1 Introduzione	34

4.1.2	Espansione per alte temperature	35
4.1.3	Espansione per basse temperature	37
4.1.4	La relazione di dualità tra le due espansioni e la temperatura critica	38
4.2	Formulazione di Kaufman della soluzione esatta di Onsager	40
4.2.1	Introduzione	40
4.2.2	Impostazione del problema	40
4.2.3	Nozioni preliminari: il prodotto diretto di matrici	42
4.2.4	Nozioni preliminari: le matrici di spin	43
4.2.5	Nozioni preliminari: rotazioni e loro rappresentanti spinoriali . . .	44
4.2.6	Risoluzione del modello di Ising bidimensionale	48
4.2.7	Funzioni termodinamiche	55
5	Conclusioni	56
	Bibliografia	58

Abstract

L'elaborato fornisce una introduzione al modello di Ising, utilizzato nello studio delle transizioni di fase tra la fase ferromagnetica e quella paramagnetica dei materiali. Nella prima parte viene trattato il modello unidimensionale, di cui viene esposta la soluzione esatta attraverso l'utilizzo delle matrici di trasferimento, dimostrando quindi l'inesistenza di una transizione di fase a temperature finite non nulle. Vengono calcolate le funzioni termodinamiche e se ne dimostra l'indipendenza dalle condizioni al contorno nel limite termodinamico. Viene proposta infine una spiegazione qualitativa del comportamento microscopico, attraverso la lunghezza di correlazione. Nella seconda parte viene trattato il caso a due dimensioni. Inizialmente viene determinata la temperatura critica per reticoli quadrati, attraverso il riconoscimento della presenza di una relazione di dualità tra l'espansione per alte e per basse temperature della funzione di partizione. Successivamente si fornisce la soluzione esatta attraverso una versione modificata del procedimento, originariamente ideato da L. Onsager, di cui è proposta una traccia della dimostrazione. Viene infine brevemente discussa l'importanza che questo risultato ebbe storicamente nella fisica delle transizioni di fase.

Introduzione

La descrizione teorica delle transizioni di fase è tra gli argomenti più interessanti della fisica statistica e probabilmente tra i più complessi. Storicamente, nello studio dei fenomeni critici, pochi modelli hanno ammesso una trattazione senza l'utilizzo estensivo di approssimazioni o simulazioni numeriche, e il modello di Ising può annoverarsi tra i primi. Nonostante la sua semplicità, questo modello ha rivelato di possedere una straordinaria ricchezza teorica e matematica e ha consentito notevoli progressi nella comprensione delle transizioni di fase e delle loro proprietà.

Il modello di Ising fu introdotto per la prima volta da Ernst Ising nel 1925, nel tentativo di riprodurre le proprietà dei solidi paramagnetici e ferromagnetici applicando la meccanica statistica a un reticolo di "magneti microscopici" ideali. Ising, allievo di Wilhelm Lenz all'Università di Amburgo, pubblicò nel 1925 un corto articolo tratto dalla sua tesi di dottorato, dal titolo "*Contributi alla Teoria del Ferromagnetismo*".¹ In questa breve pubblicazione egli risolveva in modo esatto il modello unidimensionale dimostrando l'inesistenza di una transizione di fase per temperature finite non nulle. In realtà non è possibile attribuire la completa paternità dell'articolo a Ising, come egli stesso affermò in una lettera a S.Kobe: "*Vorrei evidenziare che il modello veramente dovrebbe essere chiamato il modello di Lenz-Ising. Il mio supervisore, il Dr. Wilhelm Lenz, ebbe l'idea e mi propose questo problema matematico per la mia dissertazione*".² E' tuttavia curioso come Lenz non si curò mai di rivendicare il proprio ruolo nello sviluppo di quello che diventerà uno dei modelli più importanti nello studio delle transizioni di fase.

Dopo il suo lavoro come dottorando, Ising abbandonò la ricerca e per circa vent'anni il modello non acquistò particolare popolarità. Bisogna aspettare il 1936, anno in cui R.Pereils dimostrò l'esistenza di un punto critico nel modello bidimensionale per avere sviluppi significativi, ma furono le scoperte nel decennio successivo a portare il modello alla sua attuale popolarità. Il calcolo esatto della temperatura critica nella formulazione bidimensionale fu compiuto da A.Kramers e H.Wannier nel 1941 tramite un ingegno-

¹Ising, E. "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus." Zeitschr. f. Physik 31, 253-258, 1925.

²Kobe(2000). La lettera di Ising originale è in tedesco.

so approccio geometrico. Sempre in quegli anni Kramers e Wannier pubblicarono una serie di articoli riguardanti un approccio tramite le matrici di trasferimento al modello bidimensionale. Con il loro lavoro aprirono la strada a quello che è considerato uno dei risultati più importanti nella fisica delle transizioni di fase: la soluzione esatta di L. Onsager al modello bidimensionale, che fu annunciata durante un convegno dell'Accademia delle Scienze di New York nel 1942 e pubblicata due anni dopo nell'articolo: " *Crystal statistics. A two-dimensional model with an order disorder transition*".³ Negli anni successivi alla pubblicazione della soluzione di Onsager la comunità scientifica era convinta che questo metodo potesse essere esteso al reticolo tridimensionale e al reticolo bidimensionale in presenza di un campo magnetico. Tuttavia, nonostante i numerosi sforzi, nessuna soluzione esatta è stata trovata fino ad ora, anche se molte proprietà sono note da approssimazioni e simulazioni numeriche.

³Phys. Rev. 65, 117 (1944).

Capitolo 1

Comportamento magnetico dei materiali e transizioni di fase

1.1 Materiali ferromagnetici e paramagnetici

Il paramagnetismo e il ferromagnetismo sono proprietà legate alla presenza di un momento di dipolo magnetico permanente, orbitale o di spin, associato agli atomi.

Nelle sostanze ferromagnetiche, l'interazione di scambio tra i momenti di dipolo magnetico degli atomi tra loro vicini dà origine a delle regioni, dette *domini magnetici* o *domini di Weiss*, nelle quali tutti i momenti di dipolo hanno lo stesso orientamento.

In assenza di un campo magnetico esterno, il momento di dipolo magnetico risultante associato a un dominio ha direzione *casuale*; tuttavia il momento totale risulta nullo poiché un materiale contiene tipicamente un elevato numero di domini.

In presenza di un campo magnetico esterno si avrà invece l'insorgere di un momento di dipolo magnetico totale non nullo, in quanto i domini che risultano già allineati possono accrescersi per riallineamento dei singoli momenti negli atomi adiacenti oppure momenti magnetici di interi domini possono ruotare.

La proprietà principale che differenzia i materiali ferromagnetici da quelli paramagnetici consiste nella permanenza di una magnetizzazione totale del materiale, detta *magnetizzazione residua*, anche quando si riporta il campo magnetico esterno a zero. E' possibile eliminare la magnetizzazione residua innalzando la temperatura sopra la cosiddetta *temperatura di Curie*, oltre la quale il materiale si comporta come un paramagnete. La scomparsa del ferromagnetismo alla temperatura di Curie è un caso di transizione di fase.

Molte sostanze che non presentano un comportamento ferromagnetico sono costituite ciononostante da atomi con momenti di dipolo magnetico permanente. In questi mate-

riali, al contrario delle sostanze che mostrano un comportamento ferromagnetico, l'interazione di scambio non è abbastanza intensa da causare l'insorgere di raggruppamenti di atomi con spin allineato. In questo caso i singoli momenti di dipolo magnetico hanno orientamento casuale e non sono organizzati in domini.

Un campo magnetico esterno, tuttavia, conferisce un certo grado di allineamento ai momenti di dipolo magnetico anche in questi materiali, ma questo allineamento è meno completo che in una sostanza ferromagnetica.

L'interazione che governa questo fenomeno, come già accennato, è l'interazione di scambio, di origine quanto-meccanica, che deriva dalla natura antisimmetrica della funzione d'onda descrivente una coppia di elettroni. Trascurando la repulsione coulombiana, l'energia derivata da tale interazione è data da:

$$I_{ij} = \int \Psi_j^*(1)\Psi_i^*(2)U_{ij}\Psi_j(2)\Psi_i(1)d^3r_1d^3r_2 \quad (1.1)$$

dove Ψ_i rappresenta la funzione d'onda del i -esimo elettrone e U_{ij} è il potenziale coulombiano tra gli elettroni.

1.2 Le transizioni di fase e la loro classificazione

Le transizioni di fase possono esser definite qualitativamente come una trasformazione della *composizione*, della *struttura* e delle *proprietà fisiche* di un materiale in seguito a una variazione dei parametri fisici esterni. Sono pressoché onnipresenti in natura e rappresentano uno dei temi più importanti della fisica statistica e della termodinamica. L'esempio tipicamente utilizzato per illustrare questo fenomeno è il passaggio tra i diversi stati di aggregazione della materia. Naturalmente, oltre a questo esempio molte altre transizioni di fase sono state osservate e studiate: il modello di Ising, esaminato in questo testo, fu inizialmente introdotto per studiare la transizione tra comportamento paramagnetico e ferromagnetico nei metalli.

Formalmente, è possibile identificare la presenza di una transizione di fase laddove risulti possibile individuare una singolarità nell'energia libera o in almeno una delle sue derivate. Una prima classificazione, introdotta da Ehrenfest, definisce come transizioni del *primo ordine* quelle in cui l'energia libera ha una discontinuità finita in una delle sue derivate prime e del *secondo ordine* quelle in cui la discontinuità si presenta nelle derivate seconde, e così via. Questo modello è tuttavia inesatto, in quanto non considera il caso nel quale una derivata tenda a infinito.

La classificazione moderna adotta un approccio diverso, distinguendo due categorie di transizioni: quelle *del primo ordine* e quelle *continue*.

Si definiscono come transizioni di fase del *primo ordine* tutte quelle transizioni che coinvolgono un calore latente non nullo. In questa tipologia tutte le quantità termodinamiche (energia interna, entropia, entalpia, etc..) mostrano una discontinuità mentre la lunghezza di correlazione risulta finita. Esempi di questa tipologia possono essere le transizioni liquido-gas e solido-liquido.

La seconda categoria è detta delle *transizioni continue*: in questa tipologia non è presente una discontinuità nelle grandezze termodinamiche, ma le loro derivate risultano discontinue (le grandezze stesse risultano quindi non analitiche) e la lunghezza di correlazione diverge nelle vicinanze del punto critico. Esempi di questo genere di transizione sono quelle tra ferromagneti e paramagneti e quelle associate ai fenomeni della superfluidità e della superconduttività.

Un ulteriore importante strumento per la caratterizzazione delle transizioni di fase è il *parametro d'ordine*. Si tratta di una grandezza fisica che rappresenta la principale differenza qualitativa tra le due fasi, e può essere legata alle variazioni delle simmetrie che il sistema presenta nelle due fasi. Per le transizioni di primo ordine, il parametro d'ordine varia in modo discontinuo, mentre per la seconda tipologia varia in modo continuo (e tipicamente assume valore nullo in una fase e diverso da zero nell'altra). Nel modello di Ising il parametro d'ordine è rappresentato dalla magnetizzazione.

Capitolo 2

Generalità sul modello di Ising

2.1 Definizione del modello di Ising

Il modello di Ising è costituito da un reticolo Ω n -dimensionale periodico con una geometria ben definita, dove ad ogni nodo del reticolo è associata una variabile vettoriale che rappresenta lo spin di una particella. Il sistema è descritto da una hamiltoniana formata da due termini: un primo termine rappresentante l'accoppiamento degli spin con un campo magnetico esterno H (considerato costante e uniforme) e un secondo termine rappresentante l'interazione reciproca tra tutti i nodi del reticolo. I parametri del sistema sono l'intensità del campo magnetico esterno H , l'intensità dell'energia di interazione J_{ij} e la temperatura.

$$H_N = -H \sum_{i=1}^N s_i - \sum_{i,j \in \Omega, i \neq j} J_{ij} s_i \cdot s_j \quad (2.1)$$

Ogni coppia di spin paralleli dà un contributo all'energia totale pari $-J_{ij}$, mentre ogni coppia di spin antiparalleli contribuisce per un valore pari a $+J_{ij}$. Un valore positivo $J_{ij} > 0$ corrisponde a un comportamento ferromagnetico, mentre un valore negativo $J_{ij} < 0$ ad un comportamento antiferromagnetico. Un materiale ferromagnetico raggiungerà quindi una configurazione a energia minore tramite un allineamento parallelo dei propri spin, mentre un materiale antiferromagnetico tramite un allineamento antiparallelo. Si può quindi affermare che i due sistemi si comportano in modo analogo e non richiedono trattazioni separate: in questo senso si osservi come (per un campo magnetico esterno nullo) le due configurazioni, quella con tutti gli spin paralleli per $J_{ij} > 0$ e quella con tutti gli spin antiparalleli per $J_{ij} < 0$, possiedono esattamente la stessa energia e sono entrambi gli stati a minore energia della relativa hamiltoniana. Si osservi come questa assunzione non è più valida nella versione quantistica del sistema (che corrisponde *al*

modello di Heisenberg): in questo senso il modello di Ising viene detto *classico*.

Per semplicità durante tutta la trattazione si assumerà quindi $J_{ij} > 0$ senza perdita di generalità alcuna.

In assenza di campo magnetico il sistema presenta una simmetria rispetto alla trasformazione $s_i \rightarrow -s_i$: l'allineamento parallelo o antiparallelo, e quindi il contributo all'hamiltoniana, risulta immodificato. Formalmente questo risultato si esprime affermando che il sistema è invariante sotto una trasformazione del gruppo discreto Z_2 . Si noti come la presenza di un campo magnetico non nullo, fornendo una direzione preferenziale, rompa questa simmetria.

Nei prossimi capitoli si procederà al calcolo esplicito della funzione di partizione:

$$Z_N(H, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_n} e^{-\beta H(s_1, s_2, \dots, s_n)} \quad (2.2)$$

da cui si ricaverà prima l'energia libera di Helmholtz e successivamente le seguenti funzioni termodinamiche:

$$\begin{aligned} F_N(H, T) &= -kT \log(Z_N(H, T)) && \text{Energia Libera di Helmholtz} \\ U_N(H, T) &= \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_N) && \text{Energia Interna} \\ C_N(H, T) &= \frac{\partial U_N}{\partial T} && \text{Calore Specifico} \\ \chi_N(H, T) &= \frac{\partial M_N}{\partial H} && \text{Suscettibilità magnetica} \\ M_N(H, T) &= \frac{\partial F_N}{\partial H} = \left\langle \sum_{i=1}^N s_i \right\rangle && \text{Magnetizzazione totale} \end{aligned} \quad (2.3)$$

dove $\langle \rangle$ indica una media sull'ensemble. La quantità $M(H=0, T)$ è detta *magnetizzazione spontanea*.

Per semplificare il calcolo della funzione di partizione si adotteranno una serie di importanti approssimazioni: la prima consiste nel considerare gli spin non più come grandezze vettoriali, ma come variabili scalari che possono assumere solo i valori $+1$ o -1 . Questa approssimazione, per quanto ragionevole, non tiene conto di certe eccitazioni del sistema (che potrebbero in alcuni casi provocare una precessione degli spin intorno ad un asse prefissato) associate al fenomeno delle *onde di spin*, la cui trattazione però non è essenziale per le finalità di questo elaborato.

Nell'hamiltoniana generale era inclusa l'interazione tra tutte le coppie di spin possibili, ma un simile modello risulterebbe inaffrontabile e sarà quindi trattato un approccio

alternativo. La seconda approssimazione si basa sull'osservazione che l'interazione di scambio decresce rapidamente con la distanza e considera quindi per ogni sito solo le interazioni con gli spin posti nei nodi del reticolo immediatamente adiacenti. Se il reticolo ha numero di coordinazione q (numero di siti adiacenti ad un singolo nodo) la somma si estenderà su $\frac{qN}{2}$ coppie. Ad esempio:

$$q = \begin{cases} 4 & \text{per un reticolo bidimensionale quadrato} \\ 6 & \text{per un reticolo tridimensionale cubico semplice} \\ 8 & \text{per un reticolo tridimensionale cubico a corpo centrato} \end{cases}$$

Inoltre, se si considera l'intensità dell'interazione di scambio costante, uniforme e isotropa (e quindi indipendente dalla geometria del reticolo), l'hamiltoniana diventa:

$$H_N = -H \sum_{i=1}^N s_i - J \sum_{n.n} s_i s_j \quad s_i = \pm 1 \quad (2.4)$$

Per indicare la serie sulle coppie adiacenti viene utilizzata la notazione, comune in letteratura, di "nearest neighbors".

2.2 Stima della temperatura critica attraverso un argomento termodinamico

Per studiare se un singolo raggruppamento di spin, in una e due dimensioni, è energeticamente favorito o meno si calcolerà la differenza tra l'energia libera F_{1-dom} per una configurazione formata da un *unico* dominio (ossia una configurazione dove gli spin possiedono uguale orientamento) e l'energia libera F_{2-dom} di una configurazione formata da due domini con allineamento opposto.

Si studierà per primo il caso unidimensionale.

Si consideri una catena unidimensionale di N siti con condizioni al contorno periodiche, ossia $s_1 = s_N$. Esistono due microstati possibili con gli spin allineati (uno per ognuna delle due direzioni possibili), entrambi aventi energia pari a $E_{1-dom} = -NJ$, per cui:

$$F_{1-dim} = -NJ - k_B T \ln(2) \quad (2.5)$$

Per formare due domini con spin allineati in direzioni opposte, bisogna inserire due "muri di dominio", invertendo tutti gli spin su un lato del muro stesso: questo processo ha un costo energetico pari a $2 * 2J$ ($2J$ è il costo energetico del singolo muro rispetto alla

configurazione a dominio unico). Poiché esistono $2N(N-1)$ microstati con due muri di dominio, l'energia libera associata sarà:

$$F_{2-dom} = -NJ + 4J - k_B T \ln(2N(N-1)) \quad (2.6)$$

La differenza tra le energie libere sarà quindi pari a:

$$\begin{aligned} F_{2-dom} - F_{1-dom} &= 4J - k_B T \ln(N(N-1)) \\ &\approx 4J - 2k_B T \ln(N) \quad \text{per } N \gg 1 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Un singolo dominio di spin è energeticamente sfavorito se $F_{2-dom} < F_{1-dom}$, ossia se

$$\frac{2J}{k_B T} < \ln(N) \quad (2.8)$$

per $N \rightarrow \infty$ e temperature finite il microstato formato da due domini è quindi sempre favorito. Si noti inoltre che, poiché la media sull'ensemble di tutti i microstati con due domini è pari zero, la magnetizzazione totale sarà nulla. Tuttavia una transizione di fase è comunque possibile solo per $T = 0$.

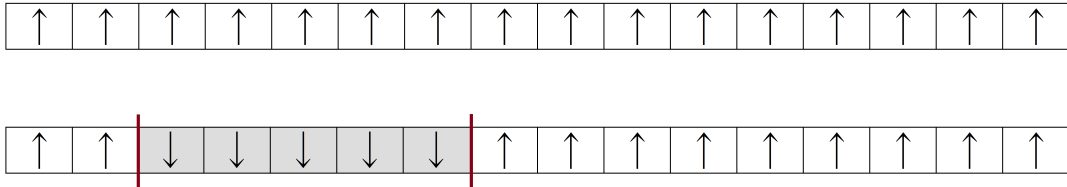


Figura 2.1: Catena unidimensionale di spin nel livello fondamentale in un livello eccitato. Le due linee verticali rosse rappresentano due *muri di dominio*.

Si affronterà adesso il caso a due dimensioni.

Si supponga che il perimetro di un dominio, detto *interfaccia*, separi n coppie di spin antiparalleli: in tal caso la differenza di energia tra la configurazione con un singolo dominio e quella con due domini è pari a $2Jn$, mentre la differenza in entropia è pari a $k_B \ln(\Omega(n))$, dove $\Omega(n)$ è il numero totale di perimetri con n segmenti.

Per effettuare una stima del limite superiore di Ω si consideri l'interfaccia di un raggruppamento come un "random walk" che non può intersecarsi. Per ogni passo ci saranno al massimo tre scelte e quindi si avrà un totale di 3^n interfacce definibili. Questa è ovviamente una stima grossolana, poiché molti dei poligoni così definiti si intersecano o non sono chiusi, ma poiché ci interessa solo studiare l'eventuale presenza di un punto critico

e non effettuare una stima precisa, risulta accettabile.

Infine, poichè ci possono essere N differenti posizioni per il centro di massa di una data interfaccia, si avrà $\Omega(n) < N3^n$.

In generale, per un oggetto bidimensionale è possibile effettuare una stima del perimetro considerandolo proporzionale alla radice quadrata dell'area. Quindi, per due domini di dimensione comparabile si avrà $n \propto \sqrt{N}$. Finalmente è possibile scrivere:

$$F_{2-dom} - F_{1-dom} = 2Jn - k_B T \ln \Omega(n) > 2J\sqrt{N} - k_B T \ln(N3^{\sqrt{N}}) \quad (2.9)$$

Un singolo dominio sarà energeticamente favorito se $F_{2-dom} > F_{1-dom}$, ossia se:

$$k_B T < \frac{2J}{\ln(3) + \ln(N)/\sqrt{N}} \quad (2.10)$$

Nel limite termodinamico è infine possibile ottenere un limite inferiore per la temperatura critica:

$$k_B T \approx \frac{2J}{\ln 3} \quad (2.11)$$

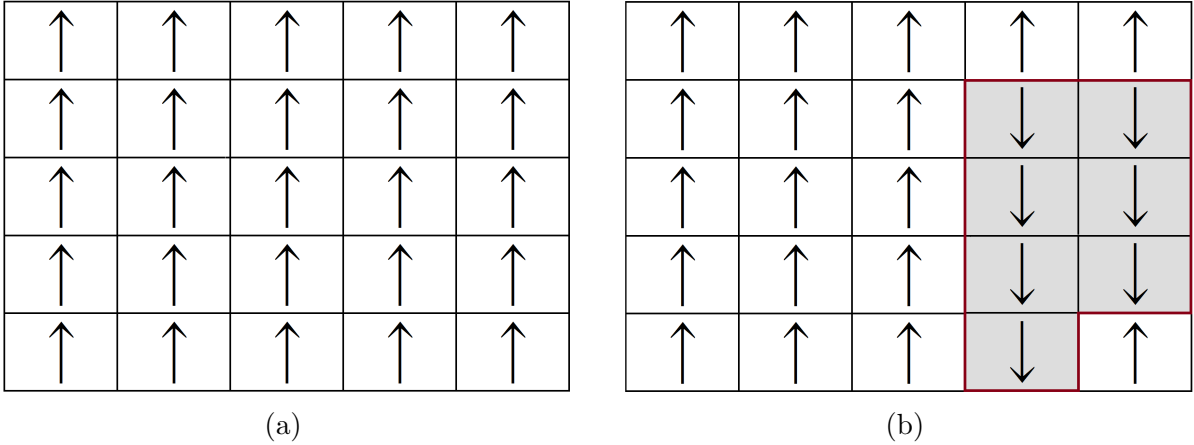


Figura 2.2: Reticolo quadrato di spin. In figura (a) è rappresentato il microstato corrispondente al livello fondamentale del sistema, mentre in figura (b) è rappresentato un microstato relativo a un livello eccitato. Il poligono rosso rappresenta l'interfaccia del dominio.

Capitolo 3

Modello di Ising unidimensionale

3.1 Risoluzione tramite le matrici di trasferimento

La formulazione del modello di Ising tramite matrici fu introdotta inizialmente da H.A. Kramers e G.H. Wannier.¹ Tra i vari metodi che permettono la risoluzione esatta del modello unidimensionale (approccio ricorsivo, espansione in serie²) l'utilizzo delle matrici di trasferimento è indubbiamente uno dei più potenti: può essere utilizzato anche in presenza di un campo magnetico non nullo e evidenzia delle interessanti analogie tra la meccanica quantistica e la meccanica statistica. Il metodo ha conosciuto un notevole successo ed è stato in seguito applicato in molte situazioni diverse, sia nella stessa teoria del modello di Ising (si veda la risoluzione del caso bidimensionale) sia in altri campi. Il modello sarà analizzato con due diverse condizioni al contorno (prima periodiche e poi con stato iniziale e finale fissati).

3.1.1 Primo tipo di condizioni al contorno: condizioni al contorno periodiche

L'applicazione di condizioni al contorno periodiche comporta una geometria ad "anello", in cui i due estremi della catena unidimensionale di spin sono connessi tra loro ed è rappresentata dalla condizione:

$$s_{N+i} = s_i \tag{3.1}$$

¹L'articolo originale risale al 1941: *Phys. Rev* 60,252 (1941).

²Per una trattazione di questi metodi si guardi G. Mussardo, *Statistical Field Theory - An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics*, Oxford University Press, 2010.

Questa condizione, applicata al caso in cui siano considerate solo le interazioni tra siti adiacenti, permette di riscrivere l'hamiltoniana (2.4) in modo più simmetrico:

$$H_N = -\frac{H}{2} \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1}) - J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} \quad (3.2)$$

L'idea alla base di questo approccio discende dall'osservazione che il fattore di Boltzmann, presente nella funzione di partizione, può esser espresso come prodotto di N matrici 2×2 che, grazie alla presenza di condizioni al contorno periodiche, risultano simmetriche. Precisamente si può così definire un operatore \hat{P} tale che:

$$\langle s_i | \hat{P} | s_{i+1} \rangle = \exp \left[\beta \left(J s_i s_{i+1} + \frac{H}{2} (s_i + s_{i+1}) \right) \right] \quad (3.3)$$

Ricordando che s_i, s_{i+1} possono assumere soltanto i valori ± 1 è possibile rappresentare esplicitamente \hat{P} come una matrice di elementi:

$$\begin{aligned} \langle +1 | \hat{P} | +1 \rangle &= e^{\beta(J+H)} \\ \langle -1 | \hat{P} | +1 \rangle &= e^{-\beta J} \\ \langle +1 | \hat{P} | -1 \rangle &= e^{-\beta J} \\ \langle -1 | \hat{P} | -1 \rangle &= e^{\beta(J-H)} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Se gli spin $s_k = \pm 1$ corrispondono ai vettori di modulo unitario $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ la matrice 2×2 associata a \hat{P} risulta:

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Si noti come la matrice è simmetrica. \hat{P} è chiamata usualmente *matrice di trasferimento*. E' possibile riscrivere la funzione di partizione come:

$$Z_N(H, T) = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_1 | \hat{P} | s_2 \rangle \langle s_2 | \hat{P} | s_3 \rangle \dots \langle s_N | \hat{P} | s_1 \rangle \quad (3.6)$$

E' possibile interpretare lo spazio delle configurazioni per un *singolo* spin come lo spazio di Hilbert di un sistema quantistico a due stati (ove gli stati sono denotati come $|+1\rangle, |-1\rangle$). Poiché i due stati formano, per il sistema, un set completo vale la relazione di completezza:

$$\sum_{s=\pm 1} |s\rangle \langle s| = \hat{1} \quad (3.7)$$

È possibile quindi riscrivere la funzione di partizione tramite la traccia dell'operatore \hat{P}^N . Risulta evidente, ancora una volta, il ruolo fondamentale della periodicità delle condizioni al contorno, che permette questa scrittura:

$$Z_N(T, H) = \sum_{s_i = \pm 1} \langle s_1 | \hat{P}^N | s_1 \rangle = Tr \left(\hat{P}^N \right) \quad (3.8)$$

Il metodo più semplice per calcolare la traccia di \hat{P}^N è diagonalizzare l'operatore tramite una matrice ortogonale, procedimento che risulta sempre possibile in quanto la matrice è simmetrica:

$$\hat{U}^{-1} \hat{P} \hat{U} = \hat{D} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad \lambda_+ > \lambda_- \quad (3.9)$$

dove λ_+, λ_- rappresentano i due autovalori. Poichè la traccia di un prodotto di matrici è ciclica, e vale l'identità $\hat{U} \hat{U}^{-1} = \hat{1}$, si conclude che essa è invariante per trasformazioni ortogonali. Questo permette di scrivere $Tr \left(\hat{P}^N \right)$ come:

$$Tr \left(\hat{P}^N \right) = Tr \left(\hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{P}^N \right) = Tr \left(\hat{U}^{-1} \hat{P}^N \hat{U} \right) = Tr \left(\hat{D}^N \right) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (3.10)$$

Gli autovalori sono calcolati tramite il polinomio caratteristico:

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+H)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (3.11)$$

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J} \cosh(\beta H) + 2 \sinh(2\beta J) = 0$$

mentre l'espressione esplicita per U è data da:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

dove ϕ è definita dalla relazione: $\cot 2\phi = e^{-2\beta J} \sinh(\beta H)$. Per semplicità si introducono le abbreviazioni: $b = \beta H, y = \beta J$:

$$\lambda_{\pm} = e^y \left[\cosh(b) \pm \sqrt{e^{-4y} + \sinh^2(b)} \right] \quad (3.13)$$

L'energia libera per unità di spin è allora esprimibile come:

$$f = \frac{F_N(H, T)}{N} = -\frac{1}{\beta N} \ln (\lambda_+^N + \lambda_-^N) = -\frac{1}{\beta} \left\{ \ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\} \quad (3.14)$$

Infine, valutando gli autovalori e la funzione di partizione in assenza di campo magnetico, per $H = 0$ si trova che:

$$\begin{aligned}\lambda_+(H = 0) &= 2 \cosh(y) & \lambda_-(H = 0) &= 2 \sinh(y) \\ Z(T, H = 0) &= (2 \cosh(y))^N (1 + \tanh^N(y)) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} (2 \cosh(y))^N\end{aligned}\quad (3.15)$$

dove l'andamento per $N \rightarrow \infty$ segue da $\lambda_-/\lambda_+ = \tanh(y) < 1$.

3.1.2 Secondo tipo di condizioni al contorno: stati al contorno fissati

Con questo tipo di condizioni al contorno la catena di spin non viene più considerata periodica e circolare ma lineare e con due estremi fissati. L'interpretazione quantistica del modello di Ising, accennata nel paragrafo precedente, si rivela ora particolarmente utile nel calcolo della funzione di partizione con queste condizioni.

Si denotino gli estremi iniziali e finali della sequenza come $|s_{iniziale}\rangle, |s_{finale}\rangle$. Si interpreterà la sequenza in un'ottica di "evoluzione temporale": $|s_{iniziale}\rangle$, il primo spin della sequenza, rappresenta il sistema quantistico a due stati al tempo iniziale $t=0$. Ponendo la catena di spin come l'asse temporale, discreto, del sistema, i successivi nodi sono interpretabili come gli stati che il sistema quantistico assume agli istanti successivi $t = 1, 2, \dots, N$. In questo contesto la matrice di trasferimento \hat{P} assume il ruolo di operatore (quantistico) di evoluzione temporale:

$$|s_{i+1}\rangle = \hat{P} |s_i\rangle = e^{-aH'} |s_i\rangle \quad (3.16)$$

Si noti che nella formula precedente H' rappresenta l'hamiltoniana quantistica del sistema, che risulta differente³ da quella classica espressa da (2.4). In questo contesto il calcolo della funzione di partizione si semplifica in quello dell'elemento di matrice :

$$\begin{aligned}Z_N &= \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \langle s_{iniziale} | \hat{P} |s_2\rangle \langle s_2 | \hat{P} |s_3\rangle \dots \langle s_{N-1} | \hat{P} |s_{finale}\rangle \\ &= \langle s_{iniziale} | \hat{P}^{N-1} |s_{finale}\rangle\end{aligned}\quad (3.17)$$

³L'espressione dell'hamiltoniana quantistica, non utile ai fini di questa trattazione, viene omessa. Per un calcolo esplicito si guardi G. Mussardo, *Statistical Field Theory - An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics*, Oxford University Press, 2010 .

L'espressione può esser resa esplicita tramite l'introduzione della matrice ortogonale \hat{U} definita in (3.12):

$$\begin{aligned} Z_N &= \langle s_{iniziale} | \hat{P}^{N-1} | s_{finale} \rangle \\ &= \langle s_{iniziale} | \hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{P}^{N-1} \hat{U} \hat{U}^{-1} | s_{finale} \rangle = \langle s_{iniziale} | \hat{U} \hat{D}^{N-1} \hat{U}^{-1} | s_{finale} \rangle \end{aligned} \quad (3.18)$$

Per poter studiare gli effetti che le diverse condizioni al contorno hanno sulle grandezze termodinamiche, si ricaveranno due espressioni per la funzione di partizione e per l'energia libera, che verranno poi confrontate con quelle ottenute nel paragrafo precedente. A questo scopo si pongano uguali gli stati iniziale e finale, ossia:

$$|s_{iniziale}\rangle = |s_{finale}\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} Z_N^{++} &= \langle + | (\hat{U} \hat{D}^{N-1} \hat{U}^{-1} | + \rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \lambda_+^{N-1} \cos^2 \phi + \lambda_-^{N-1} \sin^2 \phi \end{aligned} \quad (3.19)$$

Applicando lo stesso procedimento ma compiendo una diversa scelta per gli stati iniziali e finali si ottiene:

$$\begin{aligned} Z_N^{--} &= \lambda_+^{N-1} \sin^2 \phi + \lambda_-^{N-1} \cos^2 \phi \\ Z_N^{+-} &= Z_N^{-+} = \sin \phi \cos \phi (\lambda_+^{N-1} - \lambda_-^{N-1}) \end{aligned} \quad (3.20)$$

mentre nel limite per $N \gg 1$ l'energia libera per unità di spin risulta:

$$\begin{aligned} f^{(++)} &= \frac{F_N}{N} = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N^{(++)} = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \ln (\cos^2 \phi) \\ f^{(--)} &= \frac{F_N}{N} = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N^{(--)} = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \ln (\sin^2 \phi) \\ f^{(+-)} &= \frac{F_N}{N} = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N^{(+-)} = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \ln (\cos \phi \sin \phi) \end{aligned} \quad (3.21)$$

I risultati ottenuti tramite le due diverse condizioni al contorno saranno confrontati nel prossimo capitolo.

3.2 Funzioni Termodinamiche

3.2.1 Energia libera e magnetizzazione

Si prendano in esame le due espressioni ricavate nei capitoli precedenti per l'energia libera, (3.14) e (3.21). Entrambe sono composte da due termini: il primo rappresenta l'energia libera del sistema per unità di volume e poiché è comune a entrambi le espressioni è indipendente dalle condizioni al contorno applicate. Il secondo termine, in quanto diverso nelle due espressioni, dipende invece dalla scelta delle condizioni al contorno. Questa scelta potrebbe rivelarsi problematica, ma può esser evitata ipotizzando un alto numero di nodi nel reticolo, ossia portandosi nel limite termodinamico.⁴

In queste condizioni l'energia libera si riduce al primo termine (il secondo termine aggiunge una correzione dell'ordine $\mathcal{O}(1/N)$, che nel limite termodinamico risulta quindi trascurabile), diventando quindi indipendente dalla forma del sistema.

$$\begin{aligned}
 F_N &= \lim_{N \rightarrow +\infty} = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+ \\
 &= -\frac{N}{\beta} \left[y + \ln \left(\cosh(b) + \sqrt{e^{-4y} + \sinh^2(b)} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

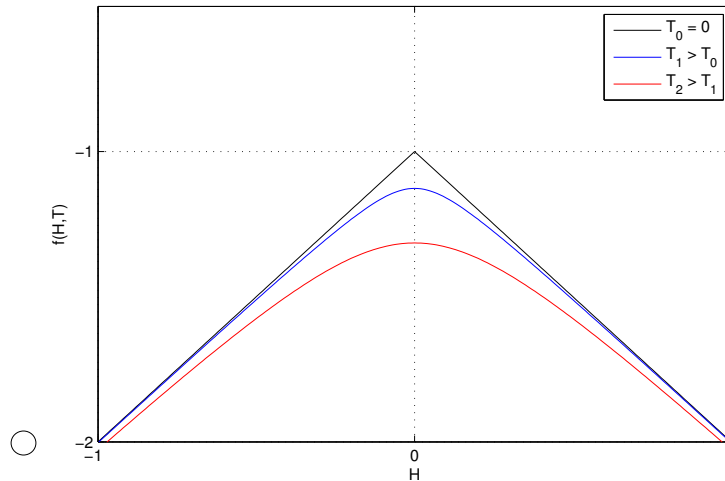


Figura 3.1: Energia libera per unità di spin per diversi valori della temperatura in funzione del campo magnetico esterno.

⁴In realtà il limite termodinamico non consiste solamente nell'ipotesi $N \rightarrow \infty$, ma è definito come il limite per $N, V \rightarrow \infty$ in cui la densità di particelle è mantenuta fissata, ossia $N/V = \text{const.}$

Si noti inoltre come nell'espressione dei due autovalori esistenti compaia solo λ_+ : questo implica che tutte le grandezze termodinamiche dipendono solo dall'autovalore maggiore. Per un sistema *finito* con N spin, la funzione di partizione (2.2) contiene 2^N termini. Se il numero è finito sia la funzione di partizione stessa che l'energia libera non potranno che essere funzioni analitiche in tutto il dominio. Quindi, dal punto di vista matematico, il limite termodinamico è una condizione necessaria per la presenza di singolarità nelle due funzioni.

L'energia libera (nel limite termodinamico) è analitica ovunque tranne che nel punto $(T, H) = (0, 0)$, dove risulta non derivabile. Ciò è chiaramente visibile osservando il grafico dell'energia libera (figura 3.1) per unità di spin rispetto al campo magnetico esterno per diversi valori della temperatura. E' noto come ad ogni transizione di fase debba corrispondere una discontinuità nell'energia libera: si può quindi concludere che il modello di Ising unidimensionale non mostra transizioni di fase per temperature finite non nulle.

Si procede quindi al calcolo della magnetizzazione media per unità di spin:

$$m(T, H) = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right) = \frac{\sinh(b)}{\sqrt{e^{-4y} + \sinh^2(b)}} \quad (3.23)$$

Per $J = 0$ ($y = 0$) si ricava immediatamente l'andamento della magnetizzazione proprio di un sistema paramagnetico:

$$m(T, 0) = \tanh(b) \quad (3.24)$$

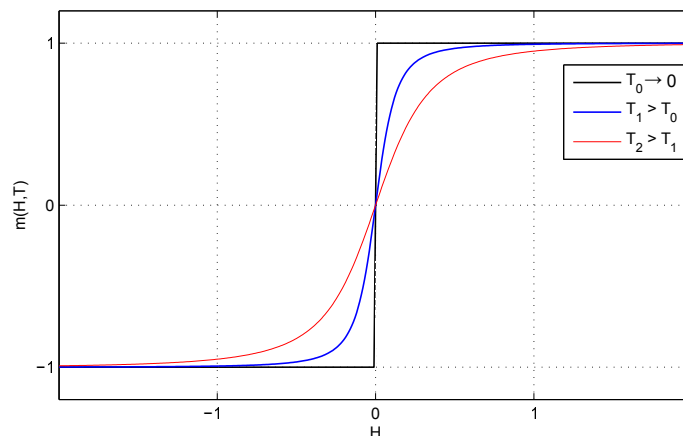


Figura 3.2: Magnetizzazione per unità di spin in funzione del campo magnetico esterno per diversi valori della temperatura.

Per valori della temperatura non nulli, la magnetizzazione è una funzione analitica e vale $\lim_{H \rightarrow 0} m(T, H) = 0$: all'annullarsi del campo magnetico esterno la magnetizzazione scompare e il sistema non mostra alcun comportamento ferromagnetico. Ancora una volta è stata provata l'inesistenza di una transizione di fase nel modello unidimensionale per temperature finite non nulle.

Interessante è lo studio del comportamento della magnetizzazione nel limite $T \rightarrow 0$ e H non nullo:

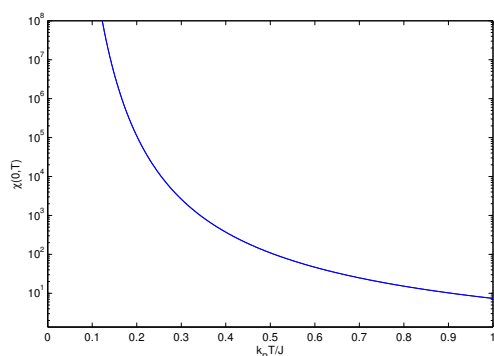
$$m_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^\pm} m(T, H) = \begin{cases} 0 & \text{per } T > 0 \\ \pm 1 & \text{per } T \rightarrow 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

Per $T=0$ il sistema possiede una magnetizzazione spontanea non nulla: è possibile quindi affermare che per $T_c = 0$ avviene una transizione di fase da un comportamento paramagnetico verso uno ferromagnetico.

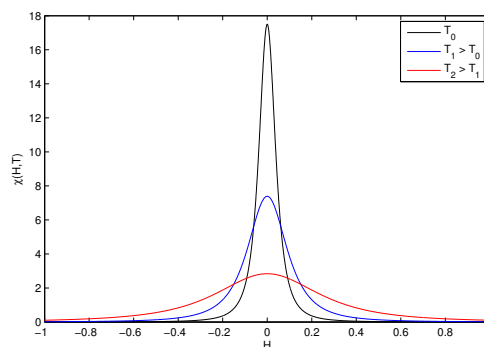
3.2.2 Suscettibilità magnetica

La suscettibilità magnetica χ per unità di spin descrive la variazione della magnetizzazione (sempre per unità di spin) in seguito a una variazione del campo magnetico esterno ad una temperatura fissata. In altre parole, rappresenta la sensibilità della magnetizzazione rispetto alle variazioni di H .

$$\chi(H, T) = \frac{\partial m}{\partial H} = \beta \frac{\cosh(b)e^{-4y}}{[\sinh^2(b) + e^{-4y}]^{3/2}} \quad (3.26)$$



(a) suscettibilità per spin in assenza di campo magnetico esterno ($H = 0$) in funzione del rapporto $k_B T/J$.



(b) suscettibilità per spin in funzione del campo magnetico esterno per diverse temperature.

Figura 3.3: Grafici della suscettibilità in funzione della temperatura e del campo magnetico esterno.

Il grafico della funzione è mostrato nella figura 3.3. Si osservi il comportamento della funzione nel limite $T \rightarrow 0$ per un campo magnetico esterno nullo: al diminuire della temperatura la suscettibilità magnetica cresce fino a divergere con un andamento esponenziale all'avvicinarsi della temperatura critica:

$$\chi_0(T) = \beta e^{2\beta J} = \begin{cases} \beta & \text{per } T \rightarrow \infty \\ \beta e^{2y} & \text{per } T \rightarrow 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

La suscettibilità per unità di spin può esser legata alla varianza della magnetizzazione totale:

$$\begin{aligned} N\chi &= \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} M_{s_i} e^{-\beta E_{s_i}} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \beta M_{s_i}^2 e^{-\beta E_{s_i}} - \frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial H} \sum_{\{s_i\}} M_{s_i} e^{-\beta E_{s_i}} \\ &= \beta \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} M_{s_i}^2 e^{-\beta E_{s_i}} - \beta \left(\frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} M_{s_i} e^{-\beta E_{s_i}} \right)^2 \\ &= \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \end{aligned} \quad (3.28)$$

dove nell'ultimo passaggio è applicata la definizione di media su un ensemble:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} M_{s_i} e^{-\beta E_{s_i}}$$

3.2.3 Calore specifico ed energia interna

Per semplicità si studierà l'andamento delle due funzioni termodinamiche nella condizione di campo magnetico esterno nullo $H = 0$. In tal caso l'energia interna media per unità di spin vale:

$$u(T, 0) = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_N(T, 0)) = -J \tanh(y) = \begin{cases} 0 & \text{per } T \rightarrow \infty \\ -J & \text{per } T \rightarrow 0 \end{cases} \quad (3.29)$$

Per $T \rightarrow \infty$ gli spin assumono un orientamento casuale e, poiché le probabilità di trovare una coppia con direzione parallela e una con direzione antiparallela sono identiche, l'energia interna media si annulla. In altre parole, l'eccitazione termica, che tenderebbe ad attribuire direzioni casuali agli spin, domina sull'interazione di scambio che invece tenderebbe ad allinearli (ossia a portarli nello stato ad energia minore). Per $T \rightarrow 0$ gli spin tendono invece ad allinearsi e l'energia interna media tende verso $-J$.

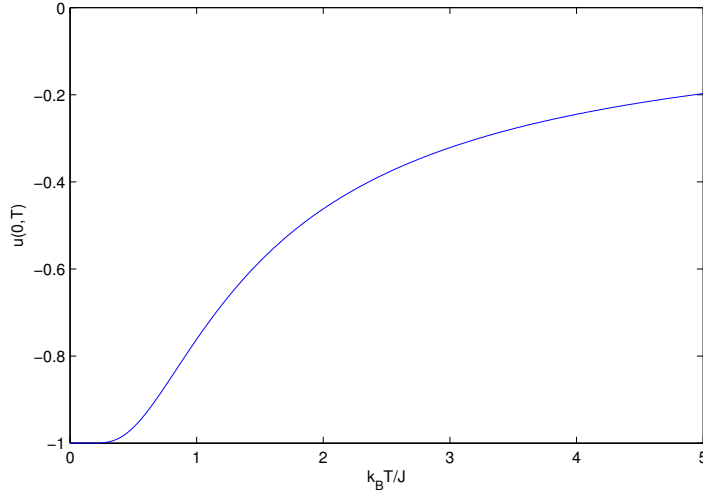


Figura 3.4: Energia interna per unità di spin in assenza di campo magnetico esterno in funzione del rapporto $k_B T / J$.

Il calore specifico, sempre nella condizione di campo magnetico nullo, si calcola come la derivata rispetto alla temperatura dell'energia interna media per spin. Applicando:

$$\frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta}$$

si trova che il calore specifico possiede la seguente espressione:

$$c(T, 0) = \frac{\partial u(T, 0)}{\partial \beta} = \frac{J^2}{k_B T^2} \operatorname{sech}^2(y) \quad (3.30)$$

Come si può vedere dal grafico in figura 3.5, al contrario della suscettibilità magnetica il calore specifico non diverge per $T \rightarrow 0$, ma tende a zero sia per $k_B T \gg J$ (dove l'energia termica $k_B T$ è molto maggiore della costante di accoppiamento) che per $k_B T \ll J$ (dove, invece, la costante di accoppiamento è molto maggiore dell'energia termica). Presenta inoltre un massimo attorno a $\beta J \approx 1$. Andamenti simili del calore specifico sono tipici di quei materiali che presentano un unico "gap" energetico ΔE , e sono noti come "anomalie di Schottky".

Questo comportamento può essere spiegato intuitivamente ricordando che ogni coppia di spin può dare un contributo all'energia $\pm J$: quindi lo spettro energetico del reticolo sarà formato da livelli discreti, mentre la differenza in energia tra due livelli sarà appunto dell'ordine di grandezza di J .

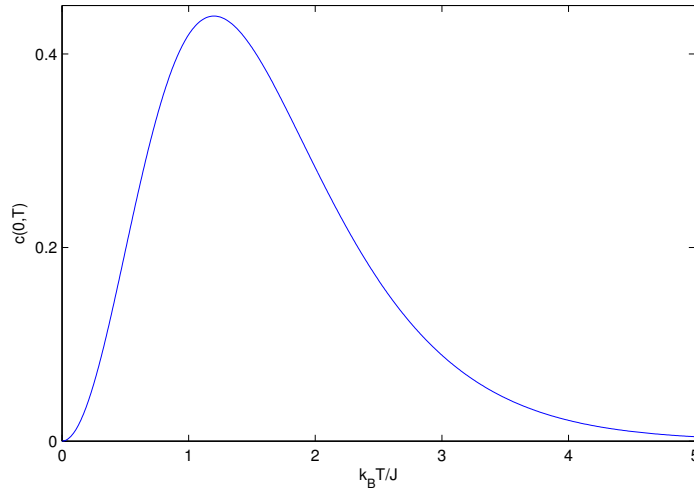


Figura 3.5: Calore specifico in assenza di campo magnetico esterno in funzione del rapporto $k_B T/J$.

Per $k_B T \ll J$ l'energia termica sarà troppo bassa (rispetto alla differenza di energia tra due livelli) per permettere il passaggio da un livello a minore energia verso uno stato eccitato: aumenti "piccoli" di temperatura non aggiungono abbastanza energia termica da modificare questa situazione.

Per $k_B T \gg J$, poiché l'ordine di grandezza dell'energia termica sarà comunque estremamente elevato rispetto all'energia di interazione, aumenti ridotti della temperatura non inducono variazioni significative dell'energia media per spin.

La variazione di energia (rispetto alla temperatura) sarà massima quando l'ordine di grandezza dell'energia termica sarà comparabile con la differenza di energia tra due livelli consecutivi: infatti in questa condizione si avrà la maggiore probabilità di eccitazione per effetti termici.

3.2.4 Funzione di correlazione e lunghezza di correlazione

L'introduzione di una lunghezza di correlazione $\xi(T, H)$, oltre a fornire un ulteriore strumento per studiare la presenza di transizioni di fase, risulta molto utile per avere una descrizione qualitativa del comportamento microscopico del modello di Ising.

Intuitivamente $\xi(T, H)$ rappresenta la dimensione del più grande raggruppamento di spin allineati a una data temperatura T e campo magnetico esterno H . Per $T < T_c$ può anche esser interpretata come la scala delle massime fluttuazioni delle dimensioni dei raggruppamenti rispetto agli stati con gli spin completamente allineati.

Per $T > T_c$ può esser invece interpretata come la scala delle massime deviazioni delle dimensioni dei raggruppamenti dalla configurazione con gli spin orientati in modo completamente casuale.

Matematicamente viene definita tramite la *funzione di correlazione spin-spin*:

$$g(r_i, r_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (3.31)$$

che descrive la correlazione *delle fluttuazioni* degli spin s_i, s_j attorno ai loro valori medi $\langle s_i \rangle, \langle s_j \rangle$.

Il modello di Ising è invariante per traslazioni, quindi il valore medio di uno spin non può dipendere dalla posizione, il che implica $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = m$. E' anche invariante rispetto a operazioni di rotazione, per cui la funzione di correlazione dipenderà solo dalla distanza tra gli spin $r = |r_i - r_j|$. Per semplicità, se si considera il campo magnetico esterno nullo, si ottiene:

$$g(r_i, r_j) = g(r) = \langle s_i s_{i+r} \rangle - m^2(T, 0) \quad (3.32)$$

Nel modello di Ising unidimensionale per temperature non nulle vale $m = 0$ (3.25), per cui la funzione $g(r)$ si riduce a:

$$g(r) = \langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s\}} s_i s_{i+r} e^{-\beta H_N(H=0)} \quad (3.33)$$

dove $H_N(H=0) = - \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1}$

Si procederà adesso verso un calcolo esplicito della funzione di correlazione. Si noti innanzitutto che, supponendo $r = 1$, vale:

$$\frac{\partial}{\partial J_k} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1} \right] = \beta s_k s_{k+1} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1} \right]$$

allora, ricordando $s_k^2 = 1$ e riscrivendo la (3.15) come $Z = \prod_{i=1}^N 2 \cosh(y_i)$:

$$\begin{aligned}
g(r) &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s\}} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1} \right] s_k s_{k+r} \\
&= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s\}} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1} \right] s_k s_{k+1} s_{k+1} s_{k+2} \dots s_{k+r-1} s_{k+r} \\
&= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s\}} \frac{1}{\beta^r} \frac{\partial}{\partial J_k} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \dots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1} \right] \\
&= \frac{1}{Z_N \beta^r} \frac{\partial}{\partial J_k} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \dots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} \prod_{i=1}^N 2 \cosh(y_i) \\
&= \frac{(2 \cosh(y))^{N-r} (2\beta \sinh(y))^r}{(2 \cosh(y))^N \beta^r} \\
&= \tanh^r(y)
\end{aligned} \tag{3.34}$$

dove prima le derivate parziali sono state portate fuori dalla sommatoria e in seguito è stato assunto $J_i = J$. Si giunge quindi a una espressione per la funzione di correlazione che mostra un andamento esponenziale:

$$g(r) = \tanh^r(y) = \exp [r \ln(\tanh y)] = e^{-r/\xi} \tag{3.35}$$

dove la lunghezza di correlazione è definita come:

$$g(r) = e^{-r/\xi} \rightarrow \xi(J) = -\frac{1}{\ln(\tanh(y))} = \frac{1}{\ln(\lambda_+/\lambda_-)} \tag{3.36}$$

Studiando il comportamento asintotico di ξ si trova immediatamente che:

$$\xi(T, 0) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{per } T \rightarrow \infty \\ 1/2 e^{2y} & \text{per } T \rightarrow 0^+ \end{cases} \tag{3.37}$$

Poichè ξ diverge nei punti di transizione, ancora una volta si rileva come il modello di Ising non possiede punti di transizione per temperature finite e che $T_c = 0$ è considerabile come un punto critico del sistema. E' interessante osservare che, sebbene le funzioni termodinamiche siano determinate solo dall'autovalore maggiore, la funzione e la lunghezza di correlazione dipendono da entrambi gli autovalori.

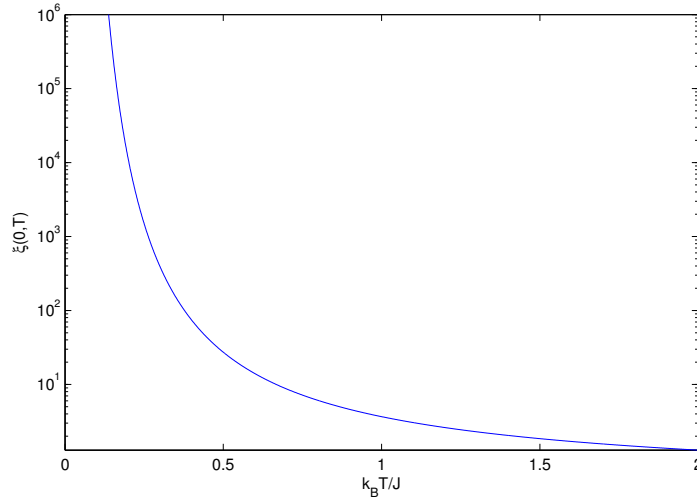


Figura 3.6: Lunghezza di correlazione in assenza di campo magnetico esterno in funzione del rapporto $k_B T/J$.

3.2.5 Spiegazione intuitiva della transizione di fase tramite la lunghezza di correlazione

La transizione di fase può essere spiegata qualitativamente in termini di raggruppamenti di spin correlati. Per temperature "alte", ossia $T \gg T_c$, il contributo energetico dovuto all'eccitazione termica risulta dominante rispetto all'interazione di scambio (che tenderebbe ad orientare parallelamente gli spin) e i singoli spin hanno direzione completamente casuale. L'interazione tra spin diventa quindi trascurabile e le fluttuazioni (rispetto al valore medio) di due spin adiacenti risultano indipendenti: si avrà così una bassa (per $T \rightarrow \infty$ nulla) correlazione tra gli spin e $\xi \rightarrow 0$.

Abbassando la temperatura, l'interazione di scambio acquista rilevanza nei confronti del rumore termico e si iniziano a formare gruppi di spin correlati sempre più ampi. Tuttavia, finché la lunghezza di correlazione è finita, non può esistere magnetizzazione netta in un sistema infinito, perché, per $H = 0$, i raggruppamenti di spin correlati avranno dimensione finita e uguale probabilità di puntare in una delle due direzioni. Sebbene sia presente una magnetizzazione "locale", globalmente il sistema presenterà una magnetizzazione nulla. Infatti, dal punto di vista del singolo spin, una magnetizzazione per unità di spin nulla indica che la somma delle intensità di tutte le interazioni con i siti adiacenti è, mediamente, pari a zero. Questo risultato non è in contraddizione con la presenza di raggruppamenti (di dimensione microscopica): se gli spin appartenenti o nelle vicinanze di un raggruppamento avvertiranno una interazione media non nulla, in assenza di una direzione preferenziale la media su tutto il reticolo rimarrà comunque nulla.

In definitiva la magnetizzazione spontanea può presentarsi solo attraverso un effetto "globale", da intendersi come la comparsa di insiemi *macroscopici* di spin correlati, fenomeno che corrisponde alla divergenza della lunghezza di correlazione nelle vicinanze della temperatura critica.

In generale (il fenomeno non è osservabile nel modello unidimensionale) per $T \ll T_c$, quasi tutti gli spin sono allineati e in questo caso la lunghezza di correlazione rappresenta la scala delle deviazioni dallo stato in cui gli spin sono totalmente allineati.

All'aumentare della temperatura, il rumore termico aumenta di intensità e ξ cresce, fino a divergere per $T \rightarrow T_c$. E' pertanto presente una magnetizzazione netta non nulla finché la lunghezza di correlazione rimane finita.

3.2.6 Legame tra la lunghezza di correlazione e la suscettibilità magnetica

Si è visto dall'equazione (3.28) come la suscettibilità per spin sia legata alla varianza della magnetizzazione totale. Ricordando allora che la magnetizzazione totale (e quindi la magnetizzazione per unità di spin) è definita come *media sull'ensemble*, la suscettibilità fornisce un'indicazione riguardo l'ampiezza delle fluttuazioni tra il valore medio su *tutti microstati* appartenenti all'ensemble e il valore "effettivo" delle diverse configurazioni dell'ensemble: ossia quanto il valore della magnetizzazione nelle diverse configurazioni dell'ensemble si discosta da M .

E' possibile quindi, dal punto di vista intuitivo, capire l'andamento della varianza della magnetizzazione per spin considerando le possibili fluttuazioni di una media *su un microstato "per spin"*, rispetto al valore medio *sull'ensemble* m .

Ad alte temperature (per $T \gg T_c$) la lunghezza di correlazione tenderà a zero e la probabilità relativa al formarsi di raggruppamenti microscopici di dimensione rilevante si manterrà su valori tipicamente bassi, quindi la media "per spin" tenderà a zero, e le fluttuazioni tenderanno a ridursi. Queste considerazioni suggeriscono una spiegazione qualitativa del perché χ tende a zero come $1/(k_B T)$ (3.27).

All'avvicinarsi della temperatura critica si assiste alla formazione di raggruppamenti, come mostra la lunghezza di correlazione; in questo caso le fluttuazioni, come anticipato sopra, divergeranno.

E' anche possibile trovare una relazione quantitativa tra la suscettibilità magnetica e la lunghezza di correlazione. Partendo dalla (3.28):

$$\chi = \frac{\beta}{N} [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] = \frac{\beta}{N} \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \frac{\beta}{N} \left\langle \left[\sum_j (s_j - m) \right]^2 \right\rangle \quad (3.38)$$

dove è stata utilizzata $M = \sum_j s_j$, $m = \langle M \rangle$ e nell'ultimo passaggio sono state applicate le condizioni periodiche. In tal caso, ricordando la definizione per la funzione di correlazione (3.31):

$$= \frac{\beta}{N} \left\langle \sum_j (s_j - m) \sum_k (s_k - m) \right\rangle = \frac{\beta}{N} \sum_{jk} \langle (s_j - m)(s_k - m) \rangle = \frac{\beta}{N} \sum_{jk} g(r_j, r_k) \quad (3.39)$$

introducendo le coordinate relative $r_i = ia$ (con a passo reticolare) e ricordando che il modello di Ising è invariante per traslazioni:

$$= \frac{\beta}{N} \sum_{jk} g(r_j - r_k) = \beta \sum_i g(r_i) \quad (3.40)$$

considerando N grande:

$$= \frac{\beta}{a} \sum_{jk} g(r_i) a \approx \frac{\beta}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|r|/\xi} dr = \frac{2\beta}{a} \int_0^{+\infty} e^{-r/\xi} dr = 2\beta \frac{\xi}{a} \quad (3.41)$$

da cui si trova il risultato:

$$\frac{\xi}{a} = \frac{\chi}{2\beta} \quad (3.42)$$

dove la lunghezza di correlazione è "misurata" in termini di passi reticolari a .

Capitolo 4

Modello di Ising bidimensionale

4.1 La relazione di dualità di Kramers-Wannier per reticoli quadrati

4.1.1 Introduzione

Tre anni prima che Onsager calcolasse la soluzione analitica esatta, H.A. Kramers e G.H. Wannier riuscirono a determinare in modo esatto la temperatura critica a cui avviene la transizione di fase per il modello di Ising bidimensionale in assenza di campo magnetico esterno. Il primo passo del procedimento da loro ideato consiste in una espansione in serie, prima per alte e poi per basse temperature, della funzione di partizione. Le espressioni così ottenute si possono interpretare geometricamente come un problema di conteggio dei poligoni che possono essere disegnati su un reticolo: questo consentirà infine di tracciare una relazione tra le due espansioni in serie.

Si consideri un reticolo quadrato L formato da N siti, dove in ogni sito è presente una variabile che può assumere solo i valori ± 1 . Si consideri il reticolo infinito ($N \rightarrow \infty$), ossia si assuma valido il limite termodinamico. In assenza di campi esterni la funzione di partizione può essere scritta come:

$$Z_N = \sum_{\{s\}} \exp \left[\beta J \sum_{(i,j)} s_i s_j \right] \quad (4.1)$$

dove la serie più interna è calcolata considerando tutte le coppie di spin adiacenti, mentre la serie più esterna prende in considerazione tutte le configurazioni (microstati) possibili nell'ensemble, ossia $\sum_{\{s\}} = \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1}$.

4.1.2 Espansione per alte temperature

Attraverso la relazione:

$$e^{Js_i s_j} = \cosh(x) (1 + s_i s_j \tanh(x)) \quad (4.2)$$

si può riscrivere la funzione di partizione come:

$$Z_N = \sum_{\{s\}} \prod_{(i,j)} e^{\beta J s_i s_j} = \cosh^{M_l}(\beta J) \sum_{\{s\}} \prod_{(i,j)} (1 + s_i s_j \tanh(\beta J)) \quad (4.3)$$

M_l è il numero totale di coppie adiacenti nel reticolo, pari a (ignorando gli elementi sul bordo) $qN/2$, dove q è il numero di coordinazione. Si noti come per $T \rightarrow \infty$ valga $\tanh(\beta J) \rightarrow 0$: risulta quindi giustificata una espansione in serie della funzione di partizione per alte temperature.

E' possibile ottenere una ulteriore espressione per la funzione di partizione sviluppando la produttoria:

$$Z_N = \cosh^{M_l}(\beta J) \sum_{\{s\}} \left[1 + u \sum_{(i,j)} (s_i s_j) + u^2 \sum_{(i,j)} \sum_{(k,l)} (s_i s_j)(s_k s_l) + \dots \right] \quad (4.4)$$

dove si è posto $\tanh(\beta J) = u$. Le sommatorie sono calcolate in modo da non sommare la stessa coppia più volte.

E' possibile a questo punto rappresentare ogni termine associato al generico coefficiente u^n come una linea poligonale disegnata sul reticolo formata precisamente da n *segmenti*, uno per ogni coppia di spin *adiacenti* ($s_i s_j$), come mostrato in figura 4.1.

Se in uno dei termini della sommatoria (4.4) uno degli spin s_i compare un numero dispari di volte, quel termine scompare e non contribuisce alla sommatoria stessa, in quanto $\sum_{s_i=\pm 1} s_i = 0$. Graficamente, uno spin con tali proprietà rappresenta un nodo coinvolto in un numero dispari di segmenti: sono quindi presenti nella sommatoria solo i termini associati ai poligoni dove ogni nodo compare in un numero pari di segmenti, ma solo le linee spezzate *chiuse* soddisfano questa proprietà. Ecco allora che questo ragionamento ha portato a un risultato importante: solo i poligoni chiusi (che non condividono i propri lati con altri poligoni) contribuiscono alla funzione di partizione. Per esempio, nella figura 4.1 nell'immagine di destra entrambi i poligoni sono associati a valori che partecipano alla sommatoria, mentre nella figura di sinistra ne è associato solo uno.

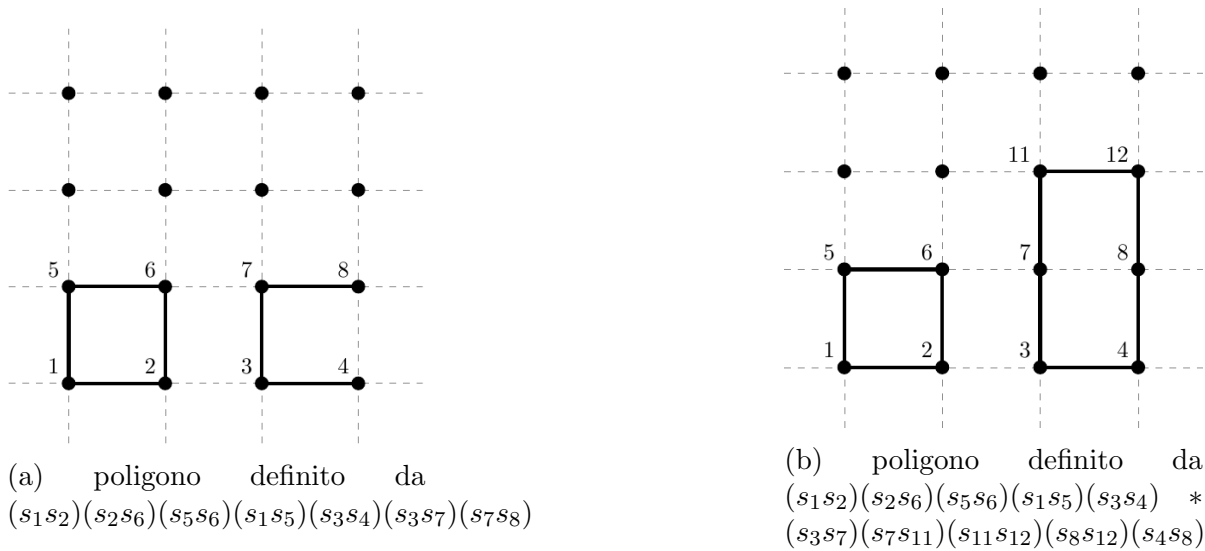


Figura 4.1: Esempi di poligoni associati ai termini della funzione di partizione.

Ogni poligono con n lati contribuisce alla sommatoria con termine $2^N u^n$; utilizzando questa formula è possibile ottenere la formulazione finale della funzione di partizione:

$$Z_N = 2^N \cosh^{M_l}(\beta J) \left(1 + \sum_n \Omega_n \tanh^n(\beta J) \right) \quad (4.5)$$

dove Ω_n rappresenta il numero di figure distinte composte esclusivamente di poligoni con n legami disegnabili sul reticolo.

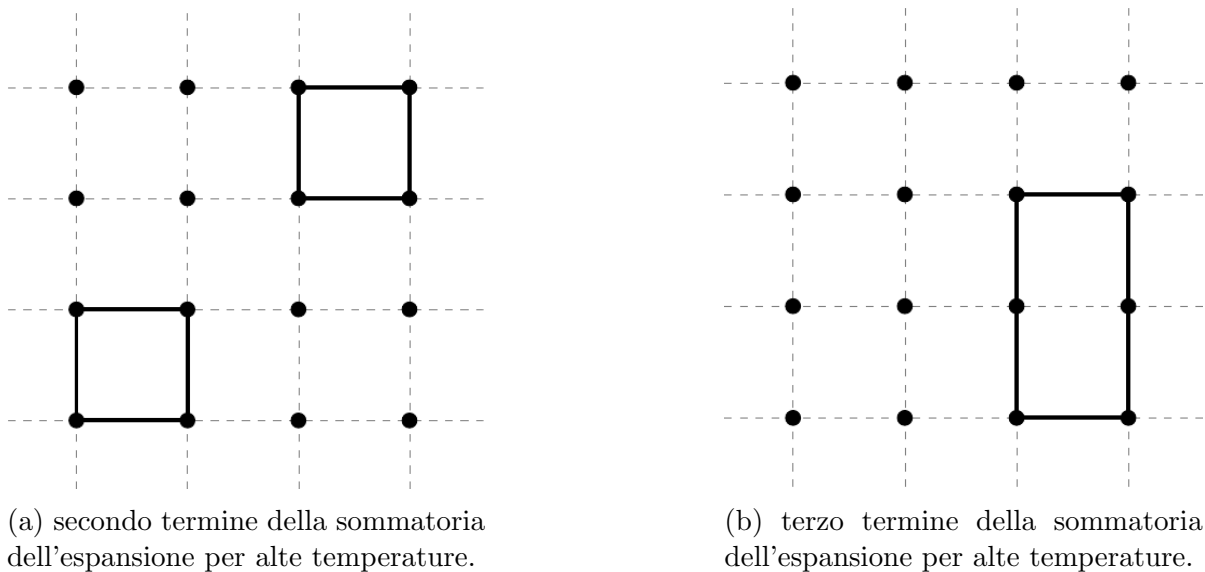


Figura 4.2: Rappresentazioni grafiche dei primi termini dell'espansione per alte temperature.

4.1.3 Espansione per basse temperature

La funzione di partizione può anche esser scritta in un altro modo. Sia r il numero di coppie con orientamento reciproco antiparallelo; se M_l è il numero di coppie adiacenti totali, allora il numero di coppie con orientamento parallelo sarà $M_l - r$. In tal caso varrà:

$$\sum_{(i,j)} s_i s_j = (M_l - r) - r = M_l - 2r$$

da cui è possibile esprimere la (4.1) come:

$$Z_N = 2e^{M_L \beta J} \left[1 + \sum_r \omega_r e^{-2\beta J r} \right] \quad (4.6)$$

dove ω_r è il numero di configurazioni con r coppie di spin antiparalleli e il coefficiente 2 è dovuto alle configurazioni in cui tutti gli spin sono invertiti. L'espressione è valida per qualunque valore di temperatura, ma per $T \rightarrow 0$ $e^{-2\beta J r}$ diventa "piccolo": per questo viene considerata come una espansione per basse temperature.

Si introdurrà adesso il concetto di *reticolo duale* L_D . Dato un generico reticolo, il suo duale è ottenuto posizionando i nodi al centro delle celle del reticolo originario e collegando tra loro i nodi relativi ai lati comuni di due celle adiacenti. Per reticoli finiti, L e L_D differiscono solo al contorno, ma nel limite termodinamico questa differenza scompare. Si ottiene così che il duale di un reticolo triangolare è un reticolo esagonale e viceversa, mentre il duale di un reticolo quadrato è un altro reticolo quadrato (ottenuto tramite una semplice traslazione).

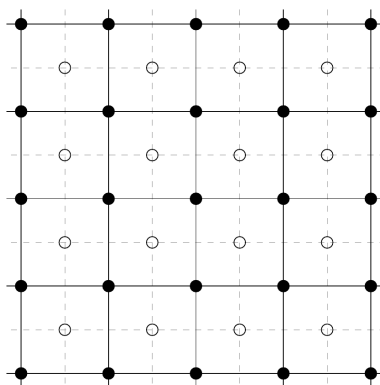


Figura 4.3: Reticolo quadrato duale

Si procede quindi andando a costruire una corrispondenza tra le coppie di spin *del reticolo duale* e *i poligoni chiusi in L* . Innanzitutto si osservi come sia possibile considerare gli spin come posizionati equivalentemente nei nodi di un reticolo o al centro delle celle del suo duale. Si definisce quindi la regola con cui tracciare i poligoni nel reticolo: se due spin adiacenti sono antiparalleli si disegna una linea lungo il segmento tra essi, se i due spin sono paralleli non si disegna nessuna linea. Si formano così dei poligoni che identificano i perimetri dei differenti *domini magnetici* (ove per dominio si intende un raggruppamento di spin allineati).

Si pongano gli spin *nei nodi del reticolo duale*, con direzione tale che i poligoni definiti nell'espansione per alte temperature sul reticolo L rappresentino adesso i *perimetri* dei domini magnetici. In questo modo, le coppie di spin antiparalleli nel reticolo duale intersecano i segmenti dei poligoni nel reticolo originario. Per un reticolo quadrato, un poligono costituito da n segmenti in L corrisponde a una configurazione con n coppie di spin antiparalleli in L_D . Vale quindi:

$$\omega_r = \Omega_r \quad (4.7)$$

da cui è possibile riscrivere la (4.6) come:

$$Z_N^* = 2e^{M_L\beta J} \left[1 + \sum_r \Omega_r e^{-2\beta J r} \right] \quad (4.8)$$

ove l'asterisco indica che è definita sul reticolo duale.

4.1.4 La relazione di dualità tra le due espansioni e la temperatura critica

Riassumendo, nell'espansione per alte temperature si è ottenuta una interpretazione della funzione di partizione (4.5) come somma di elementi ognuno legato a un particolare poligono su L . Nell'espansione per basse temperature i termini della funzione di partizione (4.6), che inizialmente erano descritti attraverso il numero di coppie di spin antiparalleli in L_D , a seguito dell'introduzione del reticolo duale possono esser associati a poligoni in L , in modo del tutto analogo a quello fatto nell'espansione per alte temperature. L'analogia non si conclude qui: le due Z_N , (4.5) e (4.8), hanno la stessa struttura:

$$\phi(x) = \sum_n \Omega_n x^n \rightarrow \begin{cases} \text{alte T: } Z_N(K) = 2^N \cosh^{M_l}(K) (1 + \phi(\tanh(K))) \\ \text{basse T: } Z_N^*(K^*) = 2e^{M_l K^*} (1 + \phi(e^{-2K^*})) \end{cases}$$

dove $K = \beta J$ è relativa all'espansione per alte temperature e $K^* = \beta^* J$ è relativa all'espansione per basse temperature.

E' quindi possibile passare (a meno di una costante moltiplicativa) da una espressione all'altra attraverso il cambio di variabili:

$$e^{-2K^*} = \tanh(K) \quad (4.9)$$

Valgono quindi la seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} e^{-2K} &= \tanh(K^*) \\ \sinh(2K) \sinh(2K^*) &= 1 \\ \tanh(2K^*) \cosh(2K) &= \tanh(2K) \cosh(2K^*) = 1 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Partendo da $\phi(\tanh(K)) = \phi(e^{-2K^*})$ si ottiene la *relazione di dualità per la funzione di partizione*:

$$\frac{Z_N^*(T^*)}{e^{M_l K^*}} = \frac{Z_N(T)}{2^{N-1} \cosh^{M_l}(K)} \quad (4.11)$$

Rimane ora solamente la determinazione del punto critico. Studiando la (4.9) si rileva come T e T^* seguano una proporzionalità inversa. Assumendo che il punto critico esista e che sia unico, in tal punto la non analiticità dell'energia libera implica una divergenza della funzione di partizione; se ciò accade per un valore $T = T_C$, lo stesso deve accadere per $T^* = T_C^*$. La chiave per il calcolo della temperatura critica consiste nel riconoscere che il reticolo quadrato coincide con il proprio duale (a meno di una traslazione che qui risulta ininfluenza): questo implica che Z_N è uguale a Z_N^* . Quindi l'equazione che definisce il punto critico sarà $T_c = T_c^*$ (o equivalentemente $K_c = K_c^*$), che può esser scritta come:

$$\sinh(2K_c) = 1 \quad (4.12)$$

la cui soluzione, ricordando $K = \beta J$ e $\sinh^{-1}(1) = \ln(1 + \sqrt{2})$ è:

$$K_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \quad \leftrightarrow \quad T_c = 2.26922J$$

4.2 Formulazione di Kaufman della soluzione esatta di Onsager

4.2.1 Introduzione

La prima soluzione *esatta* del modello a due dimensioni è dovuta a Onsager. Egli, nell'articolo "*Crystal statistics. A two-dimensional model with an order disorder transition*",¹ pubblicato nel 1944, riprende l'approccio utilizzato da Kramers e Wannier,² che lega il calcolo della funzione di partizione alla ricerca dell'autovalore maggiore della matrice di trasferimento. Per determinarlo dimostra che la matrice di trasferimento è decomponibile nel prodotto diretto di matrici bidimensionali, da cui è possibile definire un sistema di n equazioni. Questa soluzione è notoriamente considerata molto complessa; lo stesso Onsager insieme a Kaufman³ nel 1949 svilupparono un metodo che, pur mantenendo intatte le idee fondamentali dell'originale, ne semplificava il procedimento. Su quest'ultimo si baserà il metodo qui illustrato.

4.2.2 Impostazione del problema

In analogia con il caso unidimensionale, si formulerà il problema del calcolo della funzione di partizione come un problema di calcolo degli autovalori della matrice di trasferimento. Si consideri un reticolo quadrato con n colonne e n righe (e quindi $N = n^2$ nodi totali). Sia r_α l'insieme degli spin posizionati nella riga di indice α :

$$r_\alpha \equiv \{s_{1\alpha}, s_{2\alpha}, \dots, s_{n\alpha}\}$$

E' possibile descrivere l'intero reticolo specificando l'insieme $\{r_1, r_2, \dots, r_n\}$. Ancora una volta si pongono condizioni al contorno periodiche (sia per le colonne che per le righe), che porteranno il reticolo ad aver la topologia di un toro:

$$r_{n+1} = r_1 \tag{4.13}$$

¹Phys. Rev. 65, 117.

²A. Kramers e H. Wannier, Phys. Rev. 60, 252-263 (1941)

³B. Kaufman, Phys.Rev 76, 8 (1949)

L'hamiltoniana è composta da due termini: una prima sommatoria che considera l'interazione tra tutte le coppie di spin *adiacenti* sul reticolo e una seconda che considera l'accoppiamento con un campo magnetico esterno:

$$H = -J \sum_{i,j} (s_{i,j} s_{i+1,j} + s_{i,j} s_{i,j+1}) - H \sum_{i,j} s_{i,j} \quad (4.14)$$

che, utilizzando la notazione appena introdotta, può esser riscritta come:

$$H = \sum_{\alpha=1}^n [E(r_\alpha r_{\alpha+1}) + E(r_\alpha)] \quad (4.15)$$

$$E(r_k, r_l) = -J \sum_{i=1}^n s_{i,k} s_{i,l} \quad E(r_k) = -J \sum_{i=1}^n s_{i,k} s_{i+1,k} - H \sum_{i=1}^n s_{i,k}$$

osservando che la funzione di partizione può esser riscritta come:

$$Z_1 = \sum_{r_1} \dots \sum_{r_n} \prod_{\alpha=1}^n \exp[-\beta (E(r_\alpha, r_{\alpha+1}) + E(r_\alpha))] \quad (4.16)$$

In analogia con il caso unidimensionale è possibile quindi introdurre la matrice di trasferimento $2^n \times 2^n \hat{P}$ i cui elementi sono definiti come:

$$\langle r | \hat{P} | r' \rangle = \exp[-\beta (E(r, r') + E(r))] \quad (4.17)$$

da cui:

$$Z_N = \sum_{r_1} \dots \sum_{r_n} \langle r_1 | \hat{P} | r_2 \rangle \langle r_2 | \hat{P} | r_3 \rangle \dots \langle r_n | \hat{P} | r_1 \rangle \quad (4.18)$$

$$= \sum_{r_1} \langle r_1 | \hat{P}^n | r_1 \rangle = Tr \left(\hat{P}^n \right)$$

Poiché la traccia della matrice \hat{P} è indipendente dalla rappresentazione (e quindi invariante per cambi di base), è possibile calcolarla scegliendo una base per la quale la matrice sia diagonale. In tal caso \hat{P}^n è diagonale e la funzione di partizione si riduce alla somma dei suoi autovalori:

$$Z_N = \sum_{\alpha=1}^{2^n} (\lambda_\alpha)^n \quad (4.19)$$

Osservando la forma della (4.17) è possibile supporre, poiché $E(r, r'), E(r)$ sono dell'ordine di n , che gli autovalori di \hat{P} siano dell'ordine di e^n per n grandi. Naturalmente questa congettura dovrà essere verificata una volta eseguito il calcolo esplicito.

Tuttavia, se così fosse, ci si potrebbe aspettare che per l'autovalore più grande valga la relazione:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log (\lambda_{max}) < \infty \quad (4.20)$$

se questo risultasse vero e se tutti gli autovalori fossero finiti varrebbe inoltre:

$$\begin{aligned} (\lambda_{max})^n \leq Z_N \leq 2^n (\lambda_{max})^n \rightarrow \\ \frac{1}{n} \log \lambda_{max} \leq \frac{1}{n^2} \log Z_N \leq \frac{1}{n} \log \lambda_{max} + \frac{1}{n} \log 2 \end{aligned}$$

da cui:

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \log Z_N = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log (\lambda_{max}) \quad (4.21)$$

con $N = n^2$. Questo risultato, che avrà un ruolo importante più avanti, afferma che per la determinazione della funzione di partizione è richiesta solo la conoscenza dell'autovalore maggiore.

4.2.3 Nozioni preliminari: il prodotto diretto di matrici

Prima di affrontare lo studio della matrice di trasferimento è necessario introdurre alcuni strumenti di carattere matematico utili per la trattazione successiva. In questo capitolo si definirà il prodotto diretto tra matrici.

Siano \hat{A}, \hat{B} due matrici di dimensione $m \times m$, i cui elementi saranno indicati come $\langle i|\hat{A}|j\rangle, \langle k|\hat{B}|l\rangle$. Si definisce il prodotto diretto $\hat{A} \times \hat{B}$ tra \hat{A} e \hat{B} come la matrice $m^2 \times m^2$ i cui elementi sono definiti come:

$$\langle ik|\hat{A} \times \hat{B}|jl\rangle = \langle i|\hat{A}|j\rangle \langle k|\hat{B}|l\rangle \quad (4.22)$$

oppure, riscrivendo la definizione in forma più esplicita, come la matrice definita a blocchi:

$$\hat{A} \times \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\hat{B} & \dots & a_{1m}\hat{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}\hat{B} & \dots & a_{mm}\hat{B} \end{pmatrix}$$

La definizione può esser immediatamente estesa al prodotto di più matrici $m \times m$:

$$\langle ii' \dots i''|\hat{A} \times \hat{A}' \times \dots \times \hat{A}''|jj' \dots j''\rangle = \langle i|\hat{A}|j\rangle \langle i'|\hat{A}'|j'\rangle \dots \langle i''|\hat{A}''|j''\rangle \quad (4.23)$$

Sia $\hat{A}\hat{B}$ l'usuale prodotto tra matrici, vale allora la proprietà:

$$\begin{aligned} (\hat{A} \times \hat{B}) (\hat{C} \times \hat{D}) &= (\hat{A}\hat{C}) \times (\hat{B}\hat{D}) \\ (\hat{A} \times \hat{B} \times \dots \times \hat{C}) (\hat{D} \times \hat{E} \times \dots \times \hat{F}) &= (\hat{A}\hat{D}) \times (\hat{B}\hat{E}) \times \dots \times (\hat{C}\hat{F}) \end{aligned} \quad (4.24)$$

4.2.4 Nozioni preliminari: le matrici di spin

In questo capitolo si procederà a una generalizzazione delle matrici di Pauli, che verranno utilizzate successivamente per ridefinire la matrice di trasferimento. Le tre matrici di Pauli sono definite come:

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

e soddisfano le proprietà:

$$\begin{aligned} \hat{X}^2 &= 1 & \hat{Y}^2 &= 1 & \hat{Z}^2 &= 1 \\ \hat{X}\hat{Y} &= i\hat{Z} & \hat{Y}\hat{Z} &= i\hat{X} & \hat{Z}\hat{X} &= i\hat{Y} \\ \hat{X}\hat{Y} + \hat{Y}\hat{X} &= 0 & \hat{Y}\hat{Z} + \hat{Z}\hat{Y} &= 0 & \hat{Z}\hat{X} + \hat{X}\hat{Z} &= 0 \end{aligned} \quad (4.26)$$

Si definiscano quindi i tre insiemi delle matrici $2^n \times 2^n$ di Pauli generalizzate $\hat{X}_\alpha, \hat{Y}_\alpha, \hat{Z}_\alpha$ ($\alpha = 1, \dots, n$) come:

$$\begin{aligned} \hat{X}_\alpha &= \hat{1} \times \hat{1} \times \dots \times \hat{X} \times \dots \times \hat{1} & (\text{n fattori}) \\ \hat{Y}_\alpha &= \hat{1} \times \hat{1} \times \dots \times \hat{Y} \times \dots \times \hat{1} & (\text{n fattori}) \\ \hat{Z}_\alpha &= \hat{1} \times \hat{1} \times \dots \times \hat{Z} \times \dots \times \hat{1} & (\text{n fattori}) \end{aligned} \quad (4.27)$$

dove $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ compaiono come α -esimo fattore nella catena di prodotti diretti. Per $\alpha \neq \beta$ vale:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \hat{X}_\alpha & \hat{X}_\beta \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \hat{Y}_\alpha & \hat{Y}_\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{Z}_\alpha & \hat{Z}_\beta \end{bmatrix} = 0 \\ \begin{bmatrix} \hat{X}_\alpha & \hat{Y}_\beta \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \hat{Y}_\alpha & \hat{Z}_\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{X}_\alpha & \hat{Z}_\beta \end{bmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (4.28)$$

Infine, si ricorda che per qualunque matrice \hat{X} il cui quadrato è uguale alla matrice identità (condizione soddisfatta da ogni matrice $\hat{X}_\alpha, \hat{Y}_\alpha, \hat{Z}_\alpha$) vale la relazione:

$$e^{\theta\hat{X}} = \cosh(\theta) + \hat{X} \sinh(\theta) \quad (4.29)$$

4.2.5 Nozioni preliminari: rotazioni e loro rappresentanti spinoriali

Per prima cosa si definirà una classe generale di matrici tramite alcune proprietà formali. In seguito si costruirà, attraverso le matrici di Pauli generalizzate elaborate nel capitolo precedente, una possibile realizzazione di tale classe, che verrà in seguito utilizzata per lo studio della matrice di trasferimento. Infine si legheranno le matrici $2^n \times 2^n$ così ottenute alle rotazioni in uno spazio $2n$ -dimensionale e si introdurranno alcuni teoremi sui loro autovalori.

Si consideri un insieme di $2n$ matrici generiche che obbediscono alla seguente relazione di anticommutazione:

$$\hat{\Gamma}_u \hat{\Gamma}_v + \hat{\Gamma}_v \hat{\Gamma}_u = 2\delta_{uv} \quad (u, v = 1, \dots, 2n) \quad (4.30)$$

In tal caso l'insieme $\{\hat{\Gamma}_u\}$ possiede le seguenti proprietà:⁴

1. la dimensione di $\hat{\Gamma}_u$ non può essere minore di $2^n \times 2^n$.
2. siano $\{\hat{\Gamma}_u\}$ $\{\hat{\Gamma}'_u\}$ due diversi insiemi di matrici, entrambi soddisfacenti (4.30); in tal caso esiste una matrice \hat{S} non singolare tale che $\hat{\Gamma}'_u = \hat{S}\hat{\Gamma}_u\hat{S}^{-1}$. Il viceversa è altresì valido.
3. l'insieme (contenente 2^{2n} elementi) della matrice identità, delle matrici $\hat{\Gamma}_u$ (scelte di dimensione $2^n \times 2^n$) e di tutti i prodotti indipendenti tra le matrici dell'insieme $\{\hat{\Gamma}_u\}$ (ossia $\hat{\Gamma}_u\hat{\Gamma}_v, \hat{\Gamma}_u\hat{\Gamma}_v\hat{\Gamma}_l, \dots$) forma un sistema di generatori per l'algebra delle matrici $2^n \times 2^n$. In altre parole, qualunque matrice di dimensione $2^n \times 2^n$ può essere espressa come combinazione lineare degli elementi dell'insieme.

Una possibile rappresentazione di $\{\hat{\Gamma}_u\}$ formata da matrici $2^n \times 2^n$ è data dalle matrici di spin generalizzate:

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_1 &= \hat{Z}_1 & \hat{\Gamma}_2 &= \hat{Y}_1 \\ \hat{\Gamma}_3 &= \hat{X}_1\hat{Z}_2 & \hat{\Gamma}_4 &= \hat{X}_1\hat{Y}_2 \\ \hat{\Gamma}_5 &= \hat{X}_1\hat{X}_2\hat{Z}_3 & \hat{\Gamma}_6 &= \hat{X}_1\hat{X}_2\hat{Y}_3 \\ &\vdots & &\vdots \\ \hat{\Gamma}_{2\alpha-1} &= \hat{X}_1\hat{X}_2\dots\hat{X}_{\alpha-1}\hat{Z}_\alpha & (\alpha = 1, \dots, n) \\ \hat{\Gamma}_{2\alpha} &= \hat{X}_1\hat{X}_2\dots\hat{X}_{\alpha-1}\hat{Y}_\alpha & (\alpha = 1, \dots, n) \end{aligned} \quad (4.31)$$

⁴Uno studio generale delle proprietà di un insieme soddisfacente la relazione (4.30) è stato compiuto da R. Brauer e H. Weyl, Am. J. Math 57, 425 (1935).

Altre rappresentazioni valide sono ottenibili scambiando i ruoli di $\hat{X}_\alpha, \hat{Z}_\alpha$ oppure tramite una permutazione degli indici di $\hat{\Gamma}_1 \dots \hat{\Gamma}_{2n}$.

Si immagini un insieme $\{\hat{\Gamma}_u\}$, soddisfacente la (4.30), come un *vettore in uno spazio 2n-dimensionale*: in tal caso ogni matrice $2^n \times 2^n$ $\hat{\Gamma}_u$ sarà la u -esima componente di tale vettore.

Si introduca quindi la matrice $\hat{\omega}$ di dimensione $2n \times 2n$ descrivente una trasformazione ortogonale (pensabile come una *rotazione nello spazio 2n-dimensionale*):

$$\hat{\Gamma}'_u = \sum_{v=1}^{2n} \omega_{uv} \hat{\Gamma}_v \quad (4.32)$$

esplicitamente:

$$\begin{bmatrix} \hat{\Gamma}'_1 \\ \hat{\Gamma}'_2 \\ \vdots \\ \hat{\Gamma}'_{2n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \dots & \omega_{1,2n} \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \dots & \omega_{2,2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ \omega_{2n,1} & \omega_{2n,2} & \dots & \omega_{2n,2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\Gamma}_1 \\ \hat{\Gamma}_2 \\ \vdots \\ \hat{\Gamma}_{2n} \end{bmatrix}$$

dove ω_{uv} sono numeri complessi che soddisfano la condizione:

$$\sum_{v=1}^{2n} \omega_{uv} \omega_{ul} = \delta_{vl} \quad \text{ossia} \quad \hat{\omega}^T \hat{\omega} = 1 \quad (4.33)$$

Si noti che grazie a questa proprietà anche $\{\hat{\Gamma}'_u\}$ soddisfa la condizione (4.30). In tal caso, richiamando la seconda proprietà delle matrici $\hat{\Gamma}_u$, è possibile affermare che esiste una matrice $2^n \times 2^n$ \hat{S} non singolare tale che:

$$\hat{\Gamma}'_u = \hat{S}(\hat{\omega}) \hat{\Gamma}_u \hat{S}(\hat{\omega})^{-1} \quad (4.34)$$

ma ricordando come è stata introdotta $\hat{\omega}$ vale che:

$$\sum_{v=1}^{2n} \omega_{uv} \hat{\Gamma}_v = \hat{S}(\hat{\omega}) \hat{\Gamma}_u \hat{S}(\hat{\omega})^{-1} \quad \Rightarrow \quad \hat{\omega} \leftrightarrow \hat{S}(\hat{\omega}) \quad (4.35)$$

Questo risultato, che si dimostrerà fondamentale nei capitoli successivi, afferma che le matrici $2^n \times 2^n$ $\hat{S}(\hat{\omega})$ possono esser viste come *rappresentazioni* delle rotazioni nello spazio 2n-dimensionale. Questa corrispondenza non è ancora stata scritta in modo esplicito (ciò verrà fatto successivamente solamente per il caso delle rotazioni piane); si noti anche come, essendo derivata solo dalle proprietà di $\hat{\Gamma}_u$, è indipendente dalla realizzazione di

$\hat{\Gamma}_u$ (quindi non dipende dalla rappresentazione elaborata precedentemente tramite le matrici generalizzate di spin). Si definisce quindi $\hat{S}(\hat{\omega})$ come il *rappresentante spinoriale* della rotazione $\hat{\omega}$.

Poiché il prodotto di matrici ortogonali è una matrice ortogonale, risulta chiaro come se $\hat{\omega}_1, \hat{\omega}_2$ sono rotazioni allora $\hat{\omega}_1\hat{\omega}_2$ è ancora una rotazione. Inoltre:

$$\hat{S}(\hat{\omega}_1, \hat{\omega}_2) = \hat{S}(\hat{\omega}_1)\hat{S}(\hat{\omega}_2) \quad (4.36)$$

Nella risoluzione del modello bidimensionale verrà utilizzata una particolare classe di rotazioni, che si procede quindi a studiare.

Si consideri una rotazione *piana* di angolo θ (dove θ è un numero complesso), che avviene su un piano bidimensionale (sottospazio di quello $2n$ -dimensionale) descritto attraverso gli indici uv , definita attraverso la trasformazione:

$$\begin{cases} \hat{\Gamma}'_l = \hat{\Gamma}_l & (l \neq v, l \neq u) \\ \hat{\Gamma}'_u = \hat{\Gamma}_u \cos \theta - \hat{\Gamma}_v \sin \theta & (u \neq v) \\ \hat{\Gamma}'_v = \hat{\Gamma}_u \sin \theta + \hat{\Gamma}_v \cos \theta & (u \neq v) \end{cases} \quad (4.37)$$

La matrice di rotazione, chiamata $\hat{\omega}(uv|\theta)$, è definita come la matrice:

$$\hat{\omega}(uv|\theta) = \begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ \dots & \cos \theta & \dots & \sin \theta & \dots \\ & \vdots & & \vdots & \\ \dots & -\sin \theta & \dots & \cos \theta & \dots \\ & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

dove gli elementi di matrice non mostrati sono 1 lungo la diagonale e 0 altrove. Si verifica che:

$$\begin{aligned} \hat{\omega}(uv|\theta) &= \hat{\omega}(vu|-\theta) \\ \hat{\omega}^T(uv|\theta)\hat{\omega}(uv|\theta) &= 1 \end{aligned} \quad (4.39)$$

Infine si definiscono tre lemmi, che descrivono tutte le proprietà di $\hat{\omega}$ e $\hat{S}(\hat{\omega})$ rilevanti per la soluzione del modello di Ising bidimensionale, di cui non si forniscono le dimostrazioni.⁵

⁵Per le dimostrazioni si guardi K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley and Sons, 1963.

Lemma 1. *sia $\hat{\omega}(uv|\theta)$ una rotazione piana nello spazio bidimensionale uv di angolo θ . In questo caso la corrispondenza $\hat{\omega} \leftrightarrow \hat{S}(\hat{\omega})$ tra matrici di rotazione e i loro rappresentanti spinoriali permette di trovare una espressione esplicita per il rappresentante spinoriale:*

$$\hat{S}_{uv}(\theta) = e^{-1/2\theta\hat{\Gamma}_u\hat{\Gamma}_v} \quad (4.40)$$

Vale inoltre:

$$\hat{S}_{uv}^{-1}(\theta) = e^{1/2\theta\hat{\Gamma}_u\hat{\Gamma}_v} \quad (4.41)$$

da cui, utilizzando l'espressione per $\hat{\Gamma}'_u$ definita nella (4.34), è possibile ritrovare la definizione di rotazione piana:

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}'_l &= \hat{S}_{uv}(\theta)\hat{\Gamma}_l\hat{S}_{uv}^{-1}(\theta) = \hat{\Gamma}_l \quad (l \neq v, l \neq u) \\ \hat{\Gamma}'_u &= \hat{S}_{uv}(\theta)\hat{\Gamma}_u\hat{S}_{uv}^{-1}(\theta) = \hat{\Gamma}_u \cos \theta + \hat{\Gamma}_v \sin \theta \\ \hat{\Gamma}'_v &= \hat{S}_{uv}(\theta)\hat{\Gamma}_v\hat{S}_{uv}^{-1}(\theta) = \hat{\Gamma}_u \sin \theta - \hat{\Gamma}_v \cos \theta \end{aligned} \quad (4.42)$$

Lemma 2. *gli autovalori di $\hat{\omega}(uv|\theta)$ sono 1 ($(2n - 2)$ volte degeneri) e $e^{\pm i\theta}$ (non degeneri). Gli autovalori di $\hat{S}_{uv}(\theta)$ sono $e^{\pm i\theta/2}$ (ognuno 2^{n-1} volte degeneri).*

Infine l'ultimo lemma estende i due precedenti al caso in cui $\hat{\omega}$ sia definita come prodotto di rotazioni:

Lemma 3. *sia $\hat{\omega}$ un prodotto di n rotazioni piane che commutano tra loro:*

$$\hat{\omega} = \hat{\omega}(ab|\theta_1)\hat{\omega}(cd|\theta_2)\dots\hat{\omega}(uv|\theta_n)$$

ove $\{a, b, \dots, u, v\}$ è una permutazione dell'insieme di interi $\{1, 2, \dots, 2n - 1, 2n\}$ e $\theta_1, \dots, \theta_n$ sono numeri complessi. In tal caso l'espressione esplicita per il rappresentante spinoriale risulta:

$$\hat{S}(\theta) = e^{-1/2\theta_1\hat{\Gamma}_a\hat{\Gamma}_b}e^{-1/2\theta_2\hat{\Gamma}_c\hat{\Gamma}_d}\dots e^{-1/2\theta_n\hat{\Gamma}_u\hat{\Gamma}_v} \quad (4.43)$$

Per quanto riguarda gli autovalori:

- $\hat{\omega}$ possiede $2n$ autovalori:

$$e^{\pm i\theta_1}, e^{\pm i\theta_2}, \dots, e^{\pm i\theta_n} \quad (4.44)$$

- $\hat{S}(\hat{\omega})$ possiede 2^n autovalori:

$$e^{1/2i(\pm\theta_1 \pm \theta_2 \pm \dots \pm \theta_n)} \quad (4.45)$$

dove i segni dei diversi \pm sono scelti in modo indipendente.

L'importanza di quest'ultimo lemma risiede nella possibilità di ottenere gli autovalori di $\hat{S}(\hat{\omega})$ tramite lo studio degli autovalori di $\hat{\omega}$.

Si procede adesso al calcolo vero e proprio della funzione di partizione.

4.2.6 Risoluzione del modello di Ising bidimensionale

Per comodità si suddivide la dimostrazione in due parti. Nella prima parte si cercherà di esprimere la matrice di trasferimento come prodotto di rappresentanti spinoriali di rotazioni. Nella seconda parte si diagonalizzerà la matrice così ottenuta, utilizzando nel calcolo degli autovalori i teoremi appena introdotti.

Espressione della matrice di trasferimento come rappresentante spinoriale di rotazione

Nel capitolo 4.2.2 si era ottenuta, con un metodo analogo a quello utilizzato per il modello unidimensionale, una espressione (4.17) per la matrice di trasferimento, che viene qui riportata per comodità:

$$\langle r | \hat{P} | r' \rangle = \exp [-\beta (E(r, r') + E(r))]$$

esplicitando le sommatorie contenute all'interno di $E(r, r')$, $E(r)$ si ottiene, per l'elemento di matrice di \hat{P} , la scrittura:

$$\langle s_1, \dots, s_n | \hat{P} | s'_1, \dots, s'_n \rangle = \prod_{i=1}^n e^{\beta H s_i} e^{\beta J s_i s_{i+1}} e^{\beta J s_i s'_i} \quad (4.46)$$

E' possibile scomporre \hat{P} definendo tre matrici $2^n \times 2^n$ $\hat{V}'_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3$:

$$\begin{aligned} \langle s_1, \dots, s_n | \hat{V}'_1 | s'_1, \dots, s'_n \rangle &= \prod_{i=1}^n e^{\beta J s_i s'_i} \\ \langle s_1, \dots, s_n | \hat{V}_2 | s'_1, \dots, s'_n \rangle &= \delta_{s_1, s'_1} \dots \delta_{s_n, s'_n} \prod_{i=1}^n e^{\beta J s_i s_{i+1}} \\ \langle s_1, \dots, s_n | \hat{V}_3 | s'_1, \dots, s'_n \rangle &= \delta_{s_1, s'_1} \dots \delta_{s_n, s'_n} \prod_{i=1}^n e^{\beta H s_i} \end{aligned} \quad (4.47)$$

per cui vale $\hat{P} = \hat{V}_3 \hat{V}_2 \hat{V}_1'$, ossia:

$$\begin{aligned} \langle s_1, \dots, s_n | \hat{P} | s'_1, \dots, s'_n \rangle &= \sum_{s''_1, \dots, s''_n} \sum_{s'''_1, \dots, s'''_n} \langle s_1, \dots, s_n | \hat{V}_3 | s''_1, \dots, s''_n \rangle \cdot \\ &\langle s''_1, \dots, s''_n | \hat{V}_2 | s'''_1, \dots, s'''_n \rangle \langle s'''_1, \dots, s'''_n | \hat{V}_1' | s'_1, \dots, s'_n \rangle \end{aligned} \quad (4.48)$$

Si cerca quindi di riformulare le tre matrici $\hat{V}_1', \hat{V}_2, \hat{V}_3$ appena costruite attraverso le matrici di spin generalizzate introdotte nel 4.2.4. Si parte da \hat{V}_1' , definendo una matrice 2×2 \hat{a} come:

$$\langle s | \hat{a} | s' \rangle = e^{\beta J s s'} \quad (4.49)$$

Dal confronto dell'espressione per \hat{V}_1' presente nella (4.47) con la (4.23) risulta chiaro come V_1' sia uguale al *prodotto diretto* di n copie di \hat{a} :

$$\hat{V}_1' = \hat{a} \times \hat{a} \times \dots \times \hat{a} \quad (4.50)$$

dove la matrice \hat{a} è definita come (utilizzando la matrice di Pauli \hat{X}):

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} = e^{\beta J} + e^{-\beta J} \hat{X} \quad (4.51)$$

Definendo una nuova variabile θ come $\tanh \theta = e^{-2\beta J}$ e utilizzando le relazione $\sinh(2\theta) \sinh(2\beta J) = 1$ si trova che:

$$\hat{a} = \sqrt{2 \sinh(2\beta J)} e^{\theta \hat{X}} \quad (4.52)$$

da cui:

$$\hat{V}_1' = [2 \sinh(2\beta J)]^{n/2} e^{\theta \hat{X}} \times e^{\theta \hat{X}} \times \dots \times e^{\theta \hat{X}} \quad (4.53)$$

Poiché vale l'identità ($\hat{X}_1, \hat{X}_2, \dots, \hat{X}_n$ sono le matrici generalizzate di Pauli):

$$e^{\theta \hat{X}} \times e^{\theta \hat{X}} \times \dots \times e^{\theta \hat{X}} = e^{\theta \hat{X}_1} e^{\theta \hat{X}_2} \dots e^{\theta \hat{X}_n}$$

è possibile esprimere \hat{V}'_1 come un prodotto (in senso usuale) di esponenziali di matrici. Attraverso un procedimento analogo è possibile esprimere le tre matrici $\hat{V}'_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3$ attraverso le matrici generalizzate di Pauli:

$$\begin{aligned} \hat{V}'_1 &= [2 \sinh(2\beta J)]^{n/2} \hat{V}_1 & \hat{V}_1 &= \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta \hat{X}_\alpha} \\ \hat{V}_2 &= \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta J \hat{Z}_\alpha \hat{Z}_{\alpha+1}} & \hat{V}_3 &= \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta H \hat{Z}_\alpha} \\ \hat{P} &= [2 \sinh(2\beta J)]^{n/2} \hat{V}_3 \hat{V}_2 \hat{V}_1 \end{aligned} \quad (4.54)$$

In assenza di un campo magnetico esterno ($H = 0$) $\hat{V}_3 = \hat{1}$, e l'equazione (4.21) prende la forma:

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \log Z_N(0, T) = 1/2 \log [2 \sinh(2\beta J)] + \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log (\Lambda) \quad (4.55)$$

dove Λ è l'autovalore maggiore di $\hat{V} = \hat{V}_1 \hat{V}_2$. Il problema di diagonalizzare \hat{P} è stato quindi ricondotto al *problema di diagonalizzare* \hat{V} . Si procederà cercando di esprimere \hat{V} attraverso i rappresentanti spinoriali. Utilizzando la rappresentazione introdotta in (4.2.5), si può osservare che:

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_{2\alpha} \hat{\Gamma}_{2\alpha-1} &= \hat{Y}_\alpha \hat{Z}_\alpha = i \hat{X}_\alpha & (\alpha = 1, \dots, n) \\ \hat{\Gamma}_{2\alpha+1} \hat{\Gamma}_{2\alpha} &= \hat{X}_\alpha \hat{Z}_{\alpha+1} \hat{Y}_\alpha = i \hat{Z}_\alpha \hat{Z}_{\alpha+1} & (\alpha = 1, \dots, n-1) \\ \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n} &= \hat{Z}_1 \left(\hat{X}_1 \dots \hat{X}_{n-1} \right) \hat{Y}_n = -i \hat{Z}_1 \hat{Z}_n \left(\hat{X}_1 \dots \hat{X}_n \right) \end{aligned} \quad (4.56)$$

da cui si trova che:

$$\begin{aligned} \hat{V}_1 &= \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta \hat{X}_\alpha} = \prod_{\alpha=1}^n e^{-i\theta \hat{\Gamma}_{2\alpha} \hat{\Gamma}_{2\alpha-1}} \\ \hat{V}_2 &= e^{\beta J \hat{Z}_n \hat{Z}_1} \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{\beta J \hat{Z}_\alpha \hat{Z}_{\alpha+1}} \right] = e^{i\beta J \hat{U} \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n}} \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-i\beta J \hat{\Gamma}_{2\alpha+1} \hat{\Gamma}_{2\alpha}} \right] \end{aligned} \quad (4.57)$$

ove \hat{U} è definito come $\hat{U} = \hat{X}_1 \hat{X}_2 \dots \hat{X}_n$ e in \hat{V}_2 si è portato $e^{\beta J \hat{Z}_n \hat{Z}_1}$ a sinistra della produttorina, passaggio legittimo in quanto l'esponenziale commuta con la produttorina tra parentesi.

Si esaminino i due termini: \hat{V}_1 possiede già la forma propria di una rappresentazione spinoriale di un prodotto di rotazioni piane (lemma 3) , mentre \hat{V}_2 risulta leggermente diverso a causa dell'esponenziale fuori dalla parentesi, che è dovuto alle condizioni al contorno periodiche imposte sul reticolo. Per questo motivo questa scrittura non è ancora soddisfacente.

Si introducano alcune proprietà di \hat{U} :

- $\hat{U}^2 = 1$, $\hat{U}(\hat{1} \pm \hat{U}) = \pm(\hat{1} \pm \hat{U})$
- $\hat{U} = i^n \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_2 \dots \hat{\Gamma}_n$
- \hat{U} commuta con un numero pari di $\hat{\Gamma}_u$ e anticommute con un numero dispari di $\hat{\Gamma}_u$ (è una conseguenza del punto precedente e della (4.30)).
- \hat{U} può esser scritto come $\hat{U} = \hat{X}_1 \hat{X}_2 \dots \hat{X}_n = \hat{X} \times \hat{X} \times \dots \times \hat{X}$ (n volte). Infatti basta espandere ogni \hat{X}_α tramite la definizione (4.27) e ricordare la proprietà (4.24):

$$\begin{aligned} \hat{X}_1 \hat{X}_2 \dots \hat{X}_n &= (\hat{X} \times \hat{1} \times \dots \times \hat{1}) (\hat{1} \times \hat{X} \times \dots \times \hat{1}) \dots (\hat{1} \times \dots \times \hat{X}) \\ &= (\hat{X} \hat{1}^{n-1}) \times (\hat{1} \hat{X} \hat{1}^{n-2}) \times \dots \times (\hat{1}^{n-1} \hat{X}) \end{aligned}$$

Attraverso queste proprietà è possibile mostrare che (si ponga $y = \beta J$):

$$\begin{aligned} e^{iy \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n} \hat{U}} &= \left[\frac{1}{2}(\hat{1} + \hat{U}) + \frac{1}{2}(\hat{1} - \hat{U}) \right] \left[\cosh(y) + i \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n} \hat{U} \sinh(y) \right] \\ &= \frac{1}{2}(\hat{1} + \hat{U}) \left[\cosh(y) + i \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n} \sinh(y) \right] + \\ &\quad \frac{1}{2}(\hat{1} - \hat{U}) \left[\cosh(y) - i \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n} \sinh(y) \right] \\ &= \frac{1}{2}(\hat{1} + \hat{U}) e^{iy \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n}} + \frac{1}{2}(\hat{1} - \hat{U}) e^{-iy \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n}} \end{aligned} \tag{4.58}$$

In questo modo risulta finalmente possibile esprimere \hat{V} attraverso due matrici \hat{V}^\pm che sono appunto due rappresentanti spinoriali di rotazioni:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2}(\hat{1} + \hat{U}) \hat{V}^+ + \frac{1}{2}(\hat{1} - \hat{U}) \hat{V}^- \\ \hat{V}^\pm &= e^{\pm iy \hat{\Gamma}_1 \hat{\Gamma}_{2n}} \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-iy \hat{\Gamma}_{2\alpha+1} \hat{\Gamma}_{2\alpha}} \right] \left[\prod_{\lambda=1}^n e^{-i\theta \hat{\Gamma}_{2\lambda} \hat{\Gamma}_{2\lambda-1}} \right] \end{aligned} \tag{4.59}$$

Diagonalizzazione di \hat{V}

L'equazione (4.55) permette di ricondurre la diagonalizzazione di \hat{P} alla diagonalizzazione di \hat{V} . Tuttavia, nonostante lo sforzo compiuto per semplificare l'espressione della matrice di trasferimento, l'equazione (4.59) che definisce \hat{V} è ancora troppo complessa per permettere un calcolo agevole degli autovalori. Si andrà quindi a dimostrare come per diagonalizzare \hat{V} sia sufficiente diagonalizzare *separatamente e indipendentemente* \hat{V}^\pm .

Si osservi come le tre matrici \hat{U} , \hat{V}^\pm commutino tra loro e quindi possano essere diagonalizzate simultaneamente. Per prima cosa, tuttavia, si troverà una trasformazione ortogonale \hat{R} per cui \tilde{U} risulti diagonale, ma dove \tilde{V}^\pm e quindi \tilde{V} non risultino necessariamente diagonali.

$$\begin{aligned}\tilde{U} &= \hat{R}\hat{U}\hat{R}^{-1} \quad \text{diagonale} \\ \hat{R}\hat{V}\hat{R}^{-1} &= \tilde{V} = \frac{1}{2}(\hat{1} + \tilde{U})\tilde{V}^+ + \frac{1}{2}(\hat{1} - \tilde{U})\tilde{V}^- \\ \tilde{V}^\pm &= \hat{R}\hat{V}^\pm\hat{R}^{-1}\end{aligned}\tag{4.60}$$

Gli autovalori di \hat{V} possono esser ottenuti dalla diagonalizzazione di \tilde{V} (in quanto \tilde{V} e \hat{V} posseggono gli stessi autovalori, poiché questi sono invarianti sotto trasformazioni ortogonali).

Poiché $\hat{U}^2 = \hat{1}$, i suoi autovalori possono esser solamente ± 1 . Ricordando la quarta proprietà di \hat{U} descritta nel capitolo precedente, la matrice può esser scritta come $\hat{U} = \hat{X} \times \hat{X} \times \dots \times \hat{X}$ e la forma diagonale come $\hat{Z} \times \hat{Z} \times \dots \times \hat{Z}$, dove gli autovalori ± 1 capitano con uguale frequenza. Altre matrici diagonali si ottengono tramite permutazioni delle posizioni relative degli autovalori lungo la diagonale. Si suppone quindi che \hat{R} sia scelta in modo tale che tutti gli autovalori positivi di \tilde{U} siano in una sottomatrice e tutti gli autovalori negativi nell'altra, ossia:

$$\tilde{U} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}\tag{4.61}$$

dove $\hat{1}$ è la matrice identità di dimensione $2^{n-1} \times 2^{n-1}$.

Poiché \tilde{V}^\pm commuta con \tilde{U} , avrà la forma:

$$\tilde{V}^\pm = \begin{pmatrix} \hat{\mathbb{L}}^\pm & 0 \\ 0 & \hat{\mathbb{R}}^\pm \end{pmatrix}\tag{4.62}$$

dove $\hat{\mathbb{R}}^\pm, \hat{\mathbb{L}}^\pm$ sono due matrici $2^{n-1} \times 2^{n-1}$ *non necessariamente diagonali*.

Risulta inoltre chiaro come le matrici $^{1/2}(\hat{1} \pm \tilde{U})$ ne annullino rispettivamente la sottomatrice superiore e inferiore:

$$\begin{cases} ^{1/2}(\hat{1} + \tilde{U}) \tilde{V}^+ = \begin{pmatrix} \hat{\mathbb{L}}^+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ ^{1/2}(\hat{1} - \tilde{U}) \tilde{V}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{\mathbb{R}}^- \end{pmatrix} \end{cases} \Rightarrow \tilde{V} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbb{L}}^+ & 0 \\ 0 & \hat{\mathbb{R}}^- \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

Dalle formule (4.62) , (4.63) è possibile trarre due importanti risultati: il primo è che per diagonalizzare \tilde{V} è sufficiente diagonalizzare le due matrici $^{1/2}(\hat{1} \pm \tilde{U}) \tilde{V}^\pm$ appena definite *separatamente e indipendentemente*: ognuna di esse possiede soltanto n autovalori diversi da zero e quindi l'*unione* dei due insiemi di autovalori non nulli fornirà gli autovalori di \tilde{V} .

Il secondo risultato è che *per diagonalizzare le due matrici $^{1/2}(\hat{1} \pm \tilde{U}) \tilde{V}^\pm$ è possibile procedere diagonalizzando separatamente \tilde{V}^+ e \tilde{V}^-* . Con questo metodo si otterranno, per ognuna delle due matrici, il doppio degli autovalori non nulli rispetto a quelli necessari, in quanto, prendendo come esempio $^{1/2}(\hat{1} + \tilde{U}) \tilde{V}^+$, oltre agli autovalori relativi alla sottomatrice $\hat{\mathbb{L}}^+$ si ottengono gli autovalori relativi alla sottomatrice $\hat{\mathbb{R}}^+$. Per ricavare l'insieme completo degli autovalori di \tilde{V} bisognerebbe quindi trovare un criterio per scartarne la metà, ma questo passaggio è evitabile in quanto la conoscenza degli autovalori \tilde{V}^\pm è sufficiente per determinare l'autovalore maggiore di \tilde{V} .

Si procede quindi studiando gli autovalori di \tilde{V}^\pm . Per farlo si diagonalizzerà la matrice \hat{V}^\pm , di cui (al contrario di \tilde{V}^\pm) è già nota una espressione esplicita, fornita dalla (4.59) (passaggio legittimo poiché due matrici legate da trasformazioni ortogonali posseggono gli stessi autovalori).

Si ricorda come è stato dimostrato, sempre nella (4.59), che le due matrici sono rappresentanti spinoriali di un prodotto di rotazioni piane: è quindi possibile, per calcolarne i 2^n autovalori, studiare le rotazioni ad esse associate e i loro $2n$ autovalori. Queste rotazioni, chiamate $\hat{\Omega}^\pm$, sono matrici $2n \times 2n$ che possono esser scritte, ricordando la (4.59) e il lemma 3 come:

$$\hat{\Omega}^\pm = \hat{\omega}(1, 2n | \mp 2iy) \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} \hat{\omega}(2\alpha + 1, 2\alpha | - 2iy) \right] \left[\prod_{\lambda=1}^n \hat{\omega}(2\lambda, 2\lambda - 1 | - 2i\theta) \right] \quad (4.64)$$

da cui si ricava⁶ che i $2n$ autovalori λ^\pm sono definiti come:

$$\begin{aligned}\lambda_k^\pm &= e^{\pm\gamma_k} & (k = 0, 1, \dots, 2n-1) \\ \cosh \gamma_k &= \cosh 2y \cosh 2\theta - \cos\left(\frac{\pi k}{n}\right) \sinh 2y \sinh 2\theta\end{aligned}\quad (4.65)$$

dove γ_k sono definite come le soluzioni *positive* dell'equazione. E' possibile inoltre verificare come:

$$\gamma_k = \gamma_{2n-k} \quad 0 < \gamma_0 < \gamma_1 < \dots < \gamma_n$$

Riutilizzando il lemma (3), gli autovalori di \hat{V}^\pm possono esser scritti immediatamente:

$$\begin{aligned}\text{autovalori di } \hat{V}^-: & \quad e^{1/2(\pm\gamma_0 \pm \gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \dots \pm \gamma_{2n-2})} \\ \text{autovalori di } \hat{V}^+: & \quad e^{1/2(\pm\gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \gamma_5 \pm \dots \pm \gamma_{2n-1})}\end{aligned}\quad (4.66)$$

dove la scelta dei segni \pm è indipendente tra i vari addendi. Si noti inoltre che è stata verificata l'ipotesi, fatta inizialmente nel capitolo 4.2.2, che gli autovalori fossero tutti positivi e di ordine e^n : in tal caso, la formula (4.21), che legava nel limite $N \rightarrow \infty$ il logaritmo della funzione di partizione all'autovalore maggiore, risulta pienamente giustificata.

Si trova quindi che l'autovalore maggiore di \hat{V} è pari a:

$$\Lambda = e^{1/2(\gamma_1 + \gamma_3 + \gamma_5 + \dots + \gamma_{2n-1})} \quad (4.67)$$

e quindi:

$$\mathcal{L} = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log(\Lambda) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} (\gamma_1 + \gamma_3 + \gamma_5 + \dots + \gamma_{2n-1}) \quad (4.68)$$

da cui si trova:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \log\left(\frac{2 \cosh^2(2y)}{\sinh(2y)}\right) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \log^{1/2}\left(1 + \sqrt{1 - k^2 \sin^2(\phi)}\right) d\phi \quad (4.69)$$

dove $k = \frac{2}{\cosh(2\phi) \coth(2\phi)}$. Finalmente è possibile scrivere una espressione per l'*energia libera di Helmholtz per unità di spin*, ottenibile sostituendo l'espressione precedente nella (4.55) :

$$f(H=0, T) = \frac{1}{\beta} \left[-\log(2 \cosh(2\beta J)) - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \log^{1/2}\left(1 + \sqrt{1 - k^2 \sin^2(\phi)}\right) d\phi \right] \quad (4.70)$$

⁶Per un calcolo esplicito si guardi K. Huang, *Statistical Mechanics, Wiley and Sons*, 1963.

4.2.7 Funzioni termodinamiche

Tramite l'energia libera di Helmholtz per unità di spin, è possibile calcolare le principali funzioni termodinamiche. L'energia interna per unità di spin risulta:

$$u_I(0, T) = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{k}{2\pi} \frac{dk}{d\beta} \int_0^\pi \frac{\sin^2(\phi)}{\Delta(1 + \Delta)} d\phi \quad (4.71)$$

Con $\Delta = \sqrt{1 - k^2 \sin^2(\phi)}$.

La magnetizzazione spontanea invece può essere scritta come:

$$m(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ [1 - \sinh^{-4}(2\beta J)]^{1/8} & T < T_c \end{cases} \quad (4.72)$$

Si osservi come è presente una discontinuità per $T = T_c$: questo dimostra il risultato già anticipato che il modello di Ising bidimensionale è soggetto a una transizione di fase. Il calore specifico vicino a $T = T_c$ invece è scrivibile come:

$$C(0, T) = \frac{2k_B}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \left[-\log \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \log \left(\frac{k_B T_c}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (4.73)$$

La condizione per la determinazione della temperatura critica è identica a quella ottenuta tramite la relazione di dualità ovvero:

$$2 \tanh^2(2\beta J) = 1 \quad \rightarrow \quad \sinh(2\beta J) = 1 \quad (4.74)$$

Capitolo 5

Conclusioni

Il modello di Ising si propone di studiare come, al variare dei parametri esterni, le interazioni a corto raggio tra gli elementi del reticolo diano luogo a effetti a lungo raggio di natura *collettiva*. Come si è visto, il caso unidimensionale non esibisce nessuna transizione di fase a temperature finite non nulle, al contrario del modello bidimensionale.

Questo modello ha un ruolo preminente nella fisica teorica attuale ed in quanto tale è citato nella maggior parte dei libri di fisica statistica ed è trattato in molti articoli.

Ernst Ising introdusse negli anni venti il modello che porta il suo nome nel tentativo di fornire una spiegazione, tramite la fisica statistica, al comportamento ferromagnetico dei materiali. Tuttavia l'importanza di questo modello non può esser circoscritta solamente a questo aspetto, ma è da ricercarsi anche nel ruolo che storicamente ebbe nello studio delle transizioni di fase. In questo senso, viene usualmente considerato un modello molto semplificato del fenomeno del ferromagnetismo: il parziale sacrificio dal punto di vista del *realismo* del modello permette allo stesso tempo di catturare alcune delle proprietà fondamentali delle transizioni di fase in senso generale. Infatti i risultati di Kramers e Wannier e il procedimento, pubblicato pochi anni dopo, di Onsager, furono tra le prime soluzioni *esatte* di un modello matematico che riuscivano a descrivere compiutamente una transizione di fase. Per dirla con le parole di Kerson Huang:¹

IL modello di Ising è un tentativo grossolano di simulare la struttura di una sostanza ferromagnetica [...] La sua virtù principale consiste nel fatto che il modello di Ising bidimensionale permette un trattamento esatto in meccanica statistica. E' l'unico esempio non banale di una transizione di fase che può esser risolta matematicamente.

¹K. Huang, *Statistical Mechanics, Wiley and Sons*, 1963.

Queste soluzioni divennero poi un punto di riferimento ed un termine di confronto sul quale controllare la validità dei risultati delle soluzioni approssimate (quali ad esempio la teoria di campo medio).

Molto importanti sono anche i procedimenti matematici sviluppati per risoluzione del caso a due dimensioni. Per esempio, gli articoli di Kramers e Wannier del 1941 contengono infatti *"la prima applicazione sistematica ed estesa di metodi matriciali in meccanica statistica"*², mentre il metodo seguito da Onsager è stato in seguito applicato a molti modelli analoghi. La soluzione di Onsager inoltre non solo permette di individuare l'autovalore maggiore (tramite cui è possibile definire l'energia libera e quindi tutte le funzioni termodinamiche), ma consente il calcolo dell'intero insieme degli autovalori, dal quale è possibile determinare la lunghezza di correlazione.

Vale la pena richiamare al riguardo una lettera scritta da Pauli a Casimir immediatamente dopo la Seconda Guerra Mondiale. Nelle precedenti missive Casimir aveva espresso la sua preoccupazione per la propria esclusione dagli sviluppi della fisica teorica nei paesi alleati durante la guerra. La risposta di Pauli fu: *"non è successo molto di importante, tranne la soluzione di Onsager per il modello di Ising bidimensionale."*³

²Dresden(1998).

³Physics Today, Feb. 1977, p 77.

Bibliografia

- [1] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Springer, 1995.
- [2] K. Christensen, N. Moloney, *Complexity and Criticality*, Imperial College Press, 2005.
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley and Sons, 1963.
- [4] M. Niss, *Phenomena, Models, and Understanding, The Lenz-Ising Model and Critical Phenomena 1920-1971*, Spinger, 2005.
- [5] R.Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Academic Press (1989).
- [6] H.Gould, J. Tobochnik, *Statistical and Thermal Physics: With Computer Applications*, Princenton University Press, 2010.