

SCUOLA DI SCIENZE
Corso di Laurea in Fisica

**Il Modello di Ising:
Studio della soluzione generale
per i casi 1D e 2D**

**Relatore:
Prof. Francesco Ravanini**

**Presentata da:
Alessio Belshi**

**Sessione IV
Anno Accademico 2023/2024**

Sommario

In questo elaborato si intende introdurre il modello di Ising come teoria capace di spiegare alcune proprietà dei materiali ferromagnetici, ma non solo. Infatti, lo studio di questo modello in varie dimensioni sviluppa nuovi approcci e metodi di risoluzione che risulteranno poi essenziali in altri problemi di meccanica statistica. Inoltre, nell'ambito della Fisica Teorica, il modello è molto importante perché rappresenta una delle prime schematizzazioni non banali di una transizione di fase avente una risoluzione esatta. Si studia per primo il modello unidimensionale, dal quale si può dedurre l'assenza di una transizione di fase per temperature finite. Successivamente, si affronta il caso bidimensionale, dal quale si può ricavare il valore della temperatura critica sfruttando la relazione di dualità fra le espansioni della funzione di partizione alle alte e basse temperature; si arriva dunque ad una soluzione generale esatta utilizzando l'approccio matriciale proposto da R. J. Baxter.

Indice

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introduzione | 4 |
| 1.1 | La storia del Modello di Ising | 4 |
| 1.2 | Transizioni di fase e parametri d'ordine | 4 |
| 1.3 | Funzione di correlazione ed esponenti critici | 7 |
| 2 | Modello di Ising, caso unidimensionale | 9 |
| 2.1 | Generalità | 9 |
| 2.2 | Assenza di una transizione di fase nel caso unidimensionale | 10 |
| 2.3 | Soluzione generale caso 1D | 11 |
| 2.3.1 | Condizioni al contorno periodiche | 11 |
| 3 | Caso bidimensionale | 18 |
| 3.1 | Esistenza di una transizione di fase | 18 |
| 3.2 | Relazione di dualità e calcolo della temperatura critica T_c | 20 |
| 3.2.1 | Espansione della funzione di partizione: alte T | 20 |
| 3.2.2 | Espansione della funzione di partizione: basse T | 22 |
| 3.2.3 | Auto-Dualità | 23 |
| 3.3 | Soluzione generale: Matrici di trasferimento | 25 |
| 3.3.1 | Star-Triangle identity | 25 |
| 3.3.2 | Implementazione del modello: matrici di trasferimento V, W | 28 |
| 3.3.3 | Commutatività delle matrici di trasferimento | 29 |
| 3.3.4 | Proprietà di inversione e relazioni di simmetria | 32 |
| 3.3.5 | Equazioni funzionali e risoluzione del problema agli autovalori | 34 |
| 3.3.6 | Risultati | 39 |
| 4 | Conclusioni | 41 |

1 Introduzione

1.1 La storia del Modello di Ising

Il modello di Ising nasce come una teoria che tenta di schematizzare alcune importanti proprietà dei materiali ferromagnetici. Probabilmente per la sua semplicità rispetto ad altri tentativi di schematizzazione dei materiali ferromagnetici, lo studio del modello è stato largamente ripreso negli anni a venire. La sua prima pubblicazione fu nel 1925, quando E. Ising, su proposta del suo professore W. Lenz, presentò una tesi per il suo dottorato, in cui discusse la presenza di proprietà ferromagnetiche di un corpo lineare costituito da magneti elementari che interagivano solo con i loro immediati vicini. Da questo articolo si evince che un sistema siffatto non presentava nessuna proprietà ferromagnetica o, equivalentemente, nessuna transizione di fase per i casi unidimensionale e tridimensionale[3]. Il modello giunge ad un significativo sviluppo quando, nel 1936, R. Peierls dimostra la presenza di un punto critico per il caso bidimensionale, rendendolo dunque un importante strumento per indagare la natura delle transizioni di fase. Nel 1941 H.A. Kramers e G.H. Wannier riescono a ricavare il valore esatto della temperatura critica sfruttando la natura duale del modello in due dimensioni. Successivamente, si giunge ad un fondamentale risultato grazie a L. Onsager, il quale pubblica una risoluzione esatta del modello bidimensionale in assenza di un campo magnetico nel 1943. Una formulazione semplificata della soluzione generale è dovuta principalmente ai contributi di B. Kaufman e R.J. Baxter, nella quale si introduce il formalismo delle matrici di trasferimento, un approccio che si rivelerà efficace per molti altri problemi di meccanica statistica.

1.2 Transizioni di fase e parametri d'ordine

Gli atomi di alcuni materiali presentano un momento di dipolo magnetico dovuto allo spin oppure al moto degli elettroni attorno al nucleo. Se due atomi sono sufficientemente vicini, interagiscono tra di loro e influenzano vicendevolmente la direzione del momento magnetico dell'altro atomo. In buona parte dei materiali non esiste una direzione privilegiata del momento magnetico, per cui essi si orientano in maniera casuale e il campo magnetico complessivo generato è nullo. Tuttavia, per una particolare classe di materiali esiste un campo magnetico complessivo non nullo dovuto alle interazioni tra gli atomi. Schematizzati in Fig. 1, questi materiali sono denominati ferromagnetici e presentano tali proprietà al di sotto di una temperatura critica che varia per ogni materiale, la temperatura di Curie T_c .

Quando questi materiali si trovano alla temperatura $T = T_c$, vanno incontro ad una transizione di fase, un processo in cui variano alcune proprietà fisiche del sistema; nel

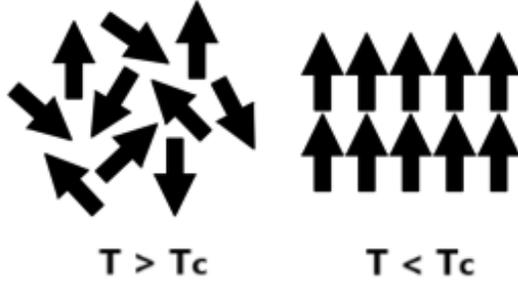


Figura 1: Rappresentazione dei momenti magnetici di un insieme di atomi. A sinistra, i momenti sono disposti casualmente e non è presente un campo magnetico. A destra, i momenti sono allineati e generano un campo magnetico diverso da zero.

caso trattato questo corrisponde ad una magnetizzazione spontanea dovuta all'allineamento dei dipoli. L'esistenza di una transizione di fase dipendente dalla temperatura può essere spiegata tramite la relazione tra due principi contrastanti che influenzano l'equilibrio di un sistema: il principio di minima energia e quello di massima entropia. Si consideri infatti un materiale ferromagnetico schematizzato come un reticolo d -dimensionale di atomi, ciascuno dotato di un momento magnetico (che per semplicità di notazione verrà definito come spin dell' i -esimo atomo \vec{S}_i). L'hamiltoniana del sistema ha un'espressione del tipo:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.2.1)$$

dove $J > 0$ ¹ è la costante di accoppiamento mentre la notazione $\langle ij \rangle$ indica che la sommatoria è fatta sugli spin immediatamente vicini. Come si può comprendere da questa espressione, la configurazione che minimizza l'energia è quella in cui tutti gli spin sono allineati. Tuttavia, se questo fosse l'unico principio che governa l'equilibrio del sistema, avremmo sempre una magnetizzazione spontanea indipendentemente dalla temperatura a cui si trova il sistema. La configurazione del sistema nella quale si ha magnetizzazione spontanea massima è una sola, ovvero quella in cui tutti gli spin sono allineati. Al contrario, il numero di configurazioni che restituiscono un campo magnetico complessivo nullo sono molte di più e coincidono con quelle in cui gli spin si orientano in maniera casuale. Dalla meccanica statistica è nota l'espressione per

¹La costante di accoppiamento è positiva per materiali ferromagnetici. Il caso paramagnetico con $J < 0$ non verrà trattato

l'entropia S dipendente dall'energia del sistema E :

$$S(E) = k_B \ln(\omega(E)), \quad (1.2.2)$$

dove k_B è la costante di Boltzmann e $\omega(E)$ denota il numero di possibili configurazioni con energia E . Si può dunque dedurre dalla (1.2.2) che la configurazione che massimizza l'entropia è quella con spin orientati casualmente. Il criterio che permette di stabilire in quale fase si trovi il sistema è la minimizzazione dell'energia libera di Helmholtz $F = E - TS$: per temperature T sufficiente alte (al di sopra di T_c) il termine dominante è l'entropia che porta gli spin ad orientarsi casualmente; se invece la temperatura è sufficientemente bassa (al di sotto di T_c), allora gli spin sono allineati ed è presente una magnetizzazione spontanea.

È ora importante introdurre il concetto di parametro d'ordine, il quale caratterizza le transizioni di fase. Questi parametri possono essere definiti come delle quantità con una media termica nulla in una fase (solitamente quella alle alte T) e una media non nulla nelle altre fasi, per cui sono degli ottimi indicatori di un'avvenuta transizione di fase. Solitamente è complicato identificare un adeguato parametro d'ordine per ciascuna transizione di fase, ma esiste una stretta relazione tra i parametri d'ordine di un sistema e le simmetrie della sua hamiltoniana. Nell'esempio precedente riguardante il reticolo d -dimensionale di spin, una quantità fisica che ha media termica nulla per $T > T_c$ è la magnetizzazione $\mathcal{M} = \sum_i \vec{S}_i$. Per cui un ragionevole parametro d'ordine potrebbe essere \vec{S}_i dato che si ha:

$$\langle \vec{S}_i \rangle = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c \\ \vec{S}_0 \neq 0 & \text{se } T < T_c. \end{cases} \quad (1.2.3)$$

Rivedendo l'espressione dell'hamiltoniana in (1.2.1) si può notare come sia invariante rispetto a rotazioni globali degli spin. Trattandosi di trasformazioni su vettori a 3 componenti, l'insieme delle rotazioni forma il gruppo $SO(3)$. Come abbiamo visto, per l'intervallo $T > T_c$ non è presente una magnetizzazione spontanea e gli spin non hanno una direzione privilegiata, per cui il sistema rispecchia fedelmente la simmetria della sua hamiltoniana. Contrariamente al caso precedente, se $T < T_c$ gli spin si allineano lungo una precisa direzione definita da \vec{S}_0 e una eventuale rotazione degli spin modifica anche la direzione della magnetizzazione $\vec{\mathcal{M}}$; quando questo avviene, il sistema non rispetta più la simmetria della sua hamiltoniana e il fenomeno prende il nome di *rottura spontanea della simmetria*.

1.3 Funzione di correlazione ed esponenti critici

Un altro parametro rilevante per lo studio delle transizioni di fase è la funzione di correlazione a due punti $G^{(2)}(\vec{i}, \vec{j})$, definita come:

$$G^{(2)}(\vec{i}, \vec{j}) = \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle, \quad (1.3.1)$$

dove il vettore \vec{i} rappresenta la posizione dello spin i -esimo. Supponendo che il sistema sia invariante per traslazione, la funzione dipende esclusivamente dalla distanza tra gli spin $r = |\vec{i} - \vec{j}|$. Tale parametro fornisce una misura di quanto gli spin siano allineati tra di loro in dipendenza della loro distanza reciproca. Siccome per $T < T_c$ gli spin sono prevalentemente lungo la stessa direzione, è utile ridefinire la funzione di correlazione per studiare propriamente le loro fluttuazioni:

$$G_c^{(2)} = \langle (\vec{S}_i - \vec{S}_0) \cdot (\vec{S}_j - \vec{S}_0) \rangle = \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle - |\vec{S}_0|^2, \quad (1.3.2)$$

nota come funzione di correlazione connessa. Notare come per $T > T_c$ il valore medio di uno spin \vec{S}_0 si annulla e si ritorni alla definizione data precedentemente. Spin vicini tendono ad allinearsi e per questo sono correlati. Per dare quantitativamente una definizione di vicinanza si introduce il parametro ξ detto lunghezza di correlazione e indica la dimensione della regione in cui gli spin sono allineati (vedi Fig. 2[4]).

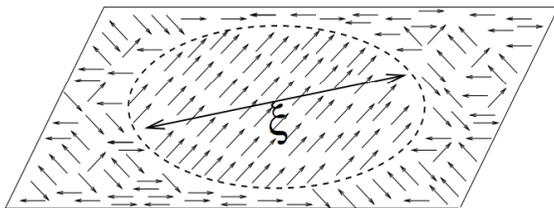


Figura 2: Disegno che schematizza il significato della lunghezza di correlazione ξ . All'interno della regione caratterizzata dalla dimensione lineare ξ gli spin sono tutti allineati.

Una definizione più rigorosa di ξ può essere data valutando l'andamento asintotico della funzione di correlazione:

$$G_c^{(2)} \simeq e^{-r/\xi}, \quad r \gg a, \quad T \neq T_c, \quad (1.3.3)$$

dove a è il passo del reticolo.

Al punto critico $T = T_c$, invece, è presente un notevole cambiamento nell'andamento della funzione di correlazione che segue ora una legge di potenza del tipo:

$$G_c^{(2)} \simeq \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad r \gg a, \quad T = T_c, \quad (1.3.4)$$

dove d è la dimensione del sistema e η è la dimensione anomala del sistema. Quest'ultimo è un parametro caratteristico di ogni sistema quando si trova al punto critico o nelle sue vicinanze e, per questo, fa parte di una importante categoria che prende il nome di esponenti critici. La legge a potenza di $G_c^{(2)}$ mostra come anche a grandi distanze gli spin sono significativamente correlati. Queste considerazioni portano a delle cruciali conseguenze: al punto critico, la lunghezza di correlazione ξ diverge ed è possibile dimostrare che ha un andamento asintotico della forma:

$$\xi(T) = \begin{cases} \xi_+ t^{-\nu}, & T > T_c; \\ \xi_- (-t^{-\nu}), & T < T_c, \end{cases} \quad (1.3.5)$$

dove $t = (T - T_c)/T_c$ è una variabile che misura lo spostamento relativo della temperatura dal valore critico e ν è un esponente critico. Un passo fondamentale sarà quindi spiegare come delle interazioni a corto raggio lontano dal punto critico riescano a generare durante una transizione di fase delle interazioni che coinvolgono tutti gli spin. Un ultimo aspetto da sottolineare riguardante le transizioni di fase è la loro universalità: è sperimentalmente verificato che sistemi di uguale dimensione con stessi gruppi di simmetria dell'hamiltoniana si comportino allo stesso modo durante una transizione di fase. Le differenze riguardanti la natura delle interazioni o i dettagli a livello microscopico di questi sistemi vengono meno al punto critico, per cui è possibile raggrupparli all'interno di una stessa classe universale.

È importante ora riportare altri esempi di esponenti critici in quanto sono degli utili parametri per verificare sperimentalmente la validità di un modello teorico. Si consideri nuovamente un reticolo d -dimensionale di spin, questa volta accoppiati ad un campo esterno \vec{B} , la sua hamiltoniana è:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{B} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (1.3.6)$$

Se si considera \vec{B} lungo l'asse z , l'espressione per la magnetizzazione diventa:

$$\mathcal{M}(B, T) = \langle S_i^z \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{n_i} S_i^z e^{-\beta \mathcal{H}} = -\frac{\partial F}{\partial B}, \quad (1.3.7)$$

la quale coincide con la media termica sulle possibili configurazioni n_i del sistema eseguita tramite la funzione di partizione canonica Z e $\beta = 1/k_B T$. La magnetizzazione spontanea M coincide con l'espressione precedente quando è funzione della sola temperatura T :

$$M(T) = \lim_{B \rightarrow 0} \mathcal{M}(B, T). \quad (1.3.8)$$

In un intorno di T_c , la magnetizzazione spontanea segue la legge:

$$M = M_0(-t)^\beta, \quad (1.3.9)$$

in cui $t = (T - T_c)/T_c$ e β è un esponente critico da non confondere con il parametro associato al peso di Boltzmann $e^{-\beta\mathcal{H}}$. Per studiare la risposta del sistema rispetto ad una variazione del campo magnetico si introduce la suscettività magnetica χ :

$$\chi(B, T) = \frac{\partial \mathcal{M}(B, T)}{\partial B}. \quad (1.3.10)$$

Anche questa grandezza vicino al punto critico segue un andamento a potenza caratterizzato dall'esponente critico γ :

$$\chi(0, T) = \begin{cases} \chi_+ t^{-\gamma}, & T > T_c; \\ \chi_- (-t)^{-\gamma}, & T < T_c. \end{cases} \quad (1.3.11)$$

Un ultimo esponente critico rilevante per la trattazione dei sistemi magnetici è la capacità termica:

$$C(T) = \frac{\partial U}{\partial T}, \quad (1.3.12)$$

dove U è l'energia interna del sistema. Alla temperatura di Curie la capacità termica ha un comportamento singolare parametrizzato dall'esponente critico α :

$$\begin{cases} C_+ t^{-\alpha}, & T > T_+; \\ C_- (-t)^{-\alpha}, & T < T_-; \end{cases} \quad (1.3.13)$$

2 Modello di Ising, caso unidimensionale

2.1 Generalità

Il modello di Ising è uno dei modelli più semplici che presenta una transizione di fase. Infatti, è possibile ricavare una soluzione generale del modello mantenendo comunque un approccio sufficientemente realistico che permetta di verificare sperimentalmente i valori attesi.

Come si vede in Fig. 3, esso consiste di un reticolo regolare d-dimensionale di spin σ_i descritti non più da un vettore ma da uno scalare. Inoltre, gli spin possono assumere solamente i valori ± 1 , stando a indicare che ciascuno di essi presenta solo la configurazione "up" ($\sigma_i = +1$) o "down" ($\sigma_i = -1$).

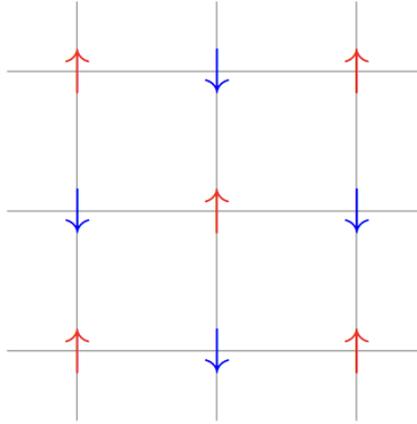


Figura 3: Schematizzazione grafica del modello di Ising con reticolo quadratico bidimensionale. Gli spin up sono colorati in rosso, gli spin down in blu.

In queste condizioni, l'hamiltoniana del sistema in presenza di un campo magnetico esterno diventa:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1. \quad (2.1.1)$$

Vanno fatte alcune precisazioni: la costante di accoppiamento J in generale varia per ciascuna coppia di spin, ma nel prosieguo considereremo il caso omogeneo se non meglio specificato. In aggiunta a questo, si noti che, quando $B = 0$, il sistema è invariante sotto trasformazioni globali appartenenti al gruppo Z_2 , le quali operano su tutti spin in modo che $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$.

La geometria del reticolo è caratterizzata dal numero di coordinazione γ che specifica il numero di spin immediatamente vicini a ciascuno spin. Alcune possibili configurazioni geometriche sono il reticolo quadratico bidimensionale ($\gamma = 4$) presente in Fig. 3, il reticolo cubico semplice tridimensionale ($\gamma = 6$) e il reticolo cubico a corpo centrato tridimensionale ($\gamma = 8$).

2.2 Assenza di una transizione di fase nel caso unidimensionale

Nel modello unidimensionale, in cui il sistema coincide con una catena lineare di N spin con $\gamma = 2$, non è presente una transizione di fase per temperature finite. Per dimostrarlo, si supponga di avere inizialmente tutti gli spin della catena allineati lungo la stessa direzione. Quando si sceglie di invertire tutti gli spin a destra del generico i -esimo spin come in Fig. 4, l'energia interna U e l'entropia S del sistema variano di modo che:

$$\Delta U = 2J, \quad \Delta S = k_B \ln(N - 1), \quad (2.2.1)$$

in cui l'argomento del logaritmo coincide con il numero di possibili modi che si hanno per invertire gli spin a destra di un certo spin.

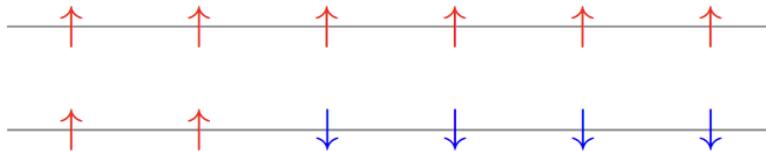


Figura 4: Rappresentazione grafica della catena lineare di spin. Nel primo caso gli spin sono tutti allineati verso l'alto, mentre nel secondo vengono invertiti tutti gli spin a destra del secondo.

Di conseguenza, la variazione di energia libera di Helmholtz F è:

$$\Delta F = \Delta U - k_B T \Delta S = 2J - k_B T \ln(N - 1). \quad (2.2.2)$$

Come si può notare, per $N \rightarrow +\infty$ e $T > 0$, tra le due configurazioni considerate quella che minimizza l'energia libera ha gli spin in parte invertiti; iterando questo procedimento, è chiaro come il sistema nel suo stato di equilibrio sia sempre nella fase disordinata, in cui gli spin sono orientati casualmente.

2.3 Soluzione generale caso 1D

La risoluzione generale del problema può essere affrontata tramite diversi approcci: quello ricorsivo, quello delle matrici di trasferimento e dell'espansione in serie. Tutti i modi portano alla stessa soluzione, tuttavia l'espansione in serie verrà trattata meglio nel caso bidimensionale, mentre in quello unidimensionale ci soffermeremo soltanto sul secondo in quanto, come vedremo, permetterà di riformulare il problema in chiave quantistica. Peraltro, l'uso delle matrici di trasferimento si rivelerà un metodo efficace anche per la risoluzione generale del modello bidimensionale in assenza di un campo magnetico esterno. Il problema verrà solamente analizzato con delle condizioni al contorno periodiche, il caso più generale porta comunque a risultati analoghi.

2.3.1 Condizioni al contorno periodiche

Imponendo le condizioni al contorno periodiche, la catena assume una geometria ad anello ed è determinata dalla condizione

$$\sigma_i \equiv \sigma_{N+i}. \quad (2.3.1)$$

Il metodo delle matrici di trasferimento si basa sul fatto che la funzione di partizione canonica di una catena di N spin

$$Z_N = \sum_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (2.3.2)$$

dove la sommatoria è eseguita sulle possibili configurazioni σ degli spin con energia \mathcal{H} , possa essere riscritta come il prodotto di matrici 2×2 :

$$Z_N = \sum_{\sigma} V(\sigma_1, \sigma_2) V(\sigma_2, \sigma_3) \cdots V(\sigma_N, \sigma_1). \quad (2.3.3)$$

Le matrici $V(\sigma, \sigma')$ prendono il nome di matrici di trasferimento e, affinché sia valida l'identità tra le due diverse espressioni di Z_N , i loro elementi di matrice sono definiti da:

$$V(\sigma, \sigma') = \exp[\mathcal{J}\sigma\sigma' + \frac{1}{2}\mathcal{B}(\sigma + \sigma')], \quad (2.3.4)$$

dove $\mathcal{J} = \beta J$ e $\mathcal{B} = \beta B$. Una espressione esplicita della matrice è

$$\begin{pmatrix} e^{\mathcal{J}+\mathcal{B}} & e^{-\mathcal{J}} \\ e^{-\mathcal{J}} & e^{\mathcal{J}-\mathcal{B}} \end{pmatrix},$$

dalla quale si può immediatamente notare che è hermitiana.

In questa prospettiva, un fondamentale accorgimento per il successivo studio del modello consiste nella possibilità di stabilire una corrispondenza tra lo spazio delle configurazioni di un singolo spin e lo spazio di Hilbert bidimensionale di un sistema quantistico a 2 stati. Infatti, gli stati di spin up e down possono essere visti rispettivamente come i ket $|+1\rangle$ e $|-1\rangle$ con la relazione di completezza

$$\sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle\langle\sigma| = 1; \quad (2.3.5)$$

mentre la matrice di trasferimento $V(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ corrisponde ad un operatore di evoluzione unitario che porta lo stato dello spin i a quello dello spin $i+1$. Più precisamente, l'originaria catena unidimensionale di spin è intesa ora come l'asse temporale associato alla dinamica di un singolo sistema a 2 stati che può evolversi a tempi discreti Δt dettati dal passo del reticolo a :

$$|\sigma_{i+1}\rangle = V(\sigma_i, \sigma_{i+1})|\sigma_i\rangle = e^{a\mathbf{H}}. \quad (2.3.6)$$

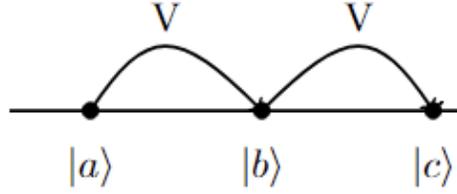


Figura 5: Rappresentazione grafica della catena di spin di Ising che può essere intesa come l'asse temporale su cui si evolve temporalmente il sistema a 2 stati quantistico: l'azione della matrice di trasferimento V porta lo stato $|a\rangle$ in $|b\rangle$ dopo un tempo Δt pari al passo del reticolo a .

Con la notazione \mathbf{H} ci si riferisce all'hamiltoniana quantistica del sistema a 2 stati, da non confondere con l'hamiltoniana classica \mathcal{H} del reticolo di spin.

Tornando al calcolo della funzione di partizione, espandendo la sommatoria e usando la relazione (2.3.5) è possibile riscrivere Z_N in una forma più semplice:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | V | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | V | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_N | V | \sigma_1 \rangle \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | V^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} V^N \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

Per calcolare la traccia di V^N , si sfrutta l'hermiticità di V per portarla in forma diagonale, cosicché esiste una matrice unitaria U tale che:

$$U^{-1} V U = \mathcal{D} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (2.3.8)$$

supponendo che $\lambda_+ \geq \lambda_-$. Imponendo la relazione

$$\cot 2\phi = e^{2\mathcal{J}} \sinh \mathcal{B}, \quad (2.3.9)$$

si ricava una espressione esplicita di U :

$$U = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (2.3.10)$$

Siccome la traccia di un prodotto di matrici non dipende dall'ordine con cui le matrici vengono moltiplicate e sapendo che $U U^{-1} = I$, si ottiene:

$$\text{Tr} V^N = \text{Tr}[U U^{-1} V^N] = \text{Tr}[U^{-1} V^N U] = \mathcal{D}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (2.3.11)$$

Dalla (2.3.8) conoscendo l'espressione esplicita di U è possibile ottenere i valori esatti degli autovalori:

$$\lambda_{\pm 1} = e^{\mathcal{J}} \cosh \mathcal{B} \pm \sqrt{e^{2\mathcal{J}} \cosh^2 \mathcal{B} - 2 \sinh(2\mathcal{J})}. \quad (2.3.12)$$

È possibile ora dedurre l'espressione dell'energia libera per unità di spin:

$$F(\beta, B) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = -\frac{1}{\beta} \left\{ \ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\}. \quad (2.3.13)$$

Eseguendo il limite termodinamico $N \rightarrow \infty$ ed assumendo che $\lambda_+ > \lambda_-$, i termini rilevanti sono controllati da λ_+ e la funzione assume la forma semplificata:

$$F(\beta, B) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[e^{\mathcal{J}} \cosh \mathcal{B} + \sqrt{e^{2\mathcal{J}} \cosh^2 \mathcal{B} - 2 \sinh(2\mathcal{J})} \right]. \quad (2.3.14)$$

Dalla (1.3.7) è possibile ricavare il valore medio della magnetizzazione \mathcal{M} che assume la forma:

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \langle \sigma \rangle = \frac{e^{\mathcal{J}} \sinh \mathcal{B}}{\sqrt{e^{2\mathcal{J}} \cosh^2 \mathcal{B} - 2 \sinh 2\mathcal{J}}}. \quad (2.3.15)$$

Come si può vedere dal grafico in Fig. 6 della magnetizzazione \mathcal{M} in funzione di B , per $B \rightarrow 0$ non è presente alcuna magnetizzazione spontanea, ossia non è presente alcuna transizione di fase per temperature finite, come già affermato in precedenza.

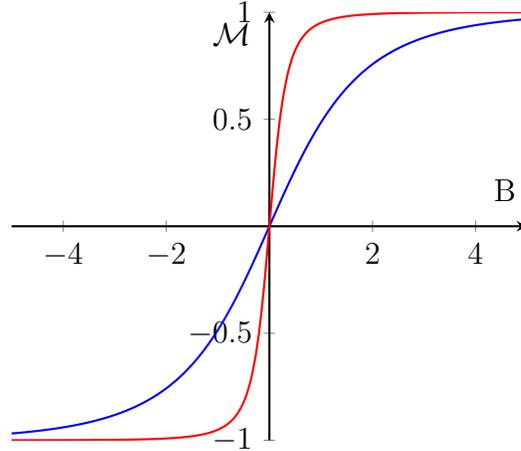


Figura 6: Grafico della magnetizzazione \mathcal{M} in funzione dell'intensità del campo B . Sono riportati due grafici per due diversi valori della temperatura.)

Tuttavia, quando $T \rightarrow 0$ per B finito la magnetizzazione ha un punto di discontinuità che può essere espresso dalla funzione

$$\langle \sigma \rangle = \epsilon(B) = \begin{cases} 1 & \text{se } B > 0, \\ 0 & \text{se } B = 0, \\ -1 & \text{se } B < 0. \end{cases} \quad (2.3.16)$$

Affrontiamo ora il problema di calcolare la funzione di correlazione, la quale può essere espressa con spin scalari nella forma

$$G^{(2)}(\vec{i}, \vec{j}) = \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle. \quad (2.3.17)$$

È conveniente usare le matrici di trasferimento per riscrivere il correlatore $\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle$, dove r indica la distanza tra i due spin, nella forma

$$\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_1 V(\sigma_1, \sigma_2) \cdots \sigma_{r+1} V(\sigma_{r+1}, \sigma_{r+2}) \cdots V(\sigma_N, \sigma_1). \quad (2.3.18)$$

Si introduce la matrice diagonale \mathcal{S} , i cui elementi di matrice possono essere espressi come

$$\mathcal{S}_{\sigma, \sigma'} = \sigma \delta_{\sigma, \sigma'}, \quad (2.3.19)$$

ovvero, in maniera esplicita:

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Tale matrice permette di riesprimere il correlatore come

$$\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\mathcal{S} V^r \mathcal{S} V^{N-r}), \quad (2.3.20)$$

cosicché si ottiene per il valore di aspettazione dello spin σ l'espressione:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\mathcal{S} V^r). \quad (2.3.21)$$

Esprimendo V tramite l'equazione (2.3.8) e sapendo che

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

nel limite termodinamico $N \rightarrow +\infty$ si ottiene:

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

$$\langle \sigma \rangle = \cos 2\phi.$$

Infine, per la funzione di correlazione connessa a due punti $G_c^{(2)}$ si ha

$$G_c^{(2)} = \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = \sin^2 2\phi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r. \quad (2.3.22)$$

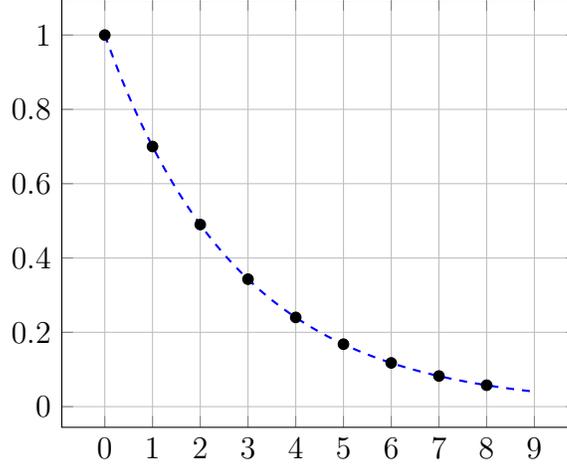


Figura 7: Grafico della funzione di correlazione a due punti per il modello di Ising unidimensionale.

Confrontando questa espressione con la (1.3.3), è possibile ricavare un'espressione per la lunghezza di correlazione ξ :

$$\xi = \frac{1}{\ln \lambda_+ / \lambda_-}, \quad (2.3.23)$$

la quale mette in rilievo il fatto che ξ dipenda dai due autovalori più grandi della matrice di trasferimento V .

Una volta conosciuta l'energia libera, è possibile ricavare tutte le altre espressioni delle grandezze termodinamiche. Verranno riportati solamente i risultati, mentre i calcoli sono riportati in Appendice. La suscettività magnetica, in assenza del campo B , avendo l'espressione

$$\chi(B = 0, T) = \beta e^{2J/k_B T}, \quad (2.3.24)$$

presenta una singolarità per $T \rightarrow 0$. Ricaviamo ora la capacità termica, una grandezza importante per evidenziare alcune importanti proprietà del modello. Partendo dall'espressione della media dell'energia interna U

$$\langle U \rangle = -\frac{\partial}{\partial B} (\ln Z_N(T, B = 0)) = -J(N - 1) \tanh \mathcal{J}, \quad (2.3.25)$$

si ottiene la capacità termica C :

$$C(T, B = 0) = \frac{\partial \langle U \rangle}{\partial T} = k_B(N - 1) \left(\frac{\mathcal{J}}{\cosh \mathcal{J}} \right)^2. \quad (2.3.26)$$

Come emerge chiaramente dal grafico in Fig. 8, la capacità termica associata al modello unidimensionale ha l'andamento caratteristico dei sistemi a due stati, ossia di sistemi descritti da solo 2 stati accessibili con differenza di energia $\Delta\epsilon$. Tale andamento prende il nome di anomalia di Schottky e il risultato è concorde con la stretta analogia del modello con un sistema quantistico a 2 stati.

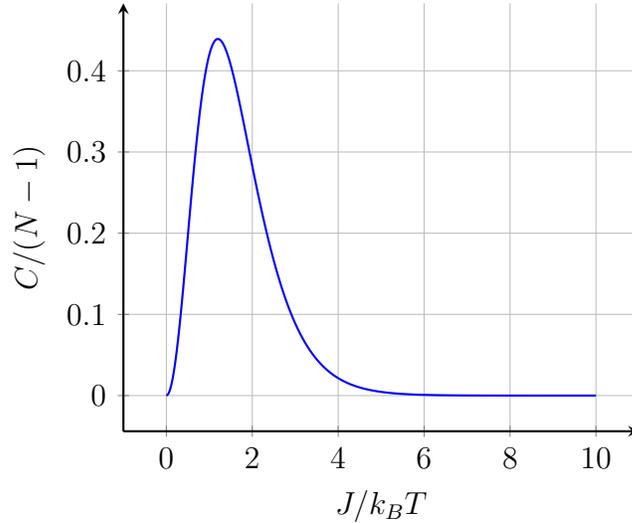


Figura 8: Grafico della capacità termica in funzione della temperatura del reticolo di Ising unidimensionale.

Infine, un'espressione per l'entropia è

$$S(T, B = 0) = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{\beta} \ln Z_N \right] = k_B [N \ln 2 + (N - 1) \ln \cosh \mathcal{J} - (N - 1) \mathcal{J} \tanh \mathcal{J}]. \quad (2.3.27)$$

Osservando l'andamento del grafico in Fig. 9, per $T \rightarrow 0$ si ottiene $S = Nk_B \ln 2$, risultato consistente con il fatto che allo stato fondamentale il sistema presenta solamente due possibili configurazioni: quella in cui tutti gli spin sono su e l'altra in cui sono tutti giù. Allo stesso modo, per $T \rightarrow +\infty$ l'entropia è proporzionale a $\ln(2^N)$, questo perchè gli spin hanno la stessa probabilità di essere su oppure giù in maniera indipendente tra di loro, per cui il sistema accede a tutte le possibili 2^N configurazioni degli spin.

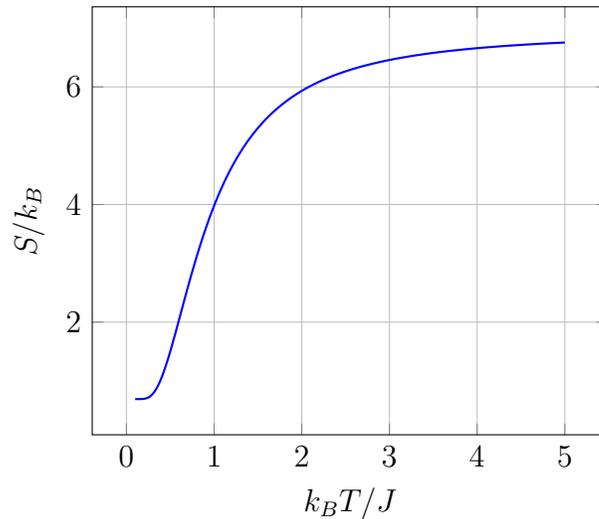


Figura 9: Grafico dell'entropia S/k_B del reticolo di Ising unidimensionale.

3 Caso bidimensionale

In questa sezione si verifica l'esistenza di una transizione di fase per temperature finite usando l'argomento di Peierls. Si mostrano le proprietà di dualità del modello di Ising in due dimensioni e come da esso sia possibile ricavare il valore esatto della temperatura critica. Si spiega il formalismo secondo Baxter delle matrici di trasferimento, ponendo grande attenzione sulla commutatività di quest'ultima. L'approccio di Baxter permette di trovare una soluzione esatta.

3.1 Esistenza di una transizione di fase

Il caso bidimensionale del modello di Ising presenta una ricca trattazione dovuta ad una sostanziale differenza con il caso unidimensionale: l'esistenza di una transizione di fase. Per dimostrarlo, ci si avvale di quello che storicamente prende il nome di argomento di Peierls[5]. Si supponga dunque di avere un reticolo bidimensionale di N spin, ciascun dei quali può essere up (+) oppure down (-). Si definiscono inoltre i parametri n_+ e n_- che corrispondono rispettivamente al numero di spin up e down nel reticolo. Sapendo che per alte temperature il sistema è completamente disordinato, affinché una transizione di fase sia possibile basta dimostrare che ad una temperatura sufficientemente bassa il sistema si trova in uno stato ordinato o parzialmente ordinato, ossia quando n_+ o n_- tende ad avere un valore dominante sull'altro. Questa affermazione si traduce nella condizione che l'espressione

$$\frac{n_+ - n_-}{n_+ + n_-} \tag{3.1.1}$$

tenda ad un valore finito diverso zero per $n_+ \rightarrow +\infty$ e $n_- \rightarrow +\infty$. Tale condizione può essere semplificata e ridotta ad un problema geometrico: si consideri il reticolo quadrato bidimensionale di spin e si traccino delle linee di lunghezza unitaria tra due spin ogni volta che essi abbiano direzioni opposte come in Fig. 10.

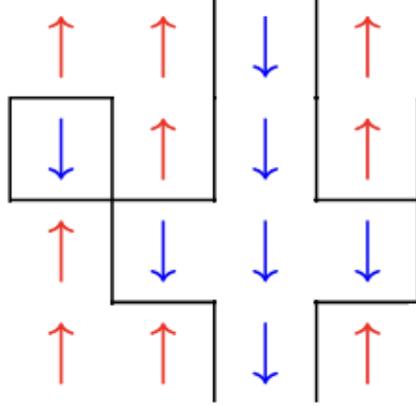


Figura 10: Schema del reticolo di spin bidimensionale in cui gli spin opposti sono separati da una linea. Si intenda geometricamente lo schema come un toroide, ossia, il limite della parte superiore è collegato a quella inferiore e lo stesso per il limite della parte destra con quello a sinistra.

Così facendo, si creano delle linee chiuse che separano gli spin up da quelli down. Pertanto, si può dedurre che il sistema presenta proprietà ferromagnetiche e una transizione di fase solo se, per temperature sufficientemente basse, l'area delle regioni chiuse è solamente una piccola frazione dell'area totale del sistema. Per arrivare a questa conclusione, studiamo la stabilità della magnetizzazione spontanea seguendo un approccio semplificato [4]. Supponiamo dunque che inizialmente tutti gli spin del reticolo siano up e che una eventuale fluttuazione termica crei una regione in cui gli spin sono invertiti. Questo ovviamente modifica il sistema a partire dalla sua energia interna, la cui variazione è

$$\Delta U = 2JL, \quad (3.1.2)$$

dove L è la lunghezza totale di tutte le curve chiuse. Tuttavia, esistono molti modi per formare una curva chiusa di lunghezza L . Per stimare il numero delle possibili configurazioni, si consideri che la linea chiusa sia stata realizzata da un moto casuale nel reticolo con un numero totale di passi pari a L . Assumendo che ad ogni passo si abbiano solo due possibilità, si ottengono 2^L possibili curve chiuse. Di conseguenza, si ha una variazione dell'entropia della forma

$$\Delta S = k_B \ln(2^L). \quad (3.1.3)$$

Essendo la variazione di energia libera pari a

$$\Delta F = \Delta U - T\Delta S = 2JL - k_B T \ln(2^L) = L[2J - k_B \ln(2)], \quad (3.1.4)$$

affinchè il sistema di partenza sia stabile si deve avere $\Delta F \geq 0$, ossia

$$T \leq T_c = \frac{2J}{k_B \ln(2)} = 2.885 \frac{J}{k_B}. \quad (3.1.5)$$

Tale stima è ragionevolmente vicina al valore esatto $T_c = 2.269... \frac{J}{k_B}$ ricavato usando la relazione di dualità del modello che verrà trattata nel paragrafo successivo.

3.2 Relazione di dualità e calcolo della temperatura critica T_c

Il calcolo esatto della temperatura critica T_c viene proposto da H.A. Kramers e G.H. Wannier sfruttando la particolare relazione di dualità del modello di Ising bidimensionale [2]. Tuttavia, è necessario precisare che nel prosieguo si riportano i procedimenti rielaborati di [4], conformi ad una notazione più moderna. Il calcolo consiste nel riesprimere la funzione di partizione del sistema in termini di espansioni in serie di un parametro perturbativo, definito a seconda del caso in cui ci si trovi ad alte o basse temperature. Successivamente, confrontando le due espansioni si mostra che esse sono legate da una relazione di dualità. Tale relazione svela una rilevante simmetria del sistema la quale può essere sfruttata per calcolare il valore esatto di T_c nel caso di un reticolo quadrato.

3.2.1 Espansione della funzione di partizione: alte T

Si consideri un reticolo \mathcal{L} costituito di M collegamenti orizzontali e M collegamenti verticali, dove per "collegamenti" si intendono le coppie di spin vicini disposti in verticale o orizzontale. Notare che quando $M \rightarrow \infty$, allora M coincide con il numero totale di spin del reticolo N . Le interazioni che le coppie di spin in orizzontale o verticale subiscono possono variare, per cui si introducono rispettivamente per esse le costanti di accoppiamento J e J' . La funzione di partizione assume allora la forma

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \left[K \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + L \sum_{(i,k)} \sigma_i \sigma_k \right], \quad (3.2.1)$$

con $K = \beta J$ e $L = \beta J'$. Tramite l'identità

$$\exp[x\sigma_i \sigma_l] = \cosh x (1 + \sigma_i \sigma_l \tanh x) \quad (3.2.2)$$

si arriva a

$$Z_N = (\cosh K \cosh L)^M \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k), \quad (3.2.3)$$

dove $v = \tanh K$ e $w = \tanh L$. Questi due parametri sono sempre minori di 1 tranne per $T = 0$. Più precisamente, v e w diventano parametri piccoli alle alte temperature e possono essere usati per espandere in serie la funzione di partizione per $T \rightarrow +\infty$. Il calcolo delle produttorie può essere affrontato tramite un'interpretazione grafica: per ogni fattore $v\sigma_i\sigma_j$ ($w\sigma_i\sigma_k$) dell'espansione viene disegnata una linea orizzontale (verticale) che collega i siti i e j (i e k). Ripetendo il procedimento per ogni termine, si stabilisce una corrispondenza tra i termini della sommatoria e le possibili configurazioni sul reticolo \mathcal{L} . Un termine generico della sommatoria ha la forma

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

dove r e s sono rispettivamente il numero totale di righe orizzontali e verticali, mentre n_i indica il numero di linee che terminano sul sito i . Si noti che, avendo $\sigma_i = \pm 1$, quando un termine della sommatoria ha almeno un pedice n_i dispari, allora esiste sempre un termine opposto in segno che restituisce un contributo complessivamente nullo. Dunque, i termini che non si annullano sono quelli con n_i tutti pari e il termine generico della sommatoria diventa $2^N v^r w^s$, dove il fattore 2^N deriva tutte le possibili configurazioni degli N spin. Date queste considerazioni, l'espressione (3.2.3) può essere riscritta come

$$Z_N = 2^N (\cosh K \cosh L)^M \sum_P v^r w^s, \quad (3.2.4)$$

dove la sommatoria è eseguita su tutte le possibili configurazioni con un numero pari di linee per ogni sito. Queste configurazioni coincidono con tutte le possibili linee poligonali chiuse P realizzabili sul reticolo \mathcal{L} . Per cui, la sommatoria si riduce al problema geometrico di contare le possibili poligonali P e, a meno di un fattore costante, la funzione di partizione dipende solo da

$$\Phi(v, w) = \sum_P v^r w^s. \quad (3.2.5)$$

I primi termini della sommatoria si riferiscono ai casi in cui non ci sono linee sul reticolo con peso 1, ci sono quadrati costituiti da 4 linee con peso $(vw)^2$ o rettangoli di 6 linee con peso $v^4 w^2$ o $v^2 w^4$ (vedi Fig. 11):

$$\Phi(v, w) = 1 + N(vw)^2 + N(v^4 w^2 + v^2 w^4) + \dots \quad (3.2.6)$$

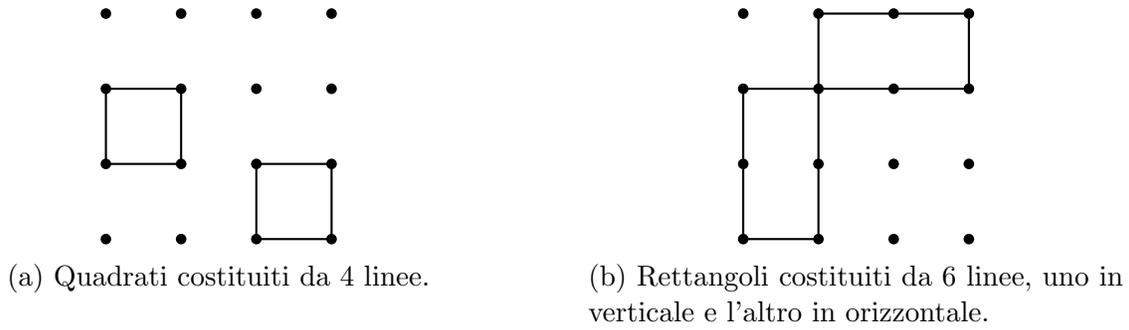


Figura 11: Rappresentazione grafica di alcune linee poligonali chiuse sul reticolo \mathcal{L}

Si noti che la degenerazione N è dovuta ai possibili N modi di posizionare i quadrati o i rettangoli.

3.2.2 Espansione della funzione di partizione: basse T

A temperature sufficientemente basse, per quanto visto in precedenza, ci si aspetta che la maggior parte degli spin siano allineati. Verrà utilizzata questa proprietà per facilitare l'espansione in serie della funzione di partizione. Si definiscano r e s come, rispettivamente, i numeri di collegamenti orizzontali e verticali in cui gli spin adiacenti siano antiparalleli. Dato che M è il numero totale di collegamenti orizzontali e verticali, si ottengono $(M - r)$ e $(M - s)$ collegamenti con spin adiacenti paralleli. Allora, il contributo nella funzione di partizione di una singola configurazione è

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

Si noti come i contributi dipendano solamente dal numero di coppie di spin antiparalleli, numero che assumiamo essere piccolo per basse T . Per agevolare il calcolo si introduce il concetto di reticolo duale: per ogni reticolo piano \mathcal{L} è possibile definire il suo duale \mathcal{L}_D semplicemente posizionando i suoi siti al centro delle facce del reticolo originale. Dalla Fig. 12 è semplice vedere come il duale di un reticolo quadrato sia ancora un reticolo quadrato traslato di metà passo del reticolo.

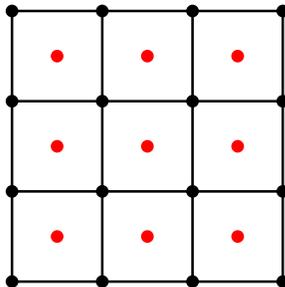


Figura 12: Illustrazione di un reticolo quadrato (in nero) e del suo duale (in rosso).

È possibile ora stabilire una relazione geometrica tra le configurazioni degli spin e un insieme di linee tracciate sul reticolo: per ciascuna coppia di spin antiparalleli del reticolo \mathcal{L} , si traccia una linea del reticolo \mathcal{L}_D che li attraversa. In questo modo si tracciano sempre un numero pari di linee e tutte le possibili configurazioni coincidono a linee poligonali chiuse. Inoltre, all'interno di ogni poligonale chiusa si formano dei domini magnetici in cui tutti gli spin sono allineati lungo la stessa direzione come in Fig. 12. Basandoci su queste considerazioni, la funzione di partizione del sistema diventa

$$Z_N = 2 \exp[M(K + L)] \sum_{\tilde{P}} \exp[(-2Lr - 2Ks)], \quad (3.2.7)$$

dove la sommatoria viene eseguita su tutte le poligonali chiuse \tilde{P} ; in aggiunta, il fattore 2 deriva dalla possibilità di avere per ogni insieme di poligoni due configurazioni, una con spin tutti up oppure down. Analogamente al caso precedente, dunque, il calcolo della sommatoria si riduce ad un semplice conteggio dei poligoni realizzabili sul reticolo \mathcal{L} . Il problema viene ulteriormente semplificato considerando il caso $T \rightarrow 0$ perché i parametri K e L diventano sufficientemente grandi da rendere rilevanti solo i termini con r ed s piccoli, corrispondenti ad un numero limitato di figure geometriche. La quantità di interesse per il calcolo della funzione di partizione è quindi

$$\tilde{\Phi}(e^{-2L}, e^{-2K}) = \sum_{\tilde{P}} \exp[(-2Lr - 2Ks)]. \quad (3.2.8)$$

I primi termini della sommatoria corrispondono geometricamente a quadrati, rettangoli in maniera totalmente equivalente alla quantità $\Phi(v, w)$ per l'espansione alle alte T :

$$\tilde{\Phi}(e^{-2L}, e^{-2K}) = 1 + Ne^{-4L-4K} + N(e^{-4L-8K} + e^{-8L-4K}) + \dots \quad (3.2.9)$$

3.2.3 Auto-Dualità

Le considerazioni fatte nel paragrafo precedente suggeriscono che le due funzioni $\Phi(v, w)$ e $\tilde{\Phi}(e^{-2L}, e^{-2K})$ possano essere strettamente correlate. Infatti, è possibile dimostrare che, nel limite termodinamico, esiste una corrispondenza biunivoca tra le due e si può passare da una all'altra tramite un cambio di variabile. Si consideri infatti la funzione (3.2.5) e si sostituiscano a K e L rispettivamente le variabili \tilde{K} e \tilde{L} tali che

$$\tanh \tilde{K} = e^{-2L}; \quad \tanh \tilde{L} = e^{-2K}. \quad (3.2.10)$$

In questo modo, è evidente notare che

$$\tilde{\Phi}(e^{-2\tilde{K}}, e^{-2\tilde{L}}) = \Phi(v, w). \quad (3.2.11)$$

Un'espressione che espliciti il legame tra le due diverse espansioni della funzione di partizione è data da

$$\frac{Z_N[K, L]}{2^N (\cosh K \cosh L)^N} = \Phi(v, w) = \tilde{\Phi}(e^{-2\tilde{K}}, e^{-2\tilde{L}}) = \frac{Z_N[\tilde{K}, \tilde{L}]}{2 \exp[N(\tilde{K} + \tilde{L})]}.^2 \quad (3.2.12)$$

Per rendere ancora più evidente la relazione tra le fasi ad alta e bassa temperatura, è necessario riscrivere le equazioni in (3.2.10) nella forma

$$\sinh 2\tilde{K} \sinh 2L = 1; \quad \sinh 2\tilde{L} \sinh 2K = 1, \quad (3.2.13)$$

in modo che la (3.2.12) diventi

$$\frac{Z_N[K, L]}{(\sinh 2K \sinh 2L)^{N/4}} = \frac{Z_N[\tilde{K}, \tilde{L}]}{(\sinh 2\tilde{K} \sinh 2\tilde{L})^{N/4}}. \quad (3.2.14)$$

Le equazioni in (3.2.13) definiscono dunque la mappa $(K, L) \rightarrow (\tilde{K}, \tilde{L})$ che permette di passare da una fase del sistema all'altra, mentre la (3.2.14) evidenzia l'invarianza del sistema sotto queste trasformazioni.

La simmetria appena rilevata permette ora di trovare il valore esatto del punto critico. Si consideri il caso isotropico, ovvero $K = L$ e $\tilde{K} = \tilde{L}$. Allora, sapendo che al punto critico la funzione di partizione diverge e ipotizzando che ciò avvenga per $K = K_c$, la relazione (3.2.14) suggerisce deve esistere un corrispondente punto critico per il suo duale $\tilde{K} = \tilde{K}_c$ ³. In principio, questi due valori non coincidono; tuttavia, l'argomento di Peierls evidenzia che, se tale punto esiste, allora è unico. Per cui, si arriva a dire che $K_c = \tilde{K}_c$ e, come si nota in (3.2.13), tale condizione è soddisfatta solo se

$$\sinh K_c = 1; \quad T_c = 2.26922\dots J/k_B. \quad (3.2.15)$$

Per il caso generale in cui le costanti di accoppiamento orizzontale e verticale non sono uguali, si combinano le equazioni in (3.2.13) in modo che

$$\sinh 2K \sinh 2L = \frac{1}{\sinh 2\tilde{K} \sinh 2\tilde{L}}. \quad (3.2.16)$$

Questa equazione mostra come la mappa $(K, L) \rightarrow (\tilde{K}, \tilde{L})$ porti i punti della regione A della Fig. 13 in punti della regione B e viceversa. Dalla trasformazione rimangono invariati solamente i punti che appartengono alla curva

$$\sinh 2K \sinh 2L = 1. \quad (3.2.17)$$

²All'esponente del denominatore dovrebbe esserci M e non N, ma per $N \rightarrow \infty$ si ha $M/N = 1$.

³Tale ragionamento può essere equivalentemente fatto per i parametri L e \tilde{L} .

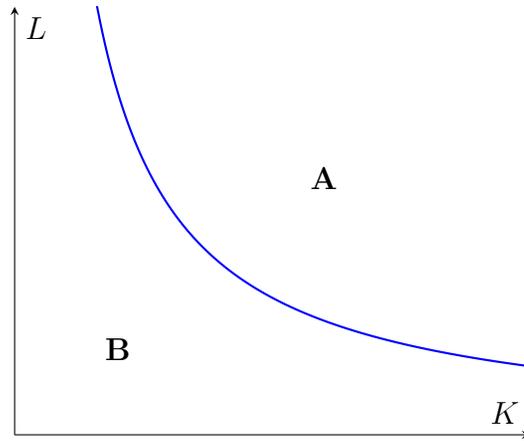


Figura 13: Rappresentazione grafica equivalente dell'equazione $\sinh 2K \sinh 2L = 1$. La curva separa la regione A dalla regione B.

La curva può essere interpretata come l'insieme dei punti tali per cui il sistema si trova al punto critico⁴ ed essa separa le due fasi definite dalle regioni A e B.

3.3 Soluzione generale: Matrici di trasferimento

La prima soluzione del modello di Ising bidimensionale in assenza di campo magnetico fu ottenuta da L. Onsager nel 1944. Egli intuì che le matrici di trasferimento seguissero una particolare algebra e che dovesse esistere per esse una rappresentazione irriducibile. Queste considerazioni gli permisero di diagonalizzare una generica matrice di trasferimento e, di conseguenza, di trovare l'energia libera del sistema in manier analoga al caso unidimensionale. Tuttavia, nel seguito verrà proposta una soluzione differente, con un campo applicativo più esteso: la soluzione di R. J. Baxter[1]. Anche in questo caso si tenta di trovare una forma diagonale per V , ma il metodo per farlo si basa significativamente sulla commutatività della matrice di trasferimento per diversi valori delle costanti di accoppiamento. Ad esempio, nel caso di un reticolo quadrato, tale condizione si traduce matematicamene in

$$[T_D(K, L), T_D(K', L')] = 0, \quad (3.3.1)$$

dove $T_D(K, L)$ rappresenta la matrice di trasferimento lungo la diagonale del reticolo caratterizzata dalle costanti di accoppiamento K e L .

3.3.1 Star-Triangle identity

Prima di procedere con l'implementazione del modello, è doveroso menzionare una relazione che sarà fondamentale nell'approccio di Baxter: l'identità stella-triangolo.

⁴Anche qui si assume che il punto critico sia unico.

Abbiamo visto la relazione di dualità per il reticolo quadrato, ma non è l'unico esempio. Infatti, come è possibile vedere in Fig. 14, il duale di un reticolo triangolare è un reticolo con celle esagonali e viceversa. Si noti che, per il reticolo esagonale, il numero di coordinazione γ è uguale a 3 ed è possibile dividere i siti in due classi, una di tipo A ed una di tipo B, in quanto i siti della stesso tipo non interagiscono tra di loro.

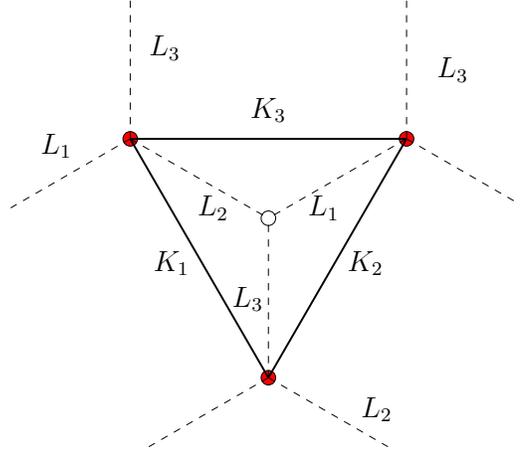


Figura 14: Disegno della cella elementare di un reticolo triangolare: si può notare come le linee tratteggiate vadano a formare il suo duale, costituito da celle esagonali. Si può inoltre vedere come i siti di tipo A (in rosso) interagiscono solo con il sito di tipo B (vuoto).

La funzione di partizione per un reticolo esagonale assume un'espressione del tipo:

$$Z_N^H(\mathcal{L}) = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\mathcal{L}_1 \sum \sigma_l \sigma_i + \mathcal{L}_2 \sum \sigma_l \sigma_j + \mathcal{L}_3 \sum \sigma_l \sigma_k \right], \quad (3.3.2)$$

dove $\mathcal{L}_i = L_i/k_B T$ e L_i sono le costanti di accoppiamento per le tre possibili direzioni con cui uno spin può interagire con i suoi vicini. Tenendo conto che i siti di tipo A interagiscono solo con siti di tipo B, il generico termine della sommatoria si scrive come

$$\prod_b W(\sigma_b; \sigma_i, \sigma_j, \sigma_k), \quad (3.3.3)$$

dove W è il peso di Boltzmann ed è dato da

$$W(\sigma_b; \sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) = \exp[\sigma_b(\mathcal{L}_1 \sigma_i + \mathcal{L}_2 \sigma_j + \mathcal{L}_3 \sigma_k)]. \quad (3.3.4)$$

Dato che σ_b compare una sola volta nella sommatoria, è semplice ridurre la sommatoria ai soli spin di tipo A:

$$Z_N^H(\mathcal{L}) = \sum_{\sigma_a} \prod_{i,j,k} w(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k), \quad (3.3.5)$$

avendo

$$w(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) = \sum_{\sigma_b = \pm 1} W(\sigma_b; \sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) = 2 \cosh(\mathcal{L}_1 \sigma_i + \mathcal{L}_2 \sigma_j + \mathcal{L}_3 \sigma_k). \quad (3.3.6)$$

L'espressione w può essere riscritta in un'altra maniera usando

$$\cosh[\mathcal{L}\sigma] = \cosh(\mathcal{L}), \quad \sinh[\mathcal{L}\sigma] = \sigma \sinh(\mathcal{L}); \quad \sigma = \pm 1,$$

cosicchè si ottenga

$$w(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) = c_1 c_2 c_3 + \sigma_j \sigma_k c_1 s_2 s_3 + \sigma_i \sigma_j s_1 s_2 c_3 \sigma_i \sigma_k s_1 c_2 s_3, \quad (3.3.7)$$

avendo definito

$$c_i \equiv \cosh(\mathcal{L}_i), \quad s_i \equiv \sinh(\mathcal{L}_i).$$

Si arriva ora ad un punto cruciale della trattazione: è possibile osservare come la quantità $w(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k)$ possa essere messa in una forma proporzionale al fattore di Boltzmann per il reticolo triangolare. Quantitativamente, questo significa ammettere l'esistenza dei parametri \mathcal{K}_i (costanti di accoppiamento per il reticolo triangolare) e una costante \mathcal{D} tali che

$$w(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) = \mathcal{D} \exp[\mathcal{K}_1 \sigma_j \sigma_k + \mathcal{K}_2 \sigma_i \sigma_k + \mathcal{K}_3 \sigma_j \sigma_i]. \quad (3.3.8)$$

Questi parametri possono essere determinati espandendo prima di tutto l'esponenziale come

$$\exp[x \sigma_a \sigma_b] = \cosh x + \sigma_a \sigma_b \sinh x.$$

Il confronto diretto di w con l'espressione (3.3.7) porta a dire che i prodotti $\sinh 2\mathcal{L}_i \sinh 2\mathcal{K}_i$ debbano essere tutti uguali:

$$\sinh 2\mathcal{L}_1 \sinh 2\mathcal{K}_1 = \sinh 2\mathcal{L}_2 \sinh 2\mathcal{K}_2 = \sinh 2\mathcal{L}_3 \sinh 2\mathcal{K}_3 \equiv h^{-1}, \quad (3.3.9)$$

con la costante h pari a

$$h = \frac{(1 - v_1^2)(1 - v_2^2)(1 - v_3^2)}{4 [(1 + v_1 v_2 v_3)(v_1 + v_2 v_3)(v_2 + v_1 v_3)(v_3 + v_1 v_2)]^{1/2}}, \quad (3.3.10)$$

in cui $v_i = \tanh \mathcal{K}_i$, mentre la costante \mathcal{D} è espressa da

$$\mathcal{D}^2 = 2h \sinh 2\mathcal{L}_1 \sinh 2\mathcal{L}_2 \sinh 2\mathcal{L}_3.$$

Il significato dell'identità stella-triangolo (3.3.8) è intuibile dal disegno in Fig. 14: quando si calcola la funzione di partizione per il reticolo esagonale, lo spin di tipo B situato al centro del reticolo genera un'interazione diretta tra gli spin di tipo A posti ai vertici di un triangolo. In questo modo, è facile capire come si possa effettivamente passare dal fattore di Boltzmann del reticolo esagonale (stella) al fattore di Boltzmann del reticolo triangolare.

3.3.2 Implementazione del modello: matrici di trasferimento V, W

Si prenda in considerazione il reticolo quadrato di Ising bidimensionale e lo si ruoti di 45 gradi, in modo che i collegamenti orizzontali e verticali caratterizzati dalle costanti di accoppiamento K e L risultino in diagonale. In questo modo, si distinguono due classi di righe A e B, una con i siti pieni e l'altra con i siti vuoti, le quali si alternano lungo tutto il reticolo come in Fig. 15.

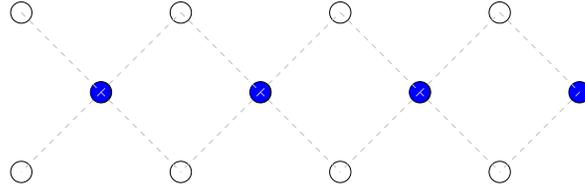


Figura 15: Reticolo bidimensionale ruotato di 45 gradi. Le righe sono alternate a siti di tipo A e B.

Si definisca ora m il numero totale delle righe e si assuma che la riga r si trovi al di sotto della riga $r+1$. Se si impongono delle condizioni al contorno periodiche per la direzione verticale, allora si deduce che m debba essere un numero intero pari. Facendo lo stesso lungo la direzione orizzontale, il numero n di siti per riga è lo stesso per i siti di tipo A e B. Per ogni riga ci sono 2^n possibili configurazioni degli spin, i quali possono essere specificati dalla notazione

$$\mu_r = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}. \quad (3.3.11)$$

Dato che i siti di tipo A interagiscono solo con quelli di tipo B e viceversa, è utile introdurre le matrici di trasferimento $V(K, L)$ e $W(K, L)$ tali che

$$V_{\mu, \mu'}(K, L) = \exp \left[\sum_{i=1}^n (K\sigma_{i+1}\sigma_i + L\sigma_i\sigma'_i) \right], \quad (3.3.12)$$

$$W_{\mu, \mu'}(K, L) = \exp \left[\sum_{i=1}^n (K\sigma_{i+1}\sigma_i + L\sigma_i\sigma'_i) \right].^5 \quad (3.3.13)$$

⁵Si ricordi che $\sigma_{n+1} \equiv \sigma_1$ e $\sigma'_{n+1} \equiv \sigma'_1$ per le condizioni al contorno periodiche.

In altri termini, la matrice V (W) tiene conto delle interazioni tra lo spin di una riga e i due adiacenti della riga superiore (inferiore). In questo modo, tutti i pesi di Boltzmann sono ottenuti iterando l'applicazione delle matrici V e W alla prima riga:

$$Z_N(K, L) = \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} \cdots \sum_{\mu_m} V_{\mu_1, \mu_2} W_{\mu_2, \mu_3} \cdots W_{\mu_m, \mu_1}. \quad (3.3.14)$$

Sfruttando le relazioni di completezza definite come nella relazione (2.3.5) e sviluppando i calcoli in maniera analoga all'espressione (2.3.7), si arriva a

$$Z_N(K, L) = \text{Tr}[VWVW \cdots VW] = \text{Tr}[VW]^{m/2}. \quad (3.3.15)$$

Dato che la traccia non dipende dalla base con cui si rappresentano le matrici, è ragionevole calcolarla portando VW in forma diagonale, in modo tale che:

$$Z_N(K, L) = \lambda_1^m + \lambda_2^m + \cdots + \lambda_m^m, \quad (3.3.16)$$

dove il generico termine λ_i^2 è un autovalore della matrice VW . Una principale differenza con il caso bidimensionale è che le matrici non sono più 2×2 , bensì $2^n \times 2^n$. Dunque, nel limite termodinamico il problema agli autovalori diventa estremamente complicato dal punto di vista computazionale. Tuttavia, manipolando l'espressione della funzione di partizione nel limite in cui n e m vanno all'infinito, è possibile semplificare considerevolmente il problema cercando solo l'autovalore più grande. Si consideri infatti $m \rightarrow \infty$ e n inizialmente finito, allora l'espressione (3.3.16) diventa

$$Z_N(K, L) = \lambda_{max}^m \left[1 + \left(\frac{\lambda_1^m}{\lambda_{max}^m} \right)^m + \left(\frac{\lambda_2^m}{\lambda_{max}^m} \right)^m + \cdots \right] \simeq (\lambda_{max})^m \quad (3.3.17)$$

Nonostante ciò, il problema rimane comunque difficile da affrontare. Si vedrà nei prossimi paragrafi che la chiave per risolverlo sfrutta delle essenziali proprietà delle matrici di trasferimento.

3.3.3 Commutatività delle matrici di trasferimento

Come abbiamo visto, la funzione di partizione consiste in una moltiplicazione in serie della matrice VW per diversi valori di K e L , la cui forma generica è quindi

$$V(K, L)W(K', L'). \quad (3.3.18)$$

In particolare, questa matrice è interpretabile come la matrice di trasferimento che permette di passare dalla riga inferiore di spin di tipo A della Fig. 15 a quella superiore dello stesso tipo. Chiamando $\mu = \{\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n\}$ lo stato degli spin della riga inferiore, $\mu' = \{\sigma'_1, \sigma'_2, \cdots, \sigma'_n\}$ quello della riga superiore e $\mu'' = \{\sigma''_1, \sigma''_2, \cdots, \sigma''_n\}$ quello della riga

centrale, gli elementi di matrice di VW rispetto agli stati μ e μ' si ottengono tramite l'usuale prodotto di matrici, il quale si traduce come una sommatoria sui possibili stati intermedi μ'' :

$$(V(K, L)W(K, L))_{\mu, \mu'} = \sum_{\{\sigma''\}} \prod_{j=1}^n \exp[\sigma''_j(K\sigma_{j+1} + L\sigma_j + K'\sigma'_j + L'\sigma'_{j+1})]. \quad (3.3.19)$$

Siccome il termine σ''_j compare solo una volta nell'espressione, la sommatoria è facilmente calcolabile e si ottiene

$$(V(K, L)W(K, L))_{\mu, \mu'} = \prod_{j=1}^n X(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma'_j, \sigma'_{j+1}), \quad (3.3.20)$$

dove il peso di Boltzmann $X(a, b; c, d)$ è dato da

$$\begin{aligned} X(a, b; c, d) &= \sum_{\sigma''=\pm 1} \exp[\sigma''(La + Kb + K'c + L'd)] \\ &= 2 \cosh(La + Kb + K'c + L'd), \quad a, b, c, d = \pm 1. \end{aligned} \quad (3.3.21)$$

Per proseguire con il calcolo risulterebbe molto utile che il prodotto di matrici (3.3.18) rimanga invariato scambiando le costanti di accoppiamento associate a V e W. In maggior dettaglio, questo significa che V e W soddisfano una relazione di commutazione generalizzata:

$$V(K, L)W(K', L') = V(K', L')W(K, L). \quad (3.3.22)$$

Questa relazione è valida solo quando le costanti di accoppiamento soddisfano la relazione

$$\sinh 2K \sinh 2L = \sinh 2K' \sinh 2L'. \quad (3.3.23)$$

Per dimostrarlo, si consideri prima la trasformazione

$$X(a, b; c, d) \rightarrow e^{Mac} X(a, b; c, d) e^{-Mbd}. \quad (3.3.24)$$

Chiaramente essa lascia l'espressione (3.3.20) invariata dato che nella produttorina i fattori esponenziali si cancellano. Allora, un'attenta analisi riduce la soluzione del problema (3.2.22) a trovare un numero M tale che

$$e^{Mac} X(a, b; c, d) = X'(a, b, c, d) e^{-Mbd}, \quad (3.3.25)$$

dove X' è il peso di boltzmann ottenuto sostituendo $K \rightarrow K'$ e $L \rightarrow L'$ a X . Per poter risolvere il problema ci si avvale dell'identità stella-triangolo (3.3.8). Si consideri infatti la rappresentazione grafica della relazione (3.3.25) in Fig. 16: entrambi i diagrammi formano un triangolo dato delle interazioni tra gli spin. Imponendo la notazione

$$K_1 = L, \quad K_2 = K', \quad K_3 = M$$

e convertendo entrambi i triangoli in stelle come in Fig. 16, è semplice notare che i due diagrammi sono uguali solo se vale

$$L_1 = K, \quad L_2 = L'.$$

Dalle relazione (3.3.9) segue che le costanti K, K', L, L' devono soddisfare (3.3.23).

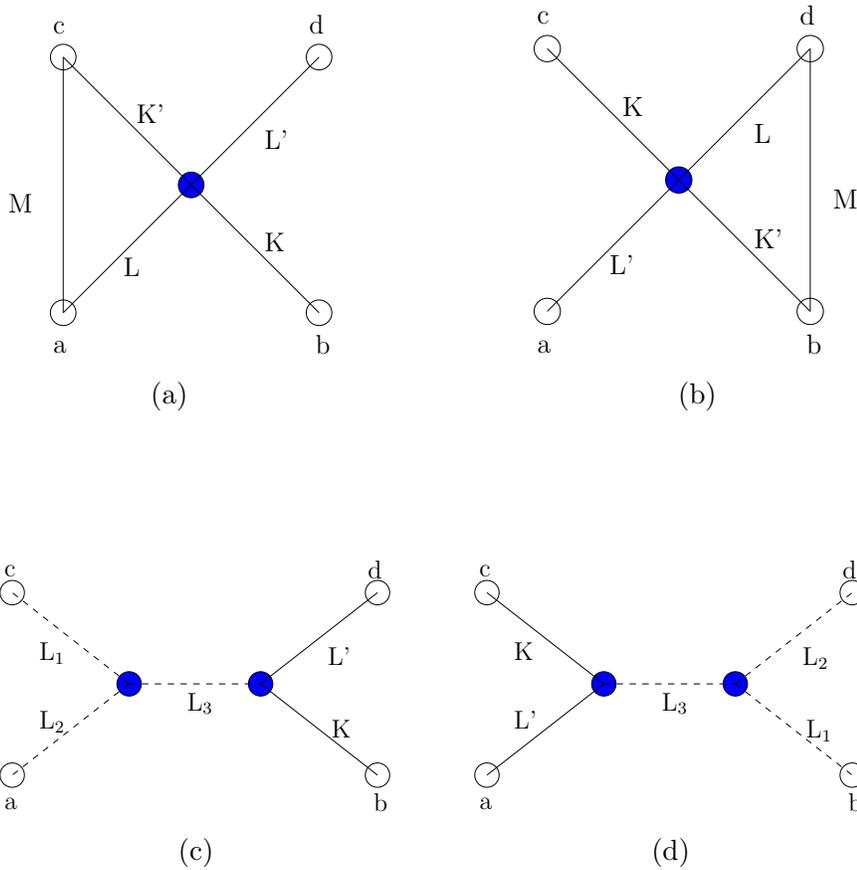


Figura 16: Rappresentazione grafica dell'identità (3.3.25), espressa come (a) = (b). Attraverso l'identità stella-triangolo, i diagrammi (a) e (b) si trasformano rispettivamente in (c) e (d), cosicché valga (c) = (d).

In conclusione del paragrafo, è possibile riscrivere l'espressione (3.3.22) in termini della sola matrice di trasferimento V . Infatti, si può notare che W può essere ottenuto da

W semplicemente eseguendo una traslazione di entità pari al passo del reticolo. Per mostrarlo quantitativamente, si introduca l'operatore T

$$T_{\mu,\mu'} = \delta(\sigma_1, \sigma'_2)\delta(\sigma_2, \sigma'_3) \cdots \delta(\sigma_n, \sigma'_1), \quad (3.3.26)$$

in modo tale che valga

$$W(K, L) = V(K, L)T. \quad (3.3.27)$$

Usando questa identità combinata alle relazioni

$$V(K, L) = T^{-1}V(K, L)T, \quad W(K, L) = T^{-1}W(K, L)T, \quad (3.3.28)$$

l'equazione (3.3.22) diventa

$$V(K, L)V(K', L') = V(K', L')V(K, L), \quad (3.3.29)$$

con le costanti di accoppiamento che soddisfano (3.3.23).

3.3.4 Proprietà di inversione e relazioni di simmetria

Ci si chiede ora se esistono dei valori di K' ed L' tali che portino la matrice VW in forma diagonale o quasi. Dato che gli elementi di matrice dipendono esplicitamente da $X(a, b; c, d)$, questa proprietà sarebbe soddisfatta se il peso statistico si annullasse per $a \neq c$ oppure $b \neq d$. Tale richiesta non può essere soddisfatta in generale, ma indebolendo la condizione affinché $a \neq c$ e $b = d$, il peso statistico si annulla se valgono le seguenti due equazioni

$$\begin{aligned} \cosh(L + K - K' + L') &= 0; \\ \cosh(L - K - K' - L') &= 0, \end{aligned} \quad (3.3.30)$$

le cui soluzioni sono definite nel campo dei complessi

$$K' = L + i\frac{\pi}{2}, \quad L' = -K. \quad (3.3.31)$$

Inserendo tali valori nell'espressione di X , gli unici casi in cui la funzione non si annulla sono

- $a = c$ e $b = d$:

$$X(a, b; a, b) = 2ia \sinh(2La) = 2i \sinh(2L);$$

- $a \neq c$ e $b \neq d$:

$$X(a, b; -a, -b) = -2ia \sinh 2Kb = -2iab \sinh 2K.$$

Gli elementi di matrice di VW assumono dunque la forma

$$\begin{aligned} \left(V(K, L)W \left(L + i\frac{\pi}{2}, -K \right) \right)_{\mu, \mu'} &= (2i \sinh 2L)^n \delta(\sigma_1, \sigma'_1) \delta(\sigma_2, \sigma'_2) \cdots \delta(\sigma_n, \sigma'_n) \\ &+ (-2i \sinh 2K)^n \delta(\sigma_1, -\sigma'_1) \delta(\sigma_2, -\sigma'_2) \cdots \delta(\sigma_n, -\sigma'_n). \end{aligned} \quad (3.3.32)$$

Si possono introdurre l'operatore identità \mathbf{I} , con elementi di matrice

$$\mathbf{I}_{\mu, \mu'} = \delta(\sigma_1, \sigma'_1) \delta(\sigma_2, \sigma'_2) \cdots \delta(\sigma_n, \sigma'_n), \quad (3.3.33)$$

e l'operatore \mathbf{R} , con elementi di matrice

$$\mathbf{R}_{\mu, \mu'} = \delta(\sigma_1, -\sigma'_1) \delta(\sigma_2, -\sigma'_2) \cdots \delta(\sigma_n, -\sigma'_n), \quad (3.3.34)$$

in modo che l'equazione (3.3.31) possa essere riscritta nella forma più compatta

$$\left(V(K, L)W \left(L + i\frac{\pi}{2}, -K \right) \right)_{\mu, \mu'} = (2i \sinh 2L)^n \mathbf{I} + (-2i \sinh 2K)^n \mathbf{R}. \quad (3.3.35)$$

Questa equazione funzionale risulterà essenziale per trovare gli autovalori di V e W . Inoltre, siccome il membro destro è facilmente invertibile, essa è molto utile nel caso si voglia ottenere l'inversa della matrice V ⁶.

In aggiunta alle proprietà commutativa e quella di inversione, è utile evidenziare alcune simmetrie delle matrici di trasferimento. Quando si scambiano la costante K con L e σ_j con σ'_j , la matrice W diventa la trasposta di V , ovvero

$$W(K, L) = V^T(L, K) \quad (3.3.36)$$

e quindi

$$V(K, L)W(K, L) = [V(L, K)W(L, K)]^T. \quad (3.3.37)$$

Inoltre, cambiare il segno a K ed L equivale a cambiare il segno a tutti i $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ oppure a $\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_n$, cosicchè

$$V(-K, -L) = RV(K, L) = V(K, L)R, \quad (3.3.38)$$

⁶Per questo motivo la (3.3.35) viene spesso denominata "identità di inversione".

e allo stesso modo per W . Siano p il numero di coppie di spin $(\sigma_{j+1}, \sigma'_j)$ con valori opposti e q il numero di coppie (σ_j, σ'_j) con valori opposti. Allora $p + q$ tiene conto del numero di cambiamenti di segno nella sequenza $\sigma_1, \sigma'_1, \sigma_2, \sigma'_2, \dots, \sigma'_n$ ed è quindi un numero pari. Di conseguenza, dalla definizione (3.3.12) di V si ottiene

$$V_{\mu, \mu'}(K, L) = \exp[(n - 2p)K + (n - 2q)L]. \quad (3.3.39)$$

Poiché nel limite termodinamico $n \rightarrow \infty$ non ha rilevanza che n sia pari o dispari, si sceglie per semplicità

$$n = 2s, \quad (3.3.40)$$

con s intero. In questo modo la matrice V assume la forma

$$V_{\mu, \mu'}(K, L) = \exp[\pm 2p'K \pm 2q'L], \quad (3.3.41)$$

dove p' e q' sono numeri pari o dispari appartenenti all'intervallo $(0, s)$. Il membro destro dell'equazione rimane invariato per inversione dei segni di $\exp(2K)$ e $\exp(2L)$, per cui vale l'identità

$$V(K \pm i\frac{\pi}{2}, L \pm i\frac{\pi}{2}) = V(K, L). \quad (3.3.42)$$

3.3.5 Equazioni funzionali e risoluzione del problema agli autovalori

Grazie a tutte le proprietà discusse nei precedenti paragrafi, si arriva infine a determinare un'espressione generica per gli autovalori delle matrici di trasferimento. È doveroso specificare che verrà trattato solamente il caso in cui il sistema si trovi al punto critico T_c , dato che, diversamente, sarebbe necessario introdurre delle funzioni ellittiche il cui calcolo andrebbe oltre l'ambito di questo elaborato.

Si assuma che per qualsiasi K, L valga

$$h^{-1} = \sinh 2K \sinh 2L, \quad (3.3.43)$$

dove h è un numero reale fissato. Variando K e L , da questa relazione si possono ricavare un numero infinito di matrici di trasferimento che commutano tra di loro (vedi (3.3.22) e (3.3.23)). Esse commutano anche con T e R (vedi rispettivamente (3.3.28) e (3.3.38)). Da queste proprietà segue che tutte le matrici con K e L che soddisfano (3.3.43) hanno una base comune di autovettori. Siccome K e L variano per ogni matrice di trasferimento, questi autovettori non possono dipendere dalle costanti di accoppiamento, però possono essere funzioni di h . Chiamando $y(h)$ l'autovettore generico e $v(K, L)$, t , r gli autovalori di $V(K, L)$, T e R , si ottengono le equazioni agli autovalori

$$\begin{aligned}
V(K, L) y(h) &= v(K, L) y(h); \\
T y(h) &= t y(h); \\
R y(h) &= r y(h).
\end{aligned}
\tag{3.3.44}$$

Visto che $T^n = R^2 = I$, le costanti t e r sono numeri complessi di modulo unitario e indipendenti da K, L

$$t^n = r^2 = 1. \tag{3.3.45}$$

Applicando l'autovettore $y(h)$ all'equazione funzionale (3.3.35), si ottiene

$$v(K, L) v\left(L + \frac{i\pi}{2}, -K\right) t = (2i \sinh 2L)^n + (-2i \sinh 2K)^n r. \tag{3.3.46}$$

Si denoti ora con $\lambda^2(K, L) \equiv \lambda_i$ l'autovalore della matrice $V(K, L)W(K, L)$. Dato che $W = VT$, $y(h)$ è anche un autovettore di questa matrice e vale

$$\lambda^2(K, L) = v^2(K, L)t. \tag{3.3.47}$$

Si può dunque definire $\lambda(K, L)$ come

$$\lambda(K, L) = v(K, L)\sqrt{t} \tag{3.3.48}$$

Inserendo $\lambda(K, L)$ nell'equazione (3.3.46) in modo che risulti indipendente da t , l'equazione

$$\lambda(K, L) \lambda\left(L + \frac{i\pi}{2}, -K\right) = (2i \sinh 2L)^n + (-2i \sinh 2K)^n r \tag{3.3.49}$$

ricopre il ruolo di un'equazione funzionale che deve essere soddisfatta per ogni autovalore della matrice di trasferimento.

Quando il sistema si trova alla temperatura di Curie, è possibile vedere che $h = 1$ e quindi (3.3.43) diventa

$$\sinh 2K \sinh 2L = 1. \tag{3.3.50}$$

L'equazione è sempre soddisfatta ponendo

$$\begin{aligned}
\sinh(2K) &= \tan(u), \\
\sinh(2L) &= \cot(u),
\end{aligned}
\tag{3.3.51}$$

con K e L reali se u appartiene all'intervallo $(0, \frac{\pi}{2})$. Un ulteriore vantaggio di questa parametrizzazione risiede nel fatto che $\exp(\pm 2K)$ e $\exp(\pm 2L)$ sono funzioni semplici di u :

$$\begin{aligned}\exp(+2K) &= (1 + \sin u) / \cos u, \\ \exp(-2K) &= (1 - \sin u) / \cos u, \\ \exp(+2L) &= (1 + \cos u) / \sin u, \\ \exp(-2L) &= (1 - \cos u) / \sin u.\end{aligned}\tag{3.3.52}$$

Da queste espressioni si possono ricavare le seguenti proprietà:

1. Le funzioni sono periodiche, di periodo 2π .
2. Le funzioni sono meromorfe, ossia presentano solo singolarità riconducibili a dei poli (in questo caso poli semplici).

Dato che gli autovalori $\lambda(K, L)$ della matrice di trasferimento possono essere visti come funzioni di u , è ragionevole usare la notazione $\lambda(u)$, cosicché l'equazione funzionale diventi

$$\lambda(u)\lambda(u + \frac{\pi}{2}) = (2i \cot u)^n + (-2i \tan u)^n r.\tag{3.3.53}$$

Anche gli elementi di matrice di V nella forma (3.3.39) possono essere espressi in termini di u :

$$V_{\mu, \mu'} = \frac{A(u)}{(\sin u \cos u)^s},\tag{3.3.54}$$

dove $A(u)$ è un polinomio in $\sin u$ e $\cos u$ di grado $2s$ la cui espressione ha una forma del tipo

$$A(u) = e^{-2isu}(a_0 + a_1 e^i u + \dots, a_{2n} e^{i4su})\tag{3.3.55}$$

Si noti ora che la prima equazione agli autovalori della (3.3.44) sia in realtà costituita da 2^n equazioni scalari. Ciascuno degli autovalori $v(K, L)$ è espresso tramite una combinazione lineare degli elementi di matrice di $V(K, L)$, i cui coefficienti sono dati dai rapporti delle componenti degli autovettori $y(h)$. Analogamente a quanto detto in precedenza, la commutatività delle matrici di trasferimento esclude che questi rapporti possano dipendere da u ma non da h . Date queste considerazioni, si può allora dire che $v(K, L)$ è esprimibile tramite una combinazione lineare i cui termini hanno la stessa forma di (3.3.55). Naturalmente, lo stesso deve valere per $\lambda(u)$.

La forma degli autovalori è piuttosto complessa, ma può essere semplificata sfruttando delle relazioni di simmetria. Difatti, si consideri la sostituzione di u con $u + \pi$ nelle relazioni in (3.3.52): questo corrisponde a sostituire K e L con $-K \pm i\frac{\pi}{2}$ e $-L \pm i\frac{\pi}{2}$. A sua volta, come si può vedere in (3.3.38) e (3.3.41), questa sostituzione è equivalente ad applicare la matrice R a V . Dunque, esplicitando la dipendenza dell'autovalore da u , la prima equazione di (3.3.44) può essere scritta come

$$V(K, L)Ry(h) = v(u + \pi)y(h). \quad (3.3.56)$$

Inoltre, usando la prima e l'ultima equazione di (3.3.44) si arriva a

$$\begin{aligned} v(u + \pi) &= rv(u); \\ \lambda(u + \pi) &= r\lambda(u). \end{aligned} \quad (3.3.57)$$

Dato che $r = \pm 1$, la condizione di periodicità (3.3.57) porta a dire che il polinomio che compare nell'espressione di $\lambda(u)$, la cui forma generica è data da (3.3.55), può avere solamente i coefficienti pari c_{2k} diversi da zero se $r = 1$, mentre ha solo i coefficienti dispari c_{2k+1} non nulli se $r = -1$. Portando in forma fattorizzata il polinomio, l'espressione risultante per $\lambda(u)$ è

$$\lambda(u) = \rho(\sin u \cos u)^{-s} \prod_{j=1}^l \sin(u - u_j), \quad (3.3.58)$$

in cui ρ e u_1, u_2, \dots, u_l sono costanti ancora da determinare, mentre l assume i seguenti valori

$$l = \begin{cases} 2s, & \text{se } r = +1 \\ 2s - 1, & \text{se } r = -1. \end{cases}$$

Dalla sostituzione di questa espressione nell'equazione funzionale (3.3.53) si ottiene

$$\rho^2 \prod_{j=1}^l \sin(u - u_j) \cos(u - u_j) = 2^{2s} (\cos^{4s} u + r \sin^{4s} u). \quad (3.3.59)$$

Questa identità deve valere per ogni valore di u . Passando ad una forma più intuitiva, si applicano le sostituzioni

$$x = e^{2iu}, \quad x_j = e^{2iu_j}$$

e si ha

$$\rho^2 \left(\frac{i}{4}\right)^l \prod_{j=1}^l \frac{x^2 - x_j^2}{x_j} = 2^{-2s} x^{l-2s} [(x+1)^{4s} + r(x-1)^{4s}]. \quad (3.3.60)$$

Si noti che i due membri dell'equazione sono polinomi in x^2 di grado l , per cui $\rho, x_1, x_2, \dots, x_l$ possono essere determinati richiedendo che i polinomi siano identici. Siccome x_1, x_2, \dots, x_l sono chiaramente zeri del membro di sinistra, lo stesso deve valere per il polinomio a destra. Si ha dunque che tali parametri sono fissati dalla condizione

$$[(x+1)^{4s} + r(x-1)^{4s}] = 0, \quad (3.3.61)$$

la cui soluzione è data da

$$x_j^2 = -\tan \frac{\theta_j}{2}, \quad j = 1, \dots, l \quad (3.3.62)$$

dove

$$\theta_j = \begin{cases} \pi(j - \frac{1}{2})/2s, & \text{se } r = +1 \\ \pi j/2s, & \text{se } r = -1. \end{cases}$$

Tutti i valori di θ_j rientrano nell'intervallo $(0, \pi)$. Definendo

$$\varphi_j = \frac{1}{2} \ln \tan \frac{\theta_j}{2}, \quad j = 1, 2, \dots, l$$

si ottengono le soluzioni per u_j

$$u_j = \mp \frac{\pi}{4} - i\varphi_j, \quad j = 1, 2, \dots, l. \quad (3.3.63)$$

Il segno \mp può essere scelto indipendentemente per ciascun u_j , avendo dunque a priori 2^l possibili soluzioni. Tuttavia, non tutte le soluzioni sono ammissibili. Infatti, per $u \rightarrow \pm i\infty$, dalla (3.3.52) si avrebbe $\exp(2K) = \exp(2L) \rightarrow \pm i$. Inoltre, siccome dall'espressione (3.3.39) la matrice di trasferimento rimane invariata invertendo i segni di $\exp(2K)$ e $\exp(2L)$, anche gli autovalori rimangono gli stessi:

$$\lambda(i\infty) = \lambda(-i\infty). \quad (3.3.64)$$

Dall'espressione generale per gli autovalori (3.3.58) si nota che questa condizione è automaticamente soddisfatta per $r = -1$ (numero pari di segni negativi), mentre per $r = +1$ ciò è vero se

$$(u_1 + u_2 s)/\pi = N + \frac{1}{2}s, \quad (3.3.65)$$

dove N è un numero intero. Il vincolo appena imposto riduce il numero di segni indipendenti nel caso $r = +1$ e si hanno dunque 2^{2s-1} autovalori λ , il quale coincide anche con quelli del caso $r = -1$.

Dunque, la soluzione generale per gli autovalori $\lambda(u)$ è data da

$$\lambda(u) = \rho(\sin u \cos u)^{-s} \prod_{j=1}^l \sin \left(u + i\varphi_j + \frac{1}{4}\eta_j\pi \right), \quad (3.3.66)$$

dove $\eta_1, \dots, \eta_l = \pm 1$ e, per $r = +1$ si ha l'ulteriore vincolo

$$\eta_1 + \dots + \eta_{2s} = 2s - 4M, \quad (3.3.67)$$

essendo M un numero intero.

Si conclude il capitolo riportando solo la soluzione finale per T generico, data dall'autovalore più grande λ_{max}

$$\log \lambda_{max} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2s} \mathcal{F} \left[\pi \left(j - \frac{1}{2} \right) / 2s \right], \quad (3.3.68)$$

dove la funzione $\mathcal{F}(\theta)$ è

$$\mathcal{F}(\theta) = \log \left\{ 2 \left[\cosh 2K \cosh 2L + h^{-1}(1 + h^2 - 2h \cos 2\theta)^{1/2} \right] \right\}. \quad (3.3.69)$$

Nel limite termodinamico $s \rightarrow \infty$ l'energia libera è data da

$$-\frac{F}{k_B T} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \mathcal{F}(\theta) d\theta. \quad (3.3.70)$$

3.3.6 Risultati

Dalla (3.3.66) è possibile ottenere l'espressione per la funzione di partizione inserendo l'autovalore più grande λ_{max} in (3.3.17) e ricavare di conseguenza tutte le grandezze termodinamiche del sistema. Per semplicità di esposizione, si riportano i risultati dell'approccio combinatoriale, i quali includono anche il caso con un campo magnetico $B \neq 0$.

La capacità termica assume un andamento logaritmico e non più a legge di potenza:

$$C \sim B \ln |T - T_c|, \quad (3.3.71)$$

portando ad avere l'esponente critico $\alpha = 0$. Per $T \neq T_c$, la funzione di correlazione a due punti decresce esponenzialmente:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \simeq M^2 + A \exp \left[\frac{-|i-j|}{\xi} \right], \quad (3.3.72)$$

dove si ricordi che M è la magnetizzazione spontanea e ξ è lunghezza di correlazione, mentre $A > 0$ è una costante. Nelle vicinanze della temperatura critica T_c la lunghezza di correlazione presenta una singolarità del tipo

$$\xi \simeq |T - T_c|^{-1}, \quad (3.3.73)$$

avendo dunque l'esponente critico $\nu = 1$. La magnetizzazione spontanea M è espressa in termini di una funzione a tratti in cui compare il parametro ν che tiene conto del numero di collegamenti tra due spin vicini:

$$M^2 = \begin{cases} \left[1 - \left(\frac{1-\nu^2}{2\nu} \right)^4 \right]^{1/4}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c; \end{cases} \quad (3.3.74)$$

inoltre, da questa si deduce l'esponente critico $\beta = 1/8$. Quando invece $T = T_c$, la funzione di correlazione decade algebricamente come

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \simeq \frac{1}{|i-j|^{1/4}}, \quad (3.3.75)$$

e si ha dunque l'esponente critico $\eta = 1/4$. Infine, dalle leggi di scala si ottengono gli esponenti critici

$$\delta = 15; \quad \gamma = \frac{7}{4}.$$

La funzione di correlazione non è stata calcolata, tuttavia si menziona che è possibile ricavare una sua espressione nel limite continuo, in cui il passo del reticolo tende a zero. In maggior dettaglio, in questo regime il modello assume una formulazione fermionica, descrivibile dunque da campi quantizzati che rispettano l'equazione di Dirac.

4 Conclusioni

Si è visto dunque come il modello di Ising, nato come una semplice schematizzazione per spiegare le proprietà dei ferromagneti, abbia avuto in realtà un esteso campo di sviluppo che ha permesso di conoscere in maggior dettaglio la natura delle transizioni di fase. In particolare, è stato trattato l'argomento di Peierls il quale dimostra per il caso bidimensionale l'esistenza di una transizione di fase, determinata da un valore finito di temperatura T_c . Inoltre, usando un metodo che sfrutta la relazione di dualità presente nel modello, è stato possibile ricavare il valore esatto di T_c . Infine, la soluzione generale è stata ricavata seguendo un approccio totalmente nuovo alla meccanica statistica, riesprimendo la funzione di partizione in termini di matrici che prendono il nome di matrici di trasferimento. Questo metodo non rimane circoscritto al modello di Ising, bensì si rivelerà fondamentale nella risoluzione di molti altri problemi su reticoli e sistemi discreti, come ad esempio il modello di Potts, il modello di Heisenberg oppure il modello dei dimeri. Un'ultima importante nota va fatta sulla analogia tra il caso classico del modello e quello quantistico: si è visto come nel caso unidimensionale le matrici di trasferimento assumano il ruolo di operatori quantistici di evoluzione temporale, ma questa relazione è in realtà più di una semplice analogia. Infatti, nel caso bidimensionale si può dimostrare che, nel limite continuo, il sistema diventa una teoria di fermioni liberi di Majorana e risulta dunque descrivibile da un campo quantizzato. Questi sono solo alcuni degli sviluppi del modello di Ising che portarono ad una comprensione diretta o meno di nuovi concetti della meccanica statistica. Ancora oggi si studiano vari aspetti del modello, che in futuro potrebbero portare a ulteriori sue riformulazioni.

Riferimenti bibliografici

- [1] R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press, New York, 1982.
- [2] G.H. Wannier H.A. Kramers. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I. *Phys. Rev.*, 60:252–262, 1941.
- [3] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeit. für Physik*, 31:253, 1925.
- [4] Giuseppe Mussardo. *Statistical field theory, An Introduction to Exactly Solved models in Statistical Physics*. Oxford University Press, Great Clarendon Street, Oxford oX2 6DP, 2010.
- [5] R. Peierls. On Ising’s model of ferromagnetism. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 32:477, 1936.