Il modello di Ising

Autore: Filippo Negrini
Corso: Simulazione di Materia Condensata e Biosistemi
Università: Università degli Studi di Milano

8 gennaio 2025

Indice

Il modello di Ising consiste in un reticolo che presenta un momento magnetico (o spin) in ogni sito. Nel modello questi spin assumono la forma più semplice possibile, non particolarmente realistica, di variabili scalari σ_i di valori ± 1, rappresentanti rispettivamente dipoli unitari rivolti verso l'alto oppure verso il basso. Tali spin interagiscono fra loro e possono accoppiarsi ad un campo magnetico esterno e per tale motivo l'Hamiltoniana del sistema assume la forma

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \tag{0.1}$$

dove la notazione $\langle ij \rangle$ denota una somma su primi vicini. Se il parametro J è positivo i dipoli vicini tendono ad allinearsi e quindi il modello è di tipo ferromagnetico, altrimenti quando $J < 0$ si ha anti-allineamento e fenomenologia anti-ferromagnetica.

1 Modello di Ising 1D

Il modello di Ising 1D è uno dei pochi modelli della meccanica statistica che presenta una soluzione esatta. Il reticolo che prendiamo in considerazione in questo caso è lineare, tale per cui ogni sito reticolare presenta solo due primi vicini. Lavorando con condizioni periodiche al contorno, l'N-esimo spin diventa un vicino del primo ed il sistema si chiude ad anello, come è possibile apprezzare in Figura 1.

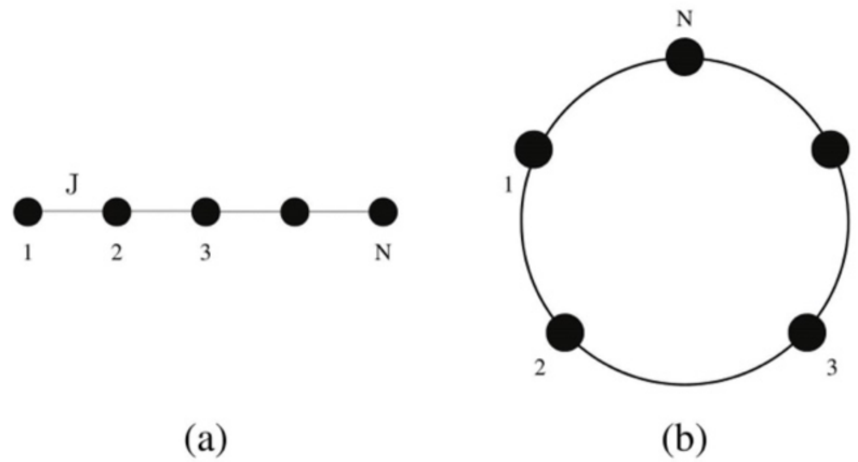

Figura 1: L'immagine (a) è un esempio di modello di Ising 1D senza pbc, mentre in (b) si può apprezzare come la catena si chiuda su se stessa nel caso di condizioni periodiche al contorno.

1.1 Soluzione esatta

Considerare un sistema con condizioni periodiche al contorno, come (b) in Figura 1, consente di scrivere l'Hamiltoniana in forma simmetrica come

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}), \tag{1.1}$$

dato che $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. La funzione di partizione del sistema è data dalla somma su tutte le possibili configurazioni del sistema, che si traduce in

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \exp\left\{ \beta \left[J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\} \tag{1.2}$$

Definendo una matrice P come

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

è possibile riscrivere la funzione di partizione in termini matriciali

$$Q\,(h,\,T) \,=\, \sum_{\sigma_1=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} \langle\sigma_1|P|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|P|\sigma_3\rangle \cdots \langle\sigma_{N-1}|P|\sigma_N\rangle\langle\sigma_N|P|\sigma_1\rangle \tag{1.4}$$

Notando che sono presenti $N\,-\,1$ completezze, è possibile procedere ad una semplificazione estrema della relazione (1.4) che consente di apprezzare come la funzione di partizione altro non sia che la traccia della matrice P elevata alla N.

$$Q\,(h,\,T) \,=\, \sum_{\sigma_1=\pm1} \langle\sigma_1|P^N|\sigma_1\rangle \,=\, Tr\left(P^N\right) \,=\, \lambda_1^N \,+\, \lambda_2^N, \tag{1.5}$$

dove λ_1 e λ_2 sono gli autovalori della matrice P. La loro determinazione richiede la soluzione di un problema agli autovalori, che porta a

$$\lambda_{1,2} \,=\, e^{\beta J}\cosh\left(\beta h\right) \,\pm\, \sqrt{e^{-2\beta J} \,+\, e^{2\beta J}\sinh^2\left(\beta h\right)}. \tag{1.6}$$

Una ottima approssimazione, quando il numero di spin preso in considerazione è elevato, consiste nel trascurare il secondo autovalore dato che

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N \,=\, 0. \tag{1.7}$$

L'energia libera, dalla quale è possibile determinare tutta la termodinamica del sistema, risulta quindi

$$A\,(h,\,T) \,=\, -k_B T \ln\left[Q\,(h,\,T)\right] \,\simeq\, -N k_B T \ln\left(\lambda_1\right). \tag{1.8}$$

1.2 Teoria di Campo Medio