



SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## I modelli di Ising: Osservabili Fisiche e Lunghezza di Correlazione.

Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali  
Corso di Laurea in Fisica e Astrofisica

Candidato

Alessio Giorlandino  
Matricola 1836168

Relatore

Prof. Enzo Marinari

Anno Accademico 2020/2021

Tesi discussa il 15 Novembre 2021

di fronte a una commissione esaminatrice composta da:

Prof. ... (presidente)

Prof. ...

Prof. ...

Prof. ...

Prof. ...

Prof. ...

Prof. ...

---

**I modelli di Ising: Osservabili Fisiche e Lunghezza di Correlazione.**

Tesi di Laurea. Sapienza – Università di Roma

© 2021 Alessio Giorlandino. Tutti i diritti riservati

Questa tesi è stata composta con L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X e la classe Sapthesis.

Email dell'autore: [giorlandino.1836168@studenti.uniroma1.it](mailto:giorlandino.1836168@studenti.uniroma1.it)

## Sommario

Il modello di Ising, nonostante la sua semplicità di definizione, mostra una transizione di fase del secondo ordine: si osserva l'esistenza di una temperatura critica tale per cui, per temperature maggiori di essa il comportamento del sistema è disordinato e simmetrico, per temperature minori si formano delle strutture di spin allineati che provocano una magnetizzazione spontanea, rompendo così la simmetria della fase calda.

Nel capitolo 1 vengono poste le basi fondamentali per le discussioni che seguono, in particolare vengono presentati i teoremi di Yang e Lee, dai quali si evince che nel limite termodinamico non ci è assicurato che la funzione di partizione sia analitica.

Successivamente, nel capitolo 2, viene studiata la magnetizzazione e il suo ruolo fondamentale di parametro d'ordine della transizione. Viene infatti sviluppata una teoria di campo medio che porta ad un'equazione trascendente per la magnetizzazione, risultato cardine del capitolo in questione. Da essa è stato possibile studiare la stabilità delle configurazioni di equilibrio, in particolare, in assenza di campo magnetico esterno si è trovato che: sopra la temperatura critica la sola configurazione stabile è quella a magnetizzazione nulla; alla temperatura critica si ha uno stato metastabile, il quale per temperature minori individua due configurazioni stabili ben distinte, di magnetizzazione opposta ma stessa energia.

L'equazione trascendente è stata sviluppata attorno alla temperatura critica e allo zero assoluto in modo tale da fornire, in tali regioni, un'espressione approssimata per il comportamento della magnetizzazione.

I risultati di campo medio sono stati usati nel capitolo 3, per determinare la funzione di correlazione connessa tra gli spin del reticolo, nello specifico passando per la relazione di fluttuazione e dissipazione. Quanto trovato mostra che nella fase simmetrica la correlazione è soppressa esponenzialmente con la distanza, alla temperatura critica invece, la lunghezza di correlazione diverge e la funzione di correlazione decade soltanto a potenza, rendendo possibili comportamenti collettivi a lungo raggio.

In ultima analisi, il capitolo 4 si pone l'obiettivo di studiare gli effetti di taglia finita attraverso delle simulazioni condotte con l'algoritmo di Metropolis. Per sistemi grandi, ma comunque finiti, anche se non è possibile avere una transizione di fase in senso rigoroso, dalle simulazioni risulta evidente che il comportamento del reticolo tende molto velocemente a ciò che ci si aspetta dal limite termodinamico.

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
1.1	Transizioni del Secondo Ordine . . . . .	2
1.2	Considerazioni sui Sistemi Magnetici . . . . .	2
1.3	Analiticità della Funzione di Partizione nel Limite Termodinamico . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Modello di Ising</b>	<b>5</b>
2.1	Definizione . . . . .	5
2.2	Approssimazione di campo medio . . . . .	5
2.3	Temperatura Critica e Transizione di Fase . . . . .	7
2.3.1	Comportamento della Magnetizzazione a Basse Temperature . . . . .	8
2.3.2	Comportamento della Magnetizzazione attorno a $T_C$ . . . . .	9
2.4	Modello di Ising in Infinite Dimensioni . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Funzione di Correlazione Connessa tra gli Spin del Reticolo</b>	<b>12</b>
3.1	Relazione di Fluttuazione e Dissipazione . . . . .	12
3.2	Lunghezza di Correlazione . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Simulazione del Modello con Metodi Monte Carlo</b>	<b>16</b>
4.1	Effetti di Taglia Finita . . . . .	16
4.2	Algoritmo di Metropolis . . . . .	17
4.3	Risultati . . . . .	19
	<b>Bibliografia</b>	<b>21</b>

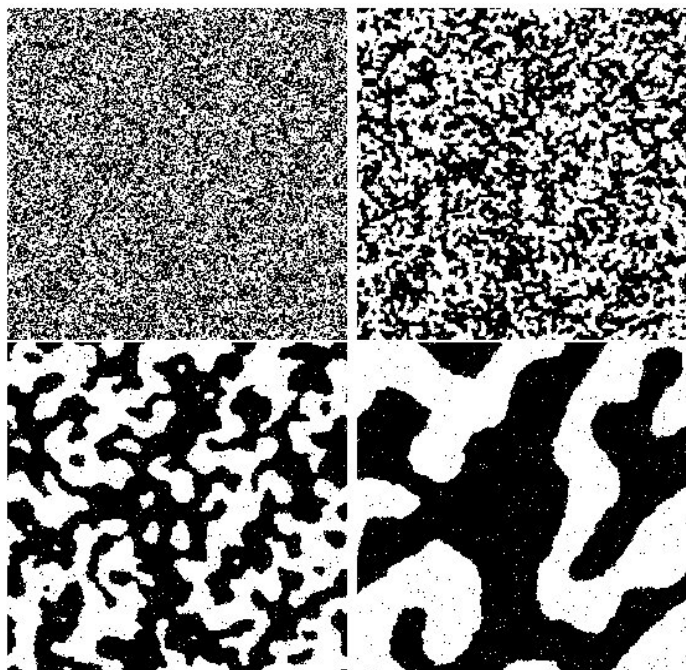


# Capitolo 1

## Introduzione

L'importanza del Modello di Ising è criticamente legata al fatto che, nonostante la sua semplicità, macroscopicamente esso presenta dei comportamenti complessi, consentendo di introdurre i principali concetti che caratterizzano le **transizioni di fase**.

Generalmente, soprattutto per modelli classici, si è abituati a pensare che le quantità che descrivono un sistema siano funzioni ovunque differenziabili. Questo modello, invece, è esempio del fatto che, quando una grande quantità di particelle interagisce, è possibile che il comportamento collettivo risultante sia completamente diverso da quello del singolo costituente; per di più, alcune grandezze macroscopiche non risultano essere funzioni analitiche. Infatti, questo modello delinea a grandi linee il fenomeno della magnetizzazione spontanea a basse temperature.



**Figura 1.1.** Esempio delle strutture macroscopiche che si formano nel reticolo quando, in assenza di campo magnetico esterno, viene abbassata la temperatura.

Per di più, il comportamento attorno al punto critico, che delimita la transizione di fase, ha un'importanza ancora più profonda, in quanto legata al fenomeno

dell'**universalità**. Infatti, molte sostanze, a prescindere dalla loro costituzione microscopica, presentano un comportamento identico lungo la transizione.

Determinate quantità attorno alla temperatura critica, ha un andamento del tipo:  $|T - T_c|^{-\alpha}$ , dove l'esponente risulta comune a tale classe di sostanze e viene detto **esponente critico**.

In generale, le transizioni di fase sono legate al fatto che qualsiasi tentativo di far passare il sistema tra due configurazioni caratterizzate da una diversa simmetria, provocherà necessariamente una violenta transizione di fase.

Questa serie di fenomeni, sembrerebbe mostrare che l'organizzazione universale avvenga per scala, nel senso che la dinamica microscopica influenza i comportamenti macroscopici, ma non il contrario. Nello specifico, tale organizzazione sembra essere rigorosamente gerarchica, nel senso che la piccola scala influenza la grande scala, ma non quella ancora più grande. Nel senso che, nel caso specifico del modello di Ising, vedremo che uno spin è correlato con tutti gli altri spin del reticolo, ma tale correlazione è compressa esponenzialmente col crescere della distanza tra essi.

Nel corso della discussione ci saranno utili alcune osservazioni generali, che riportiamo qui nel resto dell'introduzione.

## 1.1 Transizioni del Secondo Ordine

Le transizioni di fase ordinarie, anche dette del primo ordine, avvengono in modo discontinuo e inaspettato, nel senso che nessuna grandezza termodinamica sembra anticipare il salto tra i due stati. Per cui, per un sistema che può subire una transizione di questo tipo, è sempre possibile indicare in quale delle due fasi esso si trova. Al contrario, nelle transizioni del secondo ordine, lo stato del corpo varia con continuità, è la sua simmetria a subire un brusco cambiamento.

Se lungo le transizioni del primo ordine i corpi nelle due diverse fasi sono all'equilibrio, lungo le transizioni del secondo ordine, gli stati delle due fasi coincidono. Infatti le funzioni di stato termodinamiche sono continue lungo queste transizioni, che infatti non sono legate a processi di assorbimento o emissione del calore, come accade invece in quelle di primo ordine, basti pensare al caso dell'acqua. Al contrario, non è escluso che grandezze termodinamiche derivate, come il calore specifico, presentino una discontinuità. Quanto appena visto, è formalizzato dalla **classificazione di Ehrenfest**:

*Se l'energia libera è una funzione differenziabile  $K$  volte, ma non  $K+1$ , allora tale sistema presenterà una transizione di fase di ordine  $K+1$ .*

Per convenzione tutte le transizioni di ordine superiore al secondo vengono dette del secondo ordine.

## 1.2 Considerazioni sui Sistemi Magnetici

L'isoterma critica della transizione gas-liquido è l'esempio più rappresentativo delle transizioni del secondo ordine, tuttavia la complessità delle interazioni coinvolte rende la trattazione molto complicata. D'altro canto sistemi magnetici vincolati sul reticolo offrono la possibilità di studiare questo tipo di transizioni con una difficoltà notevolmente ridotta.

Per sistemi ferromagnetici si osserva che, sopra la temperatura critica, non vi è

magnetizzazione e il sistema risulta invariante sotto rotazioni. Sotto la temperatura critica, in assenza di campo magnetico esterno, la magnetizzazione residua individua spontaneamente una direzione privilegiata nello spazio, rompendo la simmetria spaziale.

Qui la magnetizzazione ha il comportamento di **parametro d'ordine**: esso esprime univocamente l'appartenenza del sistema alla fase simmetrica o a quella antisimmetrica.

L'isotropia dell'allineamento degli spin è tale che, una determinata configurazione e quella con tutti gli spin invertiti hanno necessariamente la stessa energia ma magnetizzazione opposta. Questa è facile da immaginare: se a temperatura fissata allineo gli spin del reticolo con un campo magnetico esterno  $h$ , la magnetizzazione residua sarà diversa se  $h \rightarrow 0^+$  oppure  $h \rightarrow 0^-$ . Ci aspettiamo allora che l'energia libera abbia un comportamento del tipo:  $f(h) = f(0) - m|h| + O(h^2)$ . La rottura di simmetria in questione viene detta *spontanea*, in quanto in assenza di campo magnetico esterno, anche se l'Hamiltoniana è invariante sotto inversione di Spin, il valore d'aspettazione della magnetizzazione non lo è.

In generale, il parametro d'ordine sarà dunque nullo nello stato simmetrico, positivo o negativo in quello asimmetrico, proprio a causa della rottura di simmetria spontanea.

Per i sistemi magnetici con campo magnetico esterno uniforme, per studiare il comportamento attorno la transizione, ci saranno utili, le seguenti quantità:

$$m_\nu = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial h_\nu} \quad \chi_{\mu\nu} = \frac{\partial m_\mu}{\partial h_\nu} \quad (1.1)$$

La dimostrazione della prima relazione è molto semplice, basta valutare il valor medio dello spin  $m := \frac{1}{N} \langle \sum_i \sigma_i \rangle$ .

### 1.3 Analiticità della Funzione di Partizione nel Limite Termodinamico

Poiché le transizioni di fase sono associate ai punti di non analiticità dell'energia libera, è interessante discutere l'esistenza di questi punti dato che:

$$F(T, h, V) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(T, h, V)) \quad Z(T, h, V) = \int ds e^{-\beta H(s)} \quad (1.2)$$

Cioè  $F(T, h, V)$  è il logaritmo di una funzione che non sembra mostrare singolarità per  $\beta \in \mathbb{R}^+$ . Il problema si pone quando il volume tende ad infinito a densità fissata. Dobbiamo dunque controllare il comportamento delle singolarità complesse della funzione di partizione quando  $V \rightarrow \infty$ : se esse convergono sull'asse reale allora  $Z(T, h, V)$  nel limite termodinamico presenta delle singolarità che danno luogo alle transizioni di fase.

Il discorso è formalizzato dai seguenti teoremi dovuti a Yang e Lee.

#### Teorema

Sia  $z$  la fugacità, allora esiste finito  $\forall z > 0$  il limite:

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln(Z(z, V))$$

Inoltre, esso è una funzione continua e non decrescente di  $z$ , e non dipende dalla forma di  $V$  fintanto che la superficie è  $O(V^{2/3})$ .



**Teorema** *Considerando  $R \subset \mathbb{C}$ , tale che sia incluso un segmento di asse reale positivo, se  $\forall z \in R$  la funzione di gran partizione non mostra singolarità allora la quantità  $V^{-1} \ln(Z)$  converge uniformemente al suo limite per  $V \rightarrow \infty$ . Inoltre tale limite è analitico  $\forall z \in \mathbb{R}$ .*

Per cui, dal secondo teorema capiamo che se esiste una regione  $R$  che contiene una singolarità, non ci è garantita l'analiticità della funzione di gran partizione nel limite termodinamico.

Inoltre, come corollario si ha che non si manifestano transizioni in sistemi di taglia finita.

## Capitolo 2

# Modello di Ising

### 2.1 Definizione

Il modello di Ising è un insieme di variabili discrete, dette impropriamente *Spin*, che possono assumere soltanto due valori, per convenzione  $\sigma_i = \pm 1$ . Essi sono definiti su i nodi di un reticolo, dove ciascun costituente interagisce con i rispettivi primi vicini. L'energia sarà dunque data da un termine dovuto all'interazione con un campo magnetico esterno e un termine di mutua interazione a primi vicini, il quale nel caso si voglia modellizzare un comportamento ferromagnetico è tale da favorire l'allineamento degli spin.

$$H(\{\sigma\}) = -h \sum_i \sigma_i - \frac{J}{2D} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.1)$$

La costante  $J$  è detta di accoppiamento, più in generale essa può un tensore che dipende dallo spazio, ma qui ci limiteremo al caso isotropo e omogeneo.

Il modello descritto rappresenta un'estrema esemplificazione classica del modello quantistico di Heisenberg. Nonostante la sua semplicità, il modello di Ising è risolvibile analiticamente soltanto in una dimensione, dove però non presenta una transizione di fase; in due dimensioni è possibile fornire una soluzione esatta solo in assenza di campo magnetico esterno.

Un approccio alternativo è quello di cercare una soluzione di campo medio; uno strumento prezioso con il quale è possibile fornire risultati approssimati in qualsiasi dimensione.

### 2.2 Approssimazione di campo medio

E' possibile ottenere la distribuzione di probabilità canonica, come funzione che minimizza il funzionale energia libera, definito dall'eq.(2.2).

$$F[P] = E[P] - TS[P] \Rightarrow P_{can} = \operatorname{argmin}\{F[P]\} \quad F := F[P_{can}] \quad (2.2)$$

Se non ci concentriamo sul vero minimo, ma cerchiamo una distribuzione che minimizza  $F[P]$  vincolata alla richiesta che essa si fattorizzi su tutti gli spin, allora il problema viene semplificato notevolmente. Sicuramente  $F[\prod_i P_i] \geq F \quad \forall P_i$ , si dovrà infatti discutere quanto siano i risultati di questa brutta approssimazione.

La soluzione che cerchiamo sarà allora del tipo  $P(\{\sigma\}) = \prod_{i=1}^N P(\sigma_i)$ .  
Imponendo le seguenti relazioni:

$$\begin{cases} 1 = P_i(\sigma = 1) + P_i(\sigma = -1) \\ m_i = P_i(\sigma = 1) - P_i(\sigma = -1) \end{cases}$$

si ottiene un'espressione per la probabilità di singolo spin:

$$\Rightarrow P(\sigma_i) = \frac{1 + m_i}{2} \delta_{\sigma_i, 1} + \frac{1 - m_i}{2} \delta_{\sigma_i, -1} \quad (2.3)$$

Sapendo che le configurazioni di equilibrio sono determinate dai minimi dell'energia libera, valutiamo i valori di aspettazione dell'energia e dell'entropia con questa probabilità fattorizzata. In questo modo ci sarà possibile determinare  $F[\prod_i P(\sigma_i)]$  e conseguentemente i suoi punti stazionari.

**Energia:** Risulta utile riscrivere la somma sui primi vicini dell'espressione dell'hamiltoniana dell'eq.(2.1), come somma su tutti gli spin, dove però la costante di accoppiamento è un tensore, con elementi non nulli solo per indici tale che  $|i - j| = 1$ .

$$E = \left\langle - \sum_i \sigma_i h - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{J_{ij}}{2D} \sigma_i \sigma_j \right\rangle = -Nmh - \frac{1}{2} m^2 \sum_{i,j} J_{ij}$$

In D dimensioni, si hanno  $2D$  primi vicini per ogni nodo, per cui  $\sum_{i,j} J_{ij} = 2DNJ$ .

$$E(m) = -N \left( mh + m^2 \frac{J}{2} \right) \quad (2.4)$$

**Entropia:** Poiché abbiamo ricavato una distribuzione discreta, per valutare l'entropia è possibile usare la definizione di Shannon:

$$S[P] = - \langle \log P \rangle_P = \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma_i = \pm 1} P_i(\sigma_i) \log P_i(\sigma_i) \quad (2.5)$$

Sostituendo l'espressione (2.3), si ottiene:

$$s(m) := \frac{S(m)}{N} = - \frac{1+m}{2} \log \left( \frac{1+m}{2} \right) - \frac{1-m}{2} \log \left( \frac{1-m}{2} \right) \quad (2.6)$$

E' interessante notare che l'entropia si annulla soltanto quando  $m = \pm 1$ , è maggiore di zero quando  $m \in (-1, 1)$  e non è ben definita altrimenti. Inoltre, essa è simmetrica in  $m$ .

Ci sarà utile in seguito la sua derivata:

$$s'(m) = - \frac{1}{2} \log \left( \frac{1+m}{1-m} \right) = -m$$

**Energia Libera:** Il funzionale energia libera, calcolato su questa distribuzione, sostituendo le espressioni trovate per l'energia e l'entropia risulta essere:

$$F(m) = -N \left[ mh + m^2 \frac{J}{2} + \frac{1}{\beta} s(m) \right] \quad (2.7)$$

La configurazione d'equilibrio, in funzione di  $h$  e  $\beta$ , sarà il minimo in  $m$  di questa espressione.

$$f'(m) = -h - Jm + \frac{1}{\beta} \operatorname{arctanh}(m) = 0$$

Dalla quale si ottiene, l'espressione cercata:

$$m = \tanh \beta(Jm + h) \quad (2.8)$$

Successivamente studieremo la derivata seconda per classificare la stabilità dei punti di equilibrio.

L'approssimazione fatta nel richiedere la fattorizzazione della probabilità ci ha portato ad un risultato detto di *campo medio*, perché corrisponde a quanto si sarebbe ottenuto se al posto del campo efficace che agisce sul singolo spin, avessimo sostituito il suo valor medio  $\langle h_i^{eff} \rangle = h + \frac{mJ}{2}$ .

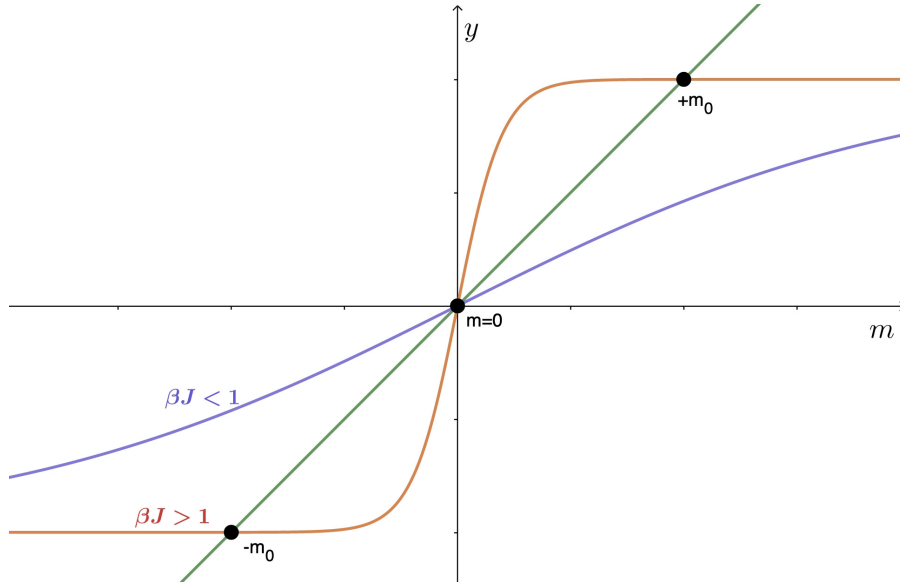
Tale campo efficace è definito dalla seguente riscrittura:

$$H(\{\sigma\}) = - \sum_i \sigma_i \left( h + \frac{1}{2} \sum_j \frac{J_{ij}}{2D} \sigma_j \right) = - \sum_i \sigma_i h_i^{eff}$$

## 2.3 Temperatura Critica e Transizione di Fase

Esploriamo il comportamento della magnetizzazione in approssimazione di campo medio in assenza di campo magnetico al variare della temperatura. Una rappresentazione grafica di tale equazione trascendente è riportata in fig.(2.1) in cui è mostrato:

$$\begin{cases} y = m \\ y = \tanh \beta J m \end{cases}$$



**Figura 2.1.** Equazione trascendente per la magnetizzazione, ottenuta dall'approssimazione di campo medio, nel caso in cui  $h = 0$ . Le intersezioni rappresentano le configurazioni stabili della magnetizzazione.

E' possibile notare che al variare della temperatura, le soluzioni per la magnetizzazione sono una o tre. Per mostrare analiticamente l'esistenza di una temperatura critica  $T_C$  che separi nettamente questi due comportamenti, è conveniente calcolare la suscettibilità per poi trovare un'espressione del campo magnetico  $h$  in funzione della magnetizzazione.

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{(1 - m^2)\beta}{1 - \beta J + m^2\beta J}$$

Dalla quale potremmo trovare  $h(m)$  e vedere le possibili configurazioni di  $m$  tale per cui  $h = 0$  e discutere le varie condizioni affinché si abbiano una o tre soluzioni. In realtà dalla fig. (2.2) si vede subito che tale condizione è equivalente al richiedere che  $h(m)$  ammetta punti estremali.

La derivata prima del campo magnetico è data dall'inverso della suscettibilità, per cui si ha:

$$\frac{dh}{dm} = 0 \iff m^2 = \frac{\beta J - 1}{\beta J}$$

La condizione trovata è rispettata soltanto se  $\beta J > 1$ . La soluzione  $m = 0$  è un minimo per  $\beta J < 1$  e un massimo per il caso complementare:

$$\left. \frac{d^2 f}{dm^2} \right|_{m=0} = -J + \frac{1}{\beta} > 0 \iff \beta J < 1$$

Ricapitolando, i **punti di equilibrio stabile** per  $h = 0$  sono:

$$\begin{cases} m = 0 & \text{se } \beta J < 1 \\ m = \pm m_0 & \text{se } \beta J > 1 \end{cases}$$

Cioè esiste una temperatura critica  $T_C = J$ , al di sotto del quale  $m \neq 0$ , invece per temperature maggiori la magnetizzazione è nulla.

Dunque  $m$  è il parametro d'ordine della transizione del secondo ordine che subisce questo sistema di spin.

Generalmente il calcolo di  $m_0$  è ottenuto numericamente, è possibile però vederne il comportamento approssimato per due casi limite in assenza di campo magnetico:  $T \ll 1$  e  $\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \ll 1$ .

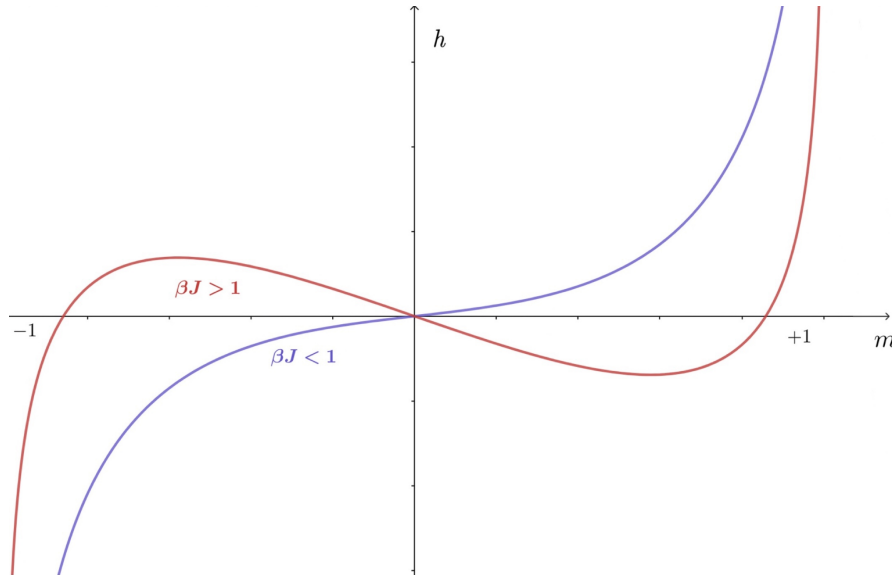
### 2.3.1 Comportamento della Magnetizzazione a Basse Temperature

In presenza di campo magnetico esterno risulta cruciale la discussione del segno dell'argomento della tangente iperbolica nell'espressione della magnetizzazione. Se invece  $h = 0$ , il segno è completamente identificato dalla magnetizzazione stessa. In tal caso risulta immediato il seguente sviluppo:

$$m = \tanh \beta(Jm) = \pm \frac{1 - e^{-2\beta Jm}}{1 + e^{-2\beta Jm}} = \pm \left(1 - 2e^{-2\beta J|m|}\right) + O(e^{-4\beta J|m|})$$

Riscrivendo il tutto in termini della temperatura e trascurando i termini sotto-dominanti:

$$m \simeq \pm \left(1 - 2e^{-2J|m|\frac{T_c}{T}}\right) \simeq \pm \left(1 - 2e^{-2T_c/T}\right) \quad (2.9)$$



**Figura 2.2.** Andamento del campo magnetico  $h$  scritto in funzione della magnetizzazione. Si noti che per  $h = 0$ , si hanno uno o tre soluzioni a seconda che la temperatura sia maggiore o inferiore di quella critica.

### 2.3.2 Comportamento della Magnetizzazione attorno a $T_C$

Il limite attorno alla temperatura critica va approcciato dal basso ( $T \rightarrow T_c^-$ ), altrimenti, percorrendolo dall'alto la magnetizzazione è nulla. In questo caso  $\beta J = O(1)$ , ma la magnetizzazione sta tendendo a zero. Anche qui risulta più semplice valutare lo sviluppo in assenza di campo magnetico.

$$m = \tanh \beta J m = \pm \beta J m \mp \frac{(\beta J m)^3}{3} + O(m^5)$$

Visto che ci troviamo sotto la temperatura critica, la magnetizzazione è non nulla, di conseguenza risulta possibile dividere per  $m$ . In questo modo:

$$m^2 \simeq \frac{3}{\beta J} \left( 1 - \frac{1}{\beta J} \right)$$

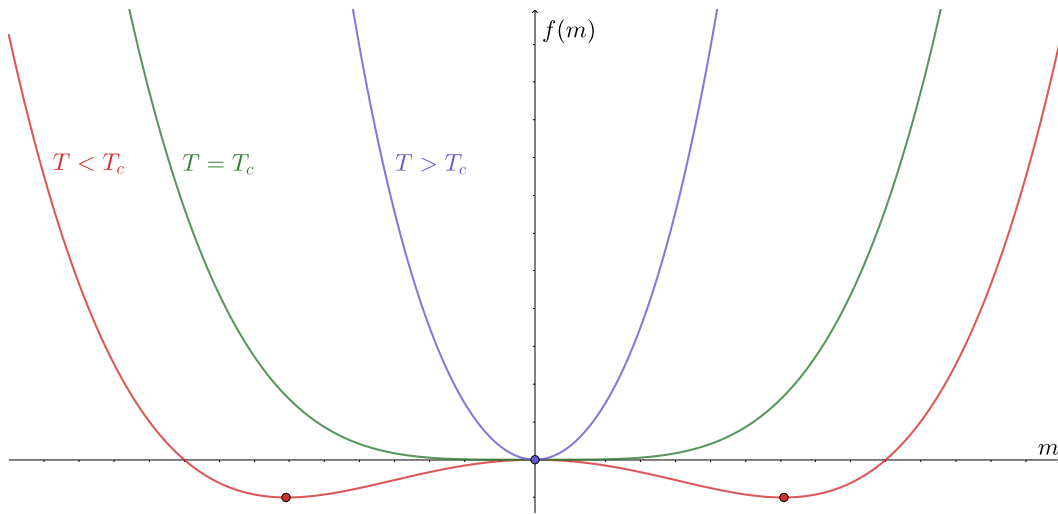
L'espressione finale per la magnetizzazione è:

$$m \simeq \pm \sqrt{3} \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \quad (2.10)$$

L'esponente  $\beta = \frac{1}{2}$  è l'esponente critico della magnetizzazione e ne caratterizza comportamento della prossimità del transizione di fase. Attorno a tale regione, è possibile il seguente sviluppo:

$$f(m) = -T \log 2 - h m + \frac{1}{2} (T - T_c) m^2 + \frac{1}{12} T m^4 + O(m^4) \quad (2.11)$$

Il termine lineare, termine dominante dell'espansione, è presente soltanto se vi è campo magnetico. In assenza di quest'ultimo, l'energia libera è una funzione simmetrica. Se invece  $h \neq 0$  allora  $f(m)$  non ha parità definita, in quanto viene



**Figura 2.3.** Attorno la temperatura critica la stabilità delle configurazioni della magnetizzazione dipende criticamente da  $T$ . Tali configurazioni stabili sono i minimi di  $f(m)$ , come evidenziato in figura.

favorita, tra le due, la configurazione concorde con tale perturbazione esterna. Ponendo  $h = 0$  l'energia libera mostra il comportamento in fig.(2.3).

Se la temperatura è quella critica, la configurazione a magnetizzazione nulla in realtà è data da due soluzioni coincidenti, dando luogo ad uno stato metastabile. Infatti, abbassando la temperatura tale degenerazione viene risolta: si ottengono le due configurazioni  $\pm m_0$ . Il sistema è invariante sotto l'inversione  $m \rightarrow -m$ , per cui l'evoluzione verso una delle due specifiche configurazioni comporta una **rottura spontanea di simmetria**.

## 2.4 Modello di Ising in Infinite Dimensioni

E' notevole che la soluzione di campo medio ottenuta è in accordo con la soluzione che si ottiene per un modello di Ising in dimensione infinita. Infatti, quando  $D \rightarrow \infty$  diverge il numero di primi vicini. , con  $N$  numero di spin totali, è possibile dare un'interpretazione alternativa: poiché l'interazione è estesa a tutti gli spin, non solo ai primi vicini, prendendo come costante d'accoppiamento  $J/2N$  l'Hamiltoniana descrive un modello di Ising con forze deboli con range infinito in dimensione arbitraria. Considerando un campo magnetico esterno uniforme, si ha:

$$H(\{\sigma\}) = -h \sum_i \sigma_i - \frac{J}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j \quad (2.12)$$

Dato che la seconda sommatoria è estesa su tutto il sistema vale la seguente relazione:

$$\sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j = \sum_i \sigma_i \cdot \sum_j \sigma_j = \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 \quad (2.13)$$

Questa relazione semplifica notevolmente il calcolo della funzione di partizione.

$$Z(T, h, N) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H(\{\sigma\})} = \sum_{i_1=\pm 1} \cdots \sum_{i_N=\pm 1} \exp \left[ \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 + \beta h \left( \sum_i \sigma_i \right) \right]$$

A questo punto è utile usare la **trasformazione di Hubbard–Stratonovich**:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + \mu x} = e^{\frac{\sigma^2 \mu^2}{2}} \quad (2.14)$$

Prendendo  $\sigma^2 = \frac{\beta J}{N}$  e  $\mu^2 = (\sum_i \sigma_i)^2$ , si ottiene:

$$\begin{aligned} \exp \left[ \frac{1}{2} \frac{\beta J}{N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 \right] &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\beta J}{N}}} \exp \left[ -\frac{N}{2\beta J} x^2 + \left( \sum_i \sigma_i \right) x \right] \\ \Rightarrow Z(T, h, N) &= \sum_{i_1=\pm 1} \cdots \sum_{i_N=\pm 1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\beta J}{N}}} \exp \left[ -\frac{N}{2\beta J} x^2 + \left( \sum_i \sigma_i \right) x + \beta h \left( \sum_i \sigma_i \right) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\beta J}{N}}} e^{-\frac{N}{2\beta J} x^2} \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\sigma_i(x+\beta h)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\beta J}{N}}} e^{-\frac{N}{2\beta J} x^2 + N \log[2 \cosh(x+\beta h)]} \end{aligned}$$

Effettuiamo il cambio di variabile  $x = \beta J m$ , dove per ora  $m$  è soltanto un parametro, successivamente vedremo che è proprio la magnetizzazione.

$$Z(T, h, N) = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int dm e^{-Nf(m)} \quad f(m) = \frac{\beta J}{2} m^2 - \log [2 \cosh \beta(Jm + h)]$$

Applicando il metodo di Laplace, si ottiene la magnetizzazione che domina l'integrale:

$$m^* = \tanh \beta(Jm^* + h) \quad (2.15)$$

Il risultato ottenuto coincide con l'eq.(2.8), risultato ottenuto dall'approssimazione di campo medio.

Manca soltanto da mostrare che la variabile  $m$  introdotta è proprio la magnetizzazione: la funzione di partizione ottenuta è:

$$Z(T, h, N) \simeq \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} e^{-Nf(m^*)} \quad (2.16)$$

$$\Rightarrow F(T, h, N) = -T \log Z(T, h, N) \simeq NTf(m^*)$$

Da cui abbiamo ottenuto che la funzione  $f(m^*)$ , considerata finora un funzione generica, è in realtà la densità di energia libera. A questo punto, sostituendo nell'eq.(1.1) si ottiene subito che  $m^*$  è davvero la magnetizzazione. Valgono dunque tutti i risultati ottenuti nella sez.(2.3).



## Capitolo 3

# Funzione di Correlazione Connessa tra gli Spin del Reticolo

### 3.1 Relazione di Fluttuazione e Dissipazione

Si vuole enfatizzare la relazione che intercorre tra le interazioni locali e gli effetti globali che si hanno quando ci si avvicina alla temperatura critica. Definiamo allora funzione di correlazione connessa per gli spin  $i$  e  $j$  la funzione:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c^{h=0} := (\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle)_{h=0} \quad (3.1)$$

dove i valori di aspettazione si riferiscono alla probabilità canonica. Per il momento vogliamo cercare la relazione per la funzione di risposta esattamente; nella prossima sezione ci sarà possibile effettuare delle approssimazioni usando i risultati della teoria di campo medio sviluppata nel capitolo precedente.

Non sarebbe sensato valutare direttamente la funzione di correlazione connessa in teoria di campo medio, visto che essa è stata costruita a partire dal brutale assunto che la probabilità si fattorizzi. La validità di questa scelta verrà giustificata in corso d'opera.

La funzione di partizione per un reticolo con  $N$  nodi è data dalle seguente espressione.

$$Z(T, h, N) = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ -\beta \left( \frac{J}{2D} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \right) \right\} \quad (3.2)$$

IL campo magnetico è tutt'ora uniforme sul reticolo, ci è però conveniente scrivere  $h_i$ , perché, ricordando le eqs.(1.1), ne segue che la suscettività in assenza di campo magnetico esterno è:

$$\begin{aligned} \chi_{ij} &= \frac{\partial \langle \sigma_j \rangle}{\partial h_i} = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \log Z(t, h, N) \right)_{h=0} \\ &= \frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{Z(T, h, N)} \frac{\partial^2 Z(t, h, N)}{\partial h_i \partial h_j} - \frac{1}{Z^2(T, h, N)} \left( \frac{\partial Z(t, h, N)}{\partial h_i} \right) \left( \frac{\partial Z(t, h, N)}{\partial h_j} \right) \right]_{h=0} \\ &= \beta (\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle)_{h=0} \end{aligned}$$

In questo modo abbiamo determinato la relazione di fluttuazione e dissipazione:

$$\chi_{ij} = \beta \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c^{h=0} \quad (3.3)$$

## 3.2 Lunghezza di Correlazione

La relazione appena trovata per la funzione di correlazione connessa è ovviamente valida soltanto se si sta usando la probabilità canonica, l'uguaglianza nell'eq.(3.3) non è rispettata se i valori medi vengono calcolati su un'altra distribuzione. Siamo dunque interessati a capire quanto sia buona la suscettività calcolata in approssimazione di campo medio. Infatti, l'errore compiuto sulla funzione di risposta è di un ordine inferiore rispetto all'errore che si compirebbe sulla funzione di correlazione. Questo perché, se supponiamo che la differenza tra la distribuzione canonica e quella approssimata sia  $O(\epsilon)$ , allora

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c - \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c^{MF} = O(\epsilon)$$

Nel valutare invece la funzione di partizione, abbiamo minimizzato il funzionale  $F[P]$  sotto l'ipotesi che la probabilità si fattorizzi sugli spin. Avendolo valutato da un principio di minimo, è nullo il primo ordine, per cui:

$$F[P_{can}] - F[P_{MF}] = O(\epsilon^2)$$

Allora si evince che, finché è piccolo l'errore che si commette su  $\delta P$ , è vantaggioso usare la relazione di fluttuazione e dissipazione per calcolare la funzione di correlazione a partire da quella di risposta, valutata in approssimazione di campo medio.

In particolare, concentriamoci sul caso in cui non vi è campo magnetico esterno e  $T > T_c$ .

L'espressione per la magnetizzazione è data dall'eq.(2.8). In realtà in tale espressione avevamo già applicato la somma sui primi vicini, un'espressione più generale è data da:

$$m_i = \tanh \left[ \beta \left( \sum_j \frac{J_{ij}}{2D} m_j + h_i \right) \right] \quad (3.4)$$

Se ci avviciniamo alla temperatura critica dall'alto e accendiamo un piccolo campo magnetico di ordine  $O(\lambda)$ , è ragionevole il seguente sviluppo dell'espressione precedente:

$$h_i \simeq \frac{m_i}{\beta} - \sum_j \frac{J_{ij}}{2D} m_j = \sum_j \left( \frac{\delta_{ij}}{\beta} - \frac{J_{ij}}{2D} \right) m_j$$

Definiamo la matrice  $A_{ji} = \left( \frac{\mathbb{I}}{\beta} - \frac{1}{2D} J \right)_{ji}^{-1}$ , allora la magnetizzazione è data da:

$$m_j = \sum_i A_{ji} h_i \quad (3.5)$$

Il reticolo è invariante sotto traslazione, per cui identificando lo spin  $i$ -esimo con la posizione  $\vec{i}$ , si ha che  $A_{ji} = A(\vec{j} - \vec{i})$ . Cioè l'interazione dipende solo dalla posizione relativa di due spin, non dalla posizione assoluta. In questo modo l'eq.(3.5) risulta essere un prodotto di convoluzione.

Ora, immaginando che il reticolo sia di passo unitario, la prima zona di Brillouin è identificata da  $B : \{p_\nu \in [-\pi, \pi], \nu = 1, \dots, D\}$ .

Chiamiamo  $\vec{r} = \vec{j} - \vec{i}$ , si vede subito che:

$$\sum_{\vec{r}} [\delta(\vec{r}) - \beta J(\vec{r})] e^{i\vec{r} \cdot \vec{p}} = \left( 1 - \frac{\beta J}{D} \sum_{\alpha=1}^D \cos p_\alpha \right)$$

Allora definendo il propagatore:

$$G(\vec{p}) = \left(1 - \frac{\beta J}{D} \sum_{\alpha=1}^D \cos p_{\alpha}\right)^{-1} \quad (3.6)$$

Si ottiene un'espressione per  $A(\vec{r})$  di questo tipo:

$$A_{ji} = \frac{\beta}{(2\pi)^D} \int_B d^D p \, G(\vec{p}) e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{j} - \vec{i})} \quad (3.7)$$

Ricordando che  $\chi_{ij} = \frac{\partial m_j}{\partial h_i}$  dall'eq.(3.5), si ottiene:

$$\chi_{ij} = A_{ji} = A_{ij} \quad (3.8)$$

Dove nell'ultimo passaggio si è usata l'hermitianicità di  $A$ .

Finalmente è possibile determinare la funzione di correlazione connessa, legata alla suscettività dall'eq.(3.3).

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c^{h=0} \simeq \frac{A_{ij}}{\beta} \quad (3.9)$$

Studiamo allora cosa succede a  $A_{ij}$  quando ci avviciniamo alla transizione di fase. Quando  $p^2 \rightarrow 0$  e la temperatura approssima quella critica ( $\beta_c = J^{-1}$ )  $G(\vec{p})$  diverge, di conseguenza diverge l'integrando dell'eq.(3.7) che definisce  $A_{ij}$ . Studiamo tale polo per capire il comportamento della funzione di correlazione attorno a quel punto. Sviluppando il coseno attorno  $p_{\nu} = 0 \, \forall \, \nu$ :

$$G(p) = \frac{1}{1 - \beta J + \frac{\beta J}{2} p^2 + O(p^4)}$$

Se ci mettiamo alla temperatura critica:

$$G(p) \propto \frac{1}{p^2}$$

Per cui l'integrale che definisce  $A_{ij}$  non converge e dunque, visto che la temperatura critica è finita e non nulla, dall'eq.(3.9) si ottiene che *alla transizione di fase diverge la correlazione tra gli spin*.

Più in particolare, per temperature maggiori di quella critica il contributo dominante alla funzione di correlazione è dato dalla dal termine del propagatore con momento nullo, il quale descrive il comportamento a grandi distanze. Per cui concentrandoci sulla regione dove in modulo è piccolo il momento; chiamando

$$a^2 = 2 \frac{1 - \beta J}{\beta J} \quad (3.10)$$

si ha allora:

$$G(p) \propto \frac{1}{p^2 + a^2}$$

Che quindi non è una funzione analitica, piuttosto presenta due singolarità complesse. Se valutiamo la correlazione tra due spin generici, di cui per comodità ne prendiamo uno nell'origine, si ottiene la seguente espressione:

$$\langle \sigma_k \sigma_0 \rangle_c^{h=0} \propto \int_B d^D p \frac{1}{p^2 + a^2} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{k}}$$

In una dimensione è possibile valutare l'integrale con il Teorema dei Residui, in più dimensioni è necessario ricorrere a questa identità:

$$\begin{aligned} \frac{1}{p^2 + a^2} &= \int_0^\infty dt e^{-(p^2 + a^2)t} \\ \Rightarrow \langle \sigma_k \sigma_0 \rangle_c^{h=0} &\propto \int_0^\infty dt \int_B d^D p e^{-(p^2 + a^2)t - i\vec{p} \cdot \vec{k}} \end{aligned}$$

Effettuiamo il cambio di variabile  $\vec{p}' = \vec{p} - i\vec{k}/(2t)$ .

$$\propto \int_0^\infty dt e^{-a^2 t - \frac{k^2}{4t}} \int_B d^D p e^{-p^2 t} \propto \int_0^\infty dt t^{-D/2} e^{-a^2 t - \frac{k^2}{4t}}$$

Chiamando  $s = ta^2$  quel che si ottiene è proporzionale alla funzione di Bessel modificata del secondo tipo  $K_{D/2-1}(ak)$ .

L'espressione integrale per tali funzioni è:

$$K_\nu(z) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} z \right)^\nu \int_0^\infty ds s^{-(\nu+1)} e^{-s - \frac{z^2}{4s}}$$

Se allora ci focalizziamo sugli effetti a lungo raggio, cioè, fissata la temperatura, sviluppiamo per  $ak \gg 1$ . Al primo ordine si ottiene il seguente comportamento asintotico

$$K_{D/2-1}(ak) \sim \frac{e^{-ak}}{\sqrt{ak}}$$

Mettendo insieme i risultati del cambiamento di variabili e della scrittura in termini della funzione di Bessel, si ottiene il risultato finale:

$$\boxed{\langle \sigma_k \sigma_0 \rangle_c^{h=0} \sim \frac{e^{-k/\xi}}{k^{(D-1)/2}}} \quad (3.11)$$

Dove abbiamo definito la **lunghezza di correlazione** come l'inverso di  $a$ :

$$\xi = \sqrt{\frac{\beta J}{2(1 - \beta J)}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{T}{T_c} - 1 \right)^{-1/2} \quad (3.12)$$

In approssimazione di campo medio si è dunque trovato l'esponente critico  $\nu = 1/2$  per la lunghezza di correlazione. Inoltre si osserva che la correlazione tra due spin è esponenzialmente compressa a tutte le temperature maggiori di quella critica. Invece quando  $T \rightarrow T_c$ , diverge la lunghezza di correlazione e dunque  $\langle \sigma_k \sigma_0 \rangle_c^{h=0}$  decade a potenza (solo se  $D > 1$ ) e non più esponenzialmente. Si ha dunque che gli effetti della correlazione diventano rilevanti e inizia ad esserci un comportamento collettivo esteso.

## Capitolo 4

# Simulazione del Modello con Metodi Monte Carlo

### 4.1 Effetti di Taglia Finita

Nella sezione 1.3, si era accennata l'impossibilità, per un sistema a volume finito, di mostrare una transizione di fase. Questo era stato ottenuto come corollario dei teoremi di Yang e Lee, in quanto per un sistema finito la funzione di partizione è sicuramente analitica, almeno per un hamiltoniana regolare.

Mettendo un modello di Ising  $L \times L$  in un bagno termico alla temperatura critica, esso non subirà una vera e propria transizione di fase, visto che  $Z(T, h, N)$  è analitica.

Dal discorso fatto in approssimazione di campo medio, ma il risultato è vero in generale, si è ottenuto che la lunghezza di correlazione diverge quando  $T \rightarrow T_c$ . In questo caso, anche se  $\xi$  diverge, il sistema è finito.

Risulta allora essenziale l'effetto che hanno le condizioni al bordo sul resto del sistema: per volumi comunque grandi, esse si comportano come una perturbazione per un sistema infinito.

Ad esempio, bloccando la configurazione degli spin di bordo, l'effetto è simile a quello di un debole campo magnetico esterno.

In ogni caso, la scelta della condizione al bordo che si compie provoca una differenza d'energia che guida la transizione verso un particolare stato dei due metastabili che si hanno alla temperatura critica. Nelle simulazioni che seguiranno sono state usate condizioni al contorno periodiche, in modo tale da minimizzare gli effetti di reticolo finito.

La proposizione che il comportamento, quando il sistema è grande, sia simile a quello di un sistema finito, non è così azzardata come potrebbe sembrare. Questo perché la correlazione tra gli spin, nella fase disordinata decresce esponenzialmente con la distanza, come mostrato in eq.(3.11). Per cui al centro del reticolo la dinamica sarà molto simile a quella che si ha nel limite termodinamico.

E' dunque escluso che si verifichi una vera e propria transizione, nel modo inteso dalla classificazione di Ehrenfest, ma la presenza della singolarità complessa, che si avvicina all'asse reale man mano che aumentata la taglia del sistema, provoca comportamenti simili ad una transizione di fase: si osserva una fase ordinata e una disordinata.

Sono state allora condotte delle simulazioni con l'algoritmo di Metropolis per reticoli di taglia diversa. I risultati seguono dopo una breve esposizione della strategia intrapresa.

## 4.2 Algoritmo di Metropolis

Data una configurazione iniziale generica, vogliamo costruire un algoritmo che simuli l'evoluzione di tale sistema una volta che esso viene messo a contatto con una sorgente a temperatura  $T$ . A tale scopo, si vuole costruire una catena di Markov i cui stati sono tutte le possibili configurazioni di un reticolo  $L \times L$ . La probabilità limite degli stati di questa catena sarà data proprio dalla distribuzione canonica:

$$u(c) = \frac{e^{-\beta H(c)}}{\int dc e^{-\beta H(c)}} \quad (4.1)$$

In particolare vogliamo costruire tale catena affinché sia reversibile, così che valga l'equazione di bilancio dettagliato:

$$u_i P_{ik} = u_k P_{ki} \quad (4.2)$$

Dove  $P_{ik}$  rappresenta la matrice stocastica delle transizioni tra gli stati della catena. Dobbiamo allora costruire  $P_{ik}$  tale che il suo comportamento asintotico sia quello canonico.

Schematizziamo la transizione tra gli stati come un processo di proposta di cambiamento e uno di accettazione/rifiuto di quest'ultimo. La matrice di proposta  $S_{ik}$  sarà simmetrica e ha il significato di probabilità che venga proposto uno stato  $k$  dato che il sistema si trova nella configurazione  $i$ . La costruiamo in modo che abbia elementi non nulli soltanto per transizioni tra stati le cui configurazioni differiscono soltanto per un spin; per quest'ultimi stati scegliamo una probabilità uniforme di essere proposti.

Di conseguenza la matrice di transizione avrà questa forma:

$$P_{ik} = S_{ik} A_{ik} \quad (4.3)$$

Prendendo due configurazioni tale che  $S_{ik}$  non sia nullo, ovvero i due stati hanno tutti gli spin uguali tranne uno, sfruttano che  $S_{ik}$  è simmetrica, è possibile riscrivere l'equazione di bilancio dettagliato:

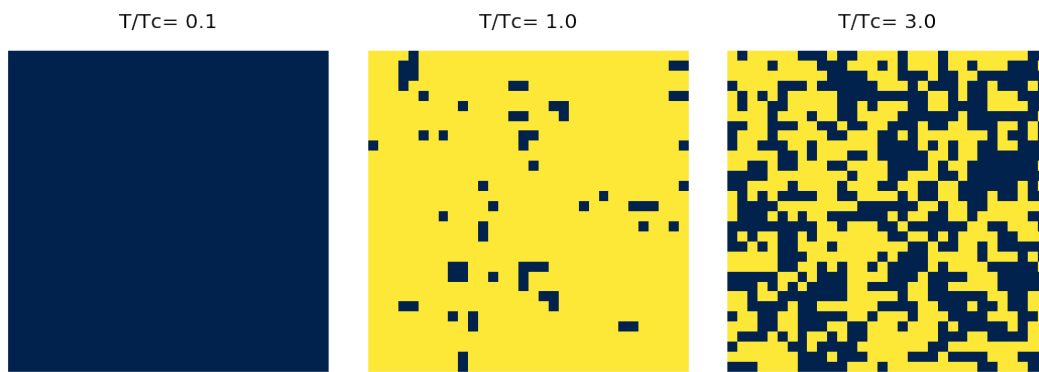
$$e^{\beta H(i)} A_{ik} = e^{\beta H(k)} A_{ki} \Rightarrow \frac{A_{ik}}{A_{ki}} = e^{-\beta(H(k)-H(i))} \quad (4.4)$$

Allora il cambiamento viene accettato con certezza se l'energia dello stato proposto è minore dello stato in cui ci si trova. Se invece è maggiore, esso viene accettato con probabilità  $\exp(-\beta \Delta E)$ .

La strategia usata nella scrittura del codice, può essere schematizzata come segue:

1. Si crea una configurazione iniziale aleatoria.
2. Viene proposta l'inversione di uno spin scelto casualmente tra tutti quelli del reticolo.
3. Se  $\Delta E < 0$  il cambiamento viene accettato
4. Se  $\Delta E > 0$  il cambiamento viene valutato estraendo un numero casuale  $x \in [0, 1]$ ; se  $x < \exp(-\beta \Delta E)$  si accetta la nuova configurazione, altrimenti si rifiuta.
5. Si ricomincia dal punto 2 fino a raggiungere una condizione in cui la porzione di cambiamenti accettati è  $\sim 0.3$ .

Ad esempio, prendendo una generica configurazione iniziale, se si applica l'algoritmo descritto, dopo un numero sufficiente di passi Monte Carlo, si ottengono configurazioni asintotiche in cui la presenza di strutture macroscopiche è criticamente legata alla temperatura a cui si è effettuata la simulazione. Nello specifico, riportiamo in fig.(4.1) le configurazioni a termalizzazione avvenuta, per i casi in cui la temperatura è minore, uguale e maggiore di quella critica. Si noti l'esistenza di una fase simmetrica ed una asimmetrica.



**Figura 4.1.** Una stessa configurazione iniziale è stata fatta evolvere a diverse temperature, si riportano le configurazioni d'equilibrio per i tre casi esplorati.

### 4.3 Risultati

Il motivo principale per cui si effettua una simulazione di questo tipo, è che la probabilità di transizione tende a quella canonica se essa viene scelta come probabilità limite. Per cui questo approccio è ideale per il calcolo delle medie canoniche dei vari osservabili macroscopici a cui siamo interessati.

Analiticamente il valore d'aspettazione di un osservabile generico é

$$\langle O \rangle := \sum_{\{\sigma\}} \frac{e^{-\beta H(\{\sigma\})}}{Z} O(\{\sigma\}) \quad (4.5)$$

Che risulta, in due dimensioni, una sommatoria di  $2^{L^2}$  termini.

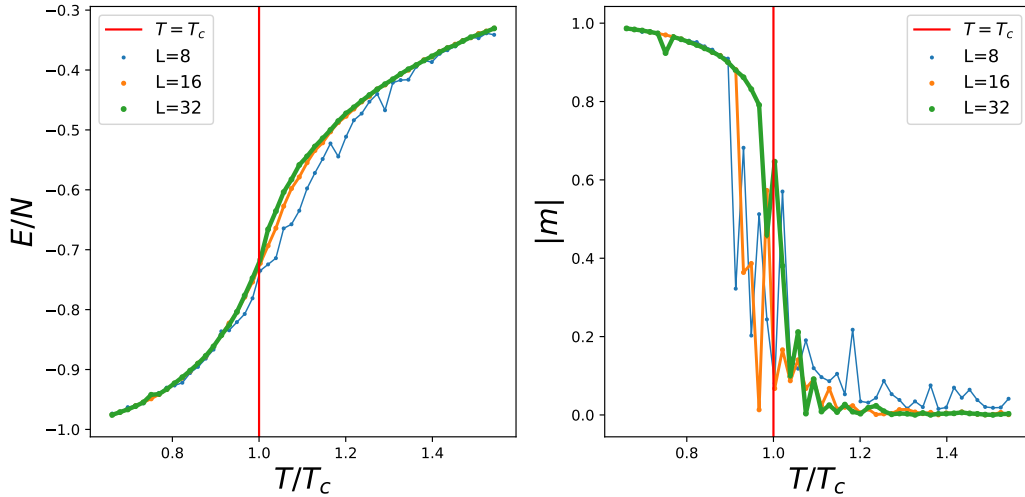
Si vuole allora usare l'algoritmo discusso in precedenza, per valutare l'eq.(4.6) come una media ristretta alle configurazioni che portano un contributo dominante alla sommatoria; questa operazione è solitamente chiamata *Importance Sampling*.

Cioè, otterremo che esplorando la catena di Markov costruita con il criterio appena descritto, la collezione di stati visitati  $\{\sigma\}_{MC}$  è tale che la media canonica è approssimabile in questo modo:

$$\langle O \rangle \simeq \sum_{\{\sigma\}_{MC}} O(\{\sigma\}_{MC}) \quad (4.6)$$

L'osservabile a cui siamo più interessati è la magnetizzazione, in quanto come discusso in precedenza, essa è il parametro d'ordine della transizione.

Simulando per varie dimensioni del reticolo, si osserva che lontano dalla regione di transizione il comportamento della magnetizzazione è conforme a quello di un sistema infinito; questo è dovuto al fatto che la correlazione tra due spin è esponenzialmente soppressa con la distanza tra di essi. Per cui lontano da  $T_C$  ritroviamo il comportamento di alte e basse temperature studiato, dove rispettivamente  $m = 0$  e  $|m| \simeq (1 - 2e^{-2T_c/T})$ .



**Figura 4.2.** E' possibile vedere che lontano da  $T_c$  il comportamento delle osservabili è indipendentemente da  $L$ , soltanto attorno essa emergono delle differenze.

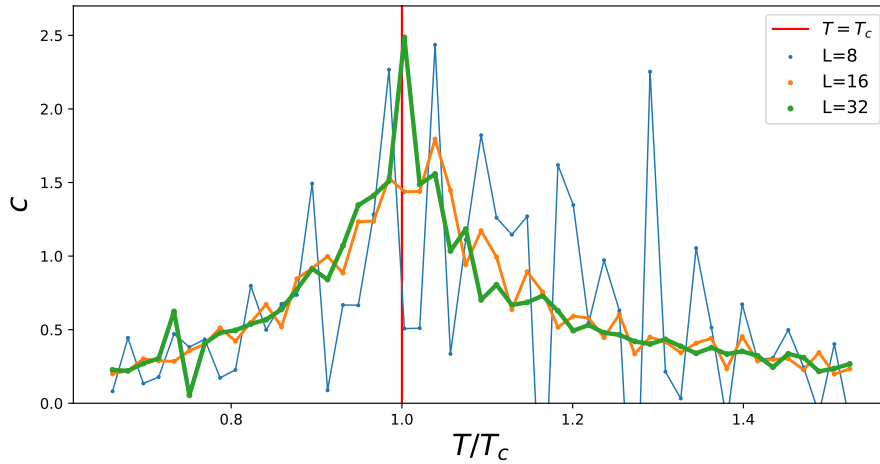


Attorno alla temperatura critica, emergono gli effetti di taglia dovuti al fatto che seppur diverge la lunghezza di correlazione, il reticolo simulato è finito. Infatti, dalla fig.(4.2) si osserva che il modulo della magnetizzazione, abbassando la temperatura, inizia a crescere ben prima di arrivare a  $T_c$  e questo effetto risulta sempre più evidente diminuendo la dimensione del reticolo simulato.

Complessivamente ne risulta una salita molto veloce ma regolare, piuttosto che un salto netto come visto nell'eq.(2.10).

Gli effetti di taglia finita sono visibili anche dall'andamento dell'energia intensiva: lontano dalla transizione l'andamento risulta pressoché indipendente dalla dimensione del sistema, avvicinandosi a  $T_c$  risulta invece possibile distinguere le curve dei tre  $L$  presi in considerazione: 8, 16 e 32.

Inoltre, è stata valutata la capacità termica come il rapporto incrementale dell'energia rispetto alla temperatura. Qui l'approssimazione di campo medio fallisce nel determinare l'esponente critico  $\alpha$  della legge a potenza attorno alla transizione di fase; tale tendenza emerge anche nel caso di reticolo finito, come ottenuto nella simulazione in fig.(4.3). Infatti, si osserva un picco deciso attorno alla temperatura critica, manifestazione della singolarità che si avrebbe nel limite termodinamico.



**Figura 4.3.** Andamento della capacità termica in funzione della temperatura. Nel caso  $L = 8$  gli effetti di taglia finita portavano a risultati il cui andamento era dominato dalle fluttuazioni, per questo motivo non è stato riportato tale caso. Per  $L = 16, 32$  è invece possibile notare come la transizione stia iniziando a crearsi.

In conclusione, lo studio di un sistema grande ma finito è una buona approssimazione di ciò che si osserverebbe per un reticolo infinito: le osservabili coinvolte evidenziano come la transizione stia iniziando a crearsi, mostrando comportamenti simili al limite termodinamico. Questo è in accordo con l'esperienza comune, dove le transizioni di fase si osservano per sistemi macroscopici in cui il numero di componenti è enorme ma finito.

Lontano dalla temperatura, dove la correlazione tra gli spin decade esponenzialmente con la distanza, il comportamento è pressoché indipendente dalla taglia del sistema.

# Bibliografia

- [1] Parisi, G. and Ramamurti, S. "Statistical Field Theory.", Physics Today 41: 110-110 (1988).
- [2] Huang, K. "Statistical Mechanics.", John Wiley Sons (1987).
- [3] Tuckerman, M. E. "Statistical Mechanics.", Oxford : Oxford University Press (2010).
- [4] Ma, S. K. "Statistical Mechanics.", World Scientific Publ. (2004).
- [5] Pathria, R. K. "Statistical Mechanics.", Pergamon Press (1994).