Tecniche combinatorie nel Modello di Ising bidimensionale

Alberto Botto Poala
Relatore Prof. Marco Billò

14.04.2014

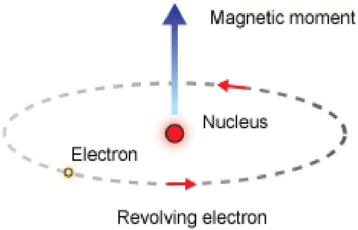
Evidenze Sperimentali

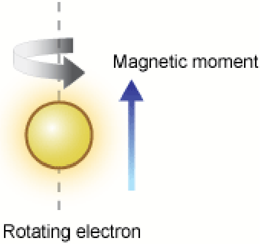
Un atomo può essere dotato di un piccolissimo momento magnetico per due motivi

- rotazione degli elettroni attorno al nucleo
- spin degli elettroni

Momento magnetico totale $\rightarrow$ somma dei due momenti.

ATOMO $\approx$ PICCOLA CALAMITA

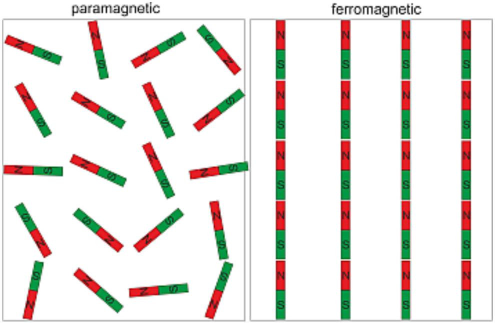




Evidenze Sperimentali

Possono queste piccole calamite allinearsi e dare vita ad un campo magnetico sensibilmente più grande?

PARAMAGNETISMO $\rightarrow \leftarrow$ **FERROMAGNETISMO**



Evidenze Sperimentali

Questa **transizione di fase** avviene

- ad una specifica temperatura T_C, detta temperatura di Curie

Evidenze Sperimentali

Questa **transizione di fase** avviene

- ad una specifica temperatura T_C, detta temperatura di Curie
- Per $T < T_C$ vi è allineamento.
  La suscettività magnetica segue la legge di Curie-Weiss

$$\chi_m = \frac{C\rho}{T - T_C}$$

con C costante del materiale e ρ la sua densità.

Evidenze Sperimentali

Questa **transizione di fase** avviene

- ad una specifica temperatura T_C, detta temperatura di Curie
- Per $T < T_C$ vi è allineamento.
  La suscettività magnetica segue la legge di Curie-Weiss

$$\chi_m = \frac{C\rho}{T - T_C}$$

  con C costante del materiale e ρ la sua densità.
- Per $T > T_C$ non vi è alcun allineamento

Evidenze Sperimentali

Questa **transizione di fase** avviene

- ad una specifica temperatura T_C, detta temperatura di Curie
- Per $T < T_C$ vi è allineamento.
  La suscettività magnetica segue la legge di Curie-Weiss

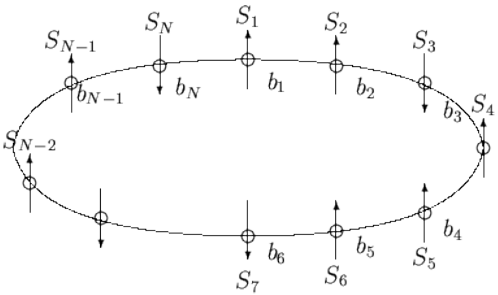
$$\chi_m = \frac{C\rho}{T - T_C}$$

  con C costante del materiale e ρ la sua densità.
- Per $T > T_C$ non vi è alcun allineamento
- **Il Modello di Ising nasce per studiare la dinamica di questo allineamento**

Storia del Modello di Ising

Il problema del ferromagnetismo può essere formulato in una, due o tre dimensioni (o più).

- **1-D** Catena monodimensionale periodica di atomi, studiata da Ernst Ising nel 1924, sotto la guida di Wilhelm Lenz.



Storia del Modello di Ising

- La soluzione monodimensionale non presenta transizioni di fase.

Figura: Ernst Ising 1900-1998

Storia del Modello di Ising

- La soluzione monodimensionale non presenta transizioni di fase.

Figura: Ernst Ising 1900-1998

- Ising riteneva che anche in più dimensioni non ci sarebbero state transizioni di fase. (cfr. *Beitrag zur Theorie des Ferro - und Paramagnetismus*, 1924, BIBLIOTHECA AUGUSTANA on line)

Storia del Modello di Ising

- **2-D** Reticolo di atomi. Venne risolta nel 1949 da Lars Onsager. Già in due dimensioni il modello mostra delle transizioni di fase.

Figura: Lars Onsager 1903-1976

- **3-D** Esistono simulazioni numeriche ma la soluzione analitica non è ancora stata trovata

Modello di Ising - Soluzione di Vdovichenko

Cosa vedremo

- Solo Modello **2-D**

Modello di Ising - Soluzione di Vdovichenko

Cosa vedremo

- Solo Modello **2-D**
- Sviluppo alta temperatura per $Z(T)$

Modello di Ising - Soluzione di Vdovichenko

Cosa vedremo

- Solo Modello **2-D**
- Sviluppo alta temperatura per $Z(T)$
- Soluzione combinatoria di Vdovichenko per $F(T)$

Il Reticolo

Reticolo quadrato periodico con $L \times L = N$ siti.

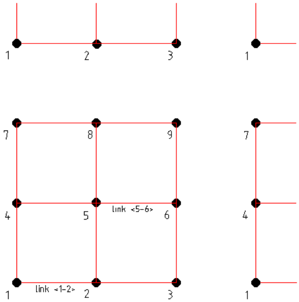


Figura: Reticolo periodico 3×3

- atomo $\rightarrow$ sito

Il Reticolo

Reticolo quadrato periodico con $L \times L = N$ siti.

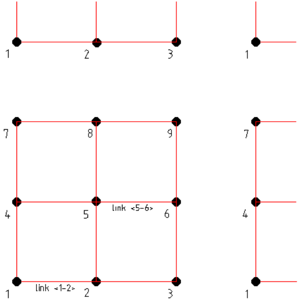


Figura: Reticolo periodico 3×3

- atomo $\rightarrow$ sito
- sito i-esimo $\rightarrow \sigma_i = \pm 1$ (oppure spin $\uparrow$ o $\downarrow$). Rappresenta il momento magnetico.

Il Reticolo

Reticolo quadrato periodico con $L \times L = N$ siti.

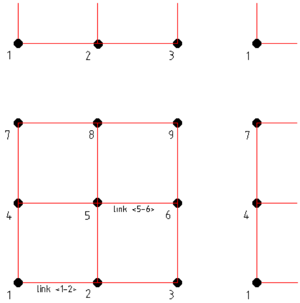


Figura: Reticolo periodico 3×3

- atomo $\rightarrow$ sito
- sito i-esimo $\rightarrow \sigma_i = \pm 1$ (oppure spin $\uparrow$ o $\downarrow$). Rappresenta il momento magnetico.
- Scelta dell'interazione $\rightarrow$ Scelta dell'Hamiltoniana

Approssimazioni

Interazione solo tra i primi vicini. La connessione è detta **Link**.

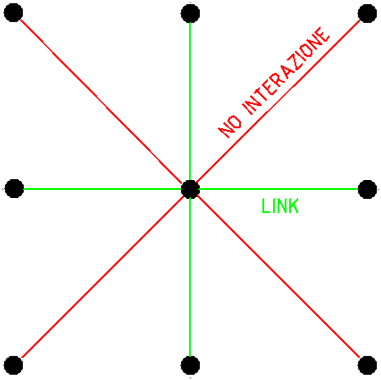


Figura: Schema delle interazioni

Funzione di Partizione nell'Ensemble Canonico

Scelta l'**Hamiltoniana**

$$H_N = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - J' \sum_{(i,k)} \sigma_i \sigma_k$$

e nota la definizone della **Funzione di Partizione** per l'Ensemble Canonico

$$\sum_{\sigma} e^{-\beta E_\sigma}$$

con $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2 ... \sigma_N\}$, si giunge facilmente alla Funzione di Partizione del nostro modello

$$Z_N = \sum_{\sigma} \exp[\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \beta J' \sum_{(i,k)} \sigma_i \sigma_k]$$

Sviluppo ad Alte Temperature

Si può manipolare questa espressione e ottenere

$$Z_N = (\cosh K \cosh K')^N \sum_{\sigma} \left(\prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k) \right)$$

$$\text{con} \quad \begin{cases} v = \tanh J/kT = \tanh K \\ w = \tanh J'/kT = \tanh K' \end{cases}$$

Notiamo che $v,\ w < 1\ \forall T \rightarrow$ **sviluppo in serie**

Cosa vuol dire sviluppare in serie Z_N in v e w?

Sviluppo ad Alte Temperature

Esplicitiamo

$$\prod_{(i,j)}(1+v\sigma_i\sigma_j)\prod_{(i,k)}(1+w\sigma_i\sigma_k) =$$
$$(1+v\sigma_1\sigma_2)\times(1+v\sigma_2\sigma_3)\times\ldots\times(1+v\sigma_{N-1}\sigma_N)\ldots$$
$$\times(1+w\sigma_1\sigma_{L+1})\times(1+w\sigma_2\sigma_{L+2})\times\ldots\times(1+v\sigma_{L(L-1)}\sigma_N) \tag{1}$$

Che cosa ottengo?

- 1
- $v\sigma_i\sigma_{i+1}$ e $w\sigma_j\sigma_{L+j}$
- prodotti dei precedenti.
  Esempio (reticolo 4×4):

$$(v\sigma_5\sigma_6)(v\sigma_6\sigma_7)(v\sigma_{11}\sigma_{12})(w\sigma_1\sigma_5)(w\sigma_{10}\sigma_{14})$$

Configurazione grafica sul reticolo

Questi termini analitici hanno anche un significato geometrico.
Ogni termine può essere disegnato sul reticolo evidenziando i link che contiene. Cosa vuol dire?
Esempio precedente

$$(v\sigma_5\sigma_6)(v\sigma_6\sigma_7)(v\sigma_{11}\sigma_{12})(w\sigma_1\sigma_5)(w\sigma_{10}\sigma_{14})$$

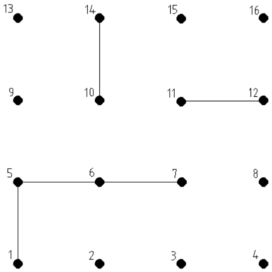


Figura: Configurazione grafica sul reticolo

Configurazione grafica sul reticolo

Altro esempio più interessante

$$(v\sigma_1\sigma_2)(v\sigma_5\sigma_6)(v\sigma_6\sigma_7)(v\sigma_{10}\sigma_{11})(w\sigma_1\sigma_5)(w\sigma_2\sigma_6)(w\sigma_6\sigma_{10})(w\sigma_7\sigma_{11})$$

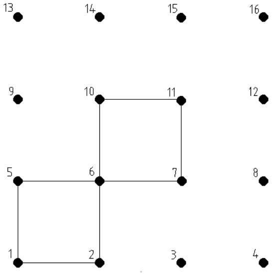


Figura: Configurazione grafica sul reticolo

Notiamo che $\begin{cases} \# \ v & \text{numero di link orizzontali} \\ \# \ w & \text{numero di link verticali} \end{cases}$

Simmetrie in Z(T)

Perchè l'esempio appena visto è più interessante?

- Ogni termine si può scrivere come

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \dots$$

Simmetrie in Z(T)

Perchè l'esempio appena visto è più interessante?

- Ogni termine si può scrivere come

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \dots$$

- Non dimentichiamoci che

$$Z_N = (\cosh K \cosh K')^N \sum_\sigma \left(\prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k) \right)$$

Simmetrie in Z(T)

Perchè l'esempio appena visto è più interessante?

- Ogni termine si può scrivere come

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \dots$$

- Non dimentichiamoci che

$$Z_N = (\cosh K \cosh K')^N \sum_{\sigma} \left(\prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k) \right)$$

- Se n_i dispari allora si cancella.

Simmetrie in Z(T)

Perchè l'esempio appena visto è più interessante?

- Ogni termine si può scrivere come

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \dots$$

- Non dimentichiamoci che

$$Z_N = (\cosh K \cosh K')^N \sum_{\sigma} \left(\prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k) \right)$$

- Se n_i dispari allora si cancella.
- n_i numero di volte che tocco il sito i-esimo $\rightarrow$ sopravvivono solo i grafici chiusi.

Esempio di antisimmetria

Primo esempio

$$(v\sigma_5\sigma_6)(v\sigma_6\sigma_7)(v\sigma_{11}\sigma_{12})(w\sigma_1\sigma_5)(w\sigma_{10}\sigma_{14}) =$$

$$= v^3w^2\sigma_1\sigma_5^2\sigma_6^2\sigma_7\sigma_{10}\sigma_{11}\sigma_{12}\sigma_{14}$$

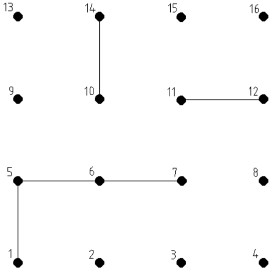


Figura: Configurazione grafica sul reticolo

Esempio di simmetria

Secondo esempio

$$(v\sigma_1\sigma_2)(v\sigma_5\sigma_6)(v\sigma_6\sigma_7)(v\sigma_{10}\sigma_{11})(w\sigma_1\sigma_5)(w\sigma_2\sigma_6)(w\sigma_6\sigma_{10})(w\sigma_7\sigma_{11}) =$$

$$= v^4 w^4 \sigma_1^2\sigma_2^2\sigma_5^2\sigma_6^4\sigma_7^2\sigma_{10}^2\sigma_{11}^2$$

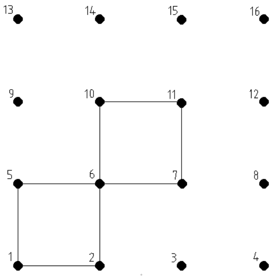


Figura: Configurazione grafica sul reticolo

Sopravvivono solo i termini con σ_i pari, quindi possiamo scrivere

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \ldots = v^r w^s$$

Ne avremo 2^N per ogni valore della coppia r, s.
La funzione di partizione diventa

$$Z_N = 2^N (\cosh K \cosh K')^N \sum_P v^r w^s$$

con P insieme delle poligonali chiuse disgiunte.
Quindi com'è fatta $\Phi(v, w) = \sum_P v^r w^s$?

I primi termini dello sviluppo

$$\begin{aligned}\sum_{P} v^r w^s =& 1 + \underline{Nv^2w^2} + \underline{Nv^2w^4 + Nv^4w^2} + \\ & + \underline{Nv^2w^6 + Nv^6w^2} + \frac{1}{2}N(N+5)v^4w^4 + \dots\end{aligned} \tag{2}$$

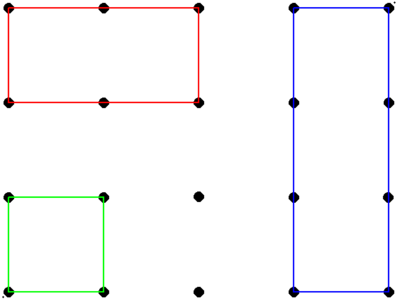


Figura: Configurazione grafica dei primi termini dello sviluppo

I termini successivi

I termini $\frac{1}{2}N(N+5)v^4w^4$ sono

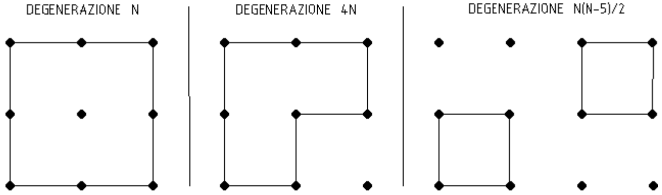


Figura: Configurazione grafica sul reticolo dei termini v^4w^4

Dallo sviluppo alla soluzione di Vdovichenko

- Abbiamo ottenuto lo sviluppo ad alte T per la Funzione di Partizione $Z(T)$
- Partiamo quindi con la **Soluzione combinatoria di Vdovichenko** per arrivare all'Energia Libera $F(T)$

Poniamo $J = J' \rightarrow v = w$.

$$\begin{aligned}\Phi(v,w) =& 1 + \underline{Nv^2w^2} + \underline{Nv^2w^4 + Nv^4w^2} + \\ &+ \underline{Nv^2w^6 + Nv^6w^2 + \tfrac{1}{2}N(N+5)v^4w^4} + \ldots = \\ &= 1 + \underline{Nv^4} + \underline{2Nv^6} + \underline{\tfrac{1}{2}N(N+9)v^8} \ldots = \Phi(v)\end{aligned} \tag{3}$$

Anche la funzione di partizione si semplifica e diventa

$$Z_N = 2^N(1-v^2)^{-N}\Phi(v) \tag{4}$$

con

$$\Phi(v) = \sum_r g_r v^r$$

L'unica incognita è g_r, numero di grafici disgiunti di perimetro r.

Dalle configurazioni grafiche ai cammini chiusi

La soluzione di Vdovichenko prevede di trasformare le configurazioni grafiche come dei **cammini chiusi**.
Sorgono dei problemi:

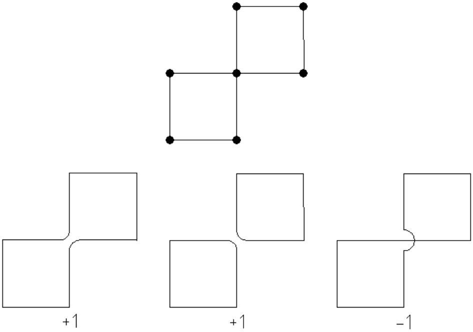


Figura: Elemento di v^8 ambiguo

Dalle configurazioni grafiche ai cammini chiusi

Altro apparente problema

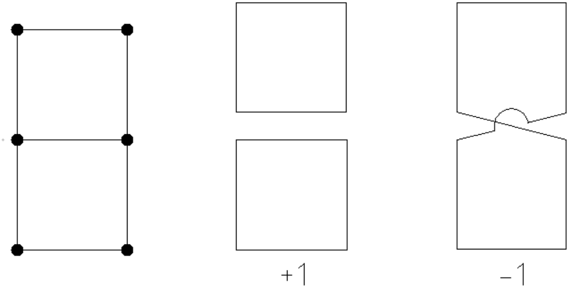


Figura: Altro grafico ambiguo

Generalizzazione del teorema di Gauss

- Teorema di Gauss
  Angolo spazzato dalla tangente di una curva piana **senza autointersezioni** è 2π

Generalizzazione del teorema di Gauss

- Teorema di Gauss
  Angolo spazzato dalla tangente di una curva piana **senza autointersezioni** è 2π
- Si può generalizzare ad una curva **con autointersezioni** e vale $2(k+1)\pi$, con k numero pesato dei nodi.

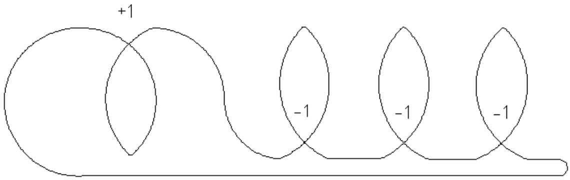


Figura: L'angolo spazzato è -2π

La definizione di maglia

Ricordiamo che

- **maglia** $\rightarrow$ una sola poligonale chiusa
- **grafico** $\rightarrow$ l'unione di una o più maglie disgiunte

Perché questa definizione?
Non cerchamo direttamente il grafico di perimetro r ma passiamo attraverso le maglie che lo compongono.
f_r numero di maglie disegnabili con perimetro r allora per i grafici composti da due maglie vale

$$g_r^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{r_1+r_2=r} f_{r_1} f_{r_2}$$

Grafici come unione di maglie

Vogliamo combinare

- quante maglie voglio $\rightarrow s$
- di tutte le lunghezze possibili $\rightarrow r_1, r_2 \ldots r_s$

$$\Phi(v) = \sum_{s=1} (-1)^s \frac{1}{s!} \sum_{r_1, r_2, \ldots = 0}^{\infty} v^{r_1 + r_2 + \ldots r_s} f_{r_1} \ldots f_{r_s}$$

Questa espressione si può manipolare e ottenere uno sviluppo in serie di un esponenziale nella forma

$$\Phi(v) = \exp\left[- \sum_{r=0}^{\infty} v^r f_r \right]$$

indicando con $r = r_1 + r_2 + \ldots + r_s$ e con $f_r = f_{r_1} \times f_{r_2} \times \ldots \times f_{r_s}$

L'unica incognita è f_r, numero di maglie di lunghezza r.

Parametrizzazione delle poligonali

Come ci si muove su un reticolo?

- Layout dell'informazione:

$$(i, j, \mu)$$

dove i, j sono le coordinate del sito e μ indica la direzione **di ingresso** nel sito nel modo seguente

μ	1	2	3	4
direzione	$\rightarrow$	$\downarrow$	$\leftarrow$	$\uparrow$

Parametrizzazione delle poligonali - Funzione W

- Date le condzioni iniziali (i_0, j_0, μ_0), definisco

  $W_r(i, j, \mu) = \#$ *pesato di cammini da* (i_0, j_0, μ_0) *a* (i, j, μ) *lunghi* r

- Per chiudere i cammini basta chiedere

  $$W_r(i_0, j_0, \mu)$$

  e per definizione si torna al punto di partenza

Proprietà ricorsive di W

Ovviamente la funzione W gode di proprietà ricorsive

$$W_{r+1}(i,j,1) = \\ W_r(i-1,j,1) + e^{-i\frac{\pi}{4}} W_r(i-1,j,2) + 0 + e^{i\frac{\pi}{4}} W_r(i-1,j,4) \tag{5}$$

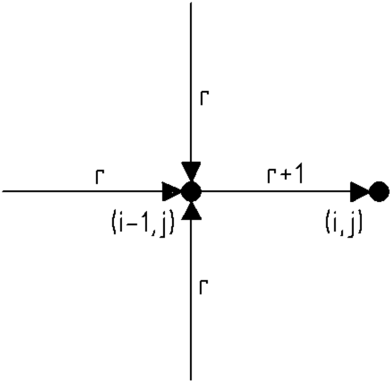


Figura: Rappresentazione grafica dell'equazione ricorsiva

La matrice Λ

- Ho molte equazioni ricorsive al variare di posizione e direzione
- Sono tutte lineari

Deduco che esiste una matrice Λ tale per cui

$$W_{r+1}(i,j,\mu) = \sum_{i',j',\mu'} \Lambda(ij\mu|i'j'\mu')W_r(i',j',\mu')$$

che essendo ricorsiva diventa

$$W_{r+1}(i,j,\mu) = \sum_{i_0,j_0,\mu_0} \Lambda^{r+1}(ij\mu|i_0j_0\mu_0)W_0(i_0,j_0,\mu_0)$$

Notiamo che Λ è una matrice di grandi dimensioni.

Significato della matrice Λ

La matrice Λ è l'oggetto che mi permette di fare evolvere il sistema.
I suoi coefficienti

$$\Lambda^r(i, j, \mu | i_0, j_0, \mu_0)$$

mi dicono se è possibile (e se sì con che fase) andare da (i_0, j_0, μ_0) a (i, j, μ).
Ricordiamoci che la scelta di μ_0 non cambia il percorso, possiamo sceglierla come vogliamo. Poniamo

$$\mu_0 = \mu$$

Il significato di $\mathrm{Tr}\,\Lambda^r$

Quindi la traccia di Λ^r

$$\mathrm{Tr}\,(\Lambda^r) = \sum_{i_0, j_0, \mu} \Lambda^r(i_0, j_0, \mu | i_0, j_0, \mu)$$

è, a meno di un prefattore $1/2r$, il numero di tutte le maglie di lunghezza r che possiamo evidenziare sul reticolo.

$$f_r = \frac{1}{2r}\,\mathrm{Tr}\,(\Lambda^r)$$

Come trovo $\mathrm{Tr}\,(\Lambda^r)$?

La traccia è un invariante

Essendo la traccia un invariante possiamo calcolarla nella base diagonale, e otteniamo

$$f_r = \frac{1}{2r} \operatorname{Tr}\left(\Lambda^r\right) = \frac{1}{2r} \sum_a \lambda_a^r$$

dove λ_a autovalori di Λ, che sono le nostre nuove incognite.

Implementazione degli autovalori

Supponiamo di avere gli autovalori

$$\Phi(v) = \exp\left[-\sum_{r=0}^{\infty} v^r f_r\right] = \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_i \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} v^r \lambda_i^r\right]$$

Si riconosce lo sviluppo in serie di un logaritmo nella variabile $(v\lambda_i)$

$$\Phi(v) = \exp\left[\frac{1}{2}\sum_i \log(1 - v\lambda_i)\right] = \prod_i \sqrt{1 - v\lambda_i}$$

Calcolo degli autovalori

Potremmo dimostrare che

$$\prod_i 1 - v\lambda_i = \det(\mathbf{1} - v\Lambda) = (1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right)$$

e sostituendo questa espressione nella funzione di partizione

$$Z_N(T) = \\ = \left(\frac{1-v^2}{2}\right)^{-N} \prod_{p,q=0}^{L} \left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{6}$$

Dalla funzione di partizione all'energia libera

Ottenuta la funzione di partizione è sufficiente valutarne il logaritmo per ottenere l'energia libera

$$\begin{aligned}
&\frac{-F(T)}{kT} = \log(Z_N) = \\
&= N\log(2) - N\log(1-v^2) + \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{p,q=0}^{L} \log\left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right)\right]
\end{aligned} \tag{7}$$

Limite termodinamico per F(T)

Nel limite termodinamico in cui $L \to \infty$ otteniamo

$$\frac{-F(T)}{kT} =$$
$$= N\log(2) - N\log(1-v^2) +$$
$$+ \frac{N}{2(2\pi)^2}\int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 \log\left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\omega_1 + \cos\omega_2\right)\right] \tag{8}$$

Notiamo che $F(T) \propto N$.
Nota l'energia libera si deriva la termodinamica, in particolare la **Temperatura di Curie**.

Singolarità di $F(T)$

Transizioni di fase $\rightarrow$ Singolarità di $F(T)$

$$\frac{-F(T)}{kT} =$$
$$= N\log(2) - N\log(1-v^2) +$$
$$+ \frac{N}{2(2\pi)^2}\int_0^{2\pi} d\omega_1 d\omega_2 \log\left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\omega_1 + \cos\omega_2\right)\right] \tag{9}$$

- Caso banale di $v = 1 \;\; \rightarrow \;\; T = 0$
- Minimo dell'argomento del logaritmo $\rightarrow \cos\omega_1 = \cos\omega_2 = 1$. Altre due singolarità v_- e v_+.

Le soluzioni non banali v_- e v_+

Si cercano le radici del polinomio

$$(1+v^2)^2 - 4v(1-v^2) = (v^2+2v-1)^2 \tag{10}$$

e si ottengono

$$\begin{cases} v_- = -(1+\sqrt{2}) & \to T_C = (0.166 + 0.590i)J/k \\ v_+ = -1+\sqrt{2}, & \to T_C = 2.269J/k \end{cases}$$

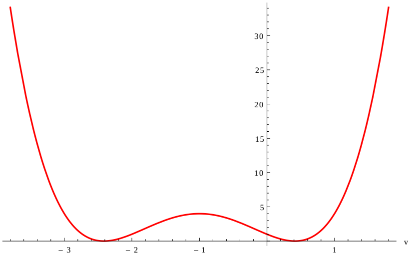


Figura: Plot del polinomio (10)

Bibliografia

- Mussardo G., *Il modello di Ising, introduzione alla teoria dei campi e delle transizioni di fase*, Bollati Boringhieri, Torino, pp 174-176, 198-204.
- Ising E., *Beitrag zur Theorie des Ferro - und Paramagnetismus*, BIBLIOTHECA AUGUSTANA on line.