

RISULTATI ESATTI PER MODELLI RETICOLARI

Indice

1 Costo energetico e vantaggio entropico	1
2 L'argomento di Peierls	3
3 Rappresentazione a bassa temperatura	4
4 Rappresentazione ad alta temperatura	7
5 La dualità di Kramers e Wannier	10
6 Dimostrazione rigorosa dell'argomento di Peierls	11
7 Matrice di trasferimento per sistemi reticolari	14
8 La soluzione di Onsager	17

1 Costo energetico e vantaggio entropico

La teoria di campo medio, nonostante sia molto attraente e spieghi qualitativamente molto bene le transizioni di fase, quantitativamente non è adeguata—gli esponenti critici misurati sono diversi da quelli predetti dalla teoria di campo medio. Si è rivelato quindi necessario sviluppare altri metodi che permettessero di stabilire risultati certi sulle transizioni di fase.

Nel 1936, Rudolf Peierls scrisse un articolo intitolato “Il modello di Ising del ferromagnetismo” in cui diede un semplice argomento che mostra che a temperatura sufficientemente bassa, il modello di Ising in 2 o 3 dimensioni deve presentare una magnetizzazione spontanea. Quando lo stesso ragionamento è applicato ad un modello uni-dimensionale si arriva alla conclusione opposta: che in una dimensione un sistema non può avere una fase ordinata neanche a bassissime temperature. Spieghiamo perché.

Supponiamo di avere N spin (in qualsiasi dimensione). Poiché ogni spin può assumere due diversi valori in modo indipendente, i micro-stati del sistema sono 2^N . L'energia di un micro-stato $\sigma = \{\sigma_i\}$ è

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

(dove $\langle ij \rangle$ restringe la somma a primi vicini) e la funzione di partizione è

$$Z = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E(\sigma)} = \sum_E e^{\beta(Tk \log \Omega(E) - E)} = \sum_E e^{\beta(TS - E)} = \sum_E e^{-\beta F}$$

dove $\Omega(E)$ è il numero di stati che hanno energia E , $S = k \log \Omega(E)$ è l'entropia di Boltzmann delle configurazioni con energia E e $F = E - TS$ è l'energia libera di Helmholtz.

Se $J > 0$, il sistema è ferromagnetico: la configurazione di energia minima in un campo magnetico nullo è quella in cui gli spin puntano verso l'alto, $\sigma_i = 1$, o verso il basso, $\sigma_i = -1$. Ci sono quindi due micro-stati di energia minima di valore $E_0 = -NJ$ (in qualsiasi dimensione). Queste sono certamente configurazioni ordinate.

Se l'energia di una tale configurazione ordinata è vicino a un minimo dell'energia libera, allora le configurazioni che dominano la funzione di partizione sono ordinate, e quindi il valore atteso del parametro d'ordine sarà diverso da zero. Il sistema sarà in una fase ordinata. Tuttavia, un minimo dell'energia non garantisce un minimo dell'energia libera. L'entropia per qualche altro valore di E può essere più alta, e quindi, per T abbastanza grande, questo darà un valore più basso di energia libera. Infatti, per ovvie ragioni, ci sono tipicamente configurazioni più disordinate di configurazioni ordinate, quindi $S(E)$ è raramente al minimo per una configurazione ordinata. Così per T abbastanza elevata, un sistema sarà sempre disordinato. La domanda è se ci sono valori di T abbastanza bassi in modo che un sistema sia ordinato— in modo tale che le configurazioni che minimizzano l'energia siano vicine a quelle che minimizzano l'energia libera.

Questa domanda spesso viene riformulata in termini di competizione tra energia ed entropia—tra costo energetico e vantaggio entropico. Modificare una configurazione ordinata aumenterà l'energia di una certa quantità ΔE , ma ci sono molti modi di cambiarla, e così anche l'entropia aumenterà di una certa quantità ΔS . Se $\Delta E > T\Delta S$, le configurazioni ordinate vincono; il sistema rimane ordinato. Se $\Delta E < T\Delta S$, allora il sistema è disordinato: l'energia libera diminuisce distruggendo l'ordine. Se c'è un valore di T per cui $\Delta E = T\Delta S$, allora c'è una transizione di fase per questo valore di temperatura. La presenza di ordine pertanto può essere verificata calcolando l'energia e l'entropia di configurazioni vicino alla configurazione ordinata.

Consideriamo il modello di Ising in una dimensione con condizioni libere al contorno. Lo stato fondamentale è doppiamente degenere: ci sono due stati di minima energia, tutti spin in su o tutti spin in giù, e la loro energia è $-NJ$. L'eccitazione più bassa in energia, e quindi più vicina alla configurazione ordinata, ha una parete di dominio magnetico ("domain wall") per cui gli spin puntano in alto a sinistra e in basso a destra della parete di dominio. L'energia per tale parete è $2J$ perché è ottenuta dallo stato fondamentale invertendo un legame e invertire un legame ha un costo energetico di $2J$.

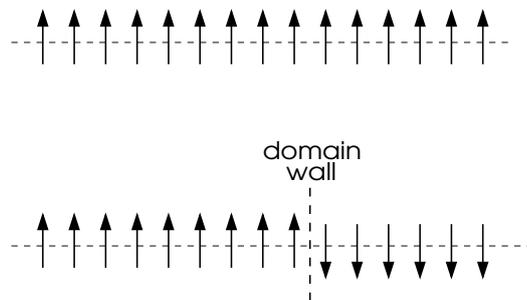


Figura 1: Parete di dominio come eccitazione più bassa dello stato fondamentale di una catena di spin.

Si osservi che la configurazione ottenuta dallo stato fondamentale invertendo un solo spin è più costosa della parete di dominio, richiede infatti un'energia pari a $+4J$ perché lo spin invertito ha ora due vicini che puntano nella direzione opposta. La variazione di entropia tra questa configurazione e lo stato fondamentale è $\Delta S = kT \log(N - 1)$ (perché ci sono $N - 1$ modi di scegliere la parete). Quindi

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = 2J - kT \log(N - 1)$$

Fintanto che J è finito e $T \neq 0$, per N abbastanza grande, ΔF deve essere negativo. Concludiamo perciò che non ci sono configurazioni vicino alla configurazione ordinata

con magnetizzazione spontanea diversa da zero: il macrostato di energia $2J$ ha magnetizzazione media pari a 0, essendo ugualmente possibili tutte le suddivisioni della catena in due domini magnetici).

2 L'argomento di Peierls

Il risultato in due e più elevate dimensioni è il contrario: si può dimostrare che nel modello di Ising esiste ordine a temperature sufficientemente basse. Poiché per βJ abbastanza piccolo non ci può essere ordine, ci deve essere una transizione di fase. Per ottenere questo risultato, si studia la dipendenza di energia ed entropia di "gocce" di spin capovolti in uno sfondo ordinato, come disegnato in due dimensioni in fig. 2.

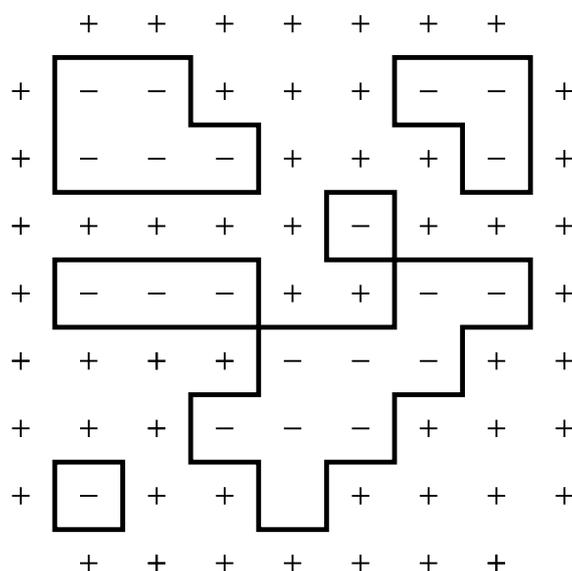


Figura 2: Contorni che racchiudono regioni sul reticolo ("gocce") dove gli spin sono -1 . Con le condizioni al contorno $+$ gli spin al di fuori dei contorni sono positivi e quelli dentro sono negativi.

Nel modello di Ising con interazioni tra primi vicini e $J > 0$, il costo energetico per la creazione di una goccia di perimetro ℓ — circuito di lunghezza ℓ — dal mare di spin positivi dello stato fondamentale, è

$$\Delta E = 2J\ell$$

dato che "spezzare" ciascun legame, ossia creare collegamenti sul reticolo che hanno un $+$ su un'estremità e un $-$ dall'altra, costa $2J$, e ℓ è proprio il numero dei legami spezzati. Spezzati i legami al bordo, invertire gli spin all'interno non ha alcun costo energetico.

La variazione di entropia è

$$\Delta S = k \log n(\ell)$$

dove $n(\ell)$ è il numero di circuiti distinti di lunghezza ℓ . Determinare $n(\ell)$ è complicato, ma l'argomento di Peierls richiede solo che si comprenda come dipende dal perimetro ℓ . Consideriamo un problema correlato: quanti cammini casuali di lunghezza ℓ ci sono su un reticolo bidimensionale? Ad ogni passo, il camminatore casuale può scegliere nord, sud, est o ovest. Così il totale numero di cammini aleatori è

$$4^\ell = e^{\ell \log 4}.$$

Questo dà un limite superiore a $n(\ell)$ perché per ottenere un circuito di lunghezza ℓ occorre imporre il **vincolo** che la camminata causale ritorni al punto iniziale dopo ℓ passi. Quindi stimiamo $n(\ell) \sim e^{\ell \log B}$, dove $1 < B < 4$. Questa stima può essere raffinata. Supponiamo di considerare cammini che non ritornano sui propri passi, quindi ad ogni passo, dopo il primo, il camminatore ha solo 3 direzioni da scegliere. Il cammino dovrebbe essere anche non intersecante: questo implica che in alcuni punti ci saranno al massimo 2 direzioni tra cui scegliere. Così

$$n(\ell) \sim e^{\ell \log B}, \quad \text{dove } 2 < B < 3. \quad (1)$$

Pertanto,

$$\Delta S = k \log n(\ell) = k\ell \log B,$$

da cui

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = \ell(2J - kT \log B). \quad (2)$$

Leq. (2) è una formula molto interessante:

- Se

$$T > \frac{2J}{k \log B}$$

allora $\Delta F < 0$, il che implica che gocce di tutte le dimensioni ℓ saranno create fuori dal mare, e distruggeranno qualsiasi magnetizzazione spontanea. Questa è la fase paramagnetica.

- Se

$$T < \frac{2J}{k \log B}$$

allora $\Delta F > 0$, il che implica che le gocce tenderanno a scomparire lasciando un mare di spin nella stessa direzione. Questa è una fase ferromagnetica.

- Se

$$T = T_c = \frac{2J}{k \log B}$$

allora $\Delta F = 0$, il che implica che non costa energia libera per creare una goccia. Questo è uno stato critico in cui esistono gocce di tutte le dimensioni e forme. La magnetizzazione risultante è zero. Poiché non vi è alcun vantaggio per la creazione o la distruzione di una goccia, il sistema "rallenta", con i singoli spin che fluttuano molto lentamente, e con correlazioni a lungo raggio tra i diversi spin.

Sulla base di questo ragionamento, Peierls predisse nel 1936 che il modello di Ising bidimensionale ha una fase ferromagnetica per $T > 0$. Questo argomento è semplice da generalizzare a dimensioni superiori e la conclusione è la stessa: una transizione di fase in un sistema di Ising può verificarsi in qualsiasi dimensione maggiore o uguale a due. Alla fine della prossima sezione ne daremo una dimostrazione rigorosa.

3 Rappresentazione a bassa temperatura

Prima un po' di terminologia. Consideriamo un reticolo $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ con V siti e quindi $P = Vd$ coppie di primi vicini (legami). Nel seguito considereremo soprattutto il caso $d = 2$. La cella unitaria del reticolo è detta "faccia" o "placchetta". Per esempio, nel reticolo triangolare mostrato in fig. 3 una placchetta è definita da tre siti, nel reticolo quadrato di fig. 4 da quattro siti. Il **duale** di un reticolo è definito come il reticolo

ottenuto tracciando la bisettrice perpendicolare attraverso ciascun legame del reticolo originario e collegando i nuovi legami nei punti nel centro di ciascuna cella unitaria del reticolo originario. Per esempio, come mostrato in fig. 3, il duale di un reticolo triangolare è il reticolo esagonale e viceversa. In altre parole, due siti del reticolo duale sono connessi da un legame se due placchette del reticolo originario hanno un legame in comune (vedere fig. 3). Inoltre, i legami del reticolo duale sono in corrispondenza uno-a-uno con i legami del reticolo originario. Il duale di un reticolo quadrato è ancora un reticolo quadrato (il reticolo quadrato è auto-duale); in fig. 4 il reticolo tratteggiato è il duale del reticolo originale.

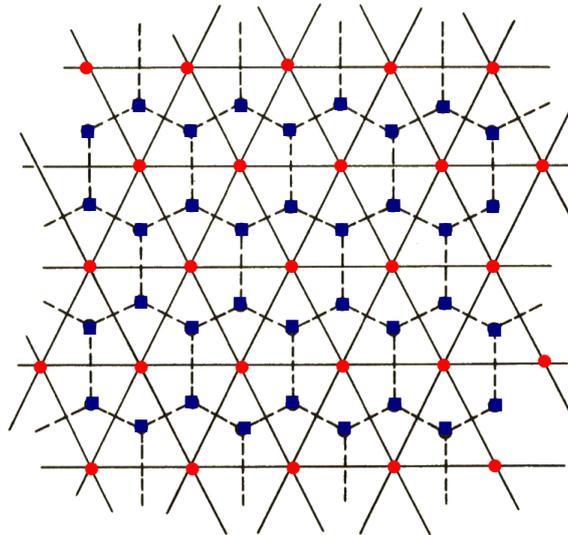


Figura 3: Reticolo triangolare con linee continue e punti pieni (rossi) nei cui vertici sono collocati gli spin, e il suo reticolo duale esagonale con linee tratteggiate e quadratini (blu) nei vertici.

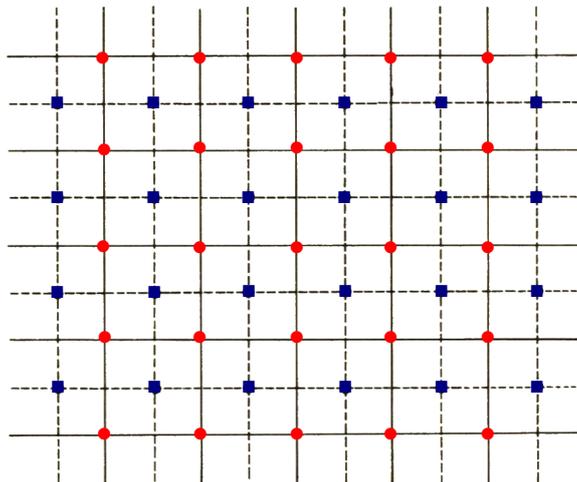


Figura 4: Reticolo quadrato con linee continue e punti pieni (rossi) nei cui vertici sono collocati gli spin, e il suo reticolo duale quadrato con linee tratteggiate e quadratini (blu) nei vertici.

Ogni configurazione σ di spin nel reticolo originario è in corrispondenza con un insieme $\Gamma(\sigma)$ di contorni non intersecantesi che separano gli spin positivi da quelli negativi (talvolta chiamato “gas di contorni”). Denotiamo con γ_i un contorno dell’insieme. Allora

$$\Gamma(\sigma) = \{\gamma_1, \dots, \gamma_n\}$$

dove n dipende ovviamente da σ . La corrispondenza è **biunivoca**. Si veda la figura fig. 5. (C'è una possibile ambiguità quando un contorno si interseca. Questo può essere risolto in vari modi. Si può per esempio decidere di introdurre sempre un canale sottile in direzione da sud-ovest a nord-est come in fig. 6.)

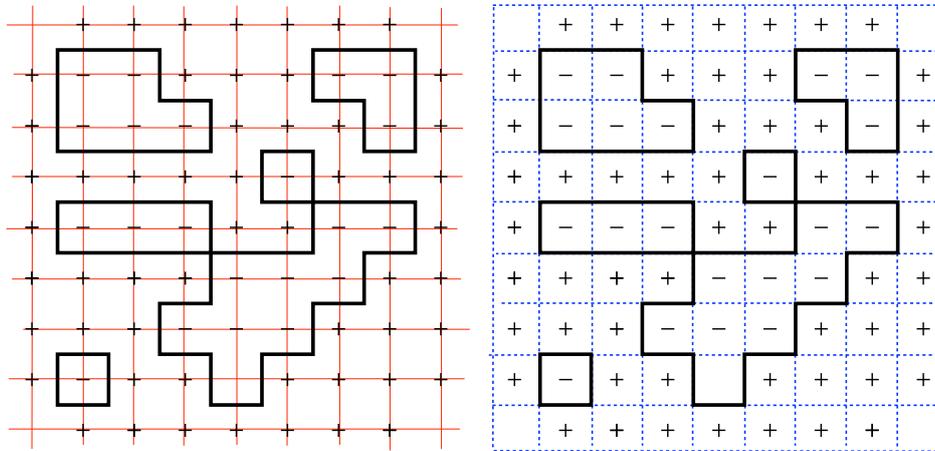


Figura 5: A ogni configurazione di spin nel reticolo originario è associato un insieme di contorni nel reticolo duale che separano gli spin positivi da quelli negativi e viceversa.

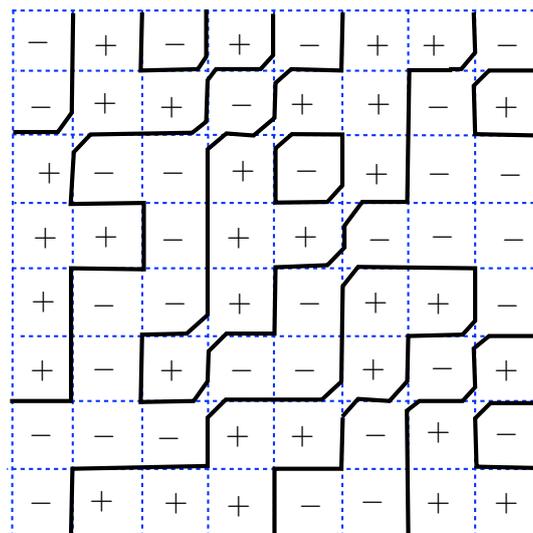


Figura 6: Contorni modificati.

Supponiamo adesso che $h = 0$ e consideriamo una regione Λ grande ma finita del reticolo e assumiamo condizioni al contorno fisse ponendo uguali a $+1$ tutti gli spin sul bordo $\partial\Lambda$. Questo dovrebbe favorire una magnetizzazione positiva (ma diventare ininfluenza nel limite termodinamico). Adesso nel reticolo duale ci sono solo contorni chiusi— **circuiti**. Se $|\gamma_i|$ denota la lunghezza di γ_i , allora una configurazione σ ha esattamente $\sum_i |\gamma_i|$ coppie di spin primi vicini e anti-paralleli e quindi la sua energia

$$H_\Lambda(\sigma) = \sum_{\langle ij \rangle \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j \quad (3)$$

può essere espressa come

$$\begin{aligned} H_\Lambda(\sigma) &= -J\# \text{ (coppie con spin uguali)} + J\# \text{ (coppie con spin diversi)} \\ &= -JP + 2J \sum_{\gamma_i \in \Gamma(\sigma)} |\gamma_i| \end{aligned}$$

dove P è il numero totale di coppie di primi vicini. Abbiamo trascurato l'energia di bordo che non dà contributo nel limite termodinamico.

Arriviamo così alla seguente rappresentazione della funzione di partizione

$$Z_\Lambda = e^{KP} \sum_{\Gamma} e^{-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma} |\gamma_i|} \quad (4)$$

dove (come al solito) $K = \beta J$. La somma nella eq. (4) è su tutti i possibili circuiti nel reticolo duale. Quindi, se $n(\ell)$ denota il numero di circuiti di lunghezza ℓ , possiamo riscrivere l'eq. (4) come

$$Z_\Lambda = e^{KP} \sum_{\ell=0}^P n(\ell) e^{-2K\ell} \quad (5)$$

La rappresentazione (5) della funzione di partizione è esatta per ogni temperatura, ma in particolare è adatta per le espansioni a bassa temperatura perché K è molto grande e quindi i termini nell'esponenziale della somma sono trascurabili salvo per i primi valori di ℓ . Per questo motivo (4) è chiamata **rappresentazione a bassa temperatura** della funzione di partizione.

4 Rappresentazione ad alta temperatura

C'è un'altra rappresentazione, che è particolarmente utile ad alte temperature e che è detta **rappresentazione ad alta temperatura** della funzione di partizione. Per ottenerla, incominciamo con la seguente uguaglianza

$$e^{K\sigma_i\sigma_j} = \cosh K + \sigma_i\sigma_j \sinh K,$$

che segue da $\sigma_i\sigma_j = \pm 1$. Allora la funzione di partizione diventa

$$Z_\Lambda = \sum_{\sigma} e^{K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i\sigma_j} = \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} (\cosh K + \sigma_i\sigma_j \sinh K).$$

che riscriviamo come

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^P \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + x\sigma_i\sigma_j) \quad (6)$$

dove $x = \tanh K$.

Prima di procedere, familiarizziamo con la formula trovata per una catena di 3 spin. In questo caso, il prodotto nell'eq. (6) contiene tre fattori,

$$\prod_{\langle ij \rangle} (1 + x\sigma_i\sigma_j) = (1 + x\sigma_1\sigma_2)(1 + x\sigma_2\sigma_3)(1 + x\sigma_3\sigma_1). \quad (7)$$

Questa espressione è un polinomio di terzo grado della variabile x e contiene $2^P = 8$ termini,

$$\begin{aligned} Z_\Lambda &= (\cosh K)^3 \sum_{\sigma} [1 + x(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1) \\ &\quad + x^2(\sigma_1\sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_1 + \sigma_2\sigma_3\sigma_3\sigma_1) + x^3(\sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3\sigma_3\sigma_1)] \end{aligned}$$

Adesso assegniamo ad ogni termine un diagramma sulla catena periodica, come segue: colleghiamo due siti adiacenti i e j mediante una linea, che chiameremo legame (bond o link), se il prodotto dei loro spin è presente nel termine in esame. I siti dove termina almeno un legame formano i vertici del diagramma associato. Chiamiamo il numero di legami collegati a un vertice l'**ordine del vertice**.

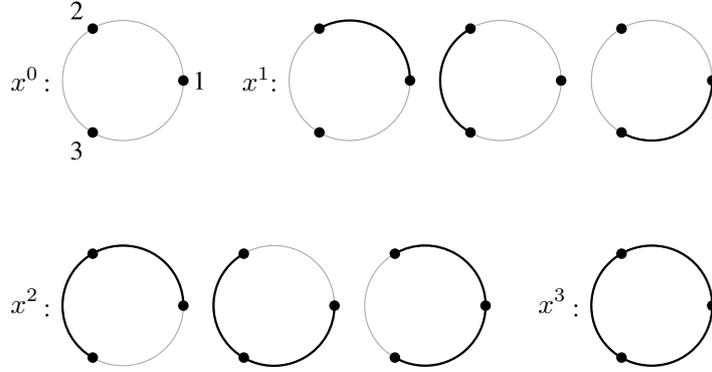


Figura 7: Diagrammi associati con la rappresentazione ad alta temperatura della catena di Ising con 3 spin.

La fig. 7 mostra gli otto diagrammi corrispondenti al polinomio (7). Dal momento che il parametro x entra attraverso la combinazione $x\sigma_i\sigma_j$, vediamo che tutti i diagrammi di ordine n in x hanno n legami. Poiché dell'identità

$$\sum_{\sigma_i=\pm 1} (\sigma_i)^n = \begin{cases} 2, & n \text{ pari} \\ 0, & n \text{ dispari,} \end{cases} \quad (8)$$

solo i diagrammi per i quali tutti i vertici sono di ordine pari contribuiscono a Z_Λ . Tali diagrammi sono chiamati chiusi. Sulla catena con tre siti solo il primo e l'ultimo diagramma in fig. 7 sono chiusi in modo tale che

$$Z_\Lambda = \cosh^3 K (8 + 8x^3) = 2^3(\cosh^3 K + \sinh^3 K)$$

Più in generale, la catena con N siti ha solo due diagrammi chiusi: un diagramma non ha legami e l'altro ha il massimo numero di N legami. Ne consegue che solo due diagrammi contribuiscono alla funzione di partizione,

$$2^N(\cosh^N K + \sinh^N K) \quad (9)$$

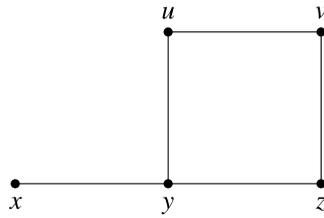
Lo sviluppo (6) porta al risultato esatto della funzione di partizione che abbiamo trovato in precedenza.

Ritorniamo adesso alla formula generale (6). Se nel reticolo Λ ci sono V siti il secondo membro della (6) si sviluppa nel polinomio di grado V

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^P \sum_{\sigma} \left[1 + x \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + x^2 \sum_{\langle ij \rangle \neq \langle i'j' \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_{i'} \sigma_{j'} + \dots \right]$$

A ciascun prodotto di spin assegniamo il diagramma dove i primi vicini sono collegati da una linea se il loro prodotto è presente nel prodotto di spin. Per esempio,

il diagramma associato al prodotto di spin $\sigma_x \sigma_y^3 \sigma_z^2 \sigma_u^2 \sigma_v^2$ è



Il diagramma non contribuisce alla funzione di partizione poiché ha i vertici dispari x ed y . Solo diagrammi chiusi contribuiscono, in modo tale che su un reticolo finito con P primi vicini

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^{P2V} \sum_{\ell=0}^P n(\ell) x^\ell, \quad x = \tanh K \quad (10)$$

dove $n(\ell)$ è il numero di di diagrammi chiusi con ℓ legami, cioè **il numero di circuiti di lunghezza** ℓ nel reticolo. Questa rappresentazione della funzione di partizione è esatta per ogni temperatura, ma in particolare è adatta per le espansioni ad alta temperatura perché K è molto piccolo e quindi i termini che contengono potenze della tangente iperbolica vanno rapidamente a zero. Per questo motivo è chiamata **rappresentazione ad alta temperatura** della funzione di partizione.

La tabella 8 contiene i diagrammi chiusi per il modello di Ising periodico su un reticolo quadrato con V siti e $P = 2V$ coppie di primi vicini, con al massimo otto legami. Il numero nella terza colonna conta il numero di diagrammi della classe corrispondente. Ad esempio, il numero di $V(V - 5)/2$ nella penultima riga di questa tabella è spiegato come segue: Possiamo porre la prima placchetta da qualche parte sul reticolo e abbiamo V possibilità per farlo. Quindi il numero rimanente di posizioni della seconda placchetta, soggetto al vincolo che nessuno dei bordi delle due placchette coincidano è $V - 5$. Quindi, ci sono $V(V - 5)$ possibilità di posizionare le due placchette sul reticolo. Tuttavia, dato che si ottiene lo stesso diagramma con una permutazione delle placchette finiamo con l'ottenere $V(V - 5)/2$ diagrammi diversi.

# bonds ℓ	Diagram	Number	$n(\ell)$
4		V	V
6		$2V$	$2V$
8		$4V$	
		$2V$	$\frac{1}{2}V^2 + \frac{9}{2}V$
		$\frac{1}{2}V(V - 5)$	
		V	

Figura 8: Diagrammi chiusi che contribuiscono alla rappresentazione ad alta temperatura della funzione di partizione del modello di Ising bi-dimensionale fino alla potenza x^8 .

La cosa davvero interessante è che l'eq. (10) è del tutto analoga all'eq. (5): la funzione di partizione nella rappresentazioni ad alta temperatura ha la stessa forma

di quella nella rappresentazione a bassa temperatura . Le sole differenze sono il parametro di espansione,

$$x = \tanh \beta J \text{ (alte temperature)}, \quad x = e^{-\beta J} \text{ (basse temperature)}, \quad (11)$$

e il fatto che i cammini chiusi nella rappresentazione ad alta temperatura sono nel reticolo originario, mentre in quella a bassa temperatura sono in quello duale. Per $d = 2$ (e $d = 1$) il reticolo duale di un modello di Ising coincide con il reticolo originario, pertanto la struttura dei diagrammi delle due espansioni è esattamente la stessa.

Quindi, per uno studio perturbativo in cui x è considerato piccolo, il calcolo degli stessi diagrammi ci permette di ottenere informazioni sia sul comportamento a basse temperature sia sul comportamento ad alte temperature. Per esempio, per $d = 1$, abbiamo visto che ci sono solo due diagrammi chiusi: un diagramma senza legami e l'altro che ha il massimo numero di N legami. Allora la rappresentazione (5) a bassa temperatura diventa

$$Z = e^{KN} (1 + e^{-2KN}) = e^{KN} + e^{-2KN} = 2 \cosh^N K$$

che nel limite termodinamico è del tutto equivalente all'eq. (9). Ben più interessante è il caso $d = 2$, per cui

$$Z_\Lambda = A \left[1 + Vx^4 + 2Vx^6 + \frac{V}{2}(V+9)x^8 + \dots \right]$$

Quando questa equazione è interpretata come sviluppo a basse temperature, il termine di ordine più basso corrisponde a $T = 0$, mentre come sviluppo ad alte temperature, il termine di ordine più basso corrisponde a $T = \infty$.

5 La dualità di Kramers e Wannier

Quanto descritto finora è principalmente dovuto a Kramers e Wannier (1941), che scoprirono la simmetria tra il modello di Ising bidimensionale ad alta temperatura e quello a bassa temperatura che abbiamo appena discusso. Sfruttando questa simmetria, riuscirono a determinare la temperatura critica T_c . Vediamo come.

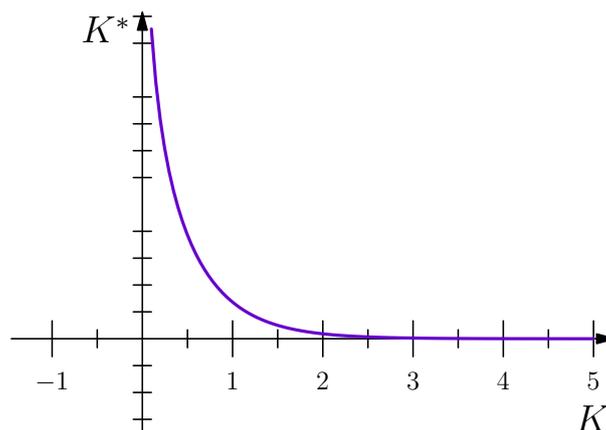


Figura 9: Relazione tra la costante di accoppiamento ad alta temperatura (K^*) e quella a bassa temperatura (K).

In primo luogo, trascuriamo i fattori moltiplicativi costanti nelle formule (4) e (10) per la funzione di partizione, poiché non danno alcun contributo alle derivate termodinamiche e definiamo

$$K^* = -\frac{1}{2} \log \tanh K. \quad (12)$$

La relazione tra K e K^* è mostrata in fig. 9. Abbiamo allora

$$Z_\Lambda = \underbrace{\sum_{\ell} n(\ell) e^{-2K\ell}}_{\text{rappresentazione a bassa temperatura}} = \underbrace{\sum_{\ell} n(\ell) e^{-2K^*\ell}}_{\text{rappresentazione ad alta temperatura}} \quad (13)$$

Questo significa che se c'è una transizione di fase per $K = K_C$, ce n'è un'altra per $K = K_C^*$. Se assumiamo che ci sia un'**unica** transizione di fase (come la teoria di campo medio suggerisce), allora

$$K_C = K_C^*, \Rightarrow e^{-2K_C} = \tanh K_C. \quad (14)$$

Osservando che

$$\tanh K = \frac{e^{K_C} - e^{-K_C}}{e^{K_C} + e^{-K_C}} = \frac{1}{e^{2K_C} + 1} \frac{e^{2K_C} - 1}{e^{2K_C} + 1},$$

si perviene all'equazione

$$\sinh 2K_C = 1. \quad (15)$$

Poiché $\sinh^{-1}(1) = \log(1 + \sqrt{2})$, questo porta a

$$K_C = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44. \quad (16)$$

Ricordando che $K = \beta J = J/kT$, l'argomento di dualità predice una transizione di fase per il valore critico di temperatura

$$T_C = \frac{2J}{k \log(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269J. \quad (17)$$

e fornisce dunque il valore esatto della costante B nell'eq. (1) dell'argomento di Peierls:

$$B = (1 + \sqrt{2}) = 2.414\dots$$

Dualità come quella scoperta da Kramers e Wannier sono molto importanti nella fisica teorica moderna, in particolare nella teoria quantistica dei campi, perché **collegano l'accoppiamento debole in un problema con l'accoppiamento forte in un altro problema; allora i metodi perturbativi per l'accoppiamento debole in un problema possono essere utilizzati per ottenere informazioni sull'accoppiamento forte in un altro problema.** Un'auto-dualità, come quella che abbiamo nel modello di Ising in due dimensioni, è una dualità tra diversi regimi dello **stesso** modello.

6 Dimostrazione rigorosa dell'argomento di Peierls

La dimostrazione matematica rigorosa del risultato ottenuto da Peierls è stata data da Griffiths (1964) e da Dobrushin (1965). La presentiamo qui per varie ragioni: ci permette di applicare la rappresentazione a bassa temperatura; dà un'idea degli obiettivi e dei metodi della meccanica statistica rigorosa; si tratta di un potente argomento ed è stato esteso ad una varietà di situazioni, compreso il caso di tipi più generali di interazioni che non hanno la simmetria dei sistemi di spin. (Questa è chiamata la teoria di Pirogov-Sinai (Sinai 1982).)

Per semplicità consideriamo solo il caso in due dimensioni per una regione $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ grande ma finita e assumiamo condizioni al contorno fisse ponendo uguali a $+1$ tutti gli spin sul bordo $\partial\Lambda$. Diamo la dimostrazione in 3 passi successivi.

Lemma 1 (Disuguaglianza di Peierls) *La probabilità $P[\gamma]$ che si realizzi un contorno chiuso γ può essere superiormente limitata come segue:*

$$P[\gamma] \equiv \mathbb{P} \{ \sigma : \gamma \in \Gamma(\sigma) \} \leq e^{-2K|\gamma|} \quad (18)$$

Prova Per l'eq. (4) la probabilità di una configurazione σ è

$$P[\sigma] = \frac{1}{Z} e^{-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma(\sigma)} |\gamma_i|}, \quad Z = \sum_{\Gamma} e^{-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma} |\gamma_i|} \quad (19)$$

Allora $P[\gamma]$ può essere scritta come

$$\begin{aligned} P[\gamma] &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma: \gamma \in \Gamma(\sigma)} \exp \left[-2K \sum_{\gamma'_i \in \Gamma(\sigma)} |\gamma'_i| \right] \\ &= \frac{1}{Z} e^{-2K|\gamma|} \sum_{\sigma: \gamma \in \Gamma(\sigma)} \exp \left[-2K \sum_{\gamma'_i \in \Gamma(\sigma) \setminus \gamma} |\gamma'_i| \right] \\ &= \frac{1}{Z} e^{-2K|\gamma|} \sum_{\sigma: \gamma \in \Gamma(P_\gamma \sigma)} \exp \left[-2K \sum_{\gamma'_i \in \Gamma(\sigma)} |\gamma'_i| \right] \end{aligned}$$

dove abbiamo usato il fatto che se togliamo γ da un insieme di circuiti $\Gamma(\sigma)$, con $\gamma \in \Gamma(\sigma)$, si ottiene l'insieme di circuiti della configurazione di spin $P_\gamma(\sigma)$, dove $P_\gamma(\sigma)$ proviene da σ mediante inversione di tutti gli spin racchiusi da γ . Poiché l'ultimo termine rappresenta una sommatoria su un **sottoinsieme** di tutte le configurazioni, è minore di Z , che è la somma su tutte le configurazioni. Quindi la disuguaglianza (18) risulta dimostrata. \square

La disuguaglianza(18) mostra che la probabilità del verificarsi di un contorno lungo diminuisce esponenzialmente con la sua lunghezza, indipendente dalle dimensioni del reticolo. Useremo questa disuguaglianza per stimare la probabilità di configurazioni di spin con $\sigma_x = -1$, dove x è un qualunque punto del reticolo. È importante ricordare che abbiamo imposto condizioni al contorno fisse, con tutti gli spin $+1$ al bordo del reticolo. Si noti che qualsiasi x con $\sigma_x = -1$ è racchiuso da almeno un contorno e il numero di lati orizzontali e verticali di un contorno è sempre pari. Così abbiamo $|\gamma| = 4, 6, 8, \dots$

Lemma 2 *Il numero $n(\ell)$ di circuiti che racchiudono un certo punto $x \in \Lambda$ è superiormente limitato secondo la disuguaglianza*

$$n(\ell) \leq \frac{\ell - 2}{2} 3^{\ell-1}. \quad (20)$$

Prova Innanzitutto, notiamo che il raggio $y(\lambda) = x + \lambda e_1$, $\lambda > 0$ che emana dal punto x , interseca un contorno almeno una volta. Questo è schematizzato in fig. 10. Consideriamo ora il legame verticale di un dato contorno γ_x che racchiude x e che interseca il raggio ad una distanza massima λ_{\max} da x . I valori possibili di λ_{\max} sono $1/2, 3/2, \dots, (\ell - 3)/2$, cioè abbiamo $(\ell - 2)/2$ possibili valori di λ_{\max} . Il valore più grande è raggiunto per il rettangolo di altezza 1 e la lunghezza $(\ell - 2)/2$. Se ora ci spostiamo lungo il contorno, allora ciascuno delle rimanenti $\ell - 1$ legami può "scegliere" tra tre

Si conclude che la probabilità che un qualsiasi dato spin sia -1 è **minore** di $1/2$ per $y < y_p$ o equivalentemente per $\alpha > -\log(3 - \sqrt{6})$. Con le condizioni $+1$ al bordo si osservare quindi magnetizzazione spontanea, se

$$\beta J > K_p, \quad K_p = \frac{1}{2} \log 3 - \frac{1}{4} \log(3 - \sqrt{6}) \approx 0.69853. \quad (22)$$

La stima vale per tutti i siti x e dimensioni del reticolo. A bassa temperatura, il sistema è quindi caratterizzato da una magnetizzazione positiva $\mathbb{E}_\beta^+\{\sigma_x\} > 0$ nel limite termodinamico. D'altro canto, impostando tutto gli spin al bordo a -1 avremmo trovato una probabilità $\mathbb{P}^+\{\sigma_x = -1\} < 1/2$ per $K > K_p$ per tutte le dimensioni del reticolo. Ciò implica una magnetizzazione negativa nel limite termodinamico. Diverse condizioni al bordo forzano il sistema in diverse fasi nel limite termodinamico. Quindi esistono almeno due diversi stati di equilibrio a bassa temperatura.

7 Matrici di trasferimento per sistemi reticolari

L'idea originale del metodo della matrice di trasferimento è dovuta a Kramers e Wannier (1941) e ha, in effetti, fornito le basi per la soluzione di Onsager del modello di Ising bidimensionale. Da allora si è rivelato un metodo utile per analizzare diversi modelli di meccanica statistica.

In una situazione molto generale, supponiamo di avere un reticolo formato da N **strati**, che potrebbero, per esempio, consistere in punti, linee o piani, per reticoli uni-, bi- e tri-dimensionali, rispettivamente. Se supponiamo che lo **stato** dell' i -esimo strato è specificato da una quantità S_i che può assumere solo un numero finito di valori discreti e che le interazioni si hanno solo dentro gli strati o tra strati che sono primi vicini, l'energia di interazione $H(S)$ di una data configurazione $S = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ o stato del reticolo può, in generale, essere espressa nella forma

$$H(S) = \sum_{i=1}^N U(S_i) + V(S_i, S_{i+1}) \quad (23)$$

dove $U(S_i)$ rappresenta l'energia di interazione dentro lo strato S_i e $V(S_i, S_{i+1})$ rappresenta l'energia di interazione tra gli strati primi vicini che sono negli stati S_i e S_{i+1} , rispettivamente, e per semplicità, assumiamo condizioni al contorno periodiche, vale a dire, assumiamo che lo strato N -esimo sia accoppiato al primo o, equivalentemente, che $S_{N+1} = S_1$. Denotiamo con M il numero totale di stati possibili per ciascun strato.

Una situazione di questo tipo si ha nel modello di Ising uni-dimensionale che abbiamo analizzato in precedenza, dove gli strati sono semplicemente punti e $S_i = \sigma_i$ assume i valori ± 1 e quindi $M = 2$. La stessa struttura dell'energia di interazione dell'eq. (23) si ha nel modello di Ising in dimensioni maggiori di 1. Consideriamo in dettaglio il caso bi-dimensionale di un reticolo rettangolare di m righe e n colonne con spin $\sigma_{i,j}$, $i = 1, 2, \dots, m$ e $j = 1, 2, \dots, n$ situati all'intersezione tra la i -esima riga e la j -esima colonna. Allora l'energia di interazione, assumendo solo interazione tra primi vicini, può essere scritta come

$$H(\sigma) = -J \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - J' \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} - h \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sigma_{i,j} \quad (24)$$

dove J e J' sono le costanti di accoppiamento a primi vicini per gli spin nelle colonne e nelle righe, rispettivamente e dove, per semplicità, abbiamo nuovamente imposto **condizioni al contorno periodiche** $\sigma_{i,n+1} = \sigma_{i,1}$, mediante ciò che, effettivamente,

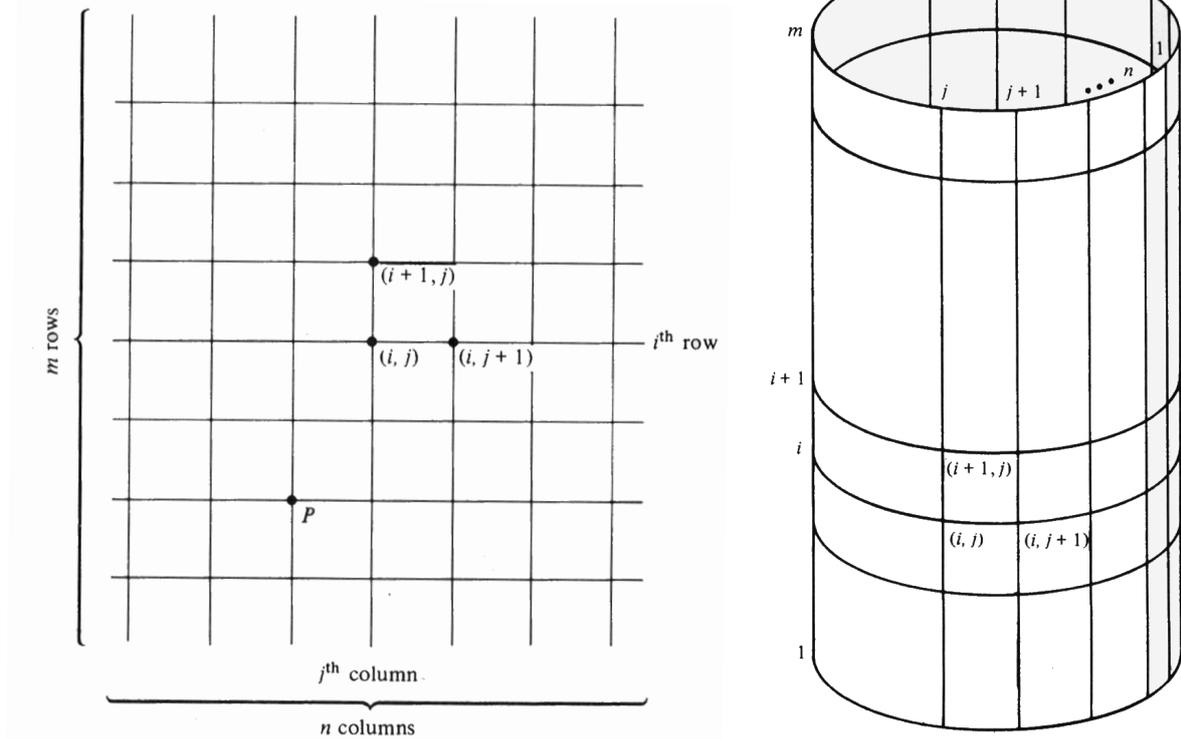


Figura 11: Modello di Ising bidimensionale avvolto su un cilindro.

consiste, nell'avvolgere il reticolo attorno a un cilindro; si veda la fig. 11. Il modello di Ising usuale corrisponde al caso in cui $J = J'$.

L'energia di interazione ha la forma (23): gli strati sono colonne, con lo strato j -esimo descritto dallo stato

$$S_j = (\sigma_{1j}, \sigma_{2j}, \dots, \sigma_{mj}). \quad (25)$$

Ci sono dunque $M = 2^m$ stati possibili per ciascun strato.

L'energia di interazione dentro lo strato j -esimo è data da

$$U(S_j) = -J \sum_{i=1}^{m-1} \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - h \sum_{i=1}^m \sigma_{i,j} \quad (26)$$

e l'energia di interazione tra strati primi vicini è data da

$$V(S_j, S_{j+1}) = -J' \sum_{i=1}^m \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}. \quad (27)$$

Se l'energia di interazione di un modello reticolare può essere espressa nella forma (23), allora la funzione di partizione può essere calcolata come nel caso uni-

dimensionale:

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_S e^{-\beta H(S)} \\
&= \sum_{(S_1, \dots, S_N)} e^{-\beta \sum_{j=1}^N [U(S_j) + V(S_j, S_{j+1})]} \\
&= \sum_{(S_1, \dots, S_N)} \prod_{j=1}^N T(S_j, S_{j+1}), \tag{28}
\end{aligned}$$

dove, simmettizzando l'esponenziale,

$$T(S, S') = e^{-\beta[U(S)/2 + V(S, S') + U(S')/2]} \tag{29}$$

Adesso consideriamo le quantità $T(S, S')$ come componenti di una matrice simmetrica \mathbb{T} , detta **matrice di trasferimento**, di dimensione $M \times M$, dove M è il numero di possibili valori per ciascun strato S (il nome deriva dal fatto che \mathbb{T} "trasferisce" da uno strato all'altro. Allora il prodotto su j nell'eq. (28) può essere interpretato come prodotto di matrici e più precisamente abbiamo

$$Z_N = \sum_{S_1} \mathbb{T}^N(S_1, S_1) = \text{Tr}(\mathbb{T}^N). \tag{30}$$

Denotando con λ_j , $j = 1, \dots, M$, gli autovalori (eventualmente degeneri) di \mathbb{T} , otteniamo, come nel caso unidimensionale,

$$Z_N = \sum_{j=1}^M \lambda_j^N \tag{31}$$

Ora, essendo gli elementi di matrice $T(S, S')$ tutti positivi, per il teorema di **Perron-Frobenius**, l'autovalore massimo è non degenere e una funzione analitica dei suoi argomenti e, in particolare, dall'eq. (29), è una funzione analitica di β o della temperatura T . Senza perdita di generalità, possiamo ordinare gli autovalori in modo tale che

$$\lambda_1 > |\lambda_2| \geq \lambda_3 \geq \dots \geq |\lambda_M| \tag{32}$$

e prendere λ_1 come funzione analitica di β .

Se adesso prendiamo il limite termodinamico (parziale) permettendo che il numero di strati $N \rightarrow \infty$, otteniamo dalle equazioni (31) e (32)

$$\begin{aligned}
-\beta f_M &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left\{ \lambda_1^N \left[1 + \sum_{j=2}^M \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^N \right] \right\} \\
&= \log \lambda_1 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left[1 + \sum_{j=2}^M \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^N \right] \\
&= \lambda_1 \tag{33}
\end{aligned}$$

dove f_M denota l'energia libera per strato del sistema infinito di strati.

Per sistemi la cui dimensionalità è due o più, per poter completare il limite termodinamico, occorre far tendere all'infinito la taglia dello strato. Questo significa che è richiesto un ulteriore processo di limite ($M \rightarrow \infty$). In ogni caso abbiamo che

l'energia libera limite è espressa mediante l'eq. (33) in termini dell'autovalore massimo della matrice di trasferimento. Notiamo che per il sistema di infinito di strati finiti, l'energia libera f_M è una funzione analitica della temperatura. Quindi per questi sistemi "quasi-unidimensionali" non ci sono transizioni di fase.

Notiamo infine che i termini di superficie nell'eq. (23) che nascono dalle condizioni al contorno periodiche non danno contributo nel limite dato dall'eq. (33). L'energia libera definita dall'eq. (33) è dunque indipendente dalle condizioni al contorno.

8 La soluzione di Onsager

La soluzione esatta del modello di Ising bidimensionale ottenuta da Lars Onsager nel 1944, rappresenta uno sviluppo importante della fisica teorica del XX secolo. Per comprenderne il motivo, vale la pena ricordare che per lungo tempo dopo il 1944 modello di Ising bidimensionale è rimasto il primo e unico modello esattamente risolubile che esibisce una transizione di fase.

Senza nulla togliere ai contributi importantissimi di Peierls, Kramers e Wannier, che hanno aperto la strada ad Onsager, la soluzione da lui trovata ha stabilito senza ombra di dubbio che le transizioni di fase appaiono come singolarità nelle funzioni termodinamiche e che queste funzioni non hanno bisogno di discontinuità semplici come aveva ipotizzato da Ehrenfest prima. Inoltre, di tutti i sistemi di meccanica statistica su cui sono stati effettuati i calcoli esatti, il modello di Ising bidimensionale non è solo quello più accuratamente indagato, ma è anche il più profondo. La sua importanza è stata immediatamente riconosciuta.

A questo proposito, ricordiamo la lettera scritta da Pauli a Casimir subito dopo la seconda guerra mondiale. Casimir nella sua lettera aveva espresso la sua preoccupazione per essere stato tagliato fuori per così tanto tempo dalla fisica teorica dei paesi alleati. Pauli nella sua risposta disse: "niente di interessante è accaduto tranne che per la soluzione esatta di Onsager del modello di Ising bidimensionale".

Con una magistrale applicazione delle rappresentazioni dei gruppi e delle algebre di Lie, Onsager trovò che l'autovalore massimo della matrice di trasferimento del modello di Ising bidimensionale nel limite termodinamico parziale di numero infinito di strati è (come al solito, $K = \beta J$)

$$\lambda_1 = (2 \sinh 2K)^{m/2} \exp \left[\frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2m-1}) \right] \quad (34)$$

dove γ_k è definito da

$$\cosh \gamma_k = \cosh 2K \coth 2K - \cos(\pi k/m). \quad (35)$$

L'energia libera è ottenuta nel limite $m \rightarrow \infty$ dalle equazioni eq. (33) e eq. (34) :

$$-\beta f = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \log \lambda_1 = \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2K) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{k=0}^{m-1} \gamma_{2k+1} \quad (36)$$

Nel limite $m \rightarrow \infty$ la somma nell'equazione precedente è una somma di Riemann che converge ad un integrale. Pertanto, tenuto conto dell'eq. (35), si ottiene

$$-\beta f = \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2K) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \cosh^{-1} [\cosh 2K \coth 2K - \cos \theta] d\theta. \quad (37)$$

L'uso dell'identità

$$\cosh^{-1} |z| = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \log [2(z - \cos \phi)] d\phi$$

ci permette di scrivere

$$-\beta f = \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2K) + \frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \log(\cosh 2K \coth 2K - \cos \theta - \cos \phi) d\theta d\phi$$

che fornisce la formula simmetrica di Onsager

$$-\beta f = \log 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \log[\cosh^2 2K - \sinh 2K (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] d\theta_1 d\theta_2 \quad (38)$$

Dalla formula a cui siamo arrivati, si ottiene l'energia

$$E = \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta f) = J \frac{\partial}{\partial K}(\beta f) = -J \coth 2K [1 + (\sinh^2 2K - 1)I(K)] \quad (39)$$

dove

$$I(K) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\cosh^2 2K - \sinh 2K (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} \quad (40)$$

L'integrale $I(K)$ diverge logaritmicamente quando $\cosh^2 2K = 2 \sinh 2K$. Per vedere come questo avviene, si osservi che in un intorno dell'origine $\theta_1 = \theta_2 = 0$, quando

$$\delta = \cosh^2 2K - 2 \sinh 2K = (\sinh 2K - 1)^2 \quad (41)$$

è piccolo, si ha

$$\begin{aligned} I(K) &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\cosh^2 2K - \sinh 2K (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} \\ &\sim \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\delta + \frac{1}{2} \sinh 2K (\theta_1^2 + \theta_2^2)} \\ &= \frac{2}{\pi} \int \frac{r dr}{\delta + (1/2)r^2 \sinh 2K} \\ &\sim -\frac{2}{\pi} \log \delta \quad \text{per } \delta \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Ne segue che c'è una singolarità o transizione di fase per $K = K_C$ dato da $\delta = 0$ nell'eq. (41), che non è altro che la condizione (15) di Kramers e Wannier e quindi al valore $K_C \approx 0.44$ dell'eq. (16). Combinando le equazioni sopra che danno l'energia in funzione di K , si vede che, nonostante la singolarità dell'integrale, l'energia è continua per $K = K_C$ e che in un intorno di K_C vale

$$E \sim -J \coth 2K_C [1 + A(K - K_C) \log |K - K_C|] \quad (42)$$

dove A_1 è qualche costante. Da questo risultato segue che il calore specifico (a campo magnetico nullo)

$$C_0 = \frac{\partial E}{\partial T} \sim A_2 \log |K - K_C| \quad \text{per } K \rightarrow K_C \quad (43)$$

ha una divergenza logaritmica simmetrica al punto critico.

In effetti, si possono dare espressioni chiuse di E e C_0 in termini di integrali ellittici, ma non lo faremo. In figura fig. 12 è rappresentato il calore specifico come funzione della temperatura nell'intorno del punto critico T_C .

Il calcolo della magnetizzazione spontanea

$$m_0 = - \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial h} f(\beta, h)$$

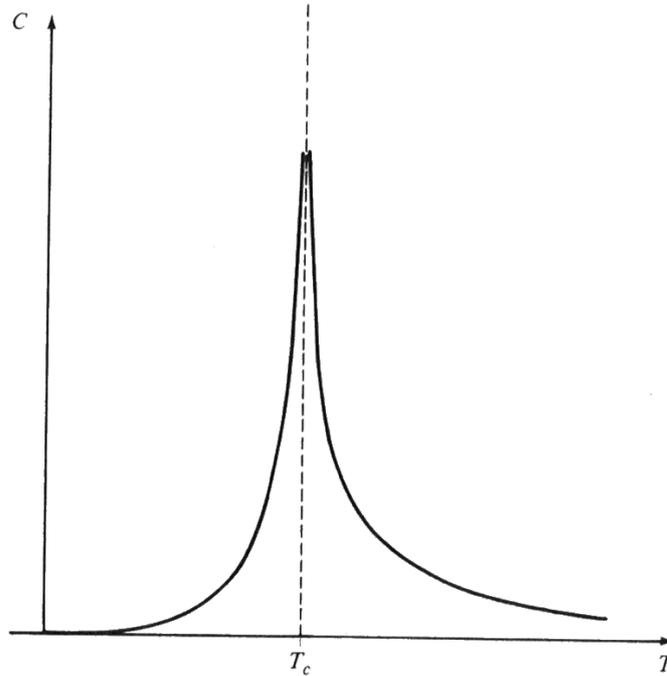


Figura 12: Calore specifico C a campo magnetico nullo del modello di Ising quadrato. C diverge logaritmicamente sia a destra sia a sinistra del punto critico T_c .

semberebbe richiedere la valutazione di $f(\beta, h)$ che ad oggi non è stata ancora ottenuta. Tuttavia, mediante metodi indiretti si sa che m_0 del modello di Ising bi-dimensionale ha la notevole forma semplice

$$m_0 = \begin{cases} [1 - (\sinh 2K)^{-4}]^{\frac{1}{8}}, & \text{per } T \leq T_c \\ 0 & \text{per } T > T_c \end{cases} \quad (44)$$

Quindi l'esponente critico è $1/8$: come T si avvicina a T_c dal basso nella fase ferromagnetica,

$$m(T) \sim [T_c - T]^{1/8}.$$

Inoltre, si può dimostrare che la suscettibilità magnetica isoterma alla temperatura di transizione diverge come

$$\chi_m \sim \frac{1}{|T_c - T|^{1/8}}$$

L'espressione (44) fu annunciata da Onsager nel 1949, ma non pubblicata. La prima derivazione pubblicata fu data nel 1952 da Chen Ning Yang (il premio Nobel per la violazione di parità e per avere inventato con Mills le teorie non abeliane di gauge) ed era estremamente complicata. Derivazioni più semplici furono date successivamente da Montroll *et al.* (1963) e da Baxter (1981), ma la semplicità del risultato finale è ancora piuttosto una sorpresa.

L'importanza di questi risultati è notevole. Per la prima volta si dimostrò che la meccanica statistica è in grado di predire transizioni di fase con esponenti critici diversi da quelli delle teorie di campo medio. Per esempio, l'esponente critico β è $1/8$ e dunque diverso da quello predetto dalla teoria di campo medio ($1/2$).

Un'analisi matematica accurata del risultato di Onsager permette di rendersi conto che la natura della singolarità è piuttosto sottile. Questo, a sua volta, permette di comprendere un punto importante: la singolarità è dovuta a circostanze particolari che vengono uccise dalle approssimazioni. Soltanto molti anni dopo la scoperta di

Onsager si comprese che le le circostanze particolari che determinano la singolarità sono l'effetto delle fluttuazioni al punto critico e che l'universalità delle varie transizioni di fase proviene proprio dalla natura di queste fluttuazioni.

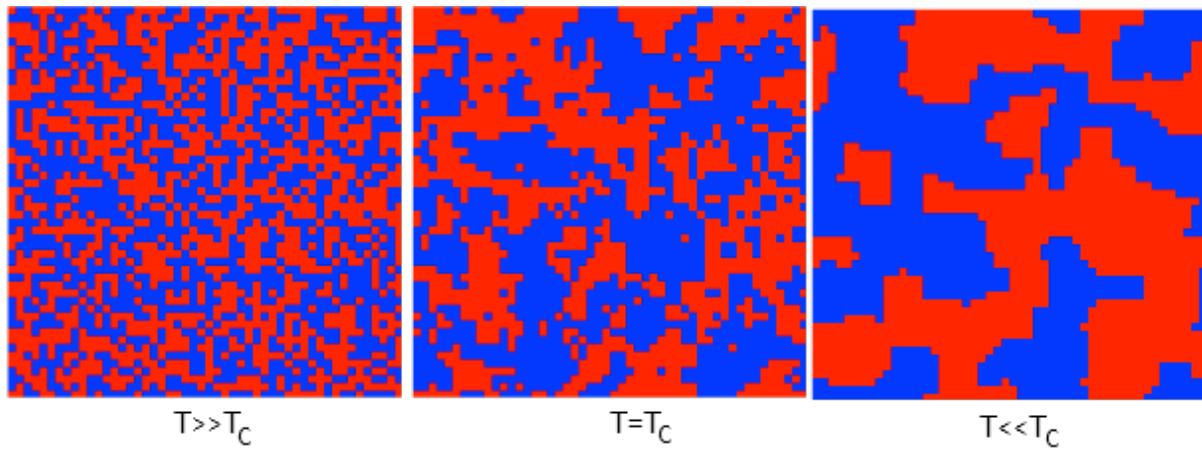


Figura 13: Configurazioni del modello di Ising su un quadrato al variare della temperatura.