

GENERALITÀ SUI MODELLI RETICOLARI

Indice

1 Modelli di Ising	1
2 Gas reticolari	5
3 Anello di Ising in un campo magnetico	6
4 Altri modelli unidimensionali	8

1 Modelli di Ising

Un modello matematico di sistema magnetico è tipicamente basato su un insieme di N spin σ_i , $i = 1, 2, \dots, N$, che possono essere vettori, scalari, o, nel caso quantistico, operatori di spin. Noi considereremo il modello più semplice basato su spin scalari $\sigma_i = +1$ o -1 corrispondenti a spin su o spin giù rispettivamente.

Più precisamente, consideriamo un insieme Λ di siti reticolari con un insieme di siti adiacenti che formano un reticolo d -dimensionale (cioè un grafo non orientato). Per ogni sito reticolare $j \in \Lambda$ esiste una variabile discreta σ_j tale che σ_j assume i valori $+1$ o -1 . Una “configurazione di spin” $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots)$ è un’assegnazione del valore dello spin in ogni sito del reticolo.

Si assume che l’energia di interazione tra due spin σ_i e σ_j collocati nei punti fissati r_i e r_j nello spazio (per esempio nei vertici di un reticolo regolare) sia $+J_{ij}$ se gli spin sono paralleli ($\sigma_i \sigma_j = +1$) e $-J_{ij}$ se gli spin sono anti-paralleli ($\sigma_i \sigma_j = -1$).

In altre parole, l’energia totale di interazione del sistema in una data configurazione $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ degli spin è

$$H = \sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \quad (1)$$

dove il primo termine proviene dall’interazione tra gli spin e il secondo termine dall’interazione di ciascun spin con un campo magnetico esterno h . Il momento magnetico è data da μ . Si noti che il segno nel secondo termine della funzione energia dovrebbe essere effettivamente positivo perché il momento magnetico dell’elettrone è antiparallelo alla suo spin, ma il termine negativo è usato convenzionalmente. Funzioni energia della forma (1) definiscono modelli su reticolo genericamente detti *modelli di Ising*.

N.B. Risulta comodo assorbire la costante μ nel campo magnetico, cioè porre $\mu = 1$ nella (1). Nel seguito useremo questa convenzione.

Modello di Ising (a primi vicini) Il modello di Ising vero e proprio, dal nome del fisico Ernst Ising, è stato inventato dal fisico Wilhelm Lenz, che lo ha dato come problema al suo allievo Ernst Ising. In questo modello si assume che ogni spin possa interagire solo con i suoi vicini più prossimi: per ogni coppia di siti adiacenti $i, j \in \Lambda$ si ha un’interazione J_{ij} , e un sito $i \in \Lambda$ ha un campo magnetico esterno h_i . L’energia di una configurazione σ è data dalla funzione energia

$$H(\sigma) = - \sum_{\langle i j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_j h_j \sigma_j \quad (2)$$

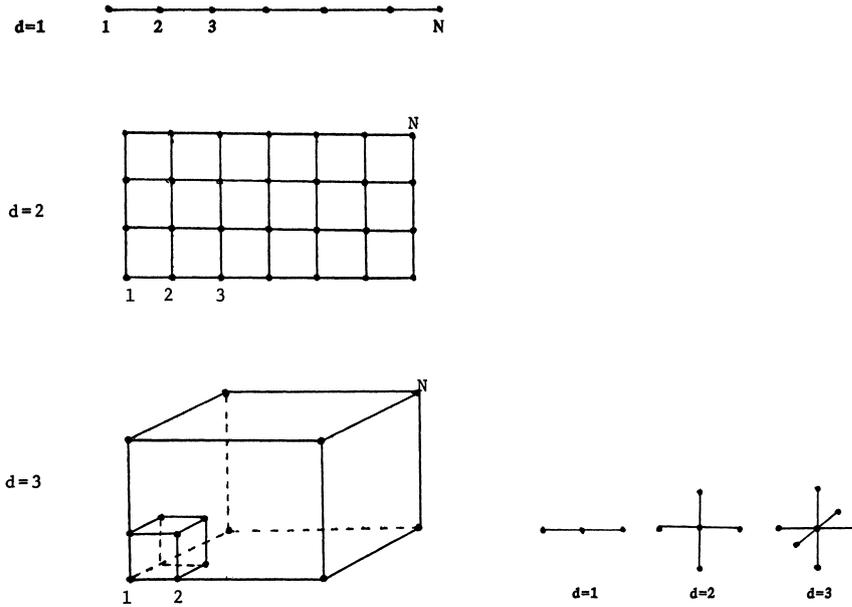


Figura 1: Modello di Ising in un reticolo $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$.

dove la prima somma è sulle coppie di spin adiacenti (ogni coppia viene conteggiata una sola volta). $\langle ij \rangle$ indica che i siti i e j sono i vicini più prossimi (primi vicini).

Il segno negativo davanti a ogni termine della funzione energia $H(\sigma)$ è convenzionale. Utilizzando questa convenzione di segno, i modelli di Ising possono essere classificati in base al segno dell'interazione: se, per tutte le coppie i, j

- $J_{ij} > 0$, l'interazione è chiamata *ferromagnetica*
- $J_{ij} < 0$, l'interazione è chiamato *antiferromagnetica*
- $J_{ij} = 0$ gli spin sono non interagenti.

In un modello di Ising ferromagnetico, gli spin tendono ad essere allineati: le configurazioni in cui gli spin adiacenti sono dello stesso segno hanno una maggiore probabilità. In un modello antiferromagnetico, gli spin adiacenti tendono ad avere segni opposti.

La convenzione di segno di $H(\sigma)$ spiega anche come uno spin nel sito j interagisce con il campo esterno. Vale a dire, il sito di spin vuole allinearsi con il campo esterno. Se:

- $h_j > 0$, lo spin nel sito j vuole allinearsi nella direzione positiva,
- $h_j < 0$, lo spin nel sito j vuole allinearsi nella direzione negativa,
- $h_j = 0$, non vi è alcuna influenza esterna sul sito dello spin.

I modelli di Ising sono spesso esaminati con campo esterno h costante,

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

o nullo, $h = 0$. Un'altra semplificazione abbastanza comune è assumere che tutti i siti più vicini $\langle ij \rangle$ abbiano la stessa intensità di accoppiamento. Allora $J_{ij} = J$ e

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_j \sigma_j. \quad (3)$$

Quando il campo esterno è ovunque nullo, $h = 0$, il modello di Ising è simmetrico rispetto all'inversione dello spin in tutti i siti reticolari. Più precisamente, se \mathcal{I} è la trasformazione

$$\mathcal{I} : \sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots) \rightarrow -\sigma = (-\sigma_1, -\sigma_2, \dots),$$

allora la funzione energia (3) è invariante rispetto a \mathcal{I} . Un campo magnetico non nullo rompe questa simmetria.

Le domande interessanti da porsi sono tutte nel limite di un gran numero di spin, ad esempio:

- In una configurazione tipica, la maggior parte degli spin sono +1 o -1, o sono divisi equamente?
- Se uno spin in un dato posizione i è 1, qual è la probabilità che lo spin nella posizione j è 1?
- Se β cambia, vi è una transizione di fase?

Il caso più studiato è il modello di Ising su un reticolo d -dimensionale $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, con campo esterno nullo.

Proprietà termodinamiche Per il calcolo delle proprietà termodinamiche di un sistema magnetico è conveniente utilizzare la misura canonica secondo cui la probabilità di una configurazione è data dalla distribuzione di Boltzmann con temperatura inversa $\beta \geq 0$:

$$P_\beta(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z}. \quad (4)$$

La costante di normalizzazione

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H(\sigma)} \quad (5)$$

è la funzione di partizione. Si osservi che sommare su tutte le configurazioni di spin σ significa sommare su tutti i valori ± 1 assunti dagli spin:

$$\sum_{\sigma} \equiv \sum_{\sigma_1=\pm 1, \dots, \sigma_N=\pm 1}.$$

Le probabilità configurazionali $P_\beta(\sigma)$ rappresentano la probabilità che all'equilibrio si abbia uno stato di configurazione σ . Per una funzione f degli spin, il suo valor medio è

$$\langle f \rangle_\beta = \sum_{\sigma} f(\sigma) P_\beta(\sigma) = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} f(\sigma) e^{-\beta H(\sigma)}.$$

Se la funzione di partizione, e quindi l'energia libera

$$G = -\frac{1}{\beta} \log Z,$$

potessero essere valutate esattamente, tutte le proprietà di equilibrio del sistema potrebbero essere calcolate, per esempio, l'energia,

$$E = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} H(\sigma) e^{-\beta H(\sigma)} = - \left(\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right)_h = \beta \left(\frac{\partial G}{\partial \beta} \right)_h,$$

e il momento magnetico totale

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \left[\sum_i \sigma_i \right] e^{-\beta H(\sigma)} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} e^{\beta \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta h \sum \sigma_j} \\ &= \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \log Z}{\partial h} \right)_{\beta} = - \left(\frac{\partial G}{\partial h} \right)_{\beta} \end{aligned} \quad (6)$$

Modello di Ising in 1D Consideriamo N spin σ_i , $i = 0, \dots, N$, che possono assumere i valori $\sigma_i = \pm 1$, disposti in un reticolo unidimensionale (catena di spin). L'energia del sistema è

$$H = -J \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \sigma_i, \quad (7)$$

dove abbiamo posto $\mu = 1$ per comodità. L'energia libera per questa "catena" di spin,

$$-\beta g(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z(\beta)$$

può essere calcolata esattamente.

Se $h = 0$, è molto facile ottenere l'energia libera, nel caso di **condizione libera al contorno**, cioè quando il valore al bordo di σ_N non è vincolato. Il problema è valutare

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 = \pm 1, \dots, \sigma_N = \pm 1} e^{\beta J \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}}.$$

Possiamo separare lo spin N -esimo e scrivere

$$Z_N = \left[\sum_{\sigma_1 = \pm 1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1} e^{\beta J \sum_{i=0}^{N-2} \sigma_i \sigma_{i+1}} \right] \left[\sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N} \right]$$

Poiché

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N} &= e^{\beta J \sigma_{N-1}} + e^{-\beta J \sigma_{N-1}} \\ &= e^{\beta J} + e^{-\beta J} \\ &= 2 \cosh(\beta J), \end{aligned}$$

otteniamo la relazione di ricorsione

$$Z_N = [2 \cosh(\beta J)] Z_{N-1}.$$

la cui soluzione è

$$Z_N = 2 [2 \cosh(\beta J)]^{N-1} \quad (8)$$

(essendo $Z_1 = 2$). Quindi l'energia libera è

$$-\beta g(\beta, 0) = \ln \left[e^{\beta J} + e^{-\beta J} \right]. \quad (9)$$

È ovvio che il trucco della relazione di ricorsione che ci ha portato a determinare l'energia libera non funziona se c'è un campo magnetico esterno o in dimensioni maggiori di uno, anche se il campo esterno è nullo. In questi casi si utilizza il metodo della **matrice di trasferimento** che discuteremo tra breve.

2 Gas reticolari

La natura binaria delle variabili di spin permette altre possibili interpretazioni del modello di Ising. Possiamo, per esempio, pensare il modello come un “gas reticolare” con + che corrisponde ad un sito occupato e – ad un sito non occupato, o ad una lega binaria con + e – che corrispondono ad un sito del reticolo occupato dall’atomo A o B , rispettivamente.

Consideriamo un reticolo di V siti (V essendo pensato come “volume”) e ad una collezione di N particelle che possono occupare questi siti con la restrizione che non più di una particella può occupare un dato sito. Ad ogni sito associamo la variabile q_i definita da

$$q_i = \begin{cases} 1 & \text{se il sito } i \text{ è occupato} \\ 0 & \text{se il sito } i \text{ non è occupato} \end{cases} \quad (10)$$

Poiché il numero totale di particelle è N , abbiamo il vincolo

$$\sum_i q_i = N. \quad (11)$$

Possiamo assumere che l’energia di interazione tra i siti i e j è $-\phi_{ij}$ se i siti i e j sono occupati e 0 altrimenti. Ne segue che l’energia totale di interazione di una data configurazione $q = (q_1, q_2, \dots, q_V)$ è

$$H(q) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi_{ij} q_i q_j.$$

La funzione di partizione canonica è data

$$Z = \sum_q^* e^{-\beta H(q)}, \quad (12)$$

dove la somma asteriscata denota la somma su tutte le configurazioni che soddisfano il vincolo (11). Per rimuovere la restrizione sulla somma, è conveniente considerare la funzione di partizione gran canonica

$$\begin{aligned} Z_{GC}(z, \beta) &= \sum_{N=1}^{\infty} Z_N z^N \\ &= \sum_q e^{\sum_i q_i \log z + \beta \sum_{i < j} \phi_{ij} q_i q_j}, \end{aligned} \quad (13)$$

dove la somma su q è adesso su tutte le configurazioni.

Per stabilire una corrispondenza precisa tra il gas reticolare e il modello di Ising, definiamo la variabile di spin

$$\sigma_i = \frac{1}{2}(1 - q_i) \quad (14)$$

che assume i valori +1 e –1 quando $q_i = 0$ o 1, rispettivamente. Sostituendo l’eq. (14) nell’eq. (13), dopo un calcolo elementare si ottiene

$$Z_{GC} = e^A \sum_{\sigma} e^{\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta \sum_i h_i \sigma_i} \quad (15)$$

dove

$$A = \frac{V}{2} \log z + \beta \sum_{i < j}^V J_{ij} \quad (16)$$

$$J_{ij} = \frac{1}{4} \phi_{ij} \quad (17)$$

$$\beta h_i = -\frac{1}{2} \log z - \beta \left(\sum_{j=i+1}^V J_{ij} + \sum_{j=1}^{i-1} J_{ji} \right) \quad (18)$$

A parte il fattore moltiplicativo banale e^A , Z_{GC} è precisamente la funzione di partizione canonica di un modello di Ising con V siti e con costanti di accoppiamento J_{ij} tra gli spin nei siti i e j e con un campo esterno h_i applicato nel sito i .

Adesso è immediato stabilire relazioni tra le quantità termodinamiche di un gas reticolare e le corrispondenti quantità per un modello di Ising. Per esempio, si può verificare che la densità

$$\rho = \frac{N}{V}$$

data dal

$$\frac{N}{V} = Vz \frac{\partial Z_{GC}}{\partial z}$$

ed è collegata alla magnetizzazione per spin

$$m = \frac{1}{V} \left\langle \sum_{i=1}^V \sigma_i \right\rangle$$

del corrispondente modello di Ising per

$$\rho = \frac{1}{2} (1 - m).$$

3 Anello di Ising in un campo magnetico

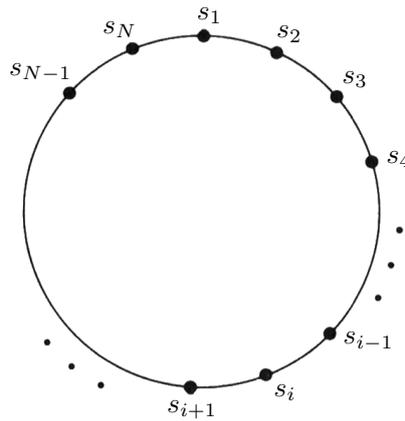


Figura 2: Modello di Ising unidimensionale su un cerchio, cioè con condizioni periodiche: lo spin N è accoppiato con lo spin 1.

Per un **anello** di Ising o **catena periodica** ($\sigma_{N+1} = \sigma_1$) in un campo magnetico h il problema è valutare

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 = \pm 1, \dots, \sigma_N = \pm 1} e^{K \sum_{i=0}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + B \sum_{i=1}^N \sigma_i}.$$

dove per comodità abbiamo posto $K = \beta J$ e $B = \beta h$. Se definiamo

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = e^{K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{B}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})} \quad (19)$$

possiamo scrivere

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 = \pm 1, \dots, \sigma_N = \pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \cdots T(\sigma_{N-1}, \sigma_N) T(\sigma_N, \sigma_1). \quad (20)$$

che ha la forma di un prodotto di matrici. In effetti, se \mathbb{T} è la matrice 2×2 , dette **matrice di trasferimento**, con elementi $T(\sigma, \sigma')$ definiti da eq. (19), vale a dire,

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} T(+1, +1) & T(+1, -1) \\ T(-1, +1) & T(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+B} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-B} \end{pmatrix}, \quad (21)$$

abbiamo, dopo aver sommato su $\sigma_1 = \pm 1, \dots, \sigma_N = \pm 1$ nell'eq. (20), che

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \mathbb{T}^N(\sigma_1, \sigma_1), \quad (22)$$

dove $\mathbb{T}^N(\sigma, \sigma')$ denota l'elemento (σ, σ') della matrice \mathbb{T} elevata alla potenza N -esima. L'eq. (22) è quindi la somma degli elementi diagonali di \mathbb{T}^N , cioè la **traccia** di \mathbb{T}^N . Ora, poiché la traccia di una matrice è la somma dei suoi autovalori e gli autovalori di \mathbb{T}^N sono gli autovalori di \mathbb{T} elevati alla potenza N -esima, abbiamo che

$$Z_N = \text{Tr}(\mathbb{T}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (23)$$

dove λ_1 e λ_2 sono gli autovalori della matrice \mathbb{T} data dall'eq. (21). L'equazione agli autovalori è

$$\begin{vmatrix} e^{K+B} - \lambda & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-B} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda e^K \cosh B + 2 \sinh 2K = 0$$

che dà

$$\left. \begin{matrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{matrix} \right\} = e^K \cosh B \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 B + e^{-2K}} \quad (24)$$

per gli autovalori di \mathbb{T} .

Notando che λ_2/λ_1 è strettamente inferiore a 1 abbiamo

$$\begin{aligned} -\beta g(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z(\beta) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left\{ \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \right\} \\ &= \log \lambda_1 \end{aligned} \quad (25)$$

Tenuto conto dell'eq. (24) e ripristinando $K = \beta J$ e $B = \beta h$, otteniamo

$$-\beta g(\beta, h) = \ln \left(e^{\beta J} \cosh \beta h + \sqrt{e^{2\beta J} (\sinh \beta h)^2 + e^{-2\beta J}} \right), \quad (26)$$

Quando $h = 0$ il lato destro dell'eq. (26) è $\log 2(\cosh \beta J)$, che è precisamente l'espressione (9) per la catena aperta (condizione libera al contorno). Inoltre, dall'eq. (24) per $B = \beta h = 0$,

$$\begin{cases} \lambda_1 = 2 \cosh \beta J \\ \lambda_2 = 2 \sinh \beta J \end{cases}$$

Quindi, dall'eq. (23) per $B = 0$ la funzione di partizione per la catena finita è

$$Z_N = (2 \cosh \beta J)^N + (2 \sinh \beta J)^N \quad (27)$$

che è ovviamente **differente** dal risultato (8) per la catena aperta. Nel limite termodinamico, tuttavia, solo l'autovalore massimo contribuisce. Vedremo che questo è vero in generale.

Si osservi che la magnetizzazione m calcolata dall'eq. (26) è

$$m(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial g}{\partial h} = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (28)$$

A campo magnetico nullo, m si annulla per qualunque valore finito di β ,

$$m(\beta, 0^+) = \lim_{h \rightarrow 0^+} m(\beta, h) = 0, \quad (29)$$

il che vuol dire che non si ha magnetizzazione spontanea e quindi che non c'è alcuna transizione di fase, fatta eccezione per $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) che ha una magnetizzazione pari a 1.

Esercizi

Calcolo della funzione di correlazione Usando il metodo della funzione di trasferimento, dimostrare che la funzione di correlazione (sottratta) spin-spin è

$$C(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = C(\beta) e^{-c(\beta)|i-j|}$$

dove $C(\beta)$ e $c(\beta)$ sono funzioni positive per $T > 0$.

4 Altri modelli unidimensionali

Concludiamo questa lezione con il calcolo della funzione di partizione di modelli unidimensionali non reticolari. Come la catena di Ising, questi modelli non hanno alcuna transizione di fase.

Gas di Tonks Uno dei modelli più semplici di fluido che si può immaginare è un gas di sfere rigide senza interazione, eccetto il potenziale "hard-core"

$$\phi_{hc}(r) = \begin{cases} 0 & \text{per } r > r_0 \\ \infty & \text{per } r \leq r_0, \end{cases} \quad (30)$$

Allora, detto b il diametro delle sfere rigide, la funzione di partizione (configurazionale) è

$$Z = \int e^{-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

con $\phi(r) = \phi_{hc}$ (per $r_0 = b$) e l'integrando nella la funzione di partizione può essere scritto come

$$\exp \left[-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right] = \prod_{1 \leq i < j \leq N} S(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (31)$$

dove

$$S(r) = \begin{cases} 1 & \text{per } r > b \\ 0 & \text{per } r \leq b, \end{cases} \quad (32)$$

La temperatura, dunque, non entra come un parametro in questo modello (se non nella parte cinetica) e la funzione di partizione è essenzialmente il “co-volume” di N sfere rigide in una regione di volume V .

In una dimensione, il modello corrisponde a un gas di N “bastoncini rigidi ” di lunghezza b . Questo problema fu risolto da Tonks nel 1936. Il modello in dimensioni maggiori è ancora irrisolto eccetto che nel caso limite di dimensione spaziale infinita (Frisch, 1985).

La funzione di partizione per N bastoncini rigidi nell'intervallo $0 \leq x \leq L$ è

$$Z(N, L, \beta) = \frac{1}{N!} \int_0^L \cdots \int_0^L \exp \left[-\beta \sum_{1 \leq j < i \leq N} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right] dx_1 \cdots dx_N \quad (33)$$

La caratteristica semplificante del caso uni-dimensionale è che le particelle possono essere ordinate sulla retta. Vale a dire, per un arbitrario potenziale ϕ , l'integrale nell'eq. (33) è $N!$ volte l'integrale sulla regione

$$R: 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_N$$

È il fatto che possiamo ordinare le particelle sulla retta cioè che rende possibile ottenere una soluzione esatta. Sfortunatamente, non c'è un trucco analogo in dimensione maggiore di uno.

Una volta che abbiamo ordinato le particelle, è chiaro che quando $x_{i+1} - x_i > b$, allora $x_j - x_i > a$ per tutti i $j = 1 + 1, i + 2, \dots, N$. Segue allora dalla rappresentazione (31) dell'integrando e dalle eq. (32) e (33) che

$$\begin{aligned} Z(N, L, \beta) &= \int \cdots \int_R \prod_{i=1}^{N-1} S(x_{i+1} - x_i) dx_1 \cdots dx_N \\ &= \int \cdots \int_{R'} dx_1 \cdots dx_N \end{aligned}$$

dove R' è la regione

$$R' = \{(i-1)b < x_i < x_{i+1} - b | i = 1, 2, \dots, N\}$$

e, per definizione, $x_{N+1} = L + b$. Con il cambiamento di variabili

$$y_i = x_i - (i-1)b,$$

si ottiene

$$Z(N, L, \beta) = \int_0^\ell dy_N \int_0^{y_N} dy_{N-1} \cdots \int_0^{y_3} dy_2 \int_0^{y_2} dy_1 = \frac{\ell^N}{N!}$$

dove

$$\ell = L - (N-1)b.$$

Usando la formula di Stirling $N! \sim N^N e^{-N}$ per $N \rightarrow \infty$, otteniamo nel limite termodinamico l'energia libera

$$-\beta f(\beta, v) = \lim_{N \rightarrow \infty, v=L/N \text{ cost.}} \frac{1}{N} \log Z(N, L, \beta) = 1 + \log(v - b) \quad (34)$$

Si osservi che $f(\beta, v)$ è definita solo per $v > b$. Quando $v \leq b$, si ha $Nb > L$, cosicché due bastoncini si sovrappongono. Dalla (33) segue che in questo caso $Z = 0$. La condizione $v = b$ corrisponde a un “completo impacchettamento”.

Da

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

si ottiene la pressione in funzione di v e T ,

$$p = - \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right)_T = \frac{kT}{v-b},$$

che è l'equazione di stato del sistema, e la compressibilità isoterma

$$\kappa_T = - \frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial p} = \frac{(v-b)^2}{vkT}.$$

Si osservi che il modello ha le corrette proprietà di stabilità, vale a dire, per $v > b$, l'energia libera è una funzione convessa di v , la pressione è una funzione decrescente di v e la compressibilità isoterma è non negativa.

Gas di Takahashi Una semplice generalizzazione del gas di Tonks, dovuta a Takahashi (1942) consiste di un gas unidimensionale di bastoncini rigidi (di lunghezza b) con interazione solo tra bastoncini primi vicini. Allora la funzione di partizione è data dall'eq. (33) dove il potenziale $\phi(r)$ soddisfa la condizione

$$\phi(r) = \begin{cases} 0 & \text{per } r > 2b \\ \infty & \text{per } r \leq b, \end{cases} \quad (35)$$

e è, in principio arbitrario (ma limitato) nell'intervallo $b \leq x \leq 2a$.

Il calcolo dell'energia libera non è un esercizio difficile, ma richiede un po' di abilità. Ci limitiamo a fornire il risultato:

$$-\beta f(\beta, v) = (v-b)\lambda_0 + \log F(\lambda_0) \quad (36)$$

dove

$$F(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda x - \beta(x+b)} dx \quad (37)$$

e λ_0 è la soluzione dell'equazione

$$\frac{F'(\lambda_0)}{F(\lambda_0)} = a - v \quad (38)$$

(si tratta del punto sella che emerge nella valutazione con metodo di Laplace della funzione di partizione per $N \rightarrow \infty$).

Se si deriva l'eq. (36) rispetto a v , si ottiene

$$\beta p = \frac{\partial}{\partial v} (-\beta f) = \lambda_0$$

che, rimessa nella (36), fornisce l'equazione di stato

$$v = a - \frac{F'(\beta p)}{F(\beta p)} \quad (39)$$

Fin tanto che il potenziale ϕ è limitato, si ha che v è una funzione analitica di p e viceversa.