

IL MODELLO DI ISING

- Alcuni materiali, detti ferromagnetici, come per esempio il ferro e il nichel, mostrano magnetizzazione spontanea in assenza di un campo magnetico esterno.

Questo tipo di magnetizzazione si manifesta solo se la temperatura è inferiore di un valore soglia ben definito chiamato temperatura di Curie o temperatura critica, T_c .

- Per temperature $T > T_c$, la magnetizzazione scompare. Quindi T_c separa nettamente la fase disordinata ($T > T_c$) da quella ferromagnetica ($T < T_c$).

Il Modello di Ising permette di studiare tali materiali ed in particolare la transizione di fase tra i regimi ferromagnetico e paramagnetico.

- Originariamente il modello venne proposto da Lenz ed investigato da Ising, studente di dottorato di Lenz.

Ising studiò le proprietà termodinamiche del sistema e trovò che per un sistema ad una dimensione non si manifesta una transizione di fase.

Tuttavia, nel caso di due o tre dimensioni, il modello di Ising descrive correttamente la transizione di fase.

Per introdurre il modello, consideriamo un reticolo composto da N siti (nodi) ed assumiamo che ogni nodo del reticolo abbia associata una variabile S che si identifica con lo spin assumendo due possibili valori:
 $S = +1 \rightarrow \text{SPIN UP}$, $S = -1 \rightarrow \text{SPIN DOWN}$.

L'energia totale del sistema è

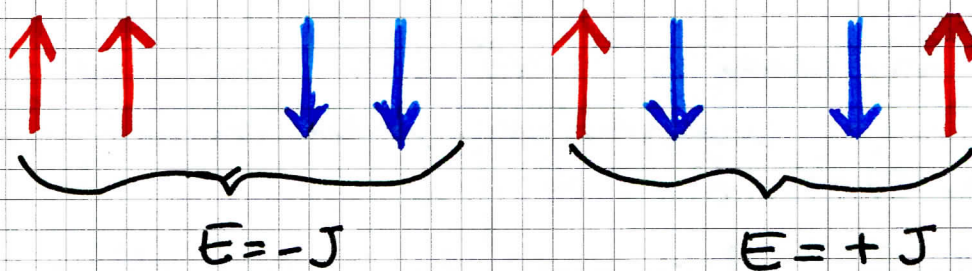
$$E = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$

FISSATO i , LA SOMMA È SUI PRIMI VICINI

J è una misura dell'interazione tra gli spin, mentre B è proporzionale al campo magnetico esterno (e può essere 0 in assenza di campo).

Il primo termine dell'espressione rappresenta l'energia di interazione degli spin e quest'ultima viene calcolata sulle coppie di elementi vicini.

Considerando il modello in una dimensione abbiamo quattro configurazioni possibili



Se $J > 0$, gli stati $\uparrow\uparrow$ e $\downarrow\downarrow$ sono energeticamente favoriti rispetto agli altri due stati: ci aspettiamo

quindi che lo stato di minima energia sia
ferromagnetico, cioè con gli spin allineati in
una 'unica' direzione.

Nel caso $J < 0$, invece, gli stati $\uparrow\downarrow$ e $\downarrow\uparrow$ sono
preferiti e il valore minimo di energia
corrisponde a un materiale paramagnetico.

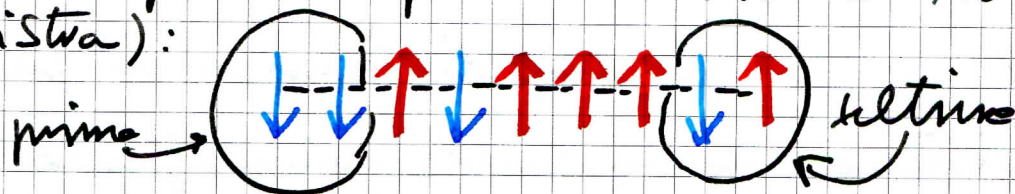
Il modello di Ising è incredibilmente semplice:

- 1) le energie cinetiche degli atomi del
reticolo sono trascurate;
- 2) nel calcolo dell'energia, soltanto i
contributi provenienti dai primi vicini
sono considerati;
- 3) gli spin assumono soltanto due valori
possibili.

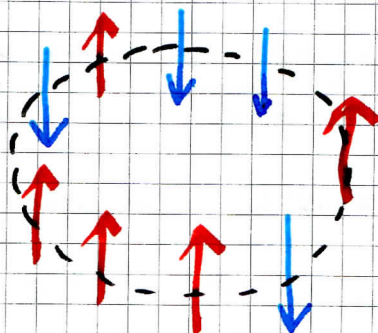
Analizziamo ora le condizioni al contorno
(sempre nel modello unidimensionale).

Esistono due possibilità:

- gli spin agli estremi interagiscono soltanto
con uno spin (il primo a destra e l'ultimo
a sinistra):



- imponiamo condizioni
periodiche in modo che
la catena formi un
anello



Un'altra osservabile fisica importante è la magnetizzazione

$$M = \sum_{l=1}^N S_l$$

mentre la magnetizzazione per spin è $m = \frac{M}{N}$

Vediamo ora come sia possibile studiare l'evoluzione temporale del sistema. Il reticolo di spin è posto a contatto con un termometro a temperatura T ed il sistema raggiunge l'equilibrio termico scambiando energia con il termometro fino a quando raggiunge la stessa temperatura.

All'equilibrio, la probabilità che il sistema si trovi in un microstato s con energia E_s è data da

$$p_s = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_s}$$

con $\beta = \frac{1}{kT}$, k costante di Boltzmann e Z costante di normalizzazione.

Quest'ultima condizione, poiché $\sum p_s = 1$ ci permette di ricavare $Z = \sum_s e^{-\beta E_s}$

Z prende il nome di funzione di partizione del sistema. L'ensemble così definito è un ensemble canonico e la distribuzione di probabilità è quella di Boltzmann.

È possibile calcolare statisticamente i valori medi delle quantità di interesse

Ad esempio, l'energia media del sistema è

$$\langle E \rangle = \sum_s P_s E_s = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s}$$

Come è possibile simulare un sistema finito di N particelle confinate in un volume V a temperatura finita T ?

Dal momento che possiamo generare soltanto un numero finito m rispetto al numero M di microstati possibili, la stima del valor medio di un osservabile è

$$\langle A \rangle \approx A_m = \frac{\sum_{s=1}^m A_s e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^m e^{-\beta E_s}}$$

dove A_s è il valore dell'osservabile A nel microstato s .

Per valutare le grandezze finché usiamo il metodo Monte Carlo detto dell'importance sampling. Riscriviamo A_m come

$$A_m = \frac{\sum_{s=1}^m \left(\frac{A_s}{\pi_s} \right) e^{-\beta E_s} \pi_s}{\sum_{s=1}^m \left(\frac{1}{\pi_s} \right) e^{-\beta E_s} \pi_s}$$

se generiamo i microstati con probabilità π_s , possiamo riscrivere

$$A_m = \frac{\sum_{s=1}^m \left(\frac{A_s}{\pi_s} \right) e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^m \left(\frac{1}{\pi_s} \right) e^{-\beta E_s}}$$

Una scelta ragionevole per Π_S è la probabilità di Boltzmann stessa

$$\Pi_S = \frac{e^{-\beta E_S}}{\sum_{S=1}^m e^{-\beta E_k}}$$

perante

$$A_m = \frac{1}{m} \sum_{S=1}^m A_S$$

Storicamente la scelta effettuata per Π_S è dovuta a Metropolis et al.

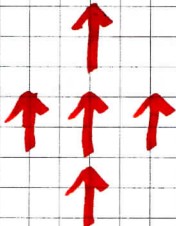
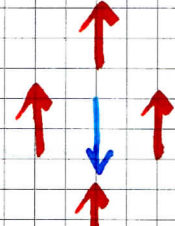
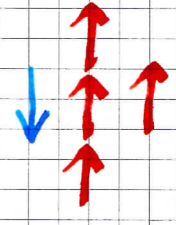
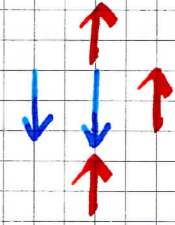
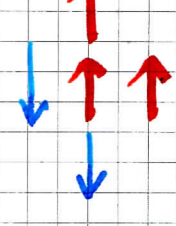
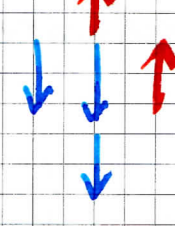
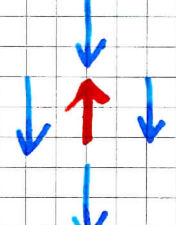
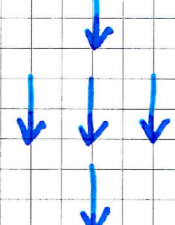
ALGORITMO

- 1) definire arbitrariamente il microstato iniziale
- 2) selezionare, a caso, uno spin ed effettuare uno spin-flip di prova
- 3) Calcolare $\Delta E = E_{\text{trial}} - E_{\text{old}}$
(il cambiamento dell'energia del sistema dovuto al singolo spin-flip)
- 4) se $\Delta E \leq 0$ accettare il nuovo stato ed ~~uscire~~ ripartire da 2)
- 5) calcolare $\psi = e^{-\beta \Delta E}$
- 6) generare un numero uniforme $u \in \mathcal{U}(0,1)$
- 7) se $u \leq \psi \rightarrow$ accettare il nuovo stato, altrimenti mantenere quella precedente (riportando lo spin nella posizione iniziale)
- 8) determinare il valore degli osservabili voluti
- 9) ripetere 2 $\rightarrow$ 8 per un certo numero di volte

CICLO PRINCIPALE

10) Calcolare le medie sui microstati

Possiamo ora a considerare un modello di ISING a due dimensioni e calcolare la variazione di energia prodotta da un spin flip

Stato iniziale	E_{IN}	Stato finale	E_{OUT}	ΔE
	-4J		+4J	+8J
	-2J		+2J	+4J
	0		0	0
	+2J		-2J	-4J
	+4J		-4J	-8J

Altre osservabili finché che caratterizzano il sistema

Capacità termica $(C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T})$

è legata
alle fluttuazioni
statistiche dell'energia
totale dell'insieme canonico

$$C = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

calcolate nell'insieme
canonico

In analogia alla capacità termica, la
suscettibilità χ misura l'abilità dello spin
di reagire ad un cambiamento indotto dal
campo magnetico esterno $(\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B})$

$$\chi = \frac{1}{kT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$