

Università degli Studi di Pisa
Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
Corso di Laurea Specialistica in Scienze Fisiche

TESI DI LAUREA SPECIALISTICA

Comportamento critico del modello si Ising in campo aleatorio

Candidato: Giacomo Ceccarelli

Relatori: Chiarissimo Prof. Ettore Vicari

Anno Accademico 2007/08

Indice

Introduzione	3
1 Transizioni di fase e fenomeni critici	7
1.1 Considerazioni introduttive	7
1.2 Sistemi magnetici	9
1.2.1 Esponenti critici	10
1.2.2 Trasformazioni di scala e dimensioni anomale	12
1.2.3 Descrizione qualitativa del punto critico	13
1.2.4 Ipotesi di riscaldamento	14
1.2.5 Invarianza di scala	16
1.3 Modello di Ising	17
1.3.1 Modello di Ising unidimensionale	18
1.3.2 Modello di Ising bidimensionale	18
1.3.3 Modello di Ising tridimensionale	19
2 Gruppo di rinormalizzazione	21
2.1 Blocchi di spin	21
2.1.1 Trasformazioni di Kadanoff	21
2.1.2 Applicazione al modello di Ising	22
2.2 Trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione	25
2.3 Punti fissi e universalità	27
2.4 Teoria generale	28
2.4.1 Variabili irrilevanti	30
2.4.2 Deduzione degli esponenti critici	31
2.4.3 Riscaldamento dell'energia libera	32
2.4.4 Correzioni allo scaling	33
2.5 Finite-size scaling	34
3 Modello di Ising in campo aleatorio	37
3.1 Introduzione ai sistemi disordinati	37
3.2 Modello di Ising in campo aleatorio	39
3.2.1 Dimensione critica inferiore	41
3.2.2 Barriere di energia libera	43
3.2.3 Stato fondamentale: il modello a $T = 0$	44
3.2.4 Spazio delle fasi	45
3.3 Transizione del secondo ordine	45
3.4 Osservabili del modello	48

4	Simulazione Monte Carlo del modello	53
4.1	Introduzione ai metodi Monte Carlo	53
4.1.1	Catene di Markov	54
4.1.2	Principio del bilancio dettagliato	55
4.2	Algoritmo di Metropolis	56
4.2.1	Applicazione al modello di Ising	58
4.3	Generalità sulle simulazioni	59
4.4	Multispin coding	59
4.4.1	Implementazione del multispin coding	62
4.4.2	Listato	63
4.5	Simulazioni al calcolatore	69
4.5.1	Verifica del codice	69
4.5.2	Tempi di correlazione	70
5	Analisi dei dati	73
5.1	Cumulante U_4 e lunghezza ξ_*	73
5.2	Cumulanti U_d e U_1	74
5.3	Conclusioni	76
5.4	Risultati delle osservabili	78
	Ringraziamenti	87

Introduzione

Il modello di Ising in campo aleatorio è un modello statistico che si pone lo scopo di descrivere il comportamento critico delle sostanze magnetiche in presenza di impurità all'interno del reticolo cristallino. Questo modello fu introdotto nel 1975 da Imry e Ma [22] per avere un termine di paragone con gli esperimenti che raffinasse la descrizione fornita dal modello di Ising puro, che a sua volta era stato introdotto nel 1920 da Lenz e risolto nel caso unidimensionale da Ising nel 1925 [8].

Questo modello è definito da una schiera di N variabili che possono assumere soltanto i due valori discreti $+1$ e -1 , disposte nei vertici di un reticolo cristallino (che nel nostro caso verrà considerato cubico semplice) in uno spazio di dimensione d (che per noi sarà tridimensionale) e che hanno due diversi tipi di interazione. Il primo tipo di interazione è ferromagnetico, del tutto analogo a quello del sistema puro, mentre il secondo tipo, caratteristico di questo modello, è costituito da un semplice accoppiamento degli spin con altre variabili esterne (una per ogni sito reticolare) il cui valore è stabilito in conformità con una funzione di distribuzione casuale assegnata. La scelta da noi effettuata è quella di una distribuzione bimodale con intensità unitaria.

La rilevanza fisica di questo modello risiede sostanzialmente nel fatto che i sistemi fisici costituiti dai materiali antiferromagnetici posti in un campo esterno uniforme appartengono alla stessa classe di universalità del modello di Ising in campo aleatorio [23]. Pertanto i risultati ottenuti in questo contesto sono suscettibili di un confronto sperimentale, almeno per quanto riguarda gli aspetti critici [30].

Nonostante molti anni di studio il comportamento delle fasi e le transizioni di fase che sono dominate dalla presenza di impurezze a casualità smorzata è ancora controverso, e il nostro modello non fa eccezione. Uno dei primi argomenti sul contendere riguardava la presenza o meno di una transizione nel caso tridimensionale. Le tecniche di studio basate sulla riduzione dimensionale [33] suggerivano che in $d = 3$ non potesse esistere ordine a lungo raggio mentre gli argomenti fondati sulla analisi delle pareti di dominio [22] prevedevano una fase ordinata a bassa temperatura e debole disordine in $d = 3$. La questione è stata poi risolta [35, 36, 37, 38] in maniera affermativa grazie a uno studio particolareggiato delle proprietà della energia libera. Ne segue che nello spazio individuato dalla temperatura T e della intensità del disordine h esiste una linea di transizione di fase che separa un comportamento paramagnetico da uno ferromagnetico.

Questi risultati aprirono dunque la strada allo studio specifico della transizione esibita dal modello. I più diffusi metodi usati in questo contesto sono le simulazioni numeriche con tecniche Monte Carlo. Il motivo risiede nel fatto che gli

aspetti critici dei modelli statistici sono caratterizzati dall'interazione simultanea di molti gradi di libertà, e quindi schemi analitici di approssimazione mal si addicono allo studio che è necessario compiere, mentre la soluzione esatta della funzione di partizione del modello è quasi sempre un obiettivo irraggiungibile. Purtroppo però queste analisi sono viziate da un limite molto stringente; i tempi di termalizzazione e di decorrelazione degli algoritmi sono affetti da un fortissimo rallentamento causato da una peculiarità del modello: barriere di energia libera largamente distribuite che crescono con una potenza della lunghezza di correlazione al tendere verso la regione critica. Tali barriere sono caratteristiche di fasi controllate, nel senso del gruppo di rinormalizzazione, da un punto fisso a temperatura nulla. Per il modello di Ising in campo aleatorio, non solo la fase ordinata di bassa temperatura è controllata da un tale punto fisso (come accade anche per il sistema puro), ma pure la stessa linea di transizione di fase è controllata da un punto fisso a temperatura nulla [34].

Uno studio alternativo consiste nell'indagine dello stato fondamentale (ossia a $T = 0$). In questo contesto non è più necessario affidarsi a simulazioni stocastiche ma si possono sfruttare, sempre per analisi al calcolatore, i metodi deterministici per la ricerca dei minimi [21]. Studi molto dettagliati in questo ambito [39] indicano che, almeno nel caso di una distribuzione gaussiana per il disordine, la transizione risulta continua ed effettivamente controllata da un punto fisso a temperatura nulla e si verifica per valori della intensità dei campi aleatori inferiori a un certo valore limite h_{c0} . Questo significa che possiamo ottenere informazioni di natura quantitativa sulla linea di separazione delle fasi semplicemente studiando il sistema a temperatura nulla.

Lo scenario appena descritto è comunque solo uno di quelli possibili, e diversi altri sono stati considerati nella letteratura. Una possibilità è quella di una transizione che fa passare il sistema dalla fase paramagnetica a quella ferromagnetica attraverso una fase intermedia vetrosa [41], associata al fenomeno della rottura della simmetria di replica, in cui si ha coesistenza di molti stati di equilibrio. Infine un ultimo caso considera l'eventualità che la linea di transizione di fase sia interrotta da un punto tricritico che separa una transizione del primo ordine da una del secondo, e questa immagine è sostenuta da alcuni risultati ottenuti in approssimazione di campo medio [44].

Il presente lavoro di tesi è articolato come segue.

- Nel CAPITOLO 1 si descrivono le caratteristiche generali delle transizioni di fase, mettendo l'accento in particolare sui sistemi magnetici e sulle informazioni ricavabili applicando l'ipotesi di riscaldamento. Si fornisce inoltre una breve analisi del modello di Ising puro.
- Nel CAPITOLO 2 si introducono i concetti del gruppo di rinormalizzazione, applicandoli come esempio al modello di Ising, e si fornisce una derivazione delle leggi di riscaldamento pertinenti al nostro argomento. Si espone infine la teoria del finite-size scaling.
- Nel CAPITOLO 3 si definisce il modello di Ising in campo aleatorio fornendo una analisi teorica degli aspetti più interessanti, in particolare in relazione allo scenario di una transizione continua governata da un punto

fisso a $T = 0$.

- Nel CAPITOLO 4 si introducono le tecniche di simulazione Monte Carlo e si descrive in dettaglio il metodo del multispin coding. Questo metodo è quello da noi utilizzato per eseguire le simulazioni numeriche, avendo scelto una distribuzione per i campi aleatori bimodale con $h = 1$.
- Nel CAPITOLO 5 si espongono e si analizzano i dati ottenuti nelle nostre analisi mediante i metodi del finite-size scaling.

Capitolo 1

Transizioni di fase e fenomeni critici

1.1 Considerazioni introduttive

Prima di analizzare in dettaglio i sistemi magnetici e il modello studiato in questo lavoro, riguardiamo i concetti più importanti e le definizioni principali relativi alle transizioni di fase in un contesto più semplice e familiare.

Consideriamo dunque un sistema fisico costituito da un certo numero di molecole identiche, ossia un sistema chimicamente puro, e prendiamone in considerazione gli stati di equilibrio.¹ La descrizione termodinamica del sistema si basa sull'introduzione di un dato numero di variabili macroscopiche che, nel nostro caso, sono la pressione P , la temperatura T e il volume V . Per avere una descrizione completa del sistema è necessario conoscere la relazione che lega queste tre quantità in ogni stato e l'espressione del calore specifico della sostanza. Infatti, grazie ai principi della termodinamica, è possibile ricavare, a partire da queste due relazioni, tutte le osservabili di interesse fisico. Equivalentemente una descrizione completa si ottiene conoscendo l'espressione dell'energia libera F del sistema (o di un qualunque altro potenziale termodinamico).

Da un punto di vista microscopico il problema è quello di calcolare, a partire dall'interazione tra i costituenti elementari, l'espressione dell'energia libera. La meccanica statistica, come è noto [1, 2, 3], risolve il problema mediante il calcolo della funzione di partizione. Infatti, dato il potenziale di interazione $W(r)$ fra una coppia di molecole, che si suppone a corto raggio e a simmetria sferica, siamo in grado di scrivere la hamiltoniana del sistema come

$$E = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i>j} W(q_i - q_j) \quad (1.1)$$

dove la prima somma è estesa a tutte le molecole e la seconda a tutte le coppie di molecole. Scelte adesso come variabili indipendenti la temperatura T e il volume V , si definisce la funzione di partizione $Z(T, V)$ come segue:

$$Z(T, V) = \int e^{-\beta E(p,q)} dpdq \quad (1.2)$$

¹Per concretezza si pensi a un gas.

dove le variabili p e q rappresentano collettivamente lo spazio delle fasi microscopico del sistema, la dipendenza dal volume è implicita in E (si suppone che il sistema sia confinato entro pareti rigide al cui bordo $W(r)$ diverge) e la dipendenza dalla temperatura è esplicita nel fattore $\beta = 1/(k_B T)$, dove k_B è la costante di Boltzmann. Nota la funzione di partizione, siamo in grado di calcolare l'energia libera del sistema mediante la seguente definizione:

$$F(T, V) = -k_B T \ln Z(T, V). \quad (1.3)$$

Passiamo adesso a descrivere come si possano identificare le transizioni di fase. In linea generale una transizione di fase è definita come un punto dello spazio delle variabili termodinamiche del sistema in cui l'energia libera non è una funzione analitica. Da un punto di vista più concreto una transizione di fase può essere descritta come segue.

L'equazione di stato $f(P, T, V) = 0$ descrive una superficie bidimensionale nello spazio tridimensionale delle variabili termodinamiche. È noto che la proiezione di tale superficie nel piano PT identifica delle curve nei cui punti avviene una transizione di fase: si pensi al fenomeno dell'ebollizione o della solidificazione dell'acqua. Tali linee sono note come *curve di coesistenza delle fasi*. Il motivo per cui queste linee sono particolari è che nei punti che vi appartengono esiste qualche grandezza che risulta discontinua, nel nostro caso la densità della sostanza. Pertanto una transizione di fase si manifesta mediante una discontinuità di qualche osservabile.

Sperimentalmente si osserva che allo stato di equilibrio di una sostanza in un punto di transizione di fase la materia non si trova in condizioni omogenee, ma è possibile dividere il sistema in due (o più) parti tali che per ciascuna si possano considerare separatamente le grandezze osservabili e i potenziali termodinamici. Ricordando che le osservabili sono calcolate mediante opportune derivate dei potenziali termodinamici, Erenfest propose la seguente classificazione delle transizioni di fase: una transizione di fase è di ordine n -esimo se, in corrispondenza del punto di transizione,

$$\frac{\partial^n f_1}{\partial T^n} \neq \frac{\partial^n f_2}{\partial T^n} \quad \text{e} \quad \frac{\partial^n f_1}{\partial P^n} = \frac{\partial^n f_2}{\partial P^n} \quad (1.4)$$

laddove tutte le derivate di ordine inferiore sono uguali e i pedici si riferiscono alle due fasi del sistema. Questa classificazione risulta però difettosa dal momento che esistono alcuni casi in cui il calore specifico diverge logaritmicamente nel punto di transizione (ferromagneti, leghe binarie, elio liquido) e quindi, non esistendo le derivate di ordine superiore, tali esempi non possono essere descritti dal presente schema, essendo il calore specifico la derivata seconda del potenziale termodinamico.

Una grandezza osservabile di grande importanza nello studio delle transizioni di fase è la *lunghezza di correlazione*. Questa grandezza ha carattere puramente microscopico e può essere misurata, nel presente contesto, mediante la diffusione di luce da parte della sostanza. Essa è una misura della distanza caratteristica della funzione di correlazione a due particelle, cioè della distanza alla quale il comportamento di una molecola influenza le (ed è influenzato dalle) altre molecole. Si osserva che nella maggioranza dei punti di transizione di fase la lunghezza di correlazione si attesta su un valore finito, mentre in alcuni punti essa tende a crescere indefinitamente esibendo un comportamento divergente. In

una tale situazione non ha più senso dividere il sistema in due parti appartenenti a fasi distinte poiché tutta la materia si influenza mutuamente costringendo il sistema in un'unica fase "critica".

A causa delle problematiche viste prima in relazione alla classificazione di Erenfest delle transizioni di fase, la terminologia moderna si riferisce alle transizioni di fase del *primo ordine* come a quelle in cui la lunghezza di correlazione resta finita e a quelle del *secondo ordine* (inteso nel senso più ampio di "non primo ordine") come a quelle in cui la lunghezza di correlazione diverge.

1.2 Sistemi magnetici

Poiché in questo lavoro ci occuperemo dello studio di un particolare sistema magnetico, introduciamo adesso alcuni concetti relativi a questo particolare tipo di sostanze e alcuni strumenti teorici utili per le analisi che faremo [4, 5, 6].

Per sistema magnetico intendiamo qui un sistema termodinamico descritto dalle seguenti variabili: la magnetizzazione M , il campo magnetico esterno applicato B e la temperatura T . Naturalmente il campo è una grandezza vettoriale così come lo è la magnetizzazione; nel nostro caso però considereremo il campo come una grandezza scalare (pensandolo come applicato soltanto lungo una direzione fissata) e similmente per la magnetizzazione (pensandola come la risposta del sistema in quella direzione). In particolare concentreremo la nostra attenzione sulle sostanze ferromagnetiche, cioè quelle sostanze, come per esempio il cobalto, il ferro o il nichel, che, anche in assenza di un campo magnetico esterno, sviluppano una magnetizzazione misurabile sperimentalmente.

Da un punto di vista microscopico le variabili che caratterizzano il sistema sono i momenti magnetici atomici degli atomi posti nei siti del reticolo cristallino che costituisce la sostanza. Tali variabili sono anche dette *variabili di spin*. Pertanto possiamo vedere la magnetizzazione sia da un punto di vista globale (come la somma totale di tutti questi momenti), sia da un punto di vista locale (come una densità di momento magnetico). In linea del tutto generale possiamo introdurre la densità di magnetizzazione $m(r)$: essa è la media su un volume macroscopicamente molto piccolo ma sufficientemente grande da contenere un ampio numero di spin in modo che la media risulti significativa; inoltre possiamo scrivere $M = \langle \int m(r) d^d r \rangle$, dove il simbolo $\langle \rangle$ denota la media statistica di ensemble. L'introduzione di questa grandezza ci consentirà di intraprendere uno studio quantitativo delle transizioni di fase a prescindere dalla conoscenza specifica dell'interazione microscopica.

Da un punto di vista sperimentale, nel piano BT , tutti i punti con $B \neq 0$ appartengono alla fase paramagnetica mentre la linea ($T < T_c, B = 0$) rappresenta una curva di transizione di fase che risulta del primo ordine, poiché attraversandola la magnetizzazione subisce una discontinuità, mentre il punto in cui essa termina è un punto critico. Si dice che i punti ($T < T_c, B = 0$) appartengono alla fase ferromagnetica. In questo contesto esiste un'analogia con un sistema fluido: la pressione è l'analogo del campo esterno e il volume della magnetizzazione sviluppata. Osserviamo comunque che, mentre nel caso precedente esistevano tre fasi (solida, liquida, gassosa), in questo caso esistono solo due fasi (paramagnetica e ferromagnetica) e, mentre prima si poteva identificare una molecola come appartenente o a una fase o l'altra, adesso non possiamo dire quali zone del materiale siano paramagnetiche o ferromagnetiche.

Prendiamo ora in considerazione la lunghezza di correlazione. In analogia con il caso fluido, la lunghezza di correlazione è definita come la distanza caratteristica della funzione di correlazione a due punti per la densità di magnetizzazione. La funzione di correlazione, per un sistema omogeneo in cui $\langle m(r) \rangle = \langle m(0) \rangle$, è definita come

$$G(r) = \langle m(r)m(0) \rangle - \langle m(0) \rangle^2. \quad (1.5)$$

Indicando con $\tilde{G}(k)$ la trasformata di Fourier di $G(r)$, possiamo definire, in maniera quantitativa e a prescindere dal modello considerato, la lunghezza di correlazione, in assenza di campo esterno, come segue:

$$\xi^2 = -\frac{1}{2\tilde{G}(0)} \frac{d^2\tilde{G}}{dk^2}(0). \quad (1.6)$$

La lunghezza di correlazione è dunque una misura della distanza sulla quale le variazioni (o *fluttuazioni*) della densità di magnetizzazione si influenzano mutuamente, ovvero della taglia di una porzione di materiale in cui gli spin puntano in media nello stesso verso.

In vista delle analisi che faremo, si supponga di avere a disposizione un modello di sostanza magnetica, ossia un modello matematico che definisce l'interazione tra un certo numero di variabili interpretabili come momenti magnetici elementari. Possiamo allora scrivere la funzione di partizione del sistema:

$$Z(T, B) = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E(\{s_i\})} \quad (1.7)$$

dove la somma è eseguita su tutte le possibili configurazioni microscopiche delle variabili di spin, e ricavare l'energia libera come funzione di T e B mediante la (1.3).

Riportiamo qui di seguito le definizioni di alcune grandezze osservabili di interesse per i sistemi magnetici: la magnetizzazione totale

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B}, \quad (1.8)$$

la suscettività magnetica

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial B}, \quad (1.9)$$

e la capacità termica

$$C = T^2 \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \quad (1.10)$$

Si può inoltre dimostrare, mediante un ragionamento noto come *teorema di fluttuazione-dissipazione* [6], che

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \int_V G(\vec{r}) d^3 r. \quad (1.11)$$

1.2.1 Esponenti critici

A questo punto è possibile definire i cosiddetti *esponenti critici*. Essi sono dei parametri che permettono di descrivere il comportamento delle osservabili in prossimità di un punto di transizione di fase del secondo ordine. Risulta

sperimentalmente che vicino al punto critico le quantità di interesse esibiscono un comportamento di “legge a potenza”: gli esponenti critici altro non sono che gli esponenti che compaiono in queste relazioni. Scopo della teoria sarà dunque quello di predirne il valore.

Definendo la temperatura ridotta come $t = (T - T_c)/T_c$, possiamo definire gli esponenti critici come segue:

- α : calore specifico, $C \sim |t|^{-\alpha}$;
- β : magnetizzazione spontanea, $M \sim |t|^\beta$;
- γ : suscettività, $\chi \sim |t|^{-\gamma}$;
- δ : equazione di stato, $M \sim B^{1/\delta}$;
- ν : lunghezza di correlazione, $\xi \sim |t|^{-\nu}$;
- η : decadimento al punto critico, $p = d - 2 + \eta$.

Nelle precedenti formule il simbolo “ \sim ” significa “possiede la parte singolare proporzionale a” e quindi tutti questi andamenti si riferiscono alla parte singolare delle nostre osservabili: per esempio $\alpha = 0$ significa che la capacità termica non ha parte singolare ma può presentare una discontinuità finita in $t = 0$.

In linea di principio dovremmo considerare la possibilità di esponenti diversi rispettivamente per $t < 0$ e $t > 0$; sia la teoria che gli esperimenti confermano comunque l’uguaglianza fra gli esponenti al di sopra e al di sotto della temperatura critica e quindi non ci preoccuperemo di fare questa distinzione. Inoltre si osservi che le prime tre relazioni sono definite in assenza di campo esterno mentre la seconda ha senso solo per $t < 0$, dal momento che la magnetizzazione spontanea non esiste al di sopra della temperatura critica.

Infine gli ultimi due esponenti critici e la lunghezza di correlazione sono definiti dalla espressione della funzione di correlazione che, nell’intorno del punto critico, assume la forma

$$G(r) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r}, \quad (1.12)$$

detta di Ornstein-Zernike [7], e che, esattamente al punto critico, assume la forma

$$G(r) \sim \frac{1}{r^p}, \quad (1.13)$$

tipica del decadimento a potenza. Nelle precedenti equazioni sono stati ovviamente omessi tutti quei fattori costanti dimensionati che dipendono dai dettagli del sistema ma non dalle variabili da cui dipendono le osservabili.

In generale si osserva che i valori degli esponenti critici non sono valori interi e nemmeno semplici numeri razionali, come ci aspetteremmo invece in situazioni in cui le leggi fisiche sottostanti al fenomeno esibissero un’invarianza di scala (si pensi per esempio al fatto che la terza legge di Keplero è sostanzialmente imposta dalla dipendenza della forza gravitazionale dall’inverso del quadrato del raggio): in questi casi gli esponenti risulterebbero da una semplice analisi dimensionale. Allora i dati sperimentali riportati ci fanno congetturare che all’interno del sistema, vicino al punto critico, esistono alcune scale di lunghezza alle quali si verificano fenomeni più rilevanti di altri, e proprio queste particolari scale, rompendo l’invarianza sopra menzionata, sono la causa degli insoliti valori degli esponenti critici.

1.2.2 Trasformazioni di scala e dimensioni anomale

Avendo intuito che il comportamento critico di un sistema è collegato a fenomeni di invarianza o meno di scala, affrontiamo adesso lo studio di cosa succeda al sistema quando esso viene appunto sottoposto a una *trasformazione di scala*. Intuitivamente una trasformazione di scala è uno “stiramento” o un “restringimento” omogeneo del sistema: in termini matematici una omotetia. In questo contesto risultano utili le nozioni di *dimensione canonica* e *dimensione di scala* di una grandezza.

Una trasformazione di scala di un fattore $b = 2$ raddoppia l’unità di misura della lunghezza mentre una di un fattore $b = 3$ triplica l’unità di misura. In altre parole, nelle nuove unità, lo spazio apparirà rimpicciolito di un fattore b . In generale possiamo scrivere per una lunghezza che

$$l \longrightarrow l' = b^{-1}l \quad (1.14)$$

e per un vettore d’onda che

$$k \longrightarrow k' = bk. \quad (1.15)$$

In virtù di queste regole di trasformazione diciamo che l ha dimensione di scala -1 mentre k ha dimensione di scala 1 . Per questi casi la dimensione canonica, ossia la dimensione delle grandezze che risulta da una semplice analisi dimensionale, risulta uguale a quella di scala.² In generale definiamo come segue la nozione di dimensione di scala di una generica grandezza: se una osservabile A , in conseguenza di una trasformazione di scala, si trasforma come

$$A \longrightarrow A' = b^\lambda A \quad (1.16)$$

allora diciamo che la dimensione di scala di A è λ .

Naturalmente per grandezze di carattere puramente geometrico (come distanze, superfici o volumi sufficientemente regolari) continuano a valere le regole della analisi dimensionale e quindi la dimensione canonica coinciderà con la dimensione di scala. La cosa però cambia quando cominciamo a prendere in considerazione grandezze di carattere statistico, poiché per il loro calcolo è necessario eseguire una media di ensemble. È proprio questo passaggio che, introducendo in gioco altre lunghezze caratteristiche (spesso in maniera insospettabile), rende le dimensioni di scala diverse da quelle canoniche. La differenza fra queste due è detta *dimensione anomala*.

Determiniamo adesso le dimensioni di scala di alcune quantità di interesse. Osserviamo per prima cosa che $\hat{F} = F/k_B T$ è adimensionale e quindi per $\hat{f} = F/k_B T V$, che è una grandezza intensiva, risulta

$$[\hat{f}] = [V]^{-1} = [l^d]^{-1} = [l]^{-d} \quad (1.17)$$

e, ricordando che $\lambda_l = -1$, otteniamo $\lambda_{\hat{f}} = d$.

Guardando la (1.13) risulta

$$[G(r)] = [r]^{-p} = [r]^{2-d-\eta} = [l]^{2-d-\eta} \quad (1.18)$$

e otteniamo $\lambda_G = (d - 2 + \eta)$.

La grandezza $\langle m(r) \rangle^2$ ha dimensione uguale a quella di $G(r)$, come si vede dalla

²A parte il segno, come si vede dalla definizione (1.14).

(1.5). Allora per $m = M/V$ risulta

$$[m] = [G(r)]^{1/2} = [l]^{(2-d-\eta)/2} \quad (1.19)$$

e otteniamo $\lambda_m = (d - 2 + \eta)/2$.

Per il teorema di fluttuazione-dissipazione (1.11) risulta

$$[k_B T \chi] = [l]^{2-\eta}. \quad (1.20)$$

La dimensione di scala del campo coniugato si ottiene dalla formula $m = -\partial f / \partial B$. Poiché $[B/k_B T] = [\hat{f}/m]$ risulta

$$[B/k_B T] = [l]^{-(2+d-\eta)/2}. \quad (1.21)$$

Si presti attenzione al fatto che le formule per le dimensioni di scala altro non sono che delle condizioni di consistenza fra l'andamento sperimentale osservato delle grandezze e l'analisi dimensionale delle stesse. Come già detto al termine del precedente paragrafo, questo è la conseguenza del fatto che, a livello profondo, alcune scale di lunghezza sono più rilevanti di altre. Per procedere cerchiamo dunque di guardare cosa succede da un punto di vista più microscopico al nostro sistema.

1.2.3 Descrizione qualitativa del punto critico

Cerchiamo adesso di avere un'immagine intuitiva del comportamento di un materiale ferromagnetico. In questo paragrafo considereremo una situazione in assenza di campo esterno.

Sul sistema agiranno in generale due effetti competitivi: l'interazione ferromagnetica microscopica fra le molecole, che tende ad allineare tutti i momenti del reticolo portando il sistema in una situazione sempre più ordinata, e l'agitazione termica, che tende a rendere caotico l'orientamento dei momenti magnetici per aumentare l'energia totale portando il sistema in una situazione sempre più disordinata. Da un punto di vista formale sappiamo che le configurazioni più importanti nel calcolo delle grandezze osservabili sono quelle la cui energia interna risulta confrontabile con il valore $k_B T$; ne segue che quando la temperatura è bassa il sistema privilegierà stati a bassa energia (ossia con spin prevalentemente allineati e dunque ordinati) mentre per alte temperature gli stati privilegiati saranno quelli ad alta energia (ossia con spin prevalentemente disallineati e dunque disordinati).

Volgiamo adesso la nostra attenzione alla lunghezza di correlazione. Alle alte temperature essa avrà un valore modesto, dal momento che l'agitazione termica, sovrastando l'interazione magnetica, le impedisce di propagare la propria influenza da uno spin all'altro. Alle basse temperature la correlazione sarà similmente debole, dal momento che, nonostante il sistema sia in una fase ordinata, l'ordinamento è sostanzialmente imposto dal fatto che l'energia termica è bassa, e dunque gli stati microscopici più rilevanti sono quelli di bassa energia interna: pertanto a imporre un ordine a lungo raggio non è l'interazione microscopica ma la bassa temperatura.³

³Si ricordi che nella (1.5) abbiamo sottratto il termine di magnetizzazione media per evitare di attribuire alla funzione di correlazione un valore non dovuto all'interazione.

Immaginiamo ora di partire da uno stato di equilibrio a una temperatura superiore alla temperatura critica e di abbassare la temperatura in modo da far compiere al sistema una trasformazione che passi per stati di equilibrio. A mano a mano che la temperatura scende l'effetto disordinante dell'agitazione termica sarà sempre minore e l'interazione magnetica potrà guidare sempre di più l'orientamento dei momenti: come conseguenza aree sempre più vaste di materiale tenderanno ad allineare i propri spin aumentando così la lunghezza di correlazione. Similmente, partendo da una temperatura inferiore a quella critica e salendo, l'effetto disordinante dell'agitazione termica tenderà a ridurre le zone di materiale ordinate fino a eliminare la magnetizzazione macroscopica; la correlazione invece tenderà comunque ad aumentare poiché l'ordine microscopico, anche se meno marcato, sarà dovuto sempre di più all'interazione fra momenti anziché alla (ancora) bassa agitazione termica.

Arriviamo così a dedurre che alla temperatura critica il sistema si trova in uno stato molto particolare: al di sopra non si ha magnetizzazione spontanea mentre al di sotto sì, e la lunghezza di correlazione tende a crescere sempre di più a mano a mano che ci avviciniamo (sia dal basso che dall'alto) alla temperatura critica. La situazione microscopica che descrive questa circostanza è rappresentata da una successione di isole di spin allineate in un verso immerse in isole di spin più grandi allineate in verso opposto. Tali isole sono note come "gocce di Kadanoff" e questa immagine rende conto di come sia possibile avere una lunghezza di correlazione divergente in presenza di magnetizzazione zero (o infinitesima).

La rappresentazione che abbiamo appena fornito ci conduce verso i due importanti concetti di *riscaldamento* e di *invarianza di scala*.

1.2.4 Ipotesi di riscaldamento

Accettando il ruolo fondamentale giocato dalla lunghezza di correlazione, siamo spinti a congetturare che tutte le singolarità nel comportamento della sostanza in prossimità del punto critico siano determinate proprio da questa grandezza. Questa assunzione è detta *ipotesi di riscaldamento*. In altre parole l'idea che sta alla base dell'ipotesi è che le correlazioni delle fluttuazioni di spin che avvengono alle grandi scale di lunghezza siano interamente responsabili degli aspetti critici. Osserviamo comunque che a questo livello l'ipotesi di riscaldamento è soltanto una plausibile congettura e il suo valore risiede nel fatto che è indipendente da qualsiasi riferimento a particolari modelli e che riesce a rendere conto di alcuni aspetti fenomenologici.

Si consideri allora la trasformata di Fourier $\tilde{G}(k)$ della funzione di correlazione. Siano a_1, a_2, \dots varie lunghezze microscopiche che sono molto più piccole di ξ quando $|T - T_c|$ è sufficientemente vicino a 0. Si scriva $\tilde{G}(k)$ come segue:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(k) &= f(k\xi, a_1/\xi, a_2/\xi, \dots) \\ &= \xi^y (g(k\xi) + O(\xi^{-1})) \\ &\approx \xi^y g(k\xi)\end{aligned}$$

dove abbiamo espanso f in potenze dei propri argomenti e abbiamo tenuto solo i primi termini. Più esplicitamente, quello che abbiamo fatto è stato considerare il primo argomento della funzione $f(\zeta, \lambda_1, \lambda_2, \dots)$ fissato ed espandere nel limite

in cui gli altri argomenti tendono a zero. Questo limite sarà proporzionale a qualche potenza di $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ porgendo

$$\lim_{\lambda_1, \lambda_2, \dots \rightarrow 0} F(\zeta, \lambda_1, \lambda_2 \dots) = \tilde{g}(\zeta) \lambda_1^{x_1} \lambda_2^{x_2} \dots \quad (1.22)$$

dove la costante di proporzionalità $\tilde{g}(\zeta)$ e gli esponenti x_1, x_2, \dots sono naturalmente proprietà di f . Ponendo $-y = x_1 + x_2 + \dots$ e $g(\zeta) = \tilde{g}(\zeta) b_1^{x_1} \dots$ si ottiene lo sviluppo di $\tilde{G}(k)$. La funzione g deve contenere le giuste potenze delle lunghezze microscopiche a_1, a_2, \dots e degli altri parametri in modo tale che l'unità di misura di $\xi^y g(\zeta)$ risulti correttamente come l'unità della funzione $\tilde{G}(k)$.⁴ L'ipotesi di riscaldamento dice allora che la dipendenza singolare dalla temperatura entra attraverso ξ e ogni altra dipendenza da T implicita in g è regolare ed essa può essere considerata costante in un opportuno intorno di T_c . Questo ragionamento non fornisce il valore di y né dice nulla di esplicito sulla funzione g , ma consente di legare y agli esponenti definiti in precedenza. Esponiamo adesso nel dettaglio un esempio di come questo sia possibile. Poiché

$$\tilde{G}(0) = \xi^y g(0) \propto |T - T_c|^{-\nu y}, \quad (1.23)$$

ricordando la definizione dell'esponente γ e il fatto che $\chi = k_B T \tilde{G}(0)$, otteniamo

$$\nu y = \gamma. \quad (1.24)$$

Siccome per $|T - T_c| \rightarrow 0$ risulta $\tilde{G}(k) \propto k^{-2+\eta}$, abbiamo

$$\lim_{k\xi \rightarrow \infty} g(k\xi) \propto (k\xi)^{-2+\eta} \quad (1.25)$$

e da queste relazioni si deduce che

$$\gamma = \nu(2 - \eta). \quad (1.26)$$

Una uguaglianza come la precedente, che leghi fra loro alcuni esponenti critici, è nota come *legge di riscaldamento*.

Il ragionamento che abbiamo appena esposto esibisce chiaramente come l'ipotesi di riscaldamento abbia un contenuto euristico molto forte. Cerchiamo adesso una maniera di applicarla che sia il più generale possibile. Un modo di realizzare l'ipotesi di riscaldamento è di assumere che vicino al punto critico una quantità di dimensione (lunghezza)^{-d} sia proporzionale a ξ^{-d} . A questo punto andiamo a sostituire la lunghezza ξ al posto della grandezza l che compare nelle (1.17, 1.18, 1.19, 1.20, 1.21) e poniamo, conformemente alla definizione di ν , $\xi \sim t^{-\nu}$. Otteniamo allora i seguenti risultati:

$$\begin{aligned} 2 &= \nu d + \alpha, \\ 2\beta &= \nu(d - 2 + \eta), \\ \gamma &= \nu(2 - \eta), \\ 2\beta\delta &= \nu(d + 2 - \eta). \end{aligned}$$

La prima relazione è nota come *legge di Josephson* e la terza come *legge di Fisher*. Sottraendo e sommando la seconda e la quarta otteniamo la *legge di Rushbrooke* e la *legge di Widom*.

⁴Si noti che k^{-1} è completamente arbitrario e $k\xi$ può assumere ogni valore.

1.2.5 Invarianza di scala

Vediamo ora come, con un piccolo sforzo ulteriore, possiamo giungere al concetto di invarianza di scala e ottenere importanti relazioni per gli esponenti critici. L'ipotesi di riscaldamento afferma che ξ è la sola lunghezza caratteristica che un sistema possiede in un intorno del punto critico. Unita all'osservazione che ξ diverge al punto critico, essa porta alla conclusione che il sistema non ha lunghezza caratteristica, e quindi che è invariante sotto trasformazioni di scala.⁵ Intuitivamente si può dire che l'invarianza di scala significa che, se una parte del sistema è ingrandita fino a quando non raggiunge le dimensioni del sistema iniziale, non si è in grado di dire quali differenze ci siano tra questo e la sua parte ingrandita.

Più precisamente definiamo un sistema invariante di scala se in esso tutte le funzioni termodinamiche sono omogenee. Quando l'unità di lunghezza aumenta di un fattore b , la coordinata si trasforma come $x \rightarrow x' = x/b$, per cui la funzione di correlazione si trasforma come $G(x/b) = b^p G(x)$. Su questo modello, detta q la generica variabile termodinamica e $\phi(q)$ la generica funzione, definiamo funzione omogenea una funzione che soddisfa la condizione

$$\phi(q') = b^{y_\phi} \phi(q) \quad q' = b^{y_q} q. \quad (1.27)$$

Applicando questi ragionamenti alla densità di energia libera e definendo il campo ridotto $h \equiv B/k_B T$, otteniamo $f(t', h') = b^d f(t, h)$, ovvero

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (1.28)$$

Poiché si è assunto che ξ sia l'unica lunghezza del problema, variare ξ equivale a variare l'unità di lunghezza; dalla relazione $\xi \propto t^{-\nu}$ abbiamo quindi

$$y_t = \frac{1}{\nu}. \quad (1.29)$$

Ricordando che il parametro b può essere fissato a piacere, decidiamo di porre

$$b = |t|^{-1/y_t} \quad (1.30)$$

ottenendo in tal modo

$$f(t, h) = t^{d/y_t} \Phi_{\pm} \left(t^{\frac{y_h}{y_t}} \right) \quad (1.31)$$

dove $\Phi_{\pm}(z) = f(z, \pm 1)$. Da un punto di vista teorico le quantità y_t e y_h sono più fondamentali degli esponenti critici: le prime ci dicono come le variabili termodinamiche si comportano sotto trasformazioni di scala, gli ultimi sono dettati dalla sola convenienza sperimentale.

Gli esponenti critici possono venir espressi in termini di y_t e y_h nella maniera

⁵Si ricordi che le leggi a potenza, come la (1.13), avendo una trasformata di Fourier il cui grafico risulta "senza picchi", sono tipiche di fenomeni in cui non esiste una scala (identificata da $1/k_{\text{picco}}$) più rilevante di altre.

seguinte:

$$\begin{aligned}\alpha &= 2 - \frac{d}{y_t} \\ \beta &= \frac{d - y_h}{y_t} \\ \gamma &= \frac{2y_h - d}{y_t} \\ \delta &= \frac{y_h}{d - y_h} \\ \eta &= d + 2 - 2y_h \\ \nu &= \frac{1}{y_t}.\end{aligned}$$

Queste relazioni si dimostrano partendo dalla (1.31), ricordando le definizioni di M, C, χ , le definizioni degli esponenti critici e le leggi di riscaldamento già viste. Riepiloghiamo quello che abbiamo fatto. L'assunzione di invarianza di scala è una ipotesi *ad hoc*, che ha comunque condotto alla (1.28) e alla (1.29). Inoltre la (1.30) ha portato alla (1.31). Da quest'ultima abbiamo poi ricavato gli esponenti critici in funzione di y_t e y_h . Allora, motivati dai risultati raggiunti in questo paragrafo, poniamo come obiettivo alla teoria che svilupperemo nel prossimo capitolo, da una parte, la deduzione del fenomeno dell'invarianza di scala direttamente da premesse più fondamentali e il calcolo delle dimensioni di scala delle diverse variabili termodinamiche, e dall'altra, una interpretazione fisica che giustifichi la (1.30). Adesso volgiamo la nostra attenzione al modello di Ising, "padre" dell'argomento di questo lavoro.

1.3 Modello di Ising

Il modello di Ising è un tentativo grossolano di simulare la struttura di una sostanza ferromagnetica e fu proposto per la prima volta da Lenz nel 1920 e risolto nel caso unidimensionale da Ising nel 1925 [8]. La sua virtù principale sta nel fatto che il modello di Ising bidimensionale è uno dei pochissimi modelli statistici che esibisce una transizione di fase e che possa essere esattamente risolto in maniera analitica.

Nel modello di Ising si considera una schiera di N punti fissi, detti siti reticolari, che costituiscono un reticolo di dimensione d . La struttura geometrica del reticolo può essere arbitraria e noi assumeremo che essa sia cubica semplice. Pertanto, in dimensione d , ogni sito reticolare avrà $2d$ primi vicini. Associata a ciascun sito reticolare vi è una variabile s_i , detta di spin, la quale è un numero che può assumere solo i valori $+1$ o -1 . Una configurazione dell'intero sistema è univocamente determinata qualora sia assegnato un dato insieme di valori per le variabili $\{s_i\}$. L'energia del sistema è data dalla seguente espressione:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i \quad (1.32)$$

dove la somma nel primo termine è estesa a tutte le coppie di primi vicini e dove J e B sono rispettivamente la costante di accoppiamento magnetico e il campo

applicato. In questo lavoro assumiamo $J > 0$ cosicché la configurazione di minima energia in assenza di campo sia quella in cui tutti gli spin possiedono il medesimo valore: questa situazione è quella che corrisponde al ferromagnetismo.

1.3.1 Modello di Ising unidimensionale

Il modello di Ising in una dimensione è rappresentato da una catena di spin. Con considerazioni elementari sul comportamento dell'energia interna e dell'entropia in corrispondenza della creazione di una parete di dominio, è possibile dimostrare che questo sistema non esibisce alcuna transizione di fase e questo fatto può essere confermato grazie alla soluzione analitica del modello [6].

La funzione di partizione può essere calcolata esattamente e da questa è possibile ricavare l'energia libera per spin

$$f(T, B) = \frac{1}{N} F(T, B) = -J - k_B T \ln \left(\cosh(\beta B) + \sqrt{\sinh^2(\beta B) + e^{-4\beta J}} \right) \quad (1.33)$$

e la densità di magnetizzazione

$$m(T, B) = \frac{1}{N} M(T, B) = \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{\sinh^2(\beta B) + e^{-4\beta J}}}. \quad (1.34)$$

Come si vede dalla (1.34), la magnetizzazione in assenza di campo esterno è nulla per tutte le temperature e quindi il sistema non è soggetto a transizione di fase. Vedremo subito che le cose cambiano se consideriamo il modello in due dimensioni.

1.3.2 Modello di Ising bidimensionale

Anche in questo caso è possibile trovare la soluzione analitica della funzione di partizione, nonostante che questo comporti un vero e proprio “*tour de force*” matematico [9, 10, 11].

La densità di energia libera in assenza di campo magnetico esterno risulta

$$\beta f(T, 0) = -\ln(2 \cosh(2\beta J)) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi} \right) \quad (1.35)$$

dove

$$k \equiv \frac{2 \sinh 2\beta J}{\cosh^2 2\beta J}. \quad (1.36)$$

Sfruttando le regole della termodinamica, è possibile osservare che tutti i potenziali termodinamici esibiscono una singolarità di qualche tipo quando $T = T_c$, dove T_c è data dalla relazione

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_c} = 1. \quad (1.37)$$

Approssimativamente abbiamo $T_c \simeq 2.27$.⁶ Tale valore della temperatura è ovviamente il valore della temperatura critica, e nel caso particolare del calore

⁶Ovviamente stiamo usando unità per la temperatura in cui $k_B = J = 1$.

specifico⁷ si ottiene, in un intorno di T_c , la seguente espressione:

$$\frac{1}{k_B}C(T, 0) \approx \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \left(-\ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \ln \left(\frac{k_B T_c}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right). \quad (1.38)$$

Si osserva dunque che esso diverge in modo logaritmico quando $|T - T_c| \rightarrow 0$. Per dare una giustificazione del fatto che il fenomeno a $T = T_c$ viene chiamato transizione di fase, dobbiamo esaminare l'ordine a lungo raggio, cioè la magnetizzazione spontanea. Il risultato per la densità di magnetizzazione è

$$m(T, 0) = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)} \right)^{1/8} \quad (1.39)$$

al di sotto della temperatura critica e $m(T, 0) = 0$ al di sopra.

Questo modello è di notevole importanza poiché costituisce uno dei pochissimi esempi di modelli statistici che siano esattamente risolvibili e che al tempo stesso esibiscano una transizione di fase. Inoltre esso riesce a catturare alcuni aspetti essenziali di sistemi fisici reali e quindi, lungi dall'essere un puro esercizio accademico, rappresenta una prima approssimazione per lo studio concreto di sostanze ferromagnetiche.

Inoltre, qualora le variabili di spin vengano interpretate in maniera differente, si può dimostrare l'equivalenza formale tra questo e altri sistemi (come leghe binarie o gas reticolari), estendendo così di gran lunga l'applicabilità dei risultati ottenuti.

1.3.3 Modello di Ising tridimensionale

A questo punto appare naturale procedere nello studio del modello aumentando la dimensione del reticolo a $d = 3$. Ci accorgiamo però che una soluzione analitica, simile a quelle appena ottenute, non è una cosa realizzabile⁸ e dunque dobbiamo rivolgerci a metodi diversi da quelli dei calcoli esatti per poter ottenere dei risultati.

In questo contesto i metodi più efficaci nello studio dei sistemi statistici, che possiedono un gran numero di variabili mutuamente interagenti, sono le simulazioni numeriche eseguite con metodi stocastici (le cosiddette “*tecniche Monte Carlo*”, di cui parleremo diffusamente in seguito nel Cap.4).

La stima della temperatura critica è $T_c \simeq 4.51$ [12] e riportiamo qui di seguito una summa dei risultati fino a oggi ottenuti per gli esponenti critici [13].

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.110(1), \\ \beta &= 0.3265(3), \\ \gamma &= 1.2372(5), \\ \delta &= 4.789(2), \\ \eta &= 0.0364(5), \\ \nu &= 0.6301(4). \end{aligned}$$

⁷L'energia interna è comunque continua alla temperatura critica e questo implica che la transizione non comporti la presenza di un calore latente

⁸Feynman una volta disse che una delle sue idee più brillanti fu quella di rifiutare lo studio analitico del modello di Ising tridimensionale.

Cogliamo adesso l'occasione per due spunti di carattere generale. Il primo riguarda il fatto che, all'aumentare delle dimensioni spaziali in cui viene considerato il modello, la temperatura critica tende a crescere. Questo può essere spiegato in maniera intuitiva con il seguente ragionamento. All'aumentare di d aumenta il numero di primi vicini nel reticolo e quindi l'interazione ferromagnetica aumenta la propria rilevanza: l'agitazione termica è dunque costretta ad aumentare se vuole aver ragione del fattore ordinante. Il secondo riguarda il fatto che, in dimensione sufficientemente bassa, per il medesimo argomento di prima, l'interazione magnetica può non bastare a ordinare il sistema per qualunque temperatura finita (per bassa che sia), eliminando così ogni transizione di fase. Dato un qualunque sistema, si definisce *dimensione critica inferiore* d_* la più grande dimensione in cui non esiste transizione di fase.

Capitolo 2

Gruppo di rinormalizzazione

I risultati ottenuti nel precedente capitolo erano essenzialmente conseguenza dell'ipotesi di riscaldamento e dell'invarianza di scala. Questi due aspetti complementari fornivano sì delle predizioni sperimentali riguardo gli esponenti critici, ma non consentivano di ricavare il loro valore a partire da postulati indipendenti, cioè non costituiscono una teoria completa in grado di spiegare i fenomeni. Ci poniamo adesso lo scopo di descrivere i risultati della teoria nota come *teoria del gruppo di rinormalizzazione* [14, 15, 16]. Questa teoria introduce alcuni concetti base, che spiegheremo in dettaglio nel seguito, e deduce in maniera elegante fenomeni come l'invarianza di scala e l'esistenza di classi di universalità; inoltre fornisce tecniche analitiche per il calcolo degli esponenti critici. In questo capitolo ci concentreremo soltanto su quegli aspetti generali della teoria che risultano pertinenti per il nostro modello [4, 5, 6]. Infine tratteremo la teoria del finite-size scaling [13, 17].

2.1 Blocchi di spin

Abbiamo imparato che le proprietà critiche di un sistema non dipendono dai dettagli alle brevi distanze, bensì soltanto dalla natura delle fluttuazioni a grandi lunghezze d'onda. Questo suggerisce di eliminare i gradi di libertà irrilevanti tramite una opportuna procedura di media.

2.1.1 Trasformazioni di Kadanoff

Si supponga di prendere un sistema magnetico e di trasformarlo in modo tale che le nuove variabili costituiscano una sorta di media su un certo gruppo di vecchie variabili. Per quanto riguarda gli aspetti rilevanti ai fini del comportamento critico, sappiamo già che i dettagli delle interazioni alle brevi distanze non contano e dunque siamo indotti a ritenere che, iterando la procedura di media, otterremo una successione di sistemi criticamente equivalenti. Arriveremo però a un punto in cui le variabili originarie su cui abbiamo operato la media si riferiscono a una porzione del sistema che ha le dimensioni della lunghezza

di correlazione: a quel punto non siamo più autorizzati a procedere, dal momento che elimineremmo dalla descrizione del modello alcuni aspetti rilevanti. La procedura di media che abbiamo sommariamente descritto rappresenta una visione del sistema a grana grossa, poiché tende a sfuocare i dettagli alle piccole distanze per far risaltare aspetti a scale maggiori, e per questo è detta *coarse-graining*. La legge di trasformazione che fa passare da una situazione all'altra è nota come *trasformazione di Kadanoff*.

L'idea della trasformazione di Kadanoff fu introdotta per la prima volta [18] in termini di trasformazioni di blocchi di spin e noi la illustreremo adesso nell'ambito del modello di Ising. Lo scopo che ci prefiggiamo è quello di ricavare informazioni qualitative sullo spazio delle variabili termodinamiche del sistema.

2.1.2 Applicazione al modello di Ising

Da un punto di vista macroscopico uno stato del sistema è univocamente determinato assegnando la temperatura T e il campo B . Le variabili microscopiche del modello sono invece gli spin, una cui configurazione reticolare d -dimensionale è indicata con $s = (s_1, s_2, \dots, s_N)$. La hamiltoniana ridotta (ossia adimensionale) è la seguente:

$$H(s) = -K \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.1)$$

dove $K(T, B) = J/k_B T^1$ e $h(T, B) = B/k_B T$ sono intese come funzioni delle grandezze termodinamiche e vengono chiamate costanti di accoppiamento della energia (intendendo che non dipendono delle variabili microscopiche). Assumiamo che il modello possieda un punto critico a $(T, B) = (T_c, 0)$: esso corrisponde a un accoppiamento critico $K_c = J/k_B T_c$ (e ovviamente $h_c = 0$) e definiamo $t(T, B) = (K - K_c)/K_c$ (e quindi $t_c = 0$). La funzione di partizione per gli N spin è

$$Z_N(t, h) \equiv e^{-Nf(t, h)} = \sum_{\{s\}} e^{-H(s)} \quad (2.2)$$

dove $f(t, h) = F(t, h)/Nk_B T$, in cui $F(t, h)$ è l'energia libera totale del sistema. Sia ora b un numero naturale $b \geq 1$. Dividiamo il reticolo in blocchi di grandezza b^d e applichiamo una trasformazione di Kadanoff definendo il nuovo spin $s'_i = \pm 1$ relativo a un dato blocco come una sorta di media sugli spin contenuti nel blocco stesso. Per esempio possiamo usare la regola di maggioranza: $s'_i = \pm 1$ a seconda che la maggioranza degli spin nel blocco sia $+1$ o -1 (nel caso di parità scegliamo il valore di uno spin a caso). Dopo una trasformazione in blocchi di spin, il numero degli spin del sistema è ridotto di un fattore b^{-d} :

$$N' = \frac{N}{b^d}. \quad (2.3)$$

Il nuovo passo reticolare è incrementato di b volte e questo significa che l'unità di lunghezza è automaticamente incrementata di un fattore b . Per esempio se gli spin di sito sono correlati su una distanza di n passi reticolari allora i blocchi

¹Riportiamo la dipendenza di K da B solo per completezza.

sono correlati su una distanza di n/b passi reticolari. Adesso la cosa ovvia da fare è cercare di capire quale sia la hamiltoniana del sistema (trasformato) a blocchi. La nostra regola di maggioranza può essere implementata mediante la definizione del seguente operatore:

$$O = (s'; s_1, \dots, s_{b^d}) = 1 \quad \text{se} \quad s' \sum_i s_i > 0 \quad (2.4)$$

e 0 altrimenti. La nuova hamiltoniana è data allora da

$$e^{-H'(s')} \equiv Tr_s \prod_{\text{blocchi}} O(s'; s) e^{-H(s)} \quad (2.5)$$

dove il prodotto è eseguito su tutti i blocchi che vengono mappati dalla trasformazione in nuovi siti reticolari.

Per andare avanti è necessario riuscire a esprimere l'energia del nuovo sistema in termini delle variabili di blocco. Guardando la (2.5) si capisce immediatamente che il calcolo esplicito della nuova hamiltoniana, oltre a risultare proibitivo, introduce dei nuovi termini di interazione, ossia degli accoppiamenti fra le variabili microscopiche che non erano presenti in H [6]: ne segue che la forma funzionale dell'energia è mutata. Mano mano che procederemo iterando questa trasformazione le cose diventeranno sempre più complicate e il numero di termini di interazione aumenterà.² Per esempio, dopo una iterazione della trasformazione di Kadanoff, la hamiltoniana del sistema trasformato è

$$H(s) = -\mu_1 \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu_2 \sum_{[ij]} s_i s_j - \mu_3 \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.6)$$

in cui il nuovo termine di accoppiamento è detto "a prossimi primi vicini" e le costanti μ_k , con $k = 1, 2, 3$, sono complicate funzioni di T e B .

Caso unidimensionale

Al fine di esporre la sostanza delle considerazioni fisiche senza incorrere in troppe difficoltà di calcolo, si consideri il modello di Ising unidimensionale descritto in Sezione 1.3.1. Poiché già sappiamo che la (eventuale) transizione avviene a $B = 0$, possiamo fin da subito pensare alla hamiltoniana come identificata dal solo accoppiamento $K(T)$. Operando una trasformazione di Kadanoff nota come "decimazione"³ [5], otteniamo per la nuova hamiltoniana e per le variabili di blocco

$$H'(s') = Na - K' \sum_i s'_i s'_{i+1}, \quad (2.7)$$

dove N è il numero totale di siti originari e

$$a(K) = -\frac{1}{3} \ln \frac{\cosh^3 K}{\cosh K'} - \frac{2}{3} \ln 2, \quad (2.8)$$

²Questa procedura ha comunque il merito di fornire un primo metodo approssimativo per il calcolo della temperatura di transizione.

³I risultati della discussione non cambiano al variare dello specifico tipo di trasformazione adottata ("a maggioranza" o "per decimazione").

in cui K e K' sono legati dalla formula

$$\tanh K' = \tanh^3 K. \quad (2.9)$$

Osserviamo esplicitamente che $a(K)$ e $K'(K)$ devono essere intese come funzioni di K , che a sua volta deve essere intesa come una funzione di T e B . In questo caso particolare la forma della hamiltoniana del sistema trasformato è uguale⁴ a quella del sistema originario.

Da questo semplice esempio vediamo che, dato un modello statistico, possiamo identificare la sua hamiltoniana ridotta con un vettore μ le cui componenti μ_k , con $k = 1, \dots, n$, sono gli n termini di interazione: nel caso appena discusso avevamo $\mu_1 = a$ e $\mu_2 = K$. Similmente l'operazione di media eseguita può essere interpretata come una mappa nello spazio di questi parametri.

Guardiamo ora cosa possiamo capire sfruttando la (2.9), che costituisce il nostro risultato fondamentale. Ponendo $\zeta = \tanh K$ e ricordando che $K = J/k_B T$, vediamo che il limite di alta temperatura corrisponde a $\zeta \rightarrow 0^+$ mentre quello di bassa temperatura a $\zeta \rightarrow 1^-$ e che la (2.9) si riduce a

$$\zeta' = \zeta^3. \quad (2.10)$$

Si supponga adesso di partire da un certo valore di K , che equivale a posizionare il sistema in un particolare stato. A meno che $\zeta = 1$ (ossia $T = 0$), come si vede subito dalla (2.10), avremo $\zeta \rightarrow 0$ (ossia $T = \infty$). Questo significa che i gradi di libertà relativi alle grandi distanze saranno descritti da una hamiltoniana effettiva in cui la temperatura è alta, e dunque ci aspettiamo che il sistema si trovi in una situazione paramagnetica: ne segue che tutto il segmento che rappresenta lo spazio delle fasi del modello unidimensionale appartiene a una ragione paramagnetica.

La conclusione che traiamo è che la nozione di trasformazione di Kadanoff costituisce uno strumento molto potente al fine di dedurre qualitativamente il comportamento critico di un qualunque stato del sistema: essa sarà quindi un ingrediente fondamentale della teoria.

Caso bidimensionale

Volendo considerare il modello di Ising in dimensioni maggiori di uno, dovremmo permettere che la hamiltoniana del sistema contenga già dal principio tutte quelle costanti di accoppiamento funzionale che verranno generate dalla trasformazione di Kadanoff: questo al fine di poter rappresentare la mappa come $\mu' = R(\mu)$. Si supponga invece di poter assumere che, vicino al punto critico, il sistema sia comunque descrivibile tramite una hamiltoniana a blocchi che a sua volta contenga solamente interazioni a primi vicini: questa assunzione, chiaramente non vera, può considerarsi come una prima approssimazione. La funzione di partizione del sistema a blocchi di spin è scrivibile come:

$$Z_{N'}(t', h') \equiv e^{-N' f(t', h')} = \sum_{\{s'\}} e^{-H'(s')}. \quad (2.11)$$

⁴A parte un termine costante (ossia indipendente dagli spin) che tiene conto dell'energia interna dei gradi di libertà eliminati e che può essere introdotto fin da principio con il valore iniziale di $a(K) \equiv 0$.

Si noti il fatto che l'energia libera $f(t', h')$ è la stessa funzione che compare nella (2.2) poiché la hamiltoniana del sistema trasformato è la stessa (come forma funzionale) di quella del sistema originale, eccezion fatta per i valori delle costanti di accoppiamento.

Supponiamo adesso di trovarci al punto critico del nostro sistema. Questo significa che, variando la scala di osservazione, non saremmo in grado di notare alcuna differenza. Ma variare la scala di osservazione significa proprio eseguire quella operazione di media che abbiamo poco fa descritto: ne segue che, al punto critico, il sistema espresso in termini delle variabili di spin $\{s_i\}$ o in termini delle variabili di blocco $\{s'_i\}$ deve risultare lo stesso sistema (a parte naturalmente la dimensione del passo reticolare). Allora deve valere la relazione

$$Nf(t, h) = N'f(t', h') \quad (2.12)$$

e dunque, ricordando che $N' = b^{-d}N$, otteniamo

$$f(t, h) = b^{-d}f(t', h') \quad (2.13)$$

Adesso facciamo l'ulteriore ipotesi che

$$t' = b^{y_t}t \quad e \quad h' = b^{y_h}h. \quad (2.14)$$

Dalle (2.13) e (2.14) segue la relazione

$$f(t, h) = b^{-d}f(b^{y_t}t, b^{y_h}h). \quad (2.15)$$

Questo risultato è di fondamentale importanza poiché la (2.15) altro non è che la (1.28) ricavata in Sezione 1.2.5. Da quest'ultima seguivano poi tutte le leggi di riscaldamento e dunque siamo riusciti a fornire una loro "derivazione". Nel presente contesto la (2.13) è conseguenza dell'applicazione della trasformazione di Kadanoff ma la (2.14) risulta ancora un'assunzione *ad hoc*. Inoltre questa analisi si basava sulla possibilità di identificare, al punto critico, il sistema trasformato con il vecchio, e questo era reso possibile dal fatto che la forma funzionale della hamiltoniana fosse la medesima. Vedremo nel seguito come la teoria del gruppo di rinormalizzazione consenta di superare queste limitazioni.

2.2 Trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione

Definiamo adesso con precisione che cosa si intende per trasformazione del gruppo di rinormalizzazione.

Un modello statistico è ovviamente definito da un gruppo di variabili microscopiche e dalle interazioni che fra quelle variabili esistono, codificate nella relativa hamiltoniana E . Da questa si costruisce la distribuzione di probabilità gibbsiana mediante la regola $P \propto e^{-H} \equiv e^{-\beta E}$, dove H è la hamiltoniana ridotta. Si consideri allora un insieme di distribuzioni di probabilità per un gruppo di variabili casuali. Indichiamo le variabili con s_i e il loro numero con L^d .⁵ Si noti che abbiamo scelto di operare con più distribuzioni di probabilità, e quindi stiamo di fatto considerando contemporaneamente una varietà di modelli statistici.

⁵Volendo possiamo pensare queste variabili come i soliti spin e il numero L^d come il numero di siti di un reticolo d -dimensionale.

Abbiamo dunque bisogno di un insieme di variabili in grado di parametrizzare tutte queste distribuzioni. Indicando con μ_k l'insieme di tali parametri, la particolare distribuzione di probabilità sarà identificata dal vettore

$$\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n) \quad (2.16)$$

dove n è la dimensione dello spazio dei parametri.⁶ Risulta che ogni trasformazione che porta una data distribuzione di probabilità P in un'altra P' è rappresentata da una corrispondente trasformazione nello spazio dei parametri che porta μ in μ' .

Sia b un numero naturale $b \geq 1$. Definiamo ora una trasformazione R_b nello spazio dei parametri

$$\mu' = R_b \mu \quad (2.17)$$

che rappresenti la trasformazione della distribuzione $P \propto e^{-H}$ nella distribuzione $P' \propto e^{-H'}$ mediante i seguenti due passi.

- Si applichi una trasformazione di Kadanoff K_b alla hamiltoniana H per ottenere

$$H''[s] = K_b H[s]. \quad (2.18)$$

Adesso $P'' \propto e^{-H''}$ è la distribuzione di probabilità per le L^d/b^d variabili di blocchi di spin di taglia b . Ogni nuova variabile di spin s'_i è la media delle b^d vecchie variabili all'interno del blocco. La trasformazione di Kadanoff degrada dunque la risoluzione spaziale delle variabili di spin al valore b .

- Si rinominino i blocchi di spin s_i in $H''[s]$ e si moltiplichino per una costante λ_b ottenendo

$$H'[s] = (H''[s])_{s_x \rightarrow \lambda_b s'_x} \quad (2.19)$$

dove

$$x' = \frac{x}{b} \quad (2.20)$$

Chiaramente questo passaggio riduce la taglia del sistema di un fattore b e la dimensione del blocco (che è b dopo la trasformazione) è ridotta a 1, cioè al passo reticolare del sistema originale.

I passi che abbiamo appena descritto ci consentono di leggere esplicitamente dalla hamiltoniana originaria e dalla nuova i valori dei parametri μ_k e quindi di poter ottenere la (2.17).

L'insieme delle trasformazioni $\{R_b, b \geq 1\}$ è chiamato gruppo di rinormalizzazione. Esso è un semigruppò, e non un gruppo, poiché non è definita la trasformazione inversa. Esso gode della proprietà che

$$R_b R_{b'} = R_{bb'} \quad (2.21)$$

soltanto nel caso in cui il fattore λ_b che appare nella (2.19) possieda una dipendenza da b della forma

$$\lambda_b = b^a \quad (2.22)$$

⁶Osserviamo che tale dimensione, nella maggioranza dei casi di interesse per la meccanica statistica, deve considerarsi infinita.

dove a risulta indipendente da b . Questo è dovuto al fatto che in ogni caso $K_b K_b' = K_{bb'}$, ma $\lambda_b \lambda_b' = \lambda_{bb'}$ soltanto se la precedente condizione è soddisfatta. In sostanza una trasformazione del gruppo di rinormalizzazione R_b è una trasformazione di coarse-graining seguita da un riscaldamento: non c'è alcun cambiamento netto nella dimensione finale del blocco.

Spendiamo adesso qualche parola sul perché abbiamo deciso di definire proprio così il nostro gruppo di trasformazioni. Quello che vogliamo fare è costruire uno schema teorico che renda sostanzialmente conto del fenomeno dell'ipotesi di riscaldamento. L'osservazione basilare è che per un sistema invariante di scala si ottiene una coincidenza fra esso e il trasformato qualora venga applicata una trasformazione di Kadanoff. Questa relazione si può immediatamente tradurre in equazioni per i potenziali termodinamici, come abbiamo già visto, solo se la trasformazione conserva la forma funzionale della hamiltoniana. In tutti i casi realistici questo non accade e allora siamo costretti a considerare le più ampie distribuzioni di probabilità introdotte precedentemente al primo punto. Il secondo punto invece risulta necessario per poter confrontare il sistema trasformato con il vecchio: le variabili di blocco rendono conto della fisica a distanze di b , ma quello che noi vogliamo è che questa fisica coincida con quella a distanza del passo reticolare originario, e allora il nuovo sistema deve essere rimpicciolito. Vedremo tra breve quali risultati si ottengono dall'applicazione di questa teoria.

2.3 Punti fissi e universalità

Riprendiamo in considerazione le varie distribuzioni associate ai modelli statici viste nel paragrafo precedente. Dal momento che le variabili microscopiche sono per tutti le stesse però, le loro osservabili macroscopiche sono le medesime, la differenza fra modelli manifestandosi solo nella particolare forma delle interazioni. Per esempio il modello di Ising è identificato dalla (2.2) mentre il suo trasformato (2.6) non potrà essere considerato un modello dello stesso tipo poiché la trasformazione ne verierà le interazioni. Nondimeno le osservabili sperimentali saranno le stesse, e dunque potremo consistentemente paragonare i due.

Supponiamo ora di assegnare un punto dello spazio μ delle costanti di accoppiamento e di procedere a iterate applicazioni del gruppo di rinormalizzazione: generiamo così una successione di punti. Se applichiamo questa procedura a tutto lo spazio, ossia a ogni distribuzione di probabilità, allora un qualsiasi punto avrà uno dei seguenti comportamenti:

- il punto può andare in se stesso, un tale punto è detto *punto fisso*;
- il punto può muoversi tendendo asintoticamente verso un altro punto dello spazio;
- il punto può esibire un comportamento ergodico;
- il punto può finire in un ciclo limite.

Noi supporremo che le distribuzioni di probabilità (ossia le hamiltoniane) considerate siano tali che possano verificarsi soltanto le situazioni descritte nei primi due punti.

Torniamo ora all'interpretazione fisica delle trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione anticipando alcune considerazioni che saranno trattate con maggiore chiarezza in Sezione 2.4. Cominciamo col domandarci quale sia il significato fisico di un punto fisso. Dalle considerazioni fin qui svolte risulta evidente che un punto *fisso* descrive un modello che si trova in un punto *critico*. Infatti, per iterate trasformazioni, la descrizione del sistema è una semplice ridefinizione delle variabili vecchie con le nuove, la quali si riferiscono a scale di lunghezza sempre maggiori. Questo è analogo a quanto visto in Sezione 1.2.2: deduciamo che per modelli in cui la trasformazione del gruppo di rinormalizzazione non altera la forma funzionale della hamiltoniana, il punto critico del sistema coincide con il punto fisso del modello.

In casi più complessi però notiamo che, se partiamo da un punto μ^0 che tende a un punto fisso μ^* , la fisica su grande scala relativa al modello rappresentato da μ^0 sarà equivalente a quella relativa al modello rappresentato da μ^* : ne segue che questi due modelli avranno un medesimo comportamento critico. Non solo, ma tutti quei punti dello spazio μ che “tendono” a finire nel punto μ^* (ossia tutti i punti che giacciono nel *bacino di attrazione* di μ^*) avranno lo stesso comportamento critico. Ne deriva che abbiamo appena spiegato il perchè alcune caratteristiche fisiche di modelli statistici definiti in maniera differente risultino le stesse. Questa caratteristica è nota come *universalità* dei fenomeni critici. Risulta a questo punto naturale identificare tutti quei modelli che appartengono al bacino di attrazione di uno stesso punto fisso come appartenenti alla stessa *classe di universalità*.

L'immagine generale che ci forniscono le considerazioni svolte fin qui è allora la seguente. Partiamo con un modello e lo “immergiamo” nel relativo spazio delle costanti di accoppiamento dettato dalla particolare scelta della trasformazione del gruppo di rinormalizzazione. In questo spazio esisteranno alcuni punti fissi e tante classi di universalità quanti essi sono. Assegnando uno stato del sistema (identificato da T e B) guardiamo qual è il “moto” che compie nello spazio μ : se lo stato rimane fermo allora siamo già in un punto fisso, altrimenti ci dirigiamo verso uno degli altri. Ci attendiamo allora che il comportamento critico del modello nello stato considerato sia ricavabile dalle proprietà relative al punto fisso verso cui tende. Questo è quello che faremo nel prossimo paragrafo.

2.4 Teoria generale

In questo paragrafo esamineremo le conseguenze della basilare assunzione che esista un punto fisso per il gruppo di rinormalizzazione nello spazio di tutte le possibili costanti di accoppiamento. La trasformazione ha la forma

$$\mu' = R(\mu), \quad (2.23)$$

dove R dipende in generale dalla specifica operazione di media scelta e in particolare dal valore del parametro di riscaldamento b . Si supponga che ci sia un punto fisso in μ^* . Assumendo che la trasformazione R sia differenziabile al punto fisso, possiamo linearizzarla in un opportuno intorno e ottenere le seguenti equazioni:

$$\mu'_a - \mu_a^* = \sum_{b=1}^n T_{ab}(\mu_b - \mu_b^*) \quad (2.24)$$

dove

$$T_{ab} = \frac{\partial \mu'_a}{\partial \mu_b} \Big|_{\mu=\mu^*} \quad (2.25)$$

è la matrice della trasformazione.

Si denotino con $\{\lambda^i\}$ gli autovalori della matrice T e con $\{e^i\}$ i corrispondenti autovettori:

$$\sum_{a=1}^n e_a^i T_{ab} = \lambda^i e_b^i. \quad (2.26)$$

Adesso si definiscano le seguenti quantità:

$$u_i \equiv \sum_{a=1}^n e_a^i (\mu_a - \mu_a^*). \quad (2.27)$$

Queste grandezze sono dette *variabili di riscaldamento* o *campi di riscaldamento* e sono una combinazione lineare delle deviazioni $\mu_a - \mu_a^*$ dal punto fisso che godono della seguente importante proprietà:

$$\begin{aligned} u'_i &= \sum_{s=1}^n e_s^i (\mu'_s - \mu_s^*) \\ &= \sum_{s=1}^n \sum_{r=1}^n e_s^i T_{sr} (\mu_r - \mu_r^*) \\ &= \sum_{r=1}^n \lambda^i e_r^i (\mu_r - \mu_r^*) = \lambda^i u_i. \end{aligned}$$

A questo punto risulta conveniente definire le quantità y_i mediante la relazione

$$\lambda_i = b^{y_i}. \quad (2.28)$$

Le grandezze y_i sono dette *autovalori* del gruppo di rinormalizzazione e avranno un ruolo fondamentale nello sviluppo della teoria. Si possono presentare i seguenti tre casi.

- Se $y_i > 0$ allora u_i è detta variabile *rilevante*: ripetute iterazioni della trasformazione di rinormalizzazione conducono il valore della variabile lontano da quello che essa assume al punto fisso.
- Se $y_i < 0$ allora u_i è detta variabile *irrilevante*: se partiamo sufficientemente vicini al punto fisso allora u_i tenderà ad assumere il valore nullo.
- Se $y_i = 0$ allora u_i è detta variabile *marginale*: non possiamo inferire dalla forma linearizzata delle equazioni quale sarà il comportamento della variabile per iterazioni della trasformazione.

Si consideri adesso un punto fisso che abbia m autovalori rilevanti. Per concretezza possiamo immaginare lo spazio delle costanti di accoppiamento come avente dimensione n (anche se in realtà la dimensione è infinita). Allora ci saranno $(n - m)$ autovalori irrilevanti cosicché in prossimità del punto fisso ci sarà una ipersuperficie $(n - m)$ -dimensionale di punti attratti verso il punto fisso: in un intorno del punto fisso questa ipersuperficie sarà semplicemente l'iperpiano generato dagli autovettori irrilevanti. Questa ipersuperficie è nota

come *superficie critica* e contiene tutti quei sistemi il cui comportamento critico è controllato da un medesimo punto fisso.

Le costanti di accoppiamento μ_k dipendono ovviamente in qualche complicata maniera dalle variabili termodinamiche del sistema. Al fine di trovarsi sull'ipersuperficie $(n - m)$ -dimensionale attratta dal punto fisso, dobbiamo sperimentalmente aggiustare il valore delle variabili termodinamiche in maniera opportuna: questo vuol dire posizionare il nostro sistema al suo punto critico. Allora ci aspettiamo che il punto fisso (verso il quale è attratto il nostro punto critico) abbia esattamente tante variabili rilevanti quante sono le variabili termodinamiche del modello. Nel caso del modello di Ising ci attendiamo che esistano due autovalori rilevanti (y_t e y_h) relativi alla temperatura T e al campo B .

Inoltre, poiché le trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione preservano le simmetrie della hamiltoniana, possiamo dividere le costanti μ_k in tanti sottospazi, ciascuno corrispondente a quelle interazioni che si trasformano in accordo a una rappresentazione irriducibile dell'appropriata simmetria. Nel caso del modello di Ising la hamiltoniana ha un termine "pari" per inversione di tutti gli spin ($s_i \rightarrow -s_i \quad \forall i$), che corrisponde alla costante K , e un termine "dispari", che corrisponde alla costante h : ci attendiamo allora che una variabile rilevante appartenga al "settore termico" e una al "settore magnetico".

2.4.1 Variabili irrilevanti

Diciamo adesso qualche parola sul significato fisico della rilevanza o meno di una variabile. Consideriamo ancora le distribuzioni di probabilità relative al modello di Ising e concentriamoci sulla proiezione sul sottospazio formato dalla costante di accoppiamento a primi vicini μ_1 e a prossimi primi vicini μ_2 [vedi la (2.6)]. Sappiamo già, per motivi di simmetria, che in questo sottospazio esiste un autovalore rilevante e un autovalore irrilevante. La natura del flusso verso il punto fisso è illustrata in Figura 2.1.

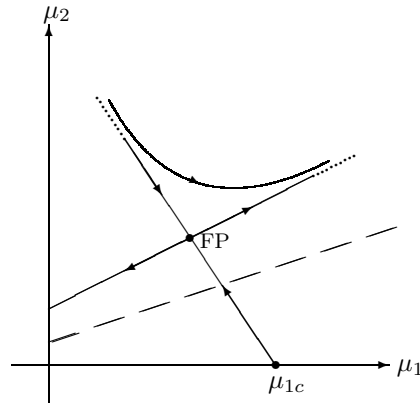


Figura 2.1: Flusso nello spazio delle costanti di accoppiamento.

C'è una curva unidimensionale di punti attratta verso il punto fisso: essa è la superficie critica di quest'esempio semplificato. Nell'intorno del punto

flusso deve avere per continuità la forma iperbolica mostrata in figura; pertanto la superficie critica agisce in questo caso da separatrice, dividendo la regione dei punti che fluiscono verso grandi valori di μ_k (in ultima istanza a temperatura zero) e i punti che fluiscono verso piccoli valori di μ_k (in ultima istanza a temperatura infinita). Nel modello con sola interazione a primi vicini ci muoviamo, al variare della temperatura, lungo l'asse $\mu_2 = 0$. Il punto in cui questa linea incontra la superficie critica definisce allora il valore critico μ_{1c} della costante di accoppiamento μ_1 , che corrisponde alla temperatura critica del modello con sola interazione a primi vicini. Per $(\mu_1, \mu_2) = (\mu_{1c}, 0)$ la traiettoria di flusso del gruppo di rinormalizzazione conduce il sistema verso il punto fisso (FP), che implica che il comportamento alle grandi distanze del sistema al punto critico è lo stesso che al punto fisso.

Comunque, nulla ci vieta di considerare anche un sistema avente già una interazione a prossimi primi vicini. Allora, variando la temperatura, ci muoveremo lungo un'altra curva nello spazio delle costanti di accoppiamento, rappresentata in figura da una linea tratteggiata. Il punto critico di questo modello occorre all'intersezione fra questa linea e quella della superficie critica: allora anche il comportamento critico di questo sistema sarà del tutto simile a quello del precedente poiché sono entrambi controllati dal medesimo punto fisso.

2.4.2 Deduzione degli esponenti critici

Per illustrare come gli esponenti critici possano essere ricavati dagli autovalori λ , consideriamo l'esempio specifico dell'esponente ν nel solito caso del modello di Ising, in cui i campi rilevanti sono quello associato alla temperatura t e quello associato al campo magnetico esterno h . In conformità con la (2.28), poniamo:

$$\lambda_1 = b^{y_h} \quad \lambda_2 = b^{y_t}. \quad (2.29)$$

L'andamento della lunghezza di correlazione ξ a $h = 0$ può essere ricavato come segue. Sotto una trasformazione del gruppo di rinormalizzazione l'unità di lunghezza cresce di un fattore b e quindi $\xi' = \xi/b$. Per definizione $t' = b^{y_t}t$ e quindi $\xi^{y_t}t$ è invariante sotto la trasformazione, cioè $\xi^{y_t}t \sim 1$. Perciò, ricordando la definizione $\xi \sim t^{-\nu}$,

$$\xi(t) \sim t^{-1/y_t} \implies \nu = \frac{1}{y_t}. \quad (2.30)$$

Questa argomentazione può essere riformulata in modo più fisico. Per successive trasformazioni in blocchi di spin, si giungerà a un punto in cui la lunghezza di correlazione sarà uguale alle dimensioni di un blocco, cosicché blocchi vicini saranno scorrelati. Questo punto deve corrispondere a un preciso t_0 che non può dipendere dalla temperatura iniziale. Supponiamo che si inizi da una qualche temperatura t e si arrivi dopo n trasformazioni a t_0 . Allora $t_0 = b^{ny_t}t$ e, notando che $\xi = b^n$, ricaviamo la (2.30). Ribadiamo ancora una volta che il passaggio cruciale consiste nella condizione

$$b = |t|^{-1/y_t} \quad (2.31)$$

che sceglie la grandezza dei blocchi dell'ordine della lunghezza di correlazione. Questo passaggio è la "vera" rinormalizzazione: con esso la grandezza dei

blocchi scompare dal problema, cancellando ogni riferimento alla struttura microscopica.

Sostituendo la (2.29) nella (2.15) possiamo allora ottenere tutti gli esponenti in funzione dei parametri λ mediante i calcoli di Sezione 1.2.5. Se fossimo in grado di linearizzare la trasformazione R e di calcolare gli autovalori della matrice T allora avremmo risolto il problema teorico della deduzione degli esponenti critici.

2.4.3 Riscaldamento dell'energia libera

Passiamo adesso a studiare quali conseguenze abbia la teoria fin qui sviluppata sull'energia libera. Si ricordi che una delle proprietà delle trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione era quella di preservare la funzione di partizione:

$$Z = \text{Tr}_s e^{-H(s)} = \text{Tr}_{s'} e^{-H'(s')}. \quad (2.32)$$

Si consideri adesso la densità di energia libera ridotta $f(\mu) \equiv -N^{-1} \ln Z$ come una funzione delle costanti di accoppiamento μ_k . In base alle considerazioni svolte in questo capitolo possiamo scrivere la seguente legge di trasformazione:

$$f(\mu) = a(\mu) + b^{-d} f(\mu') \quad (2.33)$$

dove $N' = b^{-d}N$ è il numero totale di blocchi e il termine $a(\mu)$ tiene conto dell'energia associata ai gradi di libertà eliminati dalla trasformazione. Si noti che l'energia libera si trasforma in maniera disomogenea, al contrario della lunghezza di correlazione. Comunque, se siamo interessati all'estrazione della sola parte singolare di f , per esempio perché ci concentriamo sul calcolo degli esponenti critici, possiamo tranquillamente trascurare questo termine disomogeneo.⁷ In tal modo otteniamo una legge di trasformazione omogenea per la parte singolare f_{sing} dell'energia libera:

$$f_{\text{sing}}(\mu) = b^{-d} f_{\text{sing}}(\mu'). \quad (2.34)$$

Siano u_k le variabili di riscaldamento definite dalla (2.27). Il punto critico nel quale siamo interessati si troverà in generale a una distanza finita dal corrispondente punto fisso nello spazio delle costanti di accoppiamento. Però, mediante un numero finito di iterazioni del gruppo di rinormalizzazione, giungeremo in un intorno del punto fisso dove è valido lo sviluppo lineare (2.24). I valori $u_k(t, h)$ dei campi di riscaldamento dipenderanno in maniera analitica da t e h (ossia da T e B) poiché la hamiltoniana ne dipende analiticamente e anche la trasformazione risulta analitica (e quindi pure un numero finito di sue composizioni). Allora la precedente equazione si riscrive come

$$f_{\text{sing}}(u_1, u_2, \dots, u_k, \dots) = b^{-d} f_{\text{sing}}(b^{y_1} u_1, b^{y_2} u_2, \dots, b^{y_k} u_k, \dots) \quad (2.35)$$

dove b è un qualsiasi numero positivo e y_k sono le dimensioni delle variabili di riscaldamento fornite dalla teoria. Nel modello di Ising che stiamo considerando, e più in generale per “modelli magnetici”, sappiamo che ci sono due campi

⁷Fisicamente questo deriva dal fatto che il termine disomogeneo è il risultato della somma sui gradi di libertà associati alle piccole lunghezze d'onda all'interno di ciascun blocco e dunque ci attendiamo che $a(\mu)$ sia una funzione analitica (non singolare), anche al punto critico.

rilevanti con $y_k > 0$ e un insieme infinito di campi irrilevanti con $y_k < 0$: i campi rilevanti sono associati alla temperatura e al campo magnetico. Assumiamo quindi, in un opportuno intorno del punto critico, $u_1 \equiv u_t \sim t$ e $u_2 \equiv u_h \sim h$. Se adesso fissiamo come al solito b mediante la condizione $b^{y_1}|u_1| = 1$, otteniamo

$$f_{\text{sing}}(u_1, u_2, \dots, u_k, \dots) = |u_1|^{d/y_1} f_{\text{sing}}(\text{sg } u_1, u_2|u_1|^{-y_2/y_1}, \dots, u_k|u_1|^{-y_k/y_1}, \dots). \quad (2.36)$$

Per $k \geq 3$ abbiamo $y_k < 0$ cosicché $u_k|u_1|^{-y_k/y_1} \rightarrow 0$ per $t \rightarrow 0$. Assumendo che f_{sing} sia finita e non nulla in questo limite, possiamo scrivere⁸

$$f_{\text{sing}}(u_1, u_2, \dots, u_k, \dots) \approx |t|^{d/y_1} f_{\text{sing}}(\text{sg } t, |B||t|^{-y_2/y_1}, 0, 0, \dots). \quad (2.37)$$

Usando la (2.33) e la (2.37) siamo in grado di ottenere tutte le formule di riscaldamento a patto di identificare

$$y_t \equiv y_1 = \frac{1}{\nu} \quad y_h \equiv y_2 = \frac{\beta + \gamma}{\nu}. \quad (2.38)$$

Vediamo però che in questo contesto le grandezze y_1 e y_2 non sono introdotte con assunzioni *ad hoc* ma risultano determinate dalla teoria.

Analizziamo ora retrospettivamente quello che è stato il nostro percorso. Volevamo costruire una teoria che fosse in grado di dedurre da principi primi il comportamento critico dei sistemi. Nota la hamiltoniana del modello, mediante la teoria del gruppo di rinormalizzazione abbiamo identificato nei punti fissi gli “oggetti” in grado di renderne conto e abbiamo definito le quantità y_k (ottenute come gli autovalori della linearizzazione del gruppo al punto fisso). Si è poi dedotta la (2.37), la quale coincide con la (2.15), e da questa sappiamo già come dedurre gli esponenti critici.

2.4.4 Correzioni allo scaling

Nella sezione precedente abbiamo considerato soltanto il comportamento critico *asintotico*, cioè abbiamo sviluppato l’energia libera ponendo uguali a zero i campi irrilevanti e i termini di sviluppo superiori al primo nelle variabili t e h per i campi rilevanti. Volendo fare un’analisi più fine, ci aspettiamo che compaiano quindi due tipi di correzioni al riscaldamento [13]: una non analitica, legata alla presenza dei campi irrilevanti, e una analitica, legata ai termini di sviluppo superiori per i campi rilevanti.

Cominciamo dalle correzioni non analitiche: esse sono dovute al fatto che la energia libera f , al punto critico, è singolare nei propri argomenti e dunque, in un tale intorno, espandendo ulteriormente nelle variabili di riscaldamento, ne seguiranno appunto correzioni non analitiche. Sia y_3 il più grande degli autovalori negativi y_k con $k \leq 3$ e sia u_3 il corrispondente campo. Espandendo la (2.35) otteniamo:

$$\begin{aligned} f_{\text{sing}} &= |u_1|^{d/y_1} f_{\text{sing}}(\text{sg } u_1, u_2|u_1|^{-y_2/y_1}, u_3|u_1|^{-y_3/y_1}) \\ &= |u_1|^{d\nu} \sum_{n=0}^{\infty} f_{n\pm}(u_2|u_1|^{-\beta-\gamma})(u_3|u_1|^\Delta)^n \end{aligned}$$

⁸Si osservi che la parte singolare dell’energia libera è espressa in termini di due diverse funzioni, a seconda del segno di t . Comunque, poiché l’energia libera è analitica lungo la isoterma critica per $B \neq 0$, le due funzioni sono analiticamente correlate.

dove abbiamo usato la notazione standard $\omega \equiv -y_3$ e $\Delta \equiv -y_3/y_1 = \omega\nu$ e dove le funzioni $f_{n\pm}$ sono implicitamente definite dallo sviluppo di f_{sing} rispetto al termine $u_3|u_1|^\Delta$. La variabile irrilevante è sviluppabile, nell'intorno del punto fisso, come

$$u_3 = u_3^0 + at + \dots \quad (2.39)$$

dove a e u_3^0 sono costanti e, a differenza del caso rilevante, non possiamo porre $u_3^0 = 0$. Sostituendo questo sviluppo nella precedente equazione, e specializzandoci come al solito al caso magnetico, otteniamo

$$f_{\text{sing}} = |t|^{d\nu} (C_1 + C_2 u_3^0 |t|^\Delta + \dots) \quad (2.40)$$

avendo tenuto nella sommatoria i termini con $n = 0, 1$. Vediamo dunque che la conseguenza principale della esistenza delle variabili irrilevanti è quella di introdurre termini correttivi. Questo fatto risulterà di capitale importanza quando intraprenderemo lo studio numerico nel modello di Ising in campo aleatorio e sarà ripreso nel Cap.5.

Un'altra osservazione molto importante riguarda il modo in cui abbiamo ricavato la (2.40). In essa le costanti C_1 e C_2 sono legate alla regolarità delle funzioni $f_{n\pm}$ e proprio questo potrebbe inficiare, in alcuni casi, le nostre conclusioni. Ne segue che allora, per dedurre il comportamento della energia libera, dovremmo conoscerne la dipendenza da u_3 con maggior precisione. In questi casi la variabile u_3 è definita variabile *pericolosa*. Anche questo aspetto esibirà la sua rilevanza nelle analisi teoriche del modello di Ising in campo aleatorio che faremo nel Cap.3.

Per quanto riguarda le correzioni di natura analitica, esse risultano in generale (per la maggior parte dei sistemi tridimensionali) di entità inferiore e quindi non le prenderemo in considerazione.

2.5 Finite-size scaling

Tutte le analisi svolte fino a ora riguardavano lo studio dei sistemi nel limite termodinamico, cioè nel limite in cui $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ con $N/V = \text{costante}$. Questa procedura è del tutto giustificata poichè nella realtà $N \sim N_A$, dove N_A è il numero di Avogadro.⁹ Il motivo per cui prendiamo in considerazione lo studio del finite-size scaling è che, nei Capp.4, 5, eseguiremo delle simulazioni numeriche in cui le dimensioni del sistema sono ben lungi dal rispecchiare il limite termodinamico e dunque, al fine di estrarre informazioni significative dai dati, dobbiamo analizzare come la finitezza del parametro L , che individua le dimensioni del nostro modello, influenzi i risultati del gruppo di rinormalizzazione.

L'osservazione che sta alla base di tutta la teoria degli effetti di taglia finita è che un sistema di dimensione lineare L segue l'andamento del limite termodinamico per temperature tali che $\xi(T) \ll L$ mentre per $\xi(T) \gg L$ manifesta gli effetti dovuti alla limitatezza di L ; per $\xi \sim L$ si osserva un comportamento che interpola tra i primi due ed è detto di *crossover*. La regione intorno al punto critico in cui la lunghezza di correlazione $\xi(T)$ è molto maggiore di L è detta

⁹Esistono comunque delle moderne tecniche sperimentali che riescono a riprodurre delle situazioni in cui si debba tenere conto della effettiva limitatezza di (almeno) alcune dimensioni del sistema.

regione critica.

In analogia con quanto si osserva per i sistemi nel limite termodinamico, ci aspettiamo che la energia libera sia la somma di una parte regolare $f_{\text{reg}}(T, B, L)$ e di una parte singolare $f_{\text{sing}}(T, B, L)$: si suppone che la parte regolare dipenda da L solo attraverso termini esponenzialmente piccoli mentre la parte singolare codifica il comportamento critico. Il punto di partenza del finite-size scaling è la generalizzazione della (2.35) per la parte singolare della energia libera al caso in cui si debba includere fra le variabili del sistema anche la grandezza L :

$$f_{\text{sing}}(u_t, u_h, \{u_k\}, L) = b^{-d} f_{\text{sing}}(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, \{b^{y_k} u_k\}, b^{-1} L) \quad (2.41)$$

dove $u_t \equiv u_1$, $u_2 \equiv u_h$ e $\{u_k\}$ con $k \geq 3$ sono i campi di riscaldamento associati rispettivamente alla temperatura ridotta, il campo ridotto e gli altri operatori irrilevanti, $y_k < 0 \forall k$.¹⁰ Scegliendo $b = L$ otteniamo

$$f_{\text{sing}}(u_t, u_h, \{u_k\}, L) = L^{-d} f_{\text{sing}}(L^{y_t} u_t, L^{y_h} u_h, \{L^{y_k} u_k\}, 1) \quad (2.42)$$

Poiché i campi di riscaldamento sono considerati come funzioni analitiche dei parametri della hamiltoniana (in particolare di T e B) e quindi ci si aspetta che non dipendano da L , nel limite di volume infinito e per ogni t risulta $L^{y_k} u_k \rightarrow 0$. Dalla (2.42), prendendo le opportune derivate rispetto alle variabili termodinamiche, si possono determinare i comportamenti critici di tutte le osservabili che si vuole. Decidendo di trascurare le correzioni al riscaldamento (di ordine $L^{-\omega}$), possiamo semplicemente porre $u_k = 0$ nella precedente equazione.

Qualitativamente si osserva che, per sistemi di taglia diversa, per temperature lontane dalla zona critica il valore delle osservabili tende a coincidere mentre, in un intorno critico, il valore tende a crescere all'aumentare di L . Inoltre la zona critica si restringe per sistemi sempre più grandi.

Quantitativamente, ponendo $B = 0$, possiamo ricavare le caratteristiche di una osservabile $Q(T, L)$ come segue. Se $Q_\infty(T) \equiv Q(T, \infty)$ si comporta come $t^{-\sigma}$ per $t \rightarrow 0$ allora abbiamo

$$Q(T, L) = L^{\sigma/\nu} (\Phi_Q(\xi_\infty/L) + O(L^{-\omega}, \xi_\infty^{-\omega})) \quad (2.43)$$

dove $\xi_\infty(T)$ è la lunghezza di correlazione nel limite di volume infinito. Passando alla lunghezza di correlazione $\xi_L(T)$ relativa a un reticolo di dimensione finita abbiamo invece

$$Q(T, L) = L^{\sigma/\nu} (\bar{\Phi}_Q(\xi_L/L) + O(L^{-\omega}, \xi_L^{-\omega})) . \quad (2.44)$$

Queste considerazioni ci permettono adesso di stimare la temperatura e gli esponenti critici. Per ottenere T_c usiamo il “metodo dell'incrocio”. Si scelga una quantità per cui $\sigma = 0$ o σ/ν sia noto e si definisca $R(T, L) \equiv Q(T, L)L^{-\sigma/\nu}$. Allora si considerino coppie (L_1, L_2) di reticoli e si determini la soluzione dell'equazione

$$R(T_{\text{cross}}, L_1) = R(T_{\text{cross}}, L_2) . \quad (2.45)$$

Se L_1 e L_2 divergono allora T_{cross} converge a T_c con correzioni dell'ordine di $L_{1/2}^{-\omega-1/\nu}$ e quindi otteniamo una stima per T_c . Per ottenere gli esponenti invece studiamo il modello direttamente al punto critico. In questo caso, sempre trascurando le correzioni al riscaldamento, abbiamo

$$Q(T_c, L) \sim L^{\sigma/\nu} \quad (2.46)$$

¹⁰Notiamo che il limite termodinamico corrisponde a $L^{-1} \rightarrow 0$, e quindi la variabile L^{-1} si può considerare una variabile rilevante con autovalore $y_L = 1$ (poiché $L^{-1} \rightarrow bL^{-1}$).

e quindi possiamo determinare σ/ν semplicemente analizzando la dipendenza da L . Per esempio da

$$\chi(T_c, L) \sim L^{\gamma/\nu} \quad \text{e} \quad |M(T_c, L)| \sim L^{-\beta/\nu} \quad (2.47)$$

è possibile ottenere γ/ν e β/ν . Infine per avere ν si deve studiare la dipendenza da L delle derivate delle osservabili rispetto alla temperatura. Infatti

$$\frac{\partial Q}{\partial T}(T, L) \sim L^{\sigma+1/\nu}, \quad (2.48)$$

che si ottiene dalla (2.43) ricordando che $\xi_\infty \sim |t|^{-\nu}$. Questo metodo ha il difetto di richiedere la conoscenza di T_c , cosa che nelle simulazioni numeriche è nota solo alla fine dell'analisi. Pertanto sono state sviluppate altre tecniche [19], di cui però noi non faremo uso, allo scopo di evitare questo problema.

Capitolo 3

Modello di Ising in campo aleatorio

3.1 Introduzione ai sistemi disordinati

La maggior parte dei sistemi studiati in meccanica statistica, come il modello di Ising descritto fin ora, sono sistemi omogenei che non contengono impurità. Di norma si cerca di eliminarle, ma, sotto condizioni ben controllate, è interessante anche studiare l'effetto che queste hanno sul comportamento critico della sostanza. In generale ci aspettiamo che qualunque tipo di impurità tenda ad avere un effetto disordinante sul sistema in modo da far abbassare la temperatura di transizione. In effetti esistono casi particolari in cui le impurità possono anche eliminare completamente la fase ordinata. Il motivo per cui ci attendiamo questa situazione è il seguente. Supponiamo di inserire una qualche impurezza in un sistema vicino al suo punto critico, attuando così una piccola perturbazione: la sua risposta sarà descritta dalle varie suscettività e dalle varie funzioni di correlazione. Poiché alcune di queste quantità sono funzioni singolari della temperatura, un piccolo ammontare di impurezze può produrre un grande effetto, alterando significativamente il comportamento del sistema. Esiste una gran varietà di modelli che intendono rendere conto di queste situazioni fisiche: i più studiati sono i cosiddetti *vetri di spin* e i *campi aleatori*. In questo lavoro prenderemo in considerazione solo i secondi e rimandiamo alla letteratura per i risultati relativi ai primi [20].

La prima questione da affrontare riguarda l'importante distinzione fra *disordine smorzato* e *disordine temprato* [4, 5]. In questo contesto useremo la parola "disordine" per significare la "presenza di impurità distribuite in maniera casuale". Questa distinzione è legata al modo in cui le impurezze sono distribuite all'interno del materiale ospitante. Per concretezza si supponga di introdurre qualche atomo non magnetico all'interno del reticolo cristallino della nostra sostanza magnetica. Il modo in cui possiamo fare questo è di mescolare qualche impurità in un miscuglio con la sostanza e poi far cristallizzare il tutto mediante raffreddamento. Se facciamo in modo che questo accada in maniera molto lenta allora le impurità e gli ioni magnetici saranno sempre in equilibrio termodinamico e la distribuzione per le impurezze risulterà gibbsiana, dipendendo dalla temperatura e dalle interazioni fra i differenti tipi di atomi. Una distribuzione

di questo tipo è detta distribuzione temprata. In pratica si ha disordine temprato quando le impurità sono in equilibrio termico con il sistema che le accoglie. Se intendiamo studiare la termodinamica di queste scale temporali così lunghe, dobbiamo fare meccanica statistica in cui la traccia nella funzione di partizione deve essere presa non solo sulle variabili degli ioni magnetici ma anche su quelle delle impurità. In realtà nella maggior parte dei solidi la mobilità interna delle impurezze è talmente bassa che i tempi scala necessari per raggiungere un equilibrio termico posizionale all'interno del reticolo sono "astronomici". Ne segue che una trattazione più fisica di questa situazione consiste nel considerare la posizione delle impurità come fissa: in pratica fissa all'istante della preparazione del miscuglio e dunque a quella temperatura. Allora, nell'eseguire la traccia della funzione di partizione, dovremo operare soltanto sulle variabili magnetiche del sistema originario, considerando l'interazione con le impurità come esterna a esso. Questo è il caso del disordine smorzato che corrisponde alla situazione in cui le impurità non sono in equilibrio col sistema ospitante.

Siano h_i le variabili che identificano il disordine. All'equilibrio termico la distribuzione di probabilità per le h_i e le s_i è data da

$$\begin{aligned}\Pi(h, s) &= \frac{1}{Z} e^{-H(h, s)} \\ Z &= \int e^{-H(h, s)} [dh] [ds]\end{aligned}$$

dove l'integrale è esteso a tutte le grandezze microscopiche (impurezze e spin), con $[dh] = dh_1 dh_2 \dots dh_N$ e $[ds] = ds_1 ds_2 \dots ds_N$. Per ottenere la hamiltoniana effettiva per le sole variabili magnetiche dobbiamo integrare sulle impurezze come segue:

$$e^{-H_{\text{eff}}(s)} = \int e^{-H(h, s)} [dh]. \quad (3.1)$$

Allora l'energia libera ridotta risulta semplicemente

$$F_{\text{temprata}} = -\ln Z. \quad (3.2)$$

Nel caso del disordine smorzato invece dobbiamo avere un approccio più generale. Sia $P(h)$ la distribuzione di probabilità per le impurezze e $H(h|s)$ la hamiltoniana delle variabili di spin in presenza di quel particolare disordine. La distribuzione di probabilità *condizionata* $\Pi(h|s)$ è

$$\begin{aligned}\Pi(h|s) &= \frac{1}{Z(h)} e^{-H(h|s)} \\ Z(h) &= \int e^{-H(h|s)} [ds]\end{aligned}$$

in cui $Z(h)$ è la funzione di partizione per le s_i a una data configurazione delle h_i . Allora la funzione di distribuzione *globale* risulta

$$p(h, s) = P(h)\Pi(h|s) = P(h) \frac{1}{Z(h)} e^{-H(h|s)}. \quad (3.3)$$

Di nuovo la distribuzione di probabilità per le sole variabili di spin si ottiene "integrando via" i campi h_i :

$$p(s) = \int p(h, s) [dh] = \int P(h) \frac{1}{Z(h)} e^{-H(h|s)} [dh]. \quad (3.4)$$

In questo caso è di cruciale importanza notare che $Z(h)$ non è una costante (o meglio una funzione solo di T) ma è una funzione delle h_i . Per una data assegnazione delle impurezze l'energia libera ridotta del sistema è

$$F(h) = -\ln Z(h). \quad (3.5)$$

Questa circostanza introduce una complicazione poiché il sistema non risulta più invariante per traslazione. Comunque nel limite termodinamico questo ostacolo può essere superato con il seguente argomento. Per un sistema sufficientemente esteso possiamo immaginare di suddividerlo in tante parti ancora macroscopicamente significative. Ciascuna di queste parti costituisce un sottosistema con una differente distribuzione di impurezze, appunto la $P(h)$. L'energia libera totale è, a parte effetti di superficie, la somma delle energie libere di tutti questi sottosistemi e dunque, nel limite termodinamico, l'energia libera di un qualunque sistema sarà la media su questa distribuzione di ensemble. Pertanto possiamo scrivere

$$\bar{F} \equiv F_{\text{smorzata}} = \int P(h)F(h)[dh] \equiv \overline{-\ln Z(h)}. \quad (3.6)$$

Quest'ultima definizione ci dice che, nei sistemi magnetici a casualità smorzata, l'energia libera del sistema si ottiene prima calcolando la media termica gibbsiana relativa a una particolare distribuzione delle impurità, e poi mediante una media sull'ensemble di tutte le possibili realizzazioni delle impurezze. Chiameremo quest'ultima media *media sul disordine*. Quanto appena detto sarà cruciale nello studio del nostro sistema quando eseguiremo le simulazioni numeriche.

3.2 Modello di Ising in campo aleatorio

Il modello di Ising in campo aleatorio [22] è una variante del modello di Ising puro in cui ogni variabile di spin, oltre ad avere le solite interazioni con i primi vicini del particolare reticolo considerato, ha interazione anche con un'altra variabile (una per ciascun sito) che non fa parte delle variabili del sistema ma costituisce una interazione esterna. Tutte queste nuove variabili (esterne al sistema) sono dette *campi random* o *campi aleatori*. La hamiltoniana del sistema è la seguente:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \quad (3.7)$$

dove la prima somma è estesa a tutte le coppie di primi vicini mentre la seconda è estesa a tutto il reticolo.

Per definire completamente il modello è necessario specificare come siano caratterizzati i campi aleatori. Essi sono variabili stocastiche a media nulla e indipendenti. Questo significa che la funzione di distribuzione che le caratterizza possiede le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \overline{h_i} &= 0 \quad \forall i \\ \overline{h_i \cdot h_j} &= 0 \quad \forall i \neq j. \end{aligned}$$

Compatibilmente con questi vincoli, esistono ancora molte distribuzioni di probabilità per i campi aleatori e nella letteratura specialistica due sono le scelte più

frequentemente adottate: la distribuzione *gaussiana* e la distribuzione *bimodale*. La distribuzione gaussiana è data dalla formula

$$P(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \exp\left(-\frac{h_i^2}{2h^2}\right) \quad (3.8)$$

mentre la distribuzione bimodale è data dalla formula

$$P(h_i) = \frac{1}{2}(\delta(h - h_i) + \delta(h + h_i)) \quad (3.9)$$

dove la grandezza h , in entrambi i casi, caratterizza la fluttuazione quadratica media dei campi ed è nota come *intensità* del campo aleatorio o “*disordinatezza*”.

Seguendo lo spirito della teoria del gruppo di rinormalizzazione, ci aspettiamo che la particolare scelta della distribuzione associata al disordine costituisca uno di quei dettagli del sistema che sono irrilevanti ai fini del comportamento critico, ma influisca soltanto su aspetti secondari come la temperatura critica e le costanti non universali delle osservabili. Conseguentemente, nel prossimo capitolo, focalizzeremo lo studio utilizzando solo la distribuzione bimodale con un singolo valore di h , per motivi di origine computazionale che spiegheremo in seguito.

Osserviamo fin da subito che nella descrizione statistica del modello saranno in gioco tre azioni fondamentali: la prima è l'interazione ferromagnetica espressa dal primo termine della (3.7) e ha carattere ordinante; la seconda è l'interazione stocastica con i campi random espressa dal secondo termine della (3.7) e ha carattere disordinante; la terza è l'agitazione termica codificata nel fattore statistico di Boltzmann e ha carattere disordinante.

Lo studio di questo sistema avrà come obiettivo primario quello di stabilirne il comportamento critico, cioè di capire se e sotto quali condizioni esibisce magnetizzazione spontanea e quindi una transizione di fase. In secondo luogo si dovrà capire di che tipo sia tale transizione (se discontinua o continua, oppure se abbia caratteristiche più complesse). Infine si dovranno ricercare delle stime per gli esponeti critici del modello.

Si potrebbe immaginare che questioni di carattere generale, come appunto la esistenza di una transizione di fase e lo studio del tipo di transizione, possano essere risolte in maniera sperimentale. In realtà nessun esperimento è mai stato effettuato su vere e proprie realizzazioni sperimentali del modello, ma è comunque stato dimostrato che ferromagneti diluiti in presenza di campi esterni uniformi appartengono alla stesa classe di universalità [23] e sono stati anche compiuti esperimenti su questi sistemi (i materiali prevalentemente usati sono $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ e $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$) in tre dimensioni [24, 25, 26, 27]. La hamiltoniana che definisce questi modelli, più vicina della nostra al dettaglio reale delle sostanze studiate in laboratorio, è la seguente:

$$E = +J \sum_{\langle ij \rangle} \rho_i \rho_j s_i s_j - B \sum_i \rho_i s_i \quad (3.10)$$

dove le quantità ρ_i rendono conto della diluizione presente nel materiale. Un'altro modo di ottenere il modello di Ising in campo aleatorio è poi costituito dai ferromagneti frustrati diluiti [28]. Infine una realizzazione pratica del nostro modello si può anche ottenere introducendo un fluido binario in un materiale

gelatinoso che abbia un'affinità preferenziale con uno dei componenti, e lasciando cristallizzare il tutto [29]. Per una rassegna sugli aspetti sperimentali si veda la Ref.[30].

Questi esperimenti si sono però rivelati molto difficili da realizzare e i loro risultati non sono affatto conclusivi. Il motivo di questo risiede nel fatto che la dinamica con cui il sistema appropria l'equilibrio risulta estremamente lenta, e questo elemento esibirà la sua presenza anche all'interno delle simulazioni numeriche che andremo a fare nel seguito del lavoro.

3.2.1 Dimensione critica inferiore

Cominciamo analizzando la possibile esistenza di una transizione di fase. Dal momento che il modello di Ising puro presenta una transizione di fase a partire da dimensione $d = 2$ e che la presenza del disordine provoca un abbassamento della temperatura critica, ci aspettiamo che la transizione ferromagnetica possa non essere presente in due dimensioni (o anche più). In pratica ci chiediamo quale sia la dimensione critica inferiore del modello in campo aleatorio.

Questo problema è stato originariamente affrontato mediante considerazioni energetiche relative alla creazione delle "pareti di dominio", cioè gli strati di confine tra regioni con differenti valori della magnetizzazione [31, 32]. Si consideri il modello di Ising puro unidimensionale definito in Sezione 1.3.1. Si supponga che un campo esterno agisca al bordo del sistema in modo da favorire un particolare stato ordinato. Quando gli spin sono tutti allineati l'energia si trova nel minimo assoluto ma l'entropia è nulla. Ora creiamo un dominio disallineato, ossia invertiamo tutti gli spin che si trovano compresi fra due siti particolari. Adesso ci domandiamo quale sia la variazione di energia libera associata. Sia l la lunghezza, espressa in unità del passo reticolare, del dominio. L'energia interna cresce di $2J$ per ogni parete ai suoi lati mentre l'entropia aumenta di $k_B \ln l$ poiché abbiamo $O(l)$ possibili scelte per accomodare la parete. Ne segue che la variazione di energia libera è $\Delta F = 4J - k_B T \ln l$. Si ricordi adesso che un sistema termodinamico tende a occupare lo stato che minimizza la sua energia libera. Osserviamo dunque che, a temperatura finita e per valori di l sufficientemente grandi, la creazione del dominio abbassa l'energia libera e quindi il sistema tenderà a iterare questo processo sempre di più fino a che l'ordine a lungo raggio sarà distrutto, sopprimendo una eventuale transizione. Consideriamo invece il modello in due dimensioni (vedi Sezione 1.3.2) e similmente immaginiamo di creare, all'interno dello stato fondamentale, un dominio, questa volta quadrato, di spin invertiti. L'energia interna associata alle pareti del dominio sarà dell'ordine di Jl , poiché la parete è unidimensionale. Per stimare l'entropia dobbiamo calcolare in quanti modi sia possibile realizzare una tale parete. In maniera approssimativa e intuitiva, la consideriamo come un cammino aleatorio autoevitante, che a ogni passo ha quindi 3 possibilità di scelta, poiché deve alla fine chiudersi su se stessa. Ci aspettiamo allora che il numero di configurazioni per la parete cresca come z^l , dove $z \sim 3$. Ne segue che l'entropia associata è $k_B l \ln z$ e quindi la variazione di energia libera corrispondente è $\Delta F = z_1 J l - z_2 k_B T l$, con z_1, z_2 costanti positive. Ovvero

$$\Delta F = l(z_1 J - z_2 k_B T). \quad (3.11)$$

Osserviamo allora che, per temperature sufficientemente basse, la fase ordinata rimane stabile sotto creazioni di zone con magnetizzazione invertita, e quindi la

esistenza di ordine a lungo raggio è preservata.¹

Si consideri adesso un modello di Ising in campo aleatorio in d dimensioni e si assuma che, a temperatura nulla, sia ordinato con la maggioranza degli spin in una certa direzione (diciamo $+1$). Essendo a $T = 0$, la natura del sistema è determinata dalla competizione tra interazione ferromagnetica e interazione aleatoria con i campi random. Supponiamo adesso di introdurre una regione R di dimensione lineare l con gli spin rovesciati. A questo punto, mediante ragionamenti analoghi a quelli appena visti, l'energia interna aumenterà di una quantità Jl^{d-1} a causa dell'introduzione di questa parete di dominio. Ma l'energia interna cambierà anche di una quantità $\sum_{r \in R} h_r$ dovuta all'interazione degli spin nella regione con il campo aleatorio. Per domini sufficientemente grandi questa quantità risulta una quantità a media nulla con una distribuzione normale ma con una fluttuazione quadratica media data da $hl^{d/2}$. Se siamo accorti nella scelta della forma della regione allora possiamo assicurarci che questo cambiamento corrisponda a un abbassamento dell'energia interna U del sistema e quindi, confrontando la dipendenza da d dei due termini precedenti, otteniamo

$$\Delta U = z_1 l^{d-1} - z_2 l^{d/2} \quad (3.12)$$

con z_1, z_2 sempre costanti positive. Uguagliando gli esponenti dei due termini otteniamo $d = 2$: in questo caso marginale non siamo autorizzati a trarre conclusioni. Osserviamo invece che, per $d < 2$, la introduzione del dominio può sempre abbassare l'energia interna, anche in presenza di campi di intensità molto piccola, mentre, per $d > 2$, lo stato ordinato apparirà come stabile. Inoltre, se supponiamo che a temperatura finita continui a valere questo nostro risultato, l'argomento suggerisce per la dimensione critica inferiore un valore di $d_* = 2$.² Questa conclusione è nota come *criterio di Imry-Ma*.

Un secondo modo di affrontare la determinazione della dimensione critica inferiore del modello si basa invece sulla nozione di *riduzione dimensionale*. Esporremo qui gli aspetti fisici più rilevanti sempre in maniera intuitiva. Si consideri un sistema (puro) con un parametro d'ordine $m(r)$ continuo. In questo caso una parete di dominio sarà una regione di spessore finito (anche se, ovviamente, piccola rispetto al dominio che delimita) in cui $m(r)$ cambia continuamente dal valore all'interno al valore all'esterno. Una stima approssimativa del costo energetico di tale parete è

$$\Delta U_{\text{parete}} \approx \int_{\text{parete}} |\nabla m(r)|^2 d^d r \propto \frac{V_{\text{parete}}}{l^2} \quad (3.13)$$

in cui la stima per il gradiente è motivata dal fatto che l è l'unica lunghezza rilevante del problema. Per lo stesso motivo lo spessore della parete è proporzionale a l e quindi il suo volume è proporzionale a l^d . Ne segue per l'energia interna che

$$\Delta U_{\text{parete}} = z l^{d-2}. \quad (3.14)$$

Considerando ora un modello con parametro d'ordine continuo e in presenza di disordine, notiamo che la (3.12) risulta modificata soltanto nel suo primo

¹Di passata questi ragionamenti ci offrono una stima per la temperatura critica. Ponendo $z_1 = 2$ e $z_2 = \ln 3$ otteniamo:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln 3} \simeq 1.82.$$

²A rigore quello che dovremmo dedurre è $d_* \leq 2$.

termine porgendo

$$\Delta U = z_1 l^{d-2} - z_2 l^{d/2}. \quad (3.15)$$

Procedendo in maniera del tutto analoga a prima otteniamo per il caso marginale $d = 4$. Ricordando adesso che la dimensione critica inferiore per sistemi puri con parametro d'ordine continuo è $d = 2$, il risultato suggerisce che un sistema in un campo magnetico a casualità smorzata in d dimensioni si comporti come il corrispondente sistema puro in $d - 2$ dimensioni. Questa circostanza è appunto nota come riduzione dimensionale. Supponendo che questa conclusione, tratta nel caso di sistemi con parametro d'ordine continuo, sia estendibile anche ai sistemi con variabili discrete, otteniamo per il modello di Ising in campo aleatorio $d_* - 2 = d_*^{\text{Puro}}$, ovvero $d_* = 3$, corrispondendo a una assenza di transizione per il caso tridimensionale. Esiste inoltre un argomento di natura rigorosa [33] che, mediante l'introduzione di sofisticate tecniche di calcolo e alcune assunzioni di regolarità sull'energia libera del sistema, dimostra che il fenomeno della riduzione dimensionale si verifica effettivamente.

La controversia sul valore di d_* è stata comunque risolta grazie ad alcuni lavori [35, 36, 37, 38] che, facendo uso di formule esatte per l'energia libera del modello, sono riusciti a stabilire che nel sistema tridimensionale, al di sotto di una temperatura sufficientemente bassa, esiste ordine a lungo raggio in corrispondenza di un campo aleatorio abbastanza piccolo, e questo significa appunto il passaggio da una fase paramagnetica a una fase ferromagnetica. Ne segue che la dimensione critica inferiore del modello di Ising in campo aleatorio risulta $d_* = 2$.

3.2.2 Barriere di energia libera

Alcune caratteristiche del nostro modello, che hanno notevole rilevanza sia dal punto di vista sperimentale sia da quello computazionale, sono intimamente collegate al comportamento dell'energia libera.

Si consideri il sistema di Ising puro mentre viene raffreddato al di sotto della sua temperatura di transizione. Il sistema condensa in domini di spin allineati separati fra loro da pareti di dominio con tensione superficiale che va come l'inverso della lunghezza di correlazione ξ^{-1} , e quindi cresce al decrescere della temperatura verso quella critica. Per un'isola di spin, diciamo, *up* in un mare di spin prevalentemente *down*, la combinazione di questa tensione superficiale e la convessità dell'isola fa sí che essa si rimpicciolisca e alla fine svanisca. Questo è il meccanismo primario con cui il sistema ottiene ragione delle pareti di dominio e quindi abbassa la propria energia libera. Adesso si consideri la stessa situazione nel caso disordinato. Abbiamo ancora domini separati da pareti con una certa tensione superficiale. Comunque ora è possibile che le pareti di dominio si "inchiodino" su campi locali intensi, intendendo che ci possono essere degli spin sulla frontiera del dominio che sono forzati ad allinearsi con i propri campi aleatori h_i (a causa del loro ampio valore). Questi spin vincolati hanno dunque la capacità di combattere la tensione superficiale del dominio e quindi di impedire l'evaporazione dell'isola che delimitano, rallentando così il processo di equilibratura nella fase ferromagnetica. Inoltre, poiché l'intensità della barriera energetica W necessaria per invertire uno di questi spin vincolati è indipendente dalla temperatura, il tempo necessario per far evaporare un'isola diverge esponenzialmente all'abbassarsi della temperatura come $\exp W/k_B T$.

La lezione che traiamo da questo fatto è che, a temperature non troppo elevate, il meccanismo che stabilisce l'equilibrio termico è la competizione tra interazione ferromagnetica e disordine ambientale; ne segue che la temperatura sembra essere una variabile irrilevante per il nostro modello, e quindi ci aspettiamo che il punto fisso che governa la transizione occorra a temperatura nulla. Su questo punto torneremo in Sezione 3.3.

3.2.3 Stato fondamentale: il modello a $T = 0$

Prima di procedere allo studio dello spazio delle fasi nella sua generalità, studiamo il sistema a temperatura nulla, cioè diamo uno sguardo al suo stato fondamentale. In questo contesto l'unico termine rilevante nella sommatoria per ottenere la funzione di partizione è quello in cui l'energia assume il valore minimo poiché tutti gli stati sui quali il valore della hamiltoniana è diverso da zero hanno una probabilità di realizzazione $P \propto e^{-E/0^+} = 0$. Il motivo per cui questa analisi è rilevante risiede nell'osservazione della precedente sezione in cui si arguiva che la temperatura potesse essere una variabile irrilevante: se così fosse, il punto fisso che governa la transizione di fase è situato sull'asse $T = 0$ e le sue proprietà critiche ci forniscono informazioni sulla transizione a temperature finite.

Il comportamento del modello sarà determinato dalla competizione tra la interazione ferromagnetica (ordinante) e la interazione stocastica con i campi (disordinante). Già sappiamo che esiste un valore del disordine h_{c0} al di sopra del quale il sistema si trova in una fase paramagnetica e al di sotto del quale si trova in una fase ferromagnetica: il nostro scopo sarà quello di capire quali siano le caratteristiche di questa transizione. Lo scenario più semplice da immaginare è quello di una transizione di fase del secondo ordine in cui si passa da una fase ordinata dove un singolo spin è allineato con gli altri lontani a una fase disordinata dove la magnetizzazione è zero e l'orientamento di ogni spin è determinato localmente dai campi random nelle sue vicinanze. Nella fase ordinata, quando $h < h_{c0}$, gli spin hanno correlazioni a lungo raggio e ci sono due stati, uno con spin prevalentemente *down* e uno con spin prevalentemente *up*, che nel limite termodinamico, in analogia con il caso puro, si “disaccoppiano” rompendo spontaneamente la simmetria (media) per inversione assiale. Nella fase disordinata invece, quando $h > h_{c0}$, la correlazione fra gli spin è a corto raggio, con una scala caratteristica di $\xi \sim (h - h_{c0})^{-\nu}$, ed esiste un unico stato. Inoltre le due fasi si distinguono anche per le caratteristiche delle pareti di dominio (nella ferromagnetica ve ne sono su larga scala mentre nella paramagnetica queste sono assenti) e per la *rigidità* (il costo di energia necessario per cambiare una parte del sistema relativamente a una parte lontana; nel modello di Ising puro essa è identificata con il costo di una parete di dominio, che scala come la sua superficie).

Da uno studio molto accurato di queste caratteristiche [39] si è potuto stabilire con buona approssimazione che, nel caso la distribuzione delle impurezze sia gaussiana, la fenomenologia della transizione è compatibile con una del secondo ordine. Inoltre i risultati supportano la immagine di una transizione caratterizzata da tre esponenti critici:

- ν per le deviazioni dal punto critico, $\nu = 1.37(9)$;
- θ per la energia al punto critico, $\theta = 1.49(3)$;

- β per la magnetizzazione al punto critico, $\beta = 0.017(5)$.

3.2.4 Spazio delle fasi

Passiamo adesso ad affrontare lo studio in generale dello spazio delle fasi del nostro modello, costituito dalla temperatura T , il campo magnetico esterno macroscopico B e l'intensità h della distribuzione dei campi aleatori. Poiché già sappiamo che il campo B deve valere zero per avere transizione di fase, come nel caso puro, non lo rappresenteremo.

Gli argomenti sviluppati in Sezione 3.2.1 hanno prodotto un generale accordo qualitativo sulla natura della linea di separazione tra la fase ferromagnetica e la fase paramagnetica. Tale linea interseca l'asse del disordine nel punto $(h, T) = (h_{c0}, 0)$ e l'asse della temperatura nel punto $(h, T) = (0, T_{Is})$. Il primo corrisponde allo stato critico fondamentale descritto in Sezione 3.2.3 mentre il secondo corrisponde al solito punto critico del modello di Ising puro. Le stime attualmente disponibili su questi parametri sono: $h_{c0} = 2.270(4)$ per la distribuzione gaussiana [39] e $h_{c0} = 2.21(1)$ per la distribuzione bimodale [40].

Il comportamento generale delle fasi e delle transizioni di fase per i sistemi a casualità smorzata è comunque ancora controverso, e il modello di Ising in campo aleatorio non fa eccezione. In particolare la natura della sua transizione di fase rimane irrisolta, sebbene si creda generalmente che la transizione dalla fase ordinata a quella disordinata sia continua e governata da un punto fisso a temperatura nulla (con disordine finito).

Esponiamo adesso quelli che sono i vari scenari proposti nella letteratura. Una prima possibilità è che la transizione avvenga attraverso il passaggio per una terza fase vetrosa [41, 42], probabilmente implicante la coesistenza di vari stati di equilibrio. Questa opzione appare come la più improbabile e quindi non la terremo in considerazione. I risultati ottenuti con la teoria di campo medio indicano invece che, nel caso di distribuzione gaussiana [43], la transizione è effettivamente del secondo ordine anche per temperature finite e governata dal punto fisso a temperatura nulla, come già osservato, mentre, nel caso di distribuzione bimodale [44], si manifesta un punto tricritico a temperatura T_{tc} tale che $0 \leq T_{tc} \leq T_{Is}$ e la transizione è discontinua per $0 < T < T_{tc}$ e continua per $T_{tc} < T < T_{Is}$.

Poiché i risultati forniti dalla teoria di campo medio sono spesso delle approssimazioni molto brutali, siamo spinti a pensare che, anche nel caso di un disordine bimodale, la transizione possa realmente essere continua. Un modo per verificare questa ipotesi è di studiare il modello in un punto critico $(h, T) = (h_c(T), T)$, con $0 < T < T_{Is}$, appartenente alla linea di separazione delle fasi e confrontare i valori degli esponenti critici con quelli del punto a $T = 0$ per vedere se effettivamente i due appartengono alla medesima classe di universalità. Nel Cap.5 esporremo i risultati ottenuti per il punto corrispondente al valore $h_c(T) = 1$.

3.3 Transizione del secondo ordine

In questo paragrafo analizzeremo il comportamento critico del modello di Ising in campo aleatorio mediante le tecniche del gruppo di rinormalizzazione assumendo come ipotesi che la transizione di fase sia una transizione del secondo ordine e che sia controllata da un punto fisso a temperatura nulla [45, 46].

Il comportamento critico del sistema puro è controllato dal punto fisso “termico” I posto in $(0, T_{\text{Is}})$. Poiché il campo random è una perturbazione rilevante, il flusso lungo la superficie di separazione di fase si dirige verso il punto fisso “random” R posto in $(h_{c0}, 0)$, che dunque controlla tutta la linea di transizione. Tutti i flussi che cominciano nella fase ferromagnetica terminano nel punto fisso stabile O posto in $(0, 0)$, che corrisponde al sistema puro nel limite di bassa temperatura.

Popiché per ipotesi il comportamento critico del modello è controllato dal punto fisso R , possiamo ottenere gli esponenti lavorando direttamente a $T = 0$. Per esempio l’esponente ν descrive la divergenza della lunghezza di correlazione ξ quando R viene approssiato lungo l’asse del disordine:

$$\xi \sim |\rho|^{-\nu} \quad \rho = \frac{h}{J} - \left(\frac{h}{J}\right)^* \quad (3.16)$$

dove $(h/J)^*$ è il valore di h/J al punto fisso R . Sulla base di questo passiamo alla deduzione delle leggi di scala.

Da considerazioni di carattere dimensionale, la parte singolare della densità di energia per lo stato fondamentale ha la forma

$$U = J\phi\left(\rho, \frac{B}{J}\right) \quad (3.17)$$

dove abbiamo reintrodotta il campo macroscopico esterno B .³ Adesso si immagini di operare una trasformazione di coarse-graining con fattore di scala b . Introduciamo allora gli esponenti x, θ, z che descrivono il riscaldamento delle variabili B, J, ρ sotto una operazione del gruppo di rinormalizzazione:

$$B' = b^x B \quad J' = b^\theta J \quad \rho' = b^z \rho \quad (3.18)$$

nel limite in cui $B/J \ll 1$, $\rho \ll 1$. La nuova (parte singolare della) energia e la nuova lunghezza di correlazione risultano ovviamente $U' = b^d U$ e $\xi' = b^{-1} \xi$. Sostituendo in queste le precedenti relazioni otteniamo:

$$\begin{aligned} U &= \rho^{(d-\theta)/z} \tilde{\phi}\left(\frac{BJ^{-1}}{\rho^{(x-\theta)/z}}\right) \\ \xi &= \rho^{-1/z} \tilde{\xi}\left(\frac{BJ^{-1}}{\rho^{(x-\theta)/z}}\right) \end{aligned}$$

avendo, come al solito, posto la condizione $b = |\rho|^{-1/z}$. Da queste due relazioni possiamo identificare l’esponente della lunghezza di correlazione ν e l’esponente di “gap” Δ :

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{1}{z}, \\ \Delta &= \frac{x - \theta}{z}. \end{aligned}$$

³Questo è necessario al fine del calcolo degli esponenti critici poiché il campo B , anche se è nullo al punto critico, è il campo coniugato alle variabili di spin.

Procedendo in maniera del tutto analoga a quanto visto nel Cap.2, possiamo ricavare tutti gli esponenti critici in funzione degli esponenti x, θ, z :

$$\begin{aligned}\alpha &= 2 - (d - \theta)\nu \\ \beta &= (d - x)\nu \\ \gamma &= (2x - \theta - d)\nu \\ \delta &= \frac{x - \theta}{d - x}.\end{aligned}$$

Da queste relazioni si deducono inoltre le solite leggi di riscaldamento

$$\begin{aligned}\alpha + 2\beta + \gamma &= 2, \\ \beta\delta &= \Delta.\end{aligned}$$

Dalla funzione di correlazione $G(r) \propto r^{2-d-\eta}g(r/\xi)$, ricordando il fatto che $\chi \propto \int G(r)d^d r$, si ottiene

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (3.19)$$

da cui si ricava l'ulteriore legge

$$\eta = d + 2 + \theta - 2x. \quad (3.20)$$

Per riassumere, tutte le usuali leggi di riscaldamento si applicano come nel caso puro con l'accorgimento di sostituire, in quelle che coinvolgono la dimensione dello spazio, d con $d - \theta$. Ne segue che in questa interpretazione della transizione ci sono tre esponenti critici (ν, θ e, per esempio, β) in base ai quali tutti gli altri possono essere dedotti.

Sebbene le analisi precedenti siano state fatte a $T = 0$, la generalizzazione a temperature finite è immediata. Per $T/J \ll 1$, $B/J \ll 1$, $|\rho| \ll 1$, la grandezza T/J , dopo una trasformazione del gruppo, diviene $(T/J)' = b^{-\theta}(T/J)$. Dunque la temperatura entra nelle leggi di riscaldamento mediante la combinazione $T\xi^{-\theta}$ ed è pertanto irrilevante per $\theta > 0$. Quest'ultimo esponente è la vera novità rispetto al modello di Ising puro ed è intimamente connesso col fatto che stiamo considerando un punto fisso a temperatura nulla. Al punto fisso termico I , l'analogo della (3.17) è

$$U = J\phi\left(t, \frac{B}{J}\right) \quad (3.21)$$

dove adesso $t = T/J - (T/J)^*$. Il punto essenziale è che in I l'accoppiamento J è invariante per cambiamento di scala, ossia l'esponente θ è zero. In R invece è il rapporto $\rho = h/J$ a essere invariante. Il parametro J , che fissa la scala della energia, continua a riscaldare anche al punto fisso e il suo esponente entra nella legge di riscaldamento per la densità di energia, e dunque anche nelle altre. Osserviamo che le modifiche apportate alle leggi di riscaldamento sono una semplice conseguenza della comparsa dell'esponente θ , e quindi ci aspettiamo che siano tipici aspetti generali di transizioni di fase governate da un punto fisso a temperatura nulla. Affinché, come ipotizzato all'inizio del paragrafo, la temperatura risulti una variabile irrilevante, relativamente al punto fisso R , è necessario che $\theta > 0$: solo così il comportamento critico di tutta la linea di fase (escluso il punto I) può risultare controllato dal punto R .⁴

⁴Se fosse stato $\theta < 0$ allora R avrebbe controllato solo l'asse a temperatura nulla.

La conseguenza principale a cui porta il ragionamento fin qui svolto è che, su grande scala, le fluttuazioni indotte dai campi aleatori statici dominano sulle fluttuazioni dinamiche dovute alla temperatura. Se aumentiamo la temperatura oltrepassando T_c allora il disordine sarà prevalentemente causato da una inversione della magnetizzazione statica locale, o più generalmente del parametro d'ordine. Considerando il sistema a una lunghezza dell'ordine della correlazione, la parte singolare dell'energia libera corrispondente a un volume ξ^d è sostanzialmente una funzione della magnetizzazione totale M_ξ in questa regione. Per sistemi non disordinati la scala tipica di variazione di F_ξ è imposta semplicemente dalle fluttuazioni termiche, ossia $F_\xi \sim k_B T$, che conduce alla solita relazione $d\nu = 2 - \alpha$. Comunque, in presenza dei campi aleatori, questa scala sarà data dalle fluttuazioni del disordine (che dominano sulle fluttuazioni termiche) e forzano la scala di variazione dell'energia a crescere come ξ^θ , modificando la precedente relazione di riscaldamento nella già dedotta $2 - \alpha = (d - \theta)\nu$. Infine la scala caratteristica di M_ξ su cui F_ξ varia è dell'ordine di $t^\beta \xi^d = \xi^{d - \beta/\nu}$, dove β è l'esponente della magnetizzazione.

Analizziamo adesso più da vicino le conseguenze dalla nostra ipotesi dal punto di vista della teoria del gruppo di rinormalizzazione. L'assunzione principale che abbiamo fatto è che la scala di variazione dell'energia libera effettiva in un volume di correlazione scali come ξ^θ , con un esponente θ che è indipendente da ν e β . Questa è una conseguenza dell'osservazione che la competizione che conduce alla transizione è fra l'interazione di scambio magnetica, come fattore ordinante, e i campi aleatori (e non la temperatura), come fattore disordinante. Le leggi di riscaldamento sono state poi derivate nella maniera usuale rinormalizzando il sistema, a partire da un determinato stato termodinamico, fino a che la taglia del sistema riscaldato non raggiunge le dimensioni della lunghezza di correlazione. Comunque, poiché la temperatura rinormalizzata sarà piccola, quantità che sono singolari nel limite $T \rightarrow 0$ anche fuori dalla regione critica obbediranno a leggi di riscaldamento anomale, che hanno origine in questa dipendenza singolare dalla temperatura rinormalizzata. Ne deduciamo allora che la temperatura è una variabile irrilevante pericolosa.

3.4 Osservabili del modello

Passiamo adesso a definire alcune grandezze osservabili che possono essere misurate sul sistema e che saranno di grande utilità nel seguito del nostro studio. In analogia con il caso del modello di Ising puro, si definiscono la magnetizzazione

$$M = -\frac{\partial \bar{F}}{\partial B}, \quad (3.22)$$

la suscettività

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial B} \quad (3.23)$$

e la capacità termica

$$C = T^2 \frac{\partial^2 \bar{F}}{\partial T^2}, \quad (3.24)$$

dove l'unica differenza risiede nell'uso della energia libera \bar{F} in cui si prende, oltre alla media termica, anche la media sul disordine.

A parte queste grandezze, ne esistono altre la cui esistenza è resa possibile dal

fatto che le medie statistiche che si devono fare sul sistema possiedono una duplice natura. Data una quantità O che dipende dagli spin $\{s\}$ e dai campi random $\{h\}$, definiamo, in conformità con la (3.4),

$$\overline{\langle O \rangle}_\beta = \int \frac{1}{Z[h]} \sum_{\{s\}} O e^{-\beta E[s,h]} [dh] \quad (3.25)$$

dove

$$[dh] = \prod_r \frac{1}{2} (\delta(h - h_r) + \delta(h + h_r)) dh_r. \quad (3.26)$$

Le osservabili che introduciamo adesso sono genericamente dette *cumulanti* e saranno ampiamente utilizzate nel Cap.5. Sia

$$m = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^N s_i \quad (3.27)$$

la magnetizzazione per sito. I cumulanti che verranno considerati sono definiti come segue:

$$\begin{aligned} U_4 &= \frac{\overline{\langle m^4 \rangle}}{\overline{\langle m^2 \rangle}^2} \\ U_{22} &= \frac{\overline{\langle m^2 \rangle^2} - \overline{\langle m^2 \rangle}^2}{\overline{\langle m^2 \rangle}^2} \\ U_d &= \frac{\overline{\langle m^4 \rangle} - \overline{\langle m^2 \rangle}^2}{\overline{\langle m^2 \rangle}^2} \\ U_1 &= \frac{\overline{\langle m^2 \rangle}}{\overline{\langle m \rangle}^2}. \end{aligned}$$

Passiamo adesso a discutere brevemente quali informazioni si possano ricavare da queste quantità riguardo la transizione di fase utilizzando considerazioni di carattere teorico. Nel solco delle argomentazioni svolte in Sezione 3.3, osserviamo che, per una transizione continua governata da un punto a $T = 0$, la media termica, relativamente agli aspetti critici, si riduce alla valutazione del solo stato fondamentale critico e quindi “sparisce” dalle precedenti formule. Fissando un valore di h e ricordando che i cumulanti devono essere intesi come funzioni della temperatura, otteniamo allora le seguenti relazioni:

$$U_4(T_c) = \frac{\overline{m^4}}{\overline{m^2}^2}$$

$$U_{22}(T_c) = \frac{\overline{m^4} - \overline{m^2}^2}{\overline{m^2}^2}$$

$$U_d(T_c) = 0 \quad (3.28)$$

$$U_1(T_c) = 1 \quad (3.29)$$

dove $T_c \equiv T_c(h)$ è la temperatura della transizione di fase per il disordine fissato e la media sui campi è presa nel punto $(h, T) = (h_{c0}, 0)$. Notando poi che in generale $U_d = U_4 - U_{22} - 1$, si ottiene immediatamente

$$U_4(T_c) = 1 + U_{22}(T_c). \quad (3.30)$$

Un'altra osservabile che avrà un ruolo fondamentale nel seguito è la funzione di correlazione a due punti $G(r)$, definita mediante la relazione

$$G(r) \equiv \overline{\langle s_0 s_r \rangle}. \quad (3.31)$$

Questa ci permette di definire la lunghezza di correlazione ξ come segue:

$$\xi^2 \equiv \frac{\tilde{G}(0) - \tilde{G}(q_{\min})}{p^2 \tilde{G}(q_{\min})} \quad (3.32)$$

dove $\tilde{G}(q)$ è la trasformata di Fourier della $G(r)$, $q_{\min} \equiv (2\pi/L, 0, 0)$ e $p = 2 \sin(\pi/L)$. La grandezza

$$\xi_* \equiv \frac{\xi}{L} \quad (3.33)$$

è invece nota come lunghezza di correlazione *ridotta*. Osservando che

$$\begin{aligned} \sum_r e^{iqr} s_0 s_r &= \frac{1}{L^3} \sum_{r,\rho} e^{iq(r-\rho)} s_r s_\rho \\ &= \frac{1}{L^3} \sum_r e^{iqr} s_r \cdot \sum_\rho e^{-ir\rho} s_\rho \\ &= \frac{1}{L^3} \left| \sum_r e^{iqr} s_r \right|^2 \end{aligned}$$

si riconosce subito che $\tilde{G}(0)$ coincide con $L^3 \overline{\langle m^2 \rangle}$.

Infine l'ultima grandezza che useremo per le nostre analisi è la suscettività. È facile vedere che essa si esprime in termini di m come segue:

$$\chi = \frac{L^3}{T} \left(\overline{\langle m^2 \rangle} - \overline{\langle m \rangle}^2 \right). \quad (3.34)$$

Riprendiamo adesso in considerazione la hamiltoniana (3.7) e la distribuzione (3.9). Poiché le variabili s_i sono numeri puri, i campi h_i hanno le dimensioni di una energia: il loro valore risulta in effetti determinato dalle complicate interazioni microscopiche fra atomi magnetici e impurezze. Possiamo allora riscrivere la hamiltoniana come

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i h_i s_i. \quad (3.35)$$

dove il parametro h ha le dimensioni di una energia e la forma della distribuzione è data da

$$P(h_i) = \frac{1}{2} (\delta(h_i - 1) + \delta(h_i + 1)) \quad (3.36)$$

in cui le variabili h_i sono numeri puri che assumono i soli valori $+1$ e -1 , esattamente come gli spin.

Guardiamo adesso la hamiltoniana ridotta:

$$\begin{aligned} H &\equiv \beta E \\ &= \frac{J}{k_B T} \left(- \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \frac{h}{J} \sum_i h_i s_i \right) \end{aligned}$$

Poniamo allora $J = 1$ in modo da fissare l'unità di misura della energia e $k_B = 1$ in modo da fissare l'unità di misura della temperatura (in maniera del tutto analoga a quanto fatto per il modello di Ising). In queste unità ogni variabile risulta adimensionale. Per motivi che spiegheremo nel prossimo capitolo, decidiamo di studiare il modello in corrispondenza del valore $h = 1$ (ossia $h = J$). Pertanto esso sarà definito dalle due seguenti relazioni:

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \sum_i h_i s_i,$$
$$P(h_i) = \frac{1}{2} (\delta(h_i - 1) + \delta(h_i + 1))$$

in cui ogni variabile è adimensionale e prende solamente i valori discreti $+1$ e -1 (ed è questa la cosa veramente importante per i nostri fini).

Capitolo 4

Simulazione Monte Carlo del modello

4.1 Introduzione ai metodi Monte Carlo

Lo scopo della meccanica statistica è quello di riuscire a “sommare” la funzione di partizione, ossia di esprimere tale funzione in termini delle sole variabili termodinamiche. Un tale compito è, nella maggioranza dei casi, irrealizzabile. Quello che però realmente interessa nello studio dei sistemi statistici è la conoscenza delle grandezze osservabili, ed è in questo contesto che i metodi di simulazione Monte Carlo [47, 48, 49] esibiscono tutta la loro utilità.

Riprendiamo in considerazione il modello di Ising puro. Uno stato del sistema è definito da un insieme di N variabili di spin e pertanto lo spazio delle configurazioni possibili è formato da $\mathbf{N} = 2^N$ elementi. In conformità ai principi della meccanica statistica, la probabilità di realizzazione associata a uno stato S_i è data dalla formula

$$p(S_i) = \frac{e^{-\beta E(S_i)}}{\sum_i e^{-\beta E(S_i)}} \quad (4.1)$$

dove S_i rappresenta la generica configurazione del sistema, E la hamiltoniana che ne regola l'evoluzione e la somma al denominatore è estesa a tutte le configurazioni possibili.

Come è noto il valore di aspettazione di una osservabile costruita a partire dalle variabili microscopiche risulta dato da

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_i O(S_i) e^{-\beta E(S_i)}}{\sum_i e^{-\beta E(S_i)}}. \quad (4.2)$$

Supponiamo adesso di essere in grado di generare una successione di stati tale che la frequenza delle occorrenze di ognuno sia proprio uguale alla (4.1). In questa situazione la successione visita lo spazio delle configurazioni attribuendo ai vari stati lo stesso peso che viene loro attribuito dalla media statistica. A questo punto è possibile calcolare il valor medio di una generica osservabile relativamente a questa successione mediante la formula

$$\hat{O} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M O(S_i). \quad (4.3)$$

Quello che abbiamo fatto è stato di “scaricare” l’informazione fisica contenuta nel termine di probabilità nella creazione di una opportuna successione di configurazioni. A questo punto risulta chiaro che le media statistiche esatte sono uguali alla media calcolata sulla nostra successione nel limite in cui $M \rightarrow \infty$. In pratica

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \hat{O} = \langle O \rangle. \quad (4.4)$$

Da un punto di vista concreto, quello che stiamo proponendo è di eseguire una simulazione nella quale si crea una successione di stati del sistema in maniera conforme a quanto spiegato e, per ogni configurazione, si calcolano (potremmo dire “si misurano”) “microscopicamente” le grandezze che ci interessano. In seguito su questi dati verrà eseguita la media (4.3) per ottenere i valori di aspettazione. Ovviamente il numero di stati che sarà effettivamente generato nella simulazione risulterà molto piccolo, se confrontato col valore di \mathbf{N} , ma il modo in cui abbiamo costruito la successione di campionamento ci assicura che stiamo “esplorando” lo spazio delle configurazioni in maniera efficiente. Il problema che ora dobbiamo risolvere è quello di creare la successione che abbiamo descritto.

4.1.1 Catene di Markov

Immaginiamo un processo dinamico discreto che avvenga nello spazio delle configurazioni del nostro sistema. Una catena di Markov è un simile processo in cui l’evoluzione temporale della successione è data dalle probabilità di transizione W_{ij} da un generico stato i a un generico stato j e dove la probabilità di trovarsi in una certa configurazione $C(t+1)$ al tempo $t+1$ dipende solo dalla configurazione $C(t)$ assunta al tempo precedente e non da tutta la storia pregressa. Quest’ultima caratteristica è tipica dei processi markoviani ed è nota come “perdita di memoria”.

In generale la probabilità di trovarsi in uno stato i al tempo $t+1$ si può scrivere come

$$p_i(t+1) = \sum_j p_j(t) W_{ji}. \quad (4.5)$$

Il significato di questa equazione è del tutto intuitivo ed essa assume il nome di *equazione maestra*. Per la definizione di probabilità deve valere che, a ogni tempo, $\sum_i p_i(t) = 1$ e questo implica che

$$\sum_i W_{ji} = 1 \quad \forall j. \quad (4.6)$$

La (4.5) può essere riscritta, grazie alla (4.6), nella forma più simmetrica

$$p_i(t+1) - p_i(t) = \sum_j p_j(t) W_{ji} - \sum_j p_i(t) W_{ij}, \quad (4.7)$$

che permette inoltre il passaggio al limite di tempo continuo.

Data una generica catena di Markov si dimostra che esiste un nucleo di stati che hanno probabilità di essere visitati non nulla nel limite $t \rightarrow \infty$: tali stati sono detti *ergodici*. Una catena di Markov è detta irriducibile se non esistono stati che nel precedente limite sono definitivamente esclusi del processo dinamico.

A questo punto si può dimostrare che in una catena di Markov irriducibile ed ergodica esiste il limite

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_i(t) = \pi_i \quad (4.8)$$

e non dipende dalla particolare condizione iniziale $p_i(0)$. I valori π_i definiscono una distribuzione di probabilità asintotica che risolve l'equazione che si ottiene dalla (4.5) nel limite di tempi lunghi:

$$\pi_i = \sum_j \pi_j W_{ji}. \quad (4.9)$$

Questa equazione ci mostra che la distribuzione di probabilità $p_i(t)$, che sta evolvendo secondo l'equazione maestra, una volta che ha raggiunto la distribuzione asintotica π_i , non cambia più nel tempo: da quel momento in poi tutti gli stati sono visitati dal processo dinamico con la probabilità data dalla distribuzione π_i , indipendente dal tempo.

Come ormai risulterà chiaro, l'utilità delle catene di Markov per i nostri scopi risiede nel fatto che la successione che dobbiamo creare è interpretabile come una catena di Markov nella quale la probabilità asintotica è data dalla (4.1).

4.1.2 Principio del bilancio dettagliato

A questo punto l'ultimo passo da compiere è quello della creazione di una catena di Markov con la giusta distribuzione asintotica: in sostanza, data π_i , bisogna trovare W_{ij} .

La (4.9) può essere riscritta nella forma

$$0 = \pi_i - \sum_j \pi_j W_{ji} = \sum_j (\pi_i W_{ij} - \pi_j W_{ji}) \quad \forall i, \quad (4.10)$$

che prende il nome di *equazione del bilancio*. La scelta più semplice per risolvere la (4.10) è quella di uguagliare a zero ogni termine tra parentesi tonde e ottenere quella che è nota come *equazione del bilancio dettagliato*:

$$\pi_i W_{ij} = \pi_j W_{ji} \quad \forall i, j. \quad (4.11)$$

Notiamo che la (4.11) è sempre soddisfatta per $i = j$ e di conseguenza abbiamo la più ampia libertà di scelta per le probabilità di rimanere nello stato in cui si è già. La (4.11) ammette ancora molte soluzioni ma non tutte queste sono realizzabili poiché non dobbiamo dimenticare la condizione di normalizzazione (4.6) che deve valere per ogni stato i . La scelta

$$W_{ij} = 1 \quad W_{ji} = \frac{\pi_i}{\pi_j} \quad (4.12)$$

è realizzabile soltanto se $\pi_i < \pi_j$ mentre al scelta

$$W_{ij} = \frac{\pi_j}{\pi_i} \quad W_{ji} = 1 \quad (4.13)$$

è realizzabile soltanto se $\pi_i > \pi_j$. La scelta

$$W_{ij} = \frac{1}{\pi_i} \quad W_{ji} = \frac{1}{\pi_j} \quad (4.14)$$

non è realizzabile poiché l'inverso di una distribuzione di probabilità non è una distribuzione di probabilità, mentre la scelta

$$W_{ij} = 1 \quad W_{ji} = \frac{\pi_i}{\pi_j} \quad (4.15)$$

si può sempre realizzare avendo l'accortezza di aggiustare il valore di W_{ii} ; la soluzione è infatti

$$\begin{aligned} W_{ij} &= \pi_j \quad \forall j \neq i \\ W_{ii} &= 1 - \sum_{j \neq i} \pi_j. \end{aligned}$$

Il problema di quest'ultima soluzione è che essa richiede la conoscenza dei valori della distribuzione asintotica π_i , ma questo è proprio quello che noi non conosciamo, a causa del denominatore nella (4.2), che poi altro non è che funzione di partizione. Quello di cui noi siamo a conoscenza è invece il rapporto fra le probabilità asintotiche di due stati qualsiasi poiché esso dipende solo dal valore assunto dalla hamiltoniana su questi stati.

Nel prossimo paragrafo vedremo come le varie soluzioni cui si è accennato possano essere parzialmente utilizzate insieme per risolvere correttamente il nostro problema.

4.2 Algoritmo di Metropolis

Un metodo molto generale per costruire matrici di transizione che soddisfino al principio del bilancio dettagliato per una data distribuzione asintotica π_i è stato introdotto nel 1953 e prende il nome di algoritmo di Metropolis [50].

Assumendo di trovarsi al tempo t nello stato i , l'algoritmo si compone di due fasi. Nella prima fase si considera un nuovo stato j e una matrice di probabilità di transizione simmetrica U_{ij} . Adesso si prende in considerazione la possibilità di andare dallo stato i allo stato j : questa situazione prende il nome di *fase di proposta*. Nella seconda fase, che prende il nome di *fase di scelta*, si accetta di passare nel nuovo stato j al tempo $t + 1$ con una probabilità pari a $\min(1, \frac{\pi_j}{\pi_i})$. Se il cambiamento non viene accettato si rimane nello stato i . In altre parole la catena di Markov si muove con certezza sul nuovo stato se questo ha probabilità maggiore del precedente mentre, in caso contrario, si muove solo con una probabilità data dal rapporto tra le probabilità degli stati, e dunque si sposterà difficilmente su stati con probabilità piccolissima (a meno di non venire da uno stato ancor più improbabile). Verifichiamo adesso che questo procedimento costituisce in effetti la soluzione cercata.

Sia dunque U_{ij} un'arbitraria matrice di transizione che chiamiamo matrice di proposta. Essa sarà utilizzata per generare proposte di movimento $i \rightarrow j$ che saranno accettate o rifiutate con probabilità rispettivamente a_{ij} e $1 - a_{ij}$. Se il cambiamento proposto è rifiutato allora compiamo una transizione nulla $i \rightarrow i$. Detta W_{ij} la matrice di transizione del nostro procedimento, otteniamo

$$\begin{aligned} W_{ij} &= a_{ij} U_{ij} \quad \forall i \neq j \\ W_{ii} &= U_{ii} + \sum_{j \neq i} U_{ij} (1 - a_{ij}) \end{aligned}$$

dove naturalmente deve essere $0 \leq a_{ij} \leq 1$ per ogni i, j . Adesso è facile osservare che tale matrice verifica il principio del bilancio dettagliato per π se e solo se

$$\frac{a_{ij}}{a_{ji}} = \frac{\pi_j U_{ji}}{\pi_i U_{ij}} \quad (4.16)$$

per tutte le coppie $i \neq j$. Ma questa condizione è facilmente soddisfatta se poniamo

$$a_{ij} = \Phi \left(\frac{\pi_j U_{ji}}{\pi_i U_{ij}} \right) \quad (4.17)$$

dove la funzione $\Phi : [0, +\infty) \rightarrow [0, 1]$ soddisfa la relazione

$$\frac{\Phi(z)}{\Phi(1/z)} = z. \quad (4.18)$$

Specializzandoci adesso al caso in cui la matrice U_{ij} sia simmetrica, come ipotizzato in precedenza, la (4.17) si riduce a

$$a_{ij} = \Phi \left(\frac{\pi_i}{\pi_j} \right). \quad (4.19)$$

La scelta effettuata nell'algoritmo di Metropolis è la funzione più semplice che soddisfi alla (4.18), ossia

$$\Phi(z) = \min(1, z) \quad (4.20)$$

dove $z = \frac{\pi_i}{\pi_j}$. Abbiamo dunque verificato la correttezza dall'algoritmo.

Osserviamo comunque che l'aspetto veramente delicato del problema, sul quale torneremo in seguito, è la scelta della matrice di proposta U_{ij} . Infatti è da questa scelta che dipende l'efficienza computazionale dell'algoritmo poiché ne dipendono in maniera cruciale la connettività (ossia la capacità di collegare "velocemente" stati lontani del sistema) della catena e la frequenza media di accettazione. Inoltre è fondamentale, da un punto di vista teorico, che essa sia simmetrica, al fine di produrre un algoritmo corretto. Ricordiamo infine che la procedura qui descritta è una tecnica del tutto generale: essa produce una famiglia infinita di algoritmi dipendenti dalla scelta della matrice U_{ij} .

In meccanica statistica abbiamo sempre

$$\pi_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_j e^{-\beta E_j}} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (4.21)$$

e dunque

$$\frac{\pi_j}{\pi_i} = e^{-\beta(E_j - E_i)} = e^{-\beta \Delta E}. \quad (4.22)$$

Si noti che la funzione di partizione Z è scomparsa da questa espressione: questo è cruciale poiché Z non è quasi mai calcolabile esplicitamente.

Usando la (4.20) otteniamo le seguenti regole per l'evoluzione della catena di Markov:

- se $\Delta E \leq 0$ allora accettiamo sempre la proposta;
- se $\Delta E > 0$ allora accettiamo la proposta con probabilità $e^{-\beta \Delta E}$, cioè generiamo un numero pseudocasuale r uniformemente distribuito in $[0, 1]$ e accettiamo la proposta se $r \leq e^{-\beta \Delta E}$.

4.2.1 Applicazione al modello di Ising

Vediamo ora come sia possibile applicare quanto visto fin qui al modello di Ising. Cominciamo dal caso puro. Dato uno stato i scegliamo (il criterio di scelta è irrilevante) una variabile di spin s_a . Il nuovo stato j nel quale proponiamo di muoverci sia quello in cui la variabile s_a cambia il proprio valore: questo fissa la scelta della matrice U_{ij} che risulta correttamente simmetrica. Per decidere sulla proposta dobbiamo calcolare $\Delta E = E_j - E_i$, che risulta

$$\Delta E = 2s_a \sum_{l \in V(a)} s_l \quad (4.23)$$

dove la somma è estesa ai soli siti primi vicini del sito a . Osserviamo che tale grandezza può assumere solo i valori $\Delta E = 0, \pm 4, \pm 8, \pm 12$. Qualora risulti $\Delta E = 0, -4, -8, -12$ accettiamo la proposta; in caso contrario generiamo il numero r e consideriamo il valore del termine $e^{-\beta \Delta E}$ procedendo alla scelta. A causa della finitezza del numero di valori assunti da ΔE , il numero r ha l'unico compito di identificare uno dei quattro intervalli del segmento $[0, 1]$ in cui i possibili valori di ΔE lo dividono, e questo avrà un ruolo importante in Sezione 4.4 quando dovremo scrivere il codice per le simulazioni.

La procedura appena enunciata è perfettamente corretta da un punto di vista di principio, ma dobbiamo ricordare che il nostro scopo è quello di eseguire una simulazione numerica che visiterà un numero finito di stati. Ne segue che la successione che andiamo a generare deve essere quanto più possibile scorrelata. Questo risulta chiaro dal fatto che la media (4.3), qualora eseguita su dati strettamente correlati, sarebbe poco attendibile: è come se visitassimo una piccola regione dello spazio delle configurazioni per molte volte, anziché un'ampia regione un numero significativo di volte. Appare evidente che, nel nostro modo di cambiare stato, il nuovo è intimamente correlato con il vecchio dato che, al massimo, solo una frazione $1/N$ dello stato risulta modificata. Decidiamo allora di scorrere il reticolo in ordine lessicografico e di applicare il precedente algoritmo a ogni variabile di spin in successione e di prendere come stato j quello raggiunto alla fine di tutto il procedimento: questo riduce la correlazione (anche se non la elimina) ma introduce un nuovo problema. In effetti questo modo di procedere non rispetta il principio del bilancio dettagliato, da noi usato per costruire la catena di Markov. Comunque esso soddisfa al principio del bilancio, dunque conduce alla stazionarietà di π_i , e questo è ciò che realmente importa. Passiamo adesso al caso in cui siano presenti i campi aleatori. L'unica cosa che cambia in questo contesto è l'espressione per la variazione di energia (4.23) che deve tenere in considerazione anche la presenza del campo aleatorio h_a . La formula che ne risulta è dunque

$$\Delta E = 2s_a \left(\sum_{l \in V(a)} s_l + h_a \right) \quad (4.24)$$

Si osservi che adesso i valori che può assumere la quantità ΔE sono $\Delta E = \pm 2, \pm 6, \pm 10, \pm 14$. Qualora risulti $\Delta E = -2, -6, -10, -14$ accettiamo la proposta; in caso contrario procediamo come sopra. Questa volta però il segmento $[0, 1]$ è suddiviso in cinque parti: ne segue che il numero r avrà come scopo quello di identificare appunto uno dei cinque relativi intervalli.

4.3 Generalità sulle simulazioni

Adesso che siamo in possesso di tutti gli strumenti teorici per effettuare una simulazione Monte Carlo, cominciamo a entrare nel dettaglio della sua implementazione pratica. Ricordiamo che il programma di analisi che abbiamo deciso di intraprendere consiste nell'applicazione del finite-size scaling descritto in Sezione 2.5. Le simulazioni saranno dunque eseguite su reticoli di dimensione crescente, il cui lato L assumerà i valori $L = 6, 8, 10, 12, 16, 20$, imponendo condizioni al contorno periodiche.

A questo punto è necessaria una precisazione, anche se banale. Le tecniche descritte in Sezione 4.1 sono state sviluppate per calcolare la media termica. Nel Cap.3 abbiamo visto che le osservabili del nostro sistema sono frutto però di una doppia media: quella termica e quella sul disordine. Per effettuare la media sul disordine genereremo tante sue realizzazioni, per ciascuna di esse calcolando la media gibbsiana, e solo dopo procederemo a prendere la seconda media. Questa ovvia procedura è conseguenza del fatto che il sistema di Ising in campo aleatorio è un sistema a casualità smorzata, e questo ha per conseguenza il fatto che possiamo (e dobbiamo) limitare l'utilizzo delle tecniche stocastiche al computo della sola media termica.

Le grandezze osservabili che decidiamo di studiare sono la lunghezza di correlazione ridotta ξ_* e i cumulanti U_4, U_{22}, U_d, U_1 le cui definizioni sono state date in Sezione 3.4. In pratica noi useremo le catene di Markov per calcolare la funzione di partizione (ossia per eseguire la media termica) a fissato disordine e una procedura di media "normale" per eseguire la media sui campi random.

Si vede immediatamente che per il calcolo dei cumulanti sarà sufficiente campionare durante la simulazione la sola grandezza m . Per il calcolo della lunghezza di correlazione abbiamo invece bisogno della quantità $\tilde{G}(0)$, che è riconducibile alla conoscenza di m , e della nuova grandezza $\tilde{G}(q_{\min})$ [vedi la Sezione 3.4]. Ne segue che dovremo costruire due sole procedure di campionamento: una che misuri m (indicata con `magnetisation()`) e una che misuri $\tilde{G}(q_{\min})$ (indicata con `correlation()`).

Una volta eseguiti i campionamenti necessari si pone il problema del calcolo del valor medio e della stima dell'errore. Per calcolare l'incertezza il metodo da noi usato è quello comunemente adottato nelle simulazioni Monte Carlo: il metodo del *jackknife* [49]. Questo metodo è molto utile poiché tiene conto del fatto che per funzioni complicate (nel nostro caso i cumulanti e ξ_*) delle grandezze che campioniamo (nel nostro caso m e $\tilde{G}(q_{\min})$) l'incertezza fornita dalle regole "ingenue" della propagazione degli errori sarebbe sovrastimata. Inoltre un aspetto delicato riguarda il calcolo della media di una grandezza. Poiché per ogni realizzazione del disordine il numero di campionamenti "termici" è finito (e neanche troppo ampio), ne segue che gli stimatori naturali delle osservabili (che siano la media sul disordine di una combinazione di medie termiche) sono affetti da un *bias*. Per ovviare a questo problema abbiamo costruito degli stimatori *unbiased* secondo quanto illustrato nella Appendice B della Ref.[51].

4.4 Multispin coding

Nel modello di Ising puro, così come nel modello di Ising in campo aleatorio, le variabili microscopiche sono gli spin s_i posti ai vertici del reticolo ed essi possono

assumere soltanto i valori $+1$ o -1 . Questo fatto è alla base della possibilità di scrivere algoritmi computazionali che risultino, qualora eseguiti al calcolatore, molto più veloci di algoritmi scritti per modelli in cui le variabili assumono valori reali o più valori interi. Vediamo in dettaglio come e perché.

Esiste banalmente una corrispondenza biunivoca fra l'insieme $S = \{-1; +1\}$ e l'insieme $\Lambda = \{0; 1\}$:

$$\lambda = \frac{1}{2}(s + 1) \quad (4.25)$$

con ovvio significato dei simboli.

I calcoli necessari all'esecuzione dell'algoritmo di Metropolis prevedono di dover sommare un piccolo numero di termini (6 nel caso puro e 7 nel caso aleatorio) di prodotti fra due variabili (gli spin nel caso puro e gli spin e i campi random nel caso aleatorio). In base alla scelta effettuata per la distribuzione dei campi random, tutti i termini da sommare cui si è appena accennato risultano pure variabili che assumono i soli valori $+1$ o -1 , esattamente come gli spin s_i e i campi h_i . L'osservazione fondamentale che sta alla base del multispin coding è che la corrispondenza (4.25) ci permette di esprimere le moltiplicazioni fra le nostre variabili microscopiche come operazioni logiche fra variabili booleane: questa circostanza è ciò che ha imposto la particolare scelta del disordine.

Siano a e b due variabili booleane, cioè due variabili che possono assumere soltanto due valori ($+1$ o -1 oppure 1 o 0), e interpretiamli come vero V e falso F . Poiché tali valori saranno rappresentati con 0 e 1 , per aderire all'uso che di tali variabili faremo nello sviluppo del codice, preferiamo riferirci a queste come *variabili binarie*. Ricordiamo nelle Tabelle 4.1, 4.2, 4.3, 4.4 le definizioni di alcuni operatori logici elementari.

a	b	a AND b
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Tabella 4.1: Tavola di verità per l'operatore AND.

a	b	a OR b
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

Tabella 4.2: Tavola di verità per l'operatore OR.

L'operatore logico AND corrisponde al connettivo logico del linguaggio comune noto come *congiunzione*; l'operatore OR al connettivo *disgiunzione inclusiva* (o, brevemente, *disgiunzione*); l'operatore XOR al connettivo *disgiunzione esclusiva*; l'operatore NOT al connettivo *negazione*. Le tavole di verità riportate altro non sono che la loro naturale definizione *vero-funzionale* [52]. Come è noto tutti i connettivi della logica classica sono esprimibili mediante due soli connettivi:

a	b	$a \text{ XOR } b$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Tabella 4.3: Tavola di verità per l'operatore XOR.

a	$\text{NOT } a$
0	1
1	0

Tabella 4.4: Tavola di verità per l'operatore NOT.

la negazione e uno a scelta fra congiunzione e disgiunzione. Una osservazione molto importante per i nostri fini è che la moltiplicazione fra due variabili di spin, interpretate come variabili binarie, corrisponde a un particolare operatore logico, come esemplificato dalla Tabella 4.5.

s_a	s_b	$s_a \cdot s_b$	a	b	$a \text{ XOR } b$	$\text{NOT}(a \text{ XOR } b)$
-1	-1	+1	0	0	0	1
-1	+1	-1	0	1	1	0
+1	-1	-1	1	0	1	0
+1	+1	+1	1	1	0	1

Tabella 4.5: Esempio di equivalenza fra operazioni algebriche su variabili aritmetiche e operazioni logiche su variabili binarie.

Vediamo adesso come sfruttare queste considerazioni per eseguire un passo dell'algoritmo di Metropolis utilizzando le operazioni logiche anziché le operazioni aritmetiche. Sia s_i la variabile di spin che dobbiamo decidere di cambiare, h_i il corrispondente campo random e s_j , dove $j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, le variabili di spin prime vicine di s_i . In accordo con quanto visto fin ora, interpretiamo queste variabili come variabili binarie: in queste otto variabili risiede tutta l'informazione necessaria per calcolare il valore di ΔE . La (4.24) può essere riscritta come

$$\Delta E = 2 \left(\sum_{j \in V(i)} p_j + p_7 \right) \quad (4.26)$$

dove $p_j = \text{NOT}(s_i \text{ XOR } s_j)$ con $j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ e $p_7 = \text{NOT}(s_i \text{ XOR } h_i)$ sono variabili binarie con un ovvio significato. La conoscenza delle variabili p_a , con $a = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$, ci fornisce il valore ΔE ma, per decidere se cambiare o meno lo spin, abbiamo naturalmente bisogno del numero random generato dall'algoritmo. Ricordando quanto visto nel paragrafo precedente, risulta che, ai fini del confronto tra r e $e^{-\beta \Delta E}$, basta sapere in quale segmento dell'intervallo $[0, 1]$ il numero cada, e questa informazione può essere codificata in tre variabili binarie, che indichiamo con r_k , dove $k = 1, 2, 3$. Pertanto nelle dieci variabili p_a e r_k

risiede tutta l'informazione necessaria per eseguire il passo dell'algoritmo. Supponiamo adesso di riuscire a trovare una variabile binaria, che indicheremo con `check`, che assuma il valore 1 se lo spin s_i deve essere cambiato e il valore 0 altrimenti. In questa situazione, detto s'_i il valore dello spin dopo il passo dell'algoritmo, possiamo scrivere:

$$s'_i = \text{check XOR } s_i. \quad (4.27)$$

Il compito che dobbiamo svolgere è allora quello di determinare il valore binario di `check` in funzione del valore binario delle grandezze p_a e r_k . In linea di principio abbiamo $2^{10} = 1024$ possibili situazioni e, per ciascuna di esse, dobbiamo produrre un valore binario da interpretare come “cambio lo spin” oppure “non cambio lo spin”: in pratica dobbiamo redigere una tavola di verità con 10 variabili. Il metodo per realizzare questo si basa sulla procedura standard della *riduzione in forma normale* delle tavole di verità [52] e la soluzione è rappresentata dalle righe $237 \div 248$ del listato (vedi Sezione 4.4.2).

4.4.1 Implementazione del multispin coding

Fin ora ci siamo preoccupati di codificare le operazioni necessarie al passo algoritmico in termini di variabili binarie e operazioni logiche anziché di variabili numeriche e operazioni aritmetiche. Vediamo adesso perché, nell'esecuzione su un calcolatore, questo approccio risulta più efficiente.

Cominciamo col definire un array `field[x][y][z]` di tipo `int` che rappresenti una realizzazione del campo aleatorio e un array `spin[x][y][z]` del medesimo tipo che rappresenti una configurazione del reticolo magnetico. Le variabili x, y, z assumono i valori $0 \leq x, y, z \leq L - 1$ e designano la posizione della variabile nel reticolo. Fissiamo adesso una variabile di spin e processiamola con l'algoritmo di Metropolis. Durante il procedimento il calcolatore esegue un piccolo numero di operazioni algebriche sulle precedenti variabili e al termine si attua la scelta. A questa procedura corrisponderà un certo tempo di esecuzione. Un analogo procedimento è realizzabile qualora le precedenti operazioni vengano eseguite sulle variabili mediante operazioni logiche, come spiegato nel precedente paragrafo. Per fare questo occorre reinterpretare la variabile `spin[x][y][z]`: non più il contenitore di un valore intero (+1 o -1) codificato in un `int`, ma un valore binario (0 o 1).

A questo punto è necessaria una considerazione tecnica sul modo di implementare l'utilizzo di variabili binarie nel linguaggio di programmazione adottato (il linguaggio C). In diversi linguaggi di programmazione le variabili che assumono due soli valori interpretabili come vero e falso vengono definite di tipo `boolean`, il falso F è indicato con 0 mentre il vero V è indicato con 1 e gli operatori logici, indicati con opportune stringhe, sono implementati in maniera conforme alle tavole di verità della logica. In questo contesto le variabili sono vere e proprie variabili logiche, più che variabili binarie. Volgiamo ora la nostra attenzione all'architettura che realizza sul calcolatore la rappresentazione di una variabile numerica (si considera in questo caso un numero naturale, che corrisponde al tipo `unsigned int`): tale tipo di variabile è rappresentato da una successione contigua di 32 (o 64) bits. Sui moderni calcolatori queste variabili sono soggette a normali operazioni aritmetiche eseguite mediante le regole del codice binario. Sono però implementate anche alcune operazioni che permettono di agire su tali

variabili in modo da modificarle indipendentemente dal fatto che poi possano essere interpretate come numeri. Queste operazioni sono note come “operazioni bit a bit”, e in effetti sono più vicine alla modalità di funzionamento di un calcolatore di quanto non lo siano le operazioni algebriche (si dice che sono più “a basso livello”). Queste operazioni di cui abbiamo parlato prendono le variabili (dichiarate nel codice come) intere ed eseguono sui loro singoli bit le operazioni logiche precedentemente descritte. Per questo motivo non è necessario cambiare tipo di variabile quando dalle operazioni algebriche si decide di passare alle operazioni logiche.

In definitiva possiamo vedere una variabile intera o come un numero su cui fare operazione aritmetiche o come una schiera di variabili binarie su cui fare operazioni logiche agendo in parallelo: proprio questo parallelismo è quello che renderà più efficiente il nostro codice. Infatti ci accorgiamo che è possibile processare in parallelo ben 32 (o 64) realizzazioni del sistema magnetico (in presenza di altrettante realizzazioni del campo aleatorio, estendendo la medesima interpretazione a `field[x][y][z]`), semplicemente estendendo a tutti i bits della schiera le considerazioni che abbiamo svolto per una generica variabile binaria. Poiché le operazioni bit a bit su interi hanno un tempo di esecuzione confrontabile con quelle algebriche, risulta un notevole guadagno nelle prestazioni dell’algoritmo.

4.4.2 Listato

Esibiamo qui di seguito il listato del codice che abbiamo descritto e che è stato utilizzato per le nostre simulazioni. Questo programma ha una struttura generale essenzialmente semplice. Tralasciando la spiegazione degli aspetti più prettamente “di programmazione”, diciamo qualche parola sugli aspetti rilevanti per la fisica.

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>

#define L X
#define T Y
#define NB 32
#define NR 3500
#define seed 24101980
#define size 300
#define T_campionamento 40
#define T_termalizzazione 600
#define FILENAME1 "lengthLXTY.dat"
#define FILENAME2 "magneLXTY.dat"

FILE *fp_c, *fp_m;
unsigned long long int mol=16807, mod=2147483647, number;
unsigned int mask[NB], field[L][L][L], spin[L][L][L], corr[NB][L][L][L];
double prob[4], co[L], si[L];
```

```

int mag[NB];

void StartLattice();
void StartField();
void correlation();
void magnetisation();
void MonteCarloSweep();
double genrand();

main()
{
    double duepi=6.2831853071796;
    time_t inizio, fine;
    int x, y, z, i, j, k;

    time(&inizio);
    number=seed;
    masck[0]=1;
    for(i=1;i<NB;i++)
    {
        masck[i]=masck[i-1]*2;
    }
    for(i=0;i<L;i++)
    {
        co[i]=cos(duepi*(double)i/(double)L);
        si[i]=sin(duepi*(double)i/(double)L);
    }
    prob[0]=exp(-2.0/(double)T);
    prob[1]=exp(-6.0/(double)T);
    prob[2]=exp(-10.0/(double)T);
    prob[3]=exp(-14.0/(double)T);
    fp_c=fopen(FILENAME1,"w");
    fp_m=fopen(FILENAME2,"w");
    for(k=0;k<NR;k++)
    {
        StartField();
        StartLattice();
        for(i=0;i<T_termalizzazione;i++)
        {
            MonteCarloSweep();
        }
        for(i=0;i<T_campionamento;i++)
        {
            for(j=0;j<size;j++)
            {
                MonteCarloSweep();
            }
            correlation();
        }
    }
}

```

```
        magnetisation();
    }
}
fclose(fp_c);
fclose(fp_m);
time(&fine);
printf("La simulazione risulta di %f secondi. \n", difftime(fine,inizio));
}
```

```
/* definizione delle funzioni */
```

```
void StartLattice()
{
    unsigned int help;
    int i, x, y, z;

    help=1;
    for(x=0;x<L;x++)
    {
        for(y=0;y<L;y++)
        {
            for(z=0;z<L;z++)
            {
                spin[x][y][z]=0;
                for(i=0;i<NB;i++)
                {
                    if(genrand(>0.5) spin[x][y][z]=spin[x][y][z]^(help<<i);
                }
            }
        }
    }
}
```

```
void StartField()
{
    unsigned int help;
    int i, x, y, z;

    help=1;
    for(x=0;x<L;x++)
    {
        for(y=0;y<L;y++)
        {
            for(z=0;z<L;z++)
            {
                field[x][y][z]=0;
                for(i=0;i<NB;i++)
                {
```

```

        if(genrand()>0.5) field[x][y][z]=field[x][y][z]^(help<<i);
    }
}
}
}

void correlation()
{
    double help, help_cos, help_sin, fur_cos[NB], fur_sin[NB];
    int x, y, z, i;

    for(i=0;i<NB;i++)
    {
        fur_cos[i]=0.0;
        fur_sin[i]=0.0;
    }
    for(x=0;x<L;x++)
    {
        for(y=0;y<L;y++)
        {
            for(z=0;z<L;z++)
            {
                for(i=0;i<NB;i++)
                {
                    corr[i][x][y][z]=(spin[x][y][z]&masck[i])>>i;
                    help_cos=co[x]*(double)(2*(int)corr[i][x][y][z]-1);
                    help_sin=si[x]*(double)(2*(int)corr[i][x][y][z]-1);
                    fur_cos[i]+=help_cos;
                    fur_sin[i]+=help_sin;
                }
            }
        }
    }
    for(i=0;i<NB;i++)
    {
        help=(fur_cos[i]*fur_cos[i]+fur_sin[i]*fur_sin[i])/(double)(L*L*L);
        fprintf(fp_c, "%f \n", help);
    }
}

void magnetisation()
{
    double m[NB];
    int i, x, y, z;

    for(i=0;i<NB;i++)
    {

```

```

    mag[i]=0;
}
for(x=0;x<L;x++)
{
    for(y=0;y<L;y++)
    {
        for(z=0;z<L;z++)
        {
            for(i=0;i<NB;i++)
            {
                mag[i]+=(spin[x][y][z]&masck[i])>>i;
            }
        }
    }
}
for(i=0;i<NB;i++)
{
    m[i]=(double)(2*mag[i]-L*L*L)/(double)(L*L*L);
    fprintf(fp_m, "%f \n", m[i]);
}
}

void MonteCarloSweep()
{
    unsigned int p1, p2, p3, p4, p5, p6, p7;
    unsigned int l1, l2, l3, l4, a1, a2, a3, h1, h2, r1, r2, r3;
    unsigned int app, check, metropolis;
    double r;
    int x, lnx, rnx, y, lny, rny, z, lnz, rnz;

    app=0; app=~app;
    for(x=0;x<L;x++)
    {
        lnx=x-1;
        if(x==0) lnx=L-1;
        rnx=x+1;
        if(rnx==L) rnx=0;
        for(y=0;y<L;y++)
        {
            lny=y-1;
            if(y==0) lny=L-1;
            rny=y+1;
            if(rny==L) rny=0;
            for(z=0;z<L;z++)
            {
                lnz=z-1;
                if(z==0) lnz=L-1;
                rnz=z+1;
                if(rnz==L) rnz=0;
            }
        }
    }
}

```

```

r=genrand();
r1=0; r2=0; r3=0;
if(r<prob[0]) {r2=app;
if(r<prob[1]) {r2=0; r1=app;
if(r<prob[2]) {r2=app;
if(r<prob[3]) {r3=app; }}}

p1=spin[x][y][z]^spin[lx][y][z];
p2=spin[x][y][z]^spin[rnx][y][z];
p3=spin[x][y][z]^spin[x][lly][z];
p4=spin[x][y][z]^spin[x][rny][z];
p5=spin[x][y][z]^spin[x][ly][lz];
p6=spin[x][y][z]^spin[x][y][rnz];
p7=spin[x][y][z]^field[x][y][z];

237  l1=(p1&p2)|((p1^p2)&p3);
      l2=(p1^p2)^p3;
      l3=(p4&p5)|((p4^p5)&p6);
      l4=(p4^p5)^p6;
      a1=(l1^l3)&(l2^l4);
      a2=((l1&l2)&(l3^l4))|(l2&l3&l4)|(l1&~l2&l3);
      a3=a1&p7;
      h1=~(l1|l3|l4|p7)|(~(l1|l2|l3)&(l4^p7));
      h2=~((l1|l3)|(l2^(l4^p7))|((l1^l3)&~(l2|l4|p7)));
      metropolis=(~(h1|h2)&(r1|r2))|((r1&r2)&(h1^h2))|(r1&~r2&~h1&h2);
      check=metropolis|a2|a3|r3;
248  spin[x][y][z]=check^spin[x][y][z];
      }
    }
  }
}

double genrand()
{
  double result;

  number=(number*mol)%mod;
  result=(double)number/(double)mod;
  return(result);
}

```

Come già detto le variabili che identificano i momenti magnetici reticolari sono istanziate dalle variabili `spin[x][y][z]` e quelle che identificano i campi aleatori dalle variabili `field[x][y][z]`. Il programma inizializza quindi una schiera di 32 realizzazioni del disordine in maniera casuale e altrettanti reticoli (sempre in maniera casuale, ciò che corrisponde a uno stato di alta temperatura). Passa poi a termalizzare il sistema e a campionare le osservabili descritte in Sezione 3.4. La funzione che esegue l'aggiornamento del reticolo in un passo dell'algoritmo (cui

ci riferiremo come funzione di aggiornamento) è la funzione `MonteCarloSweep()` mentre le funzioni che si occupano di misurare la magnetizzazione media e la trasformata di Fourier a impulso minimo (cui ci riferiremo come funzioni di campionamento) sono rispettivamente `magnetisation()` e `correlation()`.

4.5 Simulazioni al calcolatore

Passiamo adesso a descrivere quali verifiche sono state messe in atto per accertare il corretto funzionamento del codice e quali parametri per i tempi di decorrelazione sono stati scelti.

4.5.1 Verifica del codice

La prima cosa di cui ci siamo accertati è che le tre principali funzioni del codice (`MonteCarloSweep()`, `magnetization()`, `correlation()`) non contenessero errori.

Al fine di controllare le funzioni di campionamento è stato scritto un codice utilizzando la logica del multispin coding, ma questa volta studiando il modello di Ising puro. In questo caso le cose rimangono qualitativamente le stesse, ma si ha una semplificazione dei calcoli poiché le variabili p_a sono solamente sei e le variabili r_k sono solamente due. Per quanto riguarda le funzioni di campionamento, osserviamo che esse operano esclusivamente sulle variabili reticolari `spin` e quindi sono del tutto indipendenti dalle variabili dei campi aleatori `field`. Ne segue che, per testare il loro corretto funzionamento, è sufficiente controllare che forniscano i risultati corretti nel caso del modello di Ising puro. A questo scopo sono stati utilizzati i risultati sugli sviluppi asintotici ad alta temperatura presenti in letteratura [53]. Effettuando alcune simulazioni ad alta temperatura, sono state campionate le grandezze della magnetizzazione e della correlazione con cui si sono calcolate la suscettività e la lunghezza di correlazione corrispondenti.¹ I risultati sono esposti nelle Tabelle 4.6, 4.7.

T	CODICE	SVILUPPO ANALITICO
10	2.183(2)	2.182(1)
15	1.598(2)	1.5976(1)
20	1.399(1)	1.39928(1)

Tabella 4.6: Confronto dei dati per la suscettività χ ottenuti con il codice in “logica multispin coding” nel modello puro. Il reticolo utilizzato ha $L = 8$. Gli errori nella prima colonna sono quelli statistici e nella seconda derivano dal troncamento dello sviluppo.

Eseguito il controllo sulle funzioni di campionamento, passiamo alla verifica della funzione di aggiornamento. Per prima cosa è stato scritto un ulteriore codice, molto più semplice ed elementare del precedente, utilizzando la logica più intuitiva che fa uso delle operazioni algebriche e delle variabili numeriche, che

¹La Ref.[53] fornisce gli sviluppi per le grandezze χ e $\mu_2 = \sum_x x^2 \langle s_0 s_x \rangle_c$, dove “c” sta per “componente connessa”. Al fine di ottenere gli sviluppi asintotici per ξ abbiamo fatto uso della formula

$$\xi = \left[\frac{1}{2d} \frac{\mu_2}{\chi} \right]^{1/2}.$$

T	CODICE	SVILUPPO ANALITICO
10	0.470(3)	0.469(1)
15	0.329(3)	0.3268(2)
20	0.263(4)	0.2648(1)

Tabella 4.7: Confronto dei dati per la lunghezza di correlazione ξ ottenuti con il codice in logica “multispin coding” nel modello puro. Il reticolo utilizzato ha $L = 8$. Gli errori nella prima colonna sono quelli statistici e nella seconda derivano dal troncamento dello sviluppo.

simulasse l’evoluzione del modello di Ising in campo aleatorio. Questo codice ha il vantaggio di poter essere invocato in fase di esecuzione con un campo random identicamente nullo, pur senza modificare nessuna parte delle sue funzioni, riducendosi così al modello di Ising puro. Dopo aver testato il codice relativamente al modello puro mediante il calcolo della suscettività, abbiamo introdotto i campi aleatori e siamo passati alla verifica relativa alle alte temperature mediante il confronto con i risultati analitici degli sviluppi asintotici in presenza di disordine [54]. Tutti questi risultati sono riportati nella Tabella 4.8.

T	LIBERO	ANALITICO	ALEATORIO	ANALITICO
10	2.181(6)	2.182(1)	2.13(1)	2.132(2)
15	1.592(5)	1.5976(1)	1.59(1)	1.586(1)
20	1.397(4)	1.39928(1)	1.389(8)	1.3944(1)

Tabella 4.8: Confronto dei dati per la suscettività χ ottenuti con il codice in “logica numerica” nel caso in cui i campi h_i vengono inizializzati a 0 (prima metà della tabella) e nel caso in cui vengono posti ± 1 in maniera casuale (seconda metà). Il reticolo utilizzato ha $L = 6$.

Siamo ora in grado di procedere alla verifica della correttezza della funzione di aggiornamento del nostro codice principale. Per prima cosa si eseguono simulazioni ad alte temperature per verificare che la grandezza calcolata risulti in accordo con gli sviluppi asintotici (e ovviamente anche con i risultati del codice in “logica numerica”), poi si eseguono alcune simulazioni a temperature più basse per vedere che i due codici (quello in “logica numerica” e quello in “logica multispin coding”) forniscano gli stessi valori.² I risultati sono esposti nella Tabella 4.9.

4.5.2 Tempi di correlazione

L’ultima cosa da fare prima di procedere alla fase di campionamento dei dati è stabilire quali siano il tempo di termalizzazione e il tempo di decorrelazione. In una simulazione Monte Carlo ci sono due fondamentali aspetti da tenere in considerazione.

- Se la catena di Markov parte da una distribuzione di probabilità α che non coincide con la sua distribuzione stazionaria π allora esiste un transiente

²Questo è fatto per assicurarsi che non vi siano “piccoli” errori di programmazione che in regime di alta temperatura si medino a zero ma che nel regime critico acquistino rilevanza.

T	CODICE DI PROVA	CODICE PRINCIPALE
3.9	31.0(8)	31.56(15)
4.0	28.8(7)	29.72(13)
4.5	18.6(1)	18.57(6)
10	2.13(1)	2.133(7)
15	1.59(1)	1.587(5)
20	1.389(8)	1.396(4)

Tabella 4.9: Confronto dei risultati ottenuti per la suscettività χ con il codice di prova e con il codice del listato di Sezione 4.4.2. Il reticolo utilizzato ha $L = 6$.

iniziale in cui i dati non riflettono le caratteristiche della distribuzione π . Questo transiente è noto come *tempo di termalizzazione*.

- Una volta raggiunto l'equilibrio, la catena di Markov fornisce dati correlati, come abbiamo visto in Sezione 4.2.1. Il tempo dopo il quale due stati possono essere considerati indipendenti è detto *tempo di autocorrelazione all'equilibrio*.

Per stimare il tempo di termalizzazione abbiamo proceduto come segue. Fissati un valore del lato del reticolo e della temperatura (nella zona critica) si è misurata la suscettività. Abbiamo poi calcolato la media “a blocchi” di questa grandezza e si è correttamente osservato che essa partiva da un valore iniziale nullo per stabilizzarsi attorno a un valore finale. Quando le fluttuazioni attorno a questo valore risultavano comprese all'interno delle barre di errore, abbiamo identificato il tempo di termalizzazione con il numero di aggiornamenti reticolari (*sweeps*) compiuti dal programma fino a quel momento.

Poichè questo valore è, con buona approssimazione, anche dell'ordine di grandezza del tempo di autocorrelazione all'equilibrio, abbiamo adottato il seguente criterio standard per la scelta dei parametri delle simulazioni. Una simulazione dura complessivamente due (o tre) volte il tempo di termalizzazione e il tempo di autocorrelazione viene stabilito in base al numero di campionamenti “termici” che si vogliono eseguire. La scelta che abbiamo adottato è stata infine determinata dalla decisione di privilegiare la media sul disordine piuttosto che la media termica, e dunque i parametri utilizzati sono quelli esibiti nella seguente tabella.

L	AUTOCORRELAZIONE	TERMALIZZAZIONE
6	200	600
8	300	2000
10	400	6000
12	400	16000
16	12000	120000
20	25000	500000

Tabella 4.10: Tempo di autocorrelazione all'equilibrio e tempo di termalizzazione per il codice del listato di Sezione 4.4.2.

Il numero di samples relativi al disordine che è stato generato nelle presenti simulazioni è $32 \cdot 3500 = 112000$ per tutti i reticoli L studiati.

Capitolo 5

Analisi dei dati

In questo capitolo finale mostreremo i risultati ottenuti con le simulazioni, daremo dei limiti sui parametri del modello e trarremo le nostre conclusioni.

5.1 Cumulante U_4 e lunghezza ξ_*

Cominciamo con l'analisi del cumulante U_4 e della lunghezza di correlazione ridotta ξ_* . A questi due parametri fenomenologici sarà applicato il metodo dell'incrocio descritto in Sezione 2.5. I risultati ottenuti sono riportati nelle Tabelle in fondo al capitolo mentre i relativi grafici sono riportati nelle Figure 5.1, 5.2.

Come si osserva dai grafici, all'aumentare dei valori di L il punto di incrocio fra due reticoli tende ad arretrare in maniera "vistosa". Questo è il sintomo del fatto che le correzioni al riscaldamento sono estremamente rilevanti per questo modello. Eseguiamo adesso un fit di questi dati usando lo sviluppo

$$R(L, T) = R^* + a(T - T_c)L^{1/\nu} + b(T - T_c)^2L^{2/\nu} + cL^{-\omega}. \quad (5.1)$$

Le ragioni di questa posizione sono le seguenti. I primi due termini costituiscono un normale sviluppo lineare in un intorno sufficientemente piccolo del punto critico; ma, a causa delle correzioni prima menzionate, i nostri dati potrebbero corrispondere a una zona in cui il solo termine lineare non è sufficiente: ne segue che dobbiamo aggiungerne uno quadratico in $T - T_c$. L'ultimo invece rende conto in maniera diretta delle prime correzioni al riscaldamento.

Per quanto riguarda la lunghezza di correlazione ridotta il fit ha prodotto un valore del χ^2 tale da renderlo inattendibile, mentre per il cumulante U_4 il risultato è riportato in Tabella 5.1. Il valore dell'esponente ν non è compatibile con quello di [39]. Proviamo allora a eliminare dal fit quei punti che riteniamo siano non significativi per lo sviluppo, poiché troppo "lontani" dalla regione critica. Le nuove stime per i parametri sono riportate in Tabella 5.2. Vediamo quindi che la temperatura critica subisce un marcato arretramento, ma l'errore sull'esponente ν risulta troppo grande per consentirci di trarre alcuna conclusione.

La conseguenza principale di queste analisi è che le correzioni al riscaldamento appaiono effettivamente fortissime. Inoltre, seguendo ciò che suggeriscono le precedenti due figure, siamo indotti a porre il limite $T_c < 3.9$ per la temperatura critica del modello nel limite $L \rightarrow \infty$.

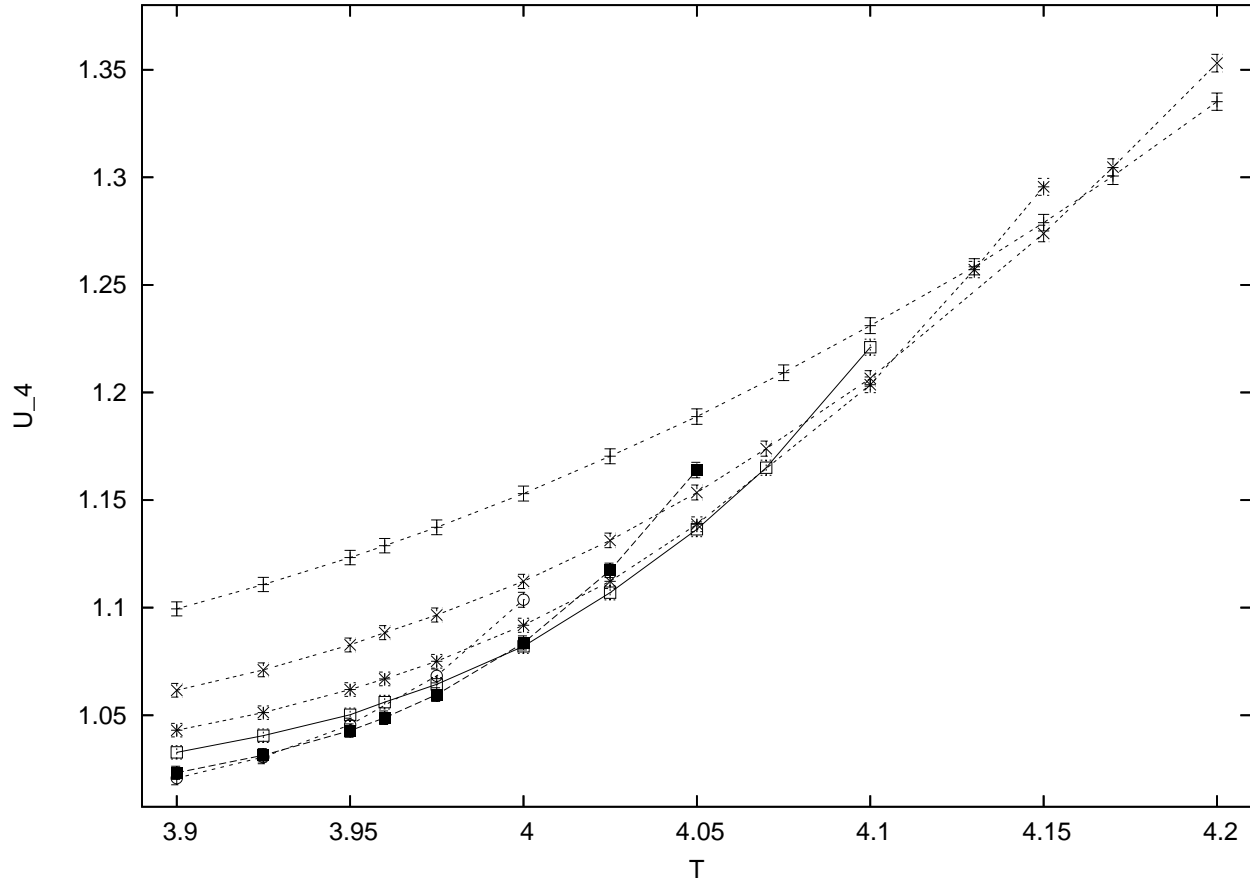


Figura 5.1: Cumulante U_4 . Legenda dei simboli per i reticoli: + per $L = 6$; \times per $L = 8$; * per $L = 10$; \square per $L = 12$; \blacksquare per $L = 16$; \circ per $L = 20$.

PARAMETRO	VALORE	ERRORE
U_4	1.033	0.013
T_c	3.946	0.018
ν	2.07	0.18
ω	2.45	0.24

Tabella 5.1: Risultati del fit eseguito sui dati relativi a U_4 secondo lo sviluppo (5.1) utilizzando tutti i dati ottenuti. ($\chi^2/\text{ndf} = 1.8$)

5.2 Cumulanti U_d e U_1

Cerchiamo adesso di verificare la nostra supposizione sulla locazione della temperatura critica sfruttando i dati relativi ai cumulanti U_{22}, U_d, U_1 . I risultati ottenuti sono riportati nelle Tabelle in fondo al capitolo mentre i relativi grafici sono rappresentati nelle Figure 5.3, 5.4, 5.5.

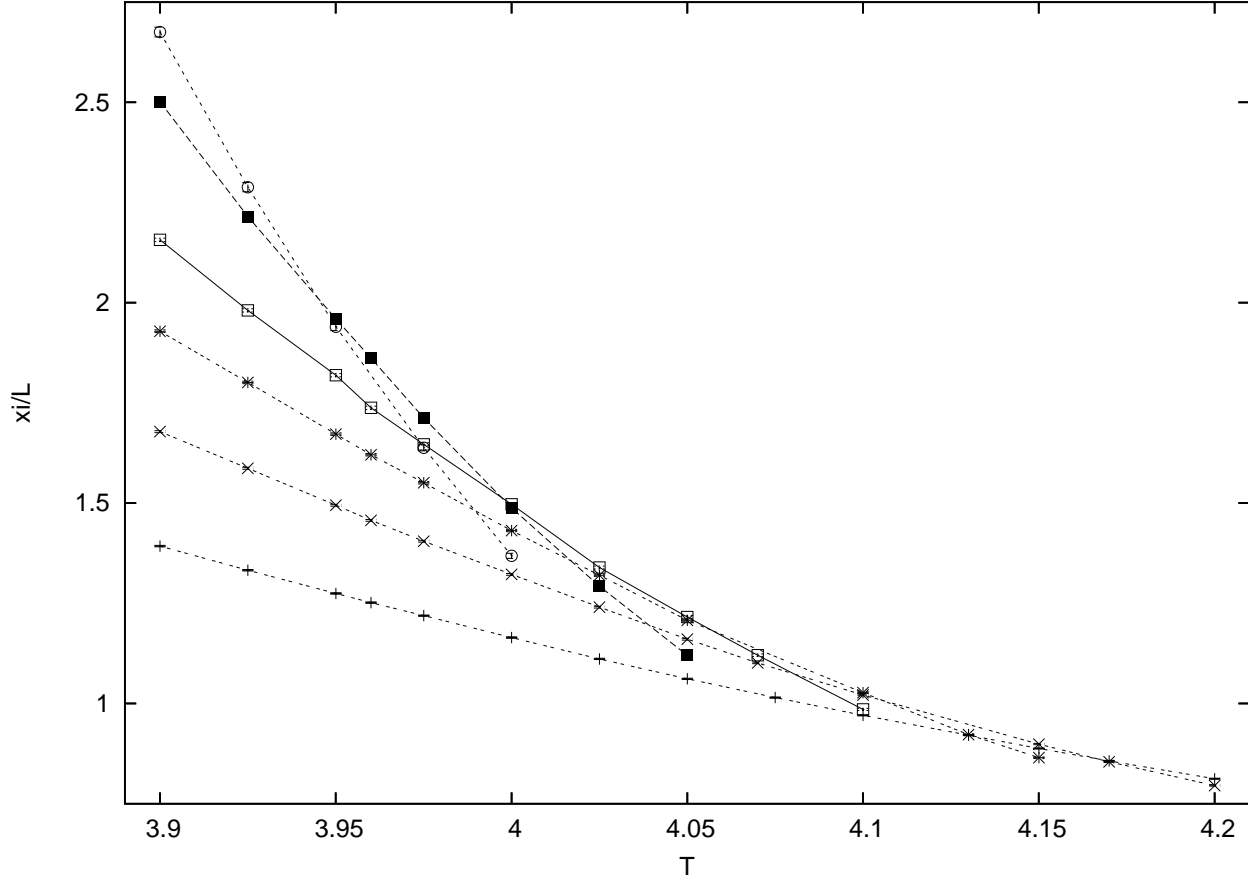


Figura 5.2: Lunghezza di correlazione ridotta ξ_* . Legenda dei simboli per i reticoli: + per $L = 6$; \times per $L = 8$; * per $L = 10$; \square per $L = 12$; \blacksquare per $L = 16$; \circ per $L = 20$.

PARAMETRO	VALORE	ERRORE
U_4	1.037	0.011
T_c	3.76	0.16
ν	2.84	0.95
ω	1.84	0.28

Tabella 5.2: Risultati del fit eseguito sui dati relativi a U_4 secondo lo sviluppo (5.1) utilizzando solo i dati per temperature $T \leq 4.1$. ($\chi^2/\text{ndf} = 1.3$)

Se la transizione di fase fosse realmente del secondo ordine e governata da un punto fisso a temperatura nulla allora, in conformità con le (3.28, 3.29), avremmo $U_d = 0$ e $U_1 = 1$. In effetti si vede che le linee relative ai vari reticoli tendono a collapsare verso i valori esatti 0 e 1 al decrescere della temperatura; ma soprattutto è al crescere di L , cioè quando le correzioni al riscaldamento tendono a farsi meno marcate, che i cumulanti si comportano in maniera conforme alla

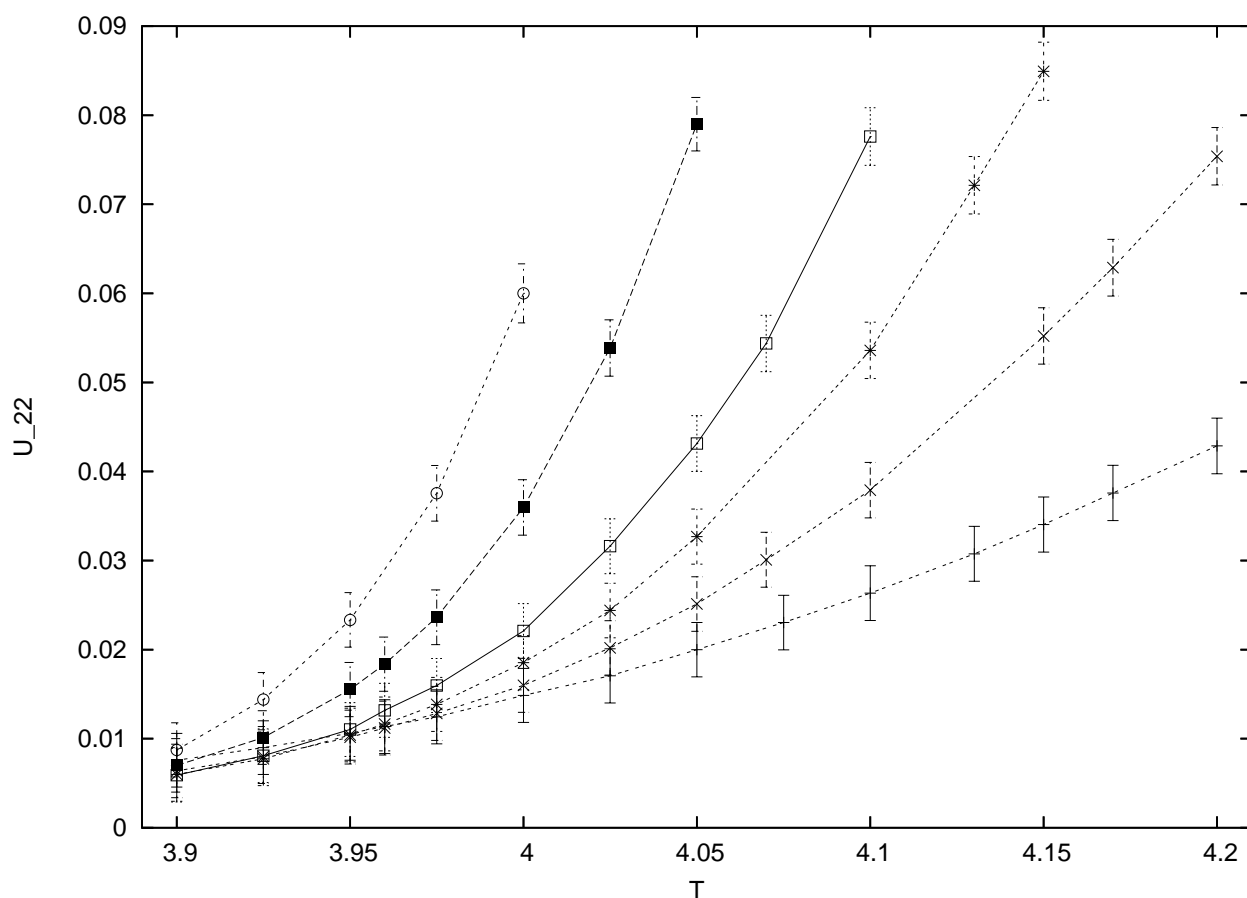


Figura 5.3: Cumulante U_{22} . Legenda dei simboli per i reticoli: + per $L = 6$; × per $L = 8$; * per $L = 10$; □ per $L = 12$; ■ per $L = 16$; ○ per $L = 20$.

teoria.

Questa immagine conforta l'intuizione del paragrafo precedente di una temperatura critica $T_c < 3.9$ e risulta anche compatibile con una transizione continua governata da un punto a $T = 0$.

5.3 Conclusioni

L'analisi del modello di Ising in campo aleatorio esposta in questo lavoro ha dovuto fronteggiare le tipiche difficoltà connesse con lo studio dei sistemi disordinati, in particolare quelli soggetti a casualità smorzata. In questo contesto la duplice natura delle medie da eseguire conduce a un notevole allungamento della durata delle simulazioni numeriche, dal momento che molte delle osservabili dipendono sensibilmente dalla realizzazione dell'ambiente aleatorio, e dunque si è costretti a generarne un ampio numero di repliche al fine di ottenere risultati

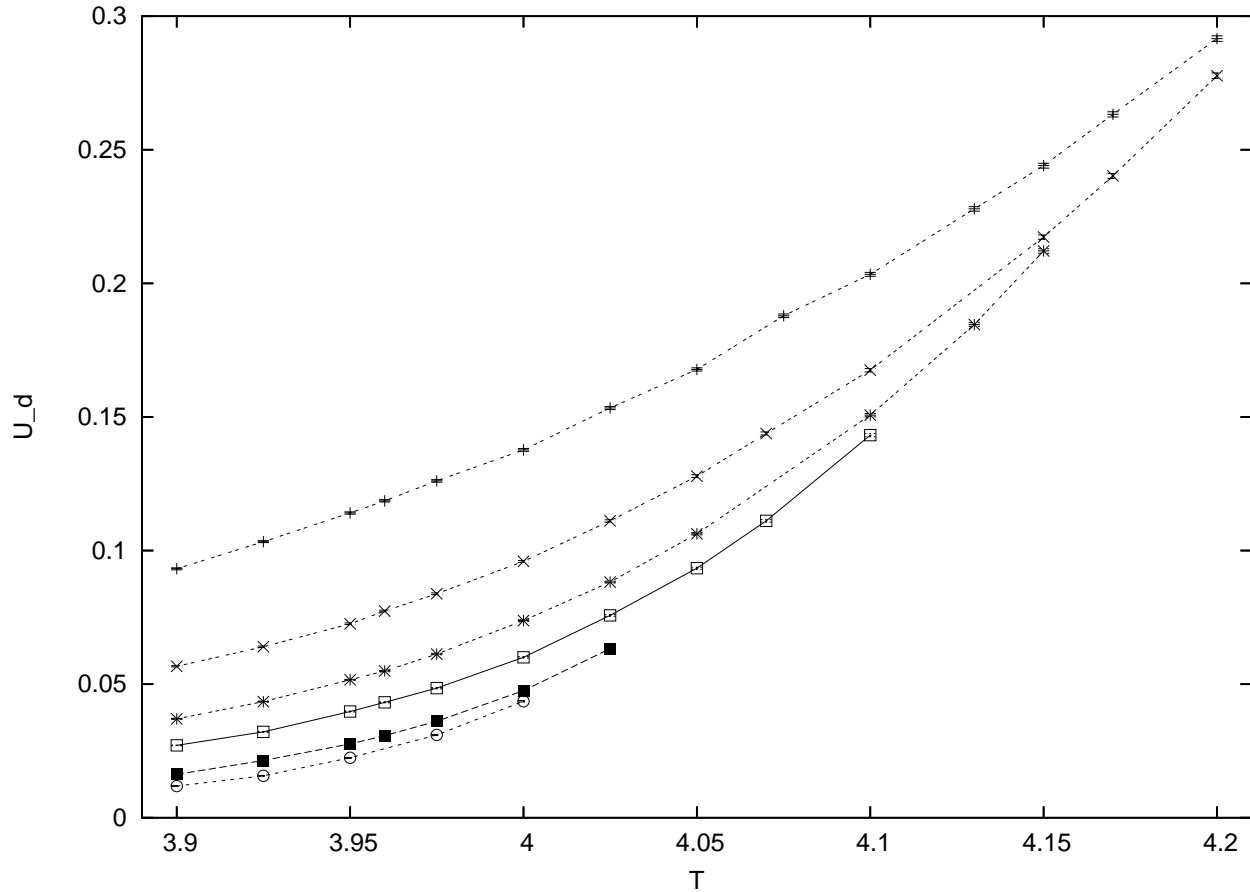


Figura 5.4: Cumulante U_d . Legenda dei simboli per i reticoli: + per $L = 6$; × per $L = 8$; * per $L = 10$; □ per $L = 12$; ■ per $L = 16$; ○ per $L = 20$.

attendibili.¹

Inoltre, nel caso particolare di questo modello, i tempi di termalizzazione divergono in modo esponenziale quando ci avviciniamo verso la zona critica, e questo pone un limite ancora più stringente sulla durata delle simulazioni. Come conseguenza i risultati che possiamo ottenere sono ridotti a reticoli di dimensioni relativamente limitate.² Questo fatto, di per sé non drammatico, risulta per noi assai negativo poiché, come abbiamo visto, le correzioni al riscaldamento sono molto marcate e affliggono ogni tentativo di analisi dei dati proprio perché i reticoli su cui abbiamo potuto campionare sono di dimensioni modeste.

Dai nostri risultati è possibile trarre le seguenti conclusioni. Da un punto di vista qualitativo vediamo che i tempi di termalizzazione del sistema sono mol-

¹Nella letteratura consultata, a parte gli studi deterministici svolti a $T = 0$, il numero di samples relativi ai campi aleatori oscillava da 100 a 5000. Nelle nostre simulazioni tale valore è 112000.

²In effetti il reticolo massimo da noi studiato è $L = 20$ mentre in letteratura si arriva ad analizzare anche reticoli con $L = 32$.

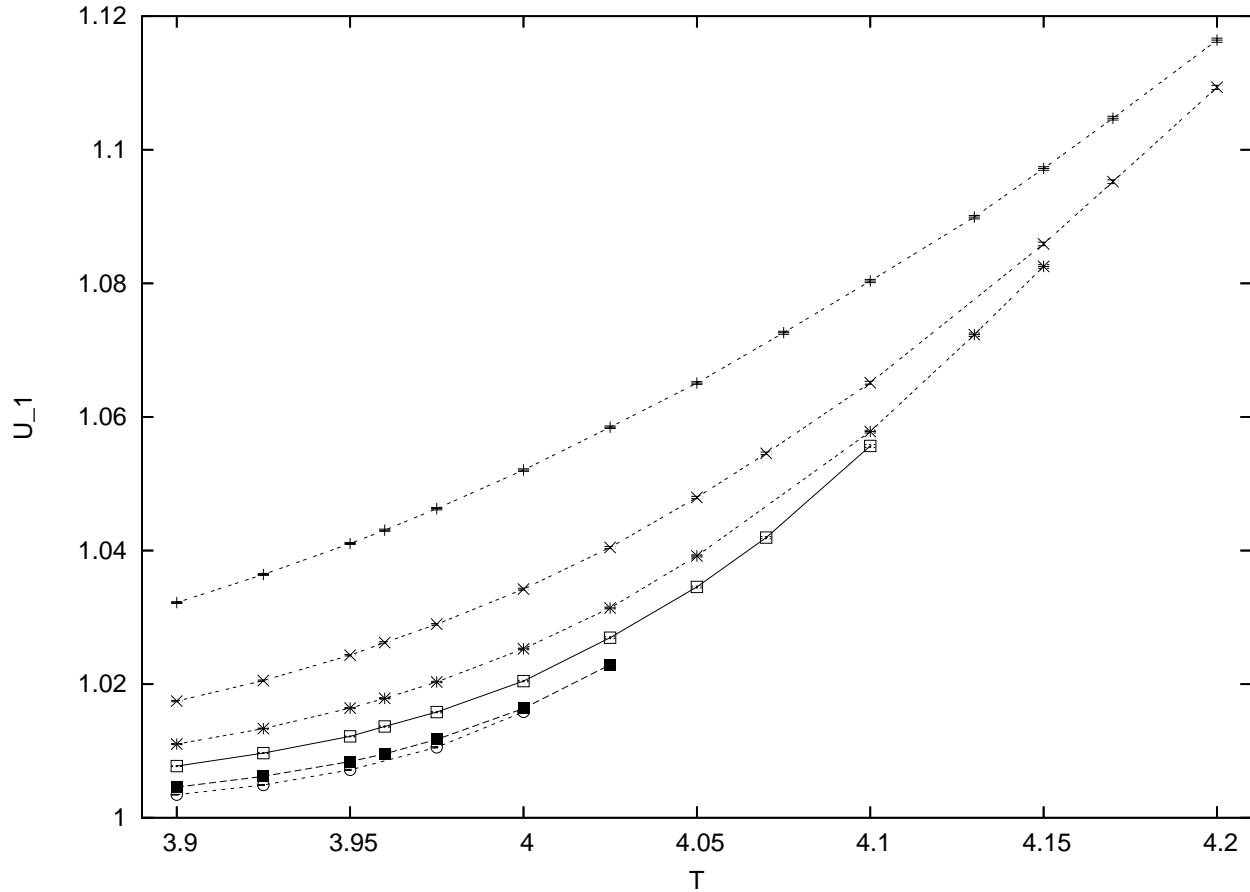


Figura 5.5: Cumulante U_1 . Legenda dei simboli per i reticoli: + per $L = 6$; \times per $L = 8$; * per $L = 10$; \square per $L = 12$; \blacksquare per $L = 16$; \circ per $L = 20$.

to lunghi e le correzioni al riscaldamento estremamente forti. Da un punto di vista quantitativo possiamo affermare che la transizione risulta effettivamente compatibile con una continua governata da un punto fisso a $T = 0$ purché si abbia $T_c(h = 1) < 3.9$. Per quanto riguarda l'esponente ν invece la scarsa stabilità del fit non consente affermazioni conclusive sulla classe di universalità cui appartiene il modello.

5.4 Risultati delle osservabili

Raccogliamo qui di seguito tutti i risultati ottenuti con le nostre simulazioni numeriche.

L	T	U_4	ERRORE
6	3.900000	1.099450	0.003289
6	3.925000	1.110782	0.003323
6	3.950000	1.123318	0.003362
6	3.960000	1.128815	0.003379
6	3.975000	1.137349	0.003405
6	4.000000	1.153032	0.003453
6	4.025000	1.170367	0.003507
6	4.050000	1.188819	0.003564
6	4.075000	1.209209	0.003628
6	4.100000	1.231064	0.003696
6	4.130000	1.258413	0.003781
6	4.150000	1.278908	0.003845
6	4.170000	1.300604	0.003913
6	4.200000	1.335118	0.004020
8	3.900000	1.061669	0.003174
8	3.925000	1.071111	0.003203
8	3.950000	1.082679	0.003239
8	3.960000	1.088419	0.003256
8	3.975000	1.096586	0.003282
8	4.000000	1.112221	0.003330
8	4.025000	1.131264	0.003390
8	4.050000	1.153536	0.003459
8	4.070000	1.173915	0.003524
8	4.100000	1.206561	0.003627
8	4.150000	1.273892	0.003841
8	4.170000	1.304659	0.003939
8	4.200000	1.353076	0.004095
10	3.900000	1.043087	0.003118
10	3.925000	1.051226	0.003143
10	3.950000	1.061944	0.003176
10	3.960000	1.066927	0.003192
10	3.975000	1.075107	0.003217
10	4.000000	1.091858	0.003270
10	4.025000	1.112264	0.003334
10	4.050000	1.138791	0.003419
10	4.100000	1.203604	0.003627
10	4.130000	1.257112	0.003801
10	4.150000	1.295565	0.003927
12	3.900000	1.032775	0.003087
12	3.925000	1.040512	0.003111
12	3.950000	1.050241	0.003141
12	3.960000	1.056124	0.003160
12	3.975000	1.064396	0.003186
12	4.000000	1.082052	0.003242
12	4.025000	1.106962	0.003322
12	4.050000	1.136445	0.003418
12	4.070000	1.165064	0.003512
12	4.100000	1.221053	0.003697

Tabella 5.3: Valori del cumulante U_4 per reticoli $L = 6, 8, 10, 12$.

L	T	U_4	ERRORE
16	3.900000	1.023303	0.003095
16	3.925000	1.031455	0.003085
16	3.950000	1.042887	0.003122
16	3.960000	1.048850	0.003142
16	3.975000	1.059601	0.003177
16	4.000000	1.083656	0.003257
16	4.025000	1.117366	0.003370
16	4.050000	1.164000	0.003600
20	3.900000	1.020815	0.003084
20	3.925000	1.030581	0.003085
20	3.950000	1.045562	0.003135
20	3.975000	1.068309	0.003213
20	4.000000	1.103686	0.003459

Tabella 5.4: Valori del cumulante U_4 per reticoli $L = 16, 20$.

L	T	ξ_*	ERRORE
16	3.900	2.501598	0.007850
16	3.925	2.214805	0.007594
16	3.950	1.959694	0.006839
16	3.960	1.862050	0.006534
16	3.975	1.712719	0.006262
16	4.000	1.488299	0.005469
16	4.025	1.292610	0.004721
16	4.050	1.120000	0.004000
20	3.900	2.675590	0.012110
20	3.925	2.288380	0.011266
20	3.950	1.939884	0.009188
20	3.975	1.637960	0.007630
20	4.000	1.368631	0.006400

Tabella 5.5: Valori della lunghezza di correlazione ridotta ξ_* per reticoli $L = 16, 20$.

L	T	ξ_*	ERRORE
6	3.900	1.393043	0.001814
6	3.925	1.332800	0.001778
6	3.950	1.274810	0.001734
6	3.960	1.251949	0.001725
6	3.975	1.219261	0.001696
6	4.000	1.164660	0.001664
6	4.025	1.111285	0.001615
6	4.050	1.061629	0.001570
6	4.075	1.014955	0.001532
6	4.100	0.970642	0.001485
6	4.130	0.921188	0.001429
6	4.150	0.887946	0.001399
6	4.170	0.856845	0.001362
6	4.200	0.812452	0.001304
8	3.900	1.678398	0.002408
8	3.925	1.587150	0.002366
8	3.950	1.494762	0.002317
8	3.960	1.456974	0.002305
8	3.975	1.404912	0.002266
8	4.000	1.322363	0.002208
8	4.025	1.240499	0.002153
8	4.050	1.160609	0.002071
8	4.070	1.101398	0.002015
8	4.100	1.021563	0.001916
8	4.150	0.898901	0.001757
8	4.170	0.854650	0.001696
8	4.200	0.795448	0.001601
10	3.900	1.928966	0.003254
10	3.925	1.801315	0.003182
10	3.950	1.672291	0.003095
10	3.960	1.620792	0.003084
10	3.975	1.551059	0.003026
10	4.000	1.431703	0.002928
10	4.025	1.320034	0.002808
10	4.050	1.207974	0.002662
10	4.100	1.027075	0.002342
10	4.130	0.922694	0.002179
10	4.150	0.864851	0.002052
12	3.900	2.156946	0.004252
12	3.925	1.980977	0.004179
12	3.950	1.819122	0.004100
12	3.960	1.737999	0.004129
12	3.975	1.646841	0.003974
12	4.000	1.497170	0.003756
12	4.025	1.339466	0.003557
12	4.050	1.216067	0.003228
12	4.070	1.120687	0.003022
12	4.100	0.985374	0.002706

Tabella 5.6: Valori della lunghezza di correlazione ridotta ξ_* per reticoli $L = 6, 8, 10, 12$.

L	T	U_{22}	ERRORE
6	3.900	0.007588	0.003011
6	3.925	0.008989	0.003015
6	3.950	0.010607	0.003020
6	3.960	0.011355	0.003023
6	3.975	0.012451	0.003026
6	4.000	0.014854	0.003033
6	4.025	0.017056	0.003040
6	4.050	0.019989	0.003049
6	4.075	0.023037	0.003059
6	4.100	0.026345	0.003069
6	4.130	0.030757	0.003083
6	4.150	0.034050	0.003093
6	4.170	0.037586	0.003105
6	4.200	0.042870	0.003122
8	3.900	0.006382	0.003007
8	3.925	0.007989	0.003012
8	3.950	0.010175	0.003019
8	3.960	0.011197	0.003022
8	3.975	0.012838	0.003027
8	4.000	0.015996	0.003037
8	4.025	0.020198	0.003050
8	4.050	0.025120	0.003066
8	4.070	0.030090	0.003081
8	4.100	0.037904	0.003106
8	4.150	0.055216	0.003161
8	4.170	0.062883	0.003186
8	4.200	0.075389	0.003227
10	3.900	0.005985	0.003006
10	3.920	0.007744	0.003012
10	3.950	0.010411	0.003020
10	3.960	0.011654	0.003024
10	3.975	0.013854	0.003031
10	4.000	0.018533	0.003046
10	4.025	0.024396	0.003064
10	4.050	0.032681	0.003091
10	4.100	0.053599	0.003158
10	4.130	0.072139	0.003219
10	4.150	0.084931	0.003261
12	3.900	0.005905	0.003006
12	3.925	0.008087	0.003013
12	3.950	0.011037	0.003022
12	3.960	0.013175	0.003029
12	3.975	0.015971	0.003038
12	4.000	0.022104	0.003058
12	4.025	0.031608	0.003089
12	4.050	0.043139	0.003127
12	4.070	0.054372	0.003163
12	4.100	0.077607	0.003241

Tabella 5.7: Valori del cumulante U_{22} per per reticoli $L = 6, 8, 10, 12$.

L	T	U_{22}	ERRORE
16	3.900	0.007000	0.003000
16	3.925	0.010130	0.003020
16	3.950	0.015521	0.003038
16	3.960	0.018369	0.003048
16	3.975	0.023631	0.003065
16	4.000	0.035960	0.003107
16	4.025	0.053859	0.003168
16	4.050	0.079000	0.003000
20	3.900	0.008742	0.003047
20	3.925	0.014393	0.003035
20	3.950	0.023333	0.003066
20	3.975	0.037552	0.003116
20	4.000	0.059999	0.003313

Tabella 5.8: Valori del cumulante U_{22} per reticoli $L = 16, 20$.

L	T	U_d	ERRORE
16	3.900	0.016221	0.000122
16	3.925	0.021406	0.000149
16	3.950	0.027636	0.000177
16	3.960	0.030719	0.000191
16	3.975	0.036100	0.000214
16	4.000	0.047567	0.000265
16	4.025	0.063254	0.000334
20	3.900	0.011872	0.000106
20	3.925	0.015722	0.000126
20	3.950	0.022422	0.000156
20	3.975	0.031002	0.000196
20	4.000	0.043611	0.000264

Tabella 5.9: Valori del cumulante U_d per reticoli $L = 16, 20$.

L	T	U_d	ERRORE
6	3.900	0.093175	0.000361
6	3.925	0.103332	0.000397
6	3.950	0.114055	0.000433
6	3.960	0.118631	0.000449
6	3.975	0.126077	0.000474
6	4.000	0.137681	0.000518
6	4.025	0.153367	0.000571
6	4.050	0.167800	0.000622
6	4.075	0.187859	0.000690
6	4.100	0.203397	0.000746
6	4.130	0.227882	0.000830
6	4.150	0.244037	0.000886
6	4.170	0.263250	0.000954
6	4.200	0.291606	0.001052
8	3.900	0.056700	0.000239
8	3.925	0.064027	0.000266
8	3.950	0.072588	0.000298
8	3.960	0.077374	0.000315
8	3.975	0.083827	0.000339
8	4.000	0.095931	0.000382
8	4.025	0.111110	0.000437
8	4.050	0.127839	0.000498
8	4.070	0.143820	0.000556
8	4.100	0.167489	0.000644
8	4.150	0.217306	0.000830
8	4.170	0.240206	0.000916
8	4.200	0.277728	0.001053
10	3.900	0.037027	0.000173
10	3.920	0.043459	0.000196
10	3.950	0.051626	0.000227
10	3.960	0.054898	0.000241
10	3.975	0.061268	0.000263
10	4.000	0.073797	0.000309
10	4.025	0.088208	0.000364
10	4.050	0.106294	0.000433
10	4.100	0.150690	0.000601
10	4.130	0.184601	0.000735
10	4.150	0.212113	0.000840
12	3.900	0.027103	0.000137
12	3.925	0.032128	0.000158
12	3.950	0.039768	0.000186
12	3.960	0.043185	0.000199
12	3.975	0.048500	0.000221
12	4.000	0.060069	0.000266
12	4.025	0.075757	0.000327
12	4.050	0.093390	0.000395
12	4.070	0.111138	0.000466
12	4.100	0.143182	0.000595

Tabella 5.10: Valori del cumulante U_d per reticoli $L = 6, 8, 10, 12$.

L	T	U_1	ERRORE
6	3.900	1.032205	0.000131
6	3.925	1.036423	0.000142
6	3.950	1.041060	0.000153
6	3.960	1.043047	0.000157
6	3.975	1.046268	0.000164
6	4.000	1.052049	0.000179
6	4.025	1.058467	0.000193
6	4.050	1.065074	0.000207
6	4.075	1.072603	0.000224
6	4.100	1.080345	0.000240
6	4.130	1.089908	0.000259
6	4.150	1.097190	0.000274
6	4.170	1.104725	0.000289
6	4.200	1.116410	0.000312
8	3.900	1.017457	0.000092
8	3.925	1.020531	0.000102
8	3.950	1.024346	0.000113
8	3.960	1.026234	0.000118
8	3.975	1.028963	0.000126
8	4.000	1.034238	0.000141
8	4.025	1.040463	0.000157
8	4.050	1.047950	0.000176
8	4.070	1.054555	0.000192
8	4.100	1.065125	0.000218
8	4.150	1.085902	0.000267
8	4.170	1.095219	0.000289
8	4.200	1.109342	0.000320
10	3.900	1.011021	0.000071
10	3.925	1.013346	0.000079
10	3.950	1.016420	0.000090
10	3.960	1.017884	0.000096
10	3.975	1.020325	0.000103
10	4.000	1.025270	0.000119
10	4.025	1.031391	0.000137
10	4.050	1.039188	0.000160
10	4.100	1.057810	0.000208
10	4.130	1.072307	0.000246
10	4.150	1.082543	0.000271
12	3.900	1.007726	0.000058
12	3.925	1.009679	0.000067
12	3.950	1.012171	0.000077
12	3.960	1.013653	0.000083
12	3.975	1.015812	0.000091
12	4.000	1.020455	0.000108
12	4.025	1.026960	0.000129
12	4.050	1.034551	0.000151
12	4.070	1.041940	0.000173
12	4.100	1.055669	0.000211

Tabella 5.11: Valori del cumulante U_1 per reticoli $L = 6, 8, 10, 12$.

L	T	U_1	ERRORE
16	3.900	1.004594	0.000062
16	3.925	1.006199	0.000073
16	3.950	1.008412	0.000086
16	3.960	1.009569	0.000092
16	3.975	1.011719	0.000103
16	4.000	1.016360	0.000125
16	4.025	1.022911	0.000152
20	3.900	1.003441	0.000054
20	3.925	1.004904	0.000065
20	3.950	1.007176	0.000079
20	3.975	1.010550	0.000098
20	4.000	1.015844	0.000127

Tabella 5.12: Valori del cumulante U_1 per reticoli $L = 16, 20$.

Ringraziamenti

Ringrazio il professor Ettore Vicari per avermi proposto lo studio di un argomento molto interessante e per avermi lasciato lavorare con la massima libertà e nella massima tranquillità.

Ringrazio i dottori Vincenzo Alba, Claudio Bonati, Daniele Gaggero e Vittorio Lippi per l'inestimabile "ausilio informatico" che mi hanno fornito.

Infine ringrazio i miei amici per il loro affetto: a loro dedico queste pagine.

Bibliografia

- [1] L.E.Reichl, *A modern course in statistical physics* (Arnold, 1980)
- [2] R.K.Pathria, *Statistical mechanics* (Pergamon Press, 1996)
- [3] K.Huang, *Meccanica Statistica*, (Zanichelli, 1997) PARTE B
- [4] S.-K.Ma, *Modern theory of critical phenomena*, (Advanced Books Classics, 1976) Capp.5, 6, 10
- [5] J.Cardy *Scaling and renormalisation in statistical physics*, (Cambridge University press, 1996) Capp.3, 8
- [6] K.Huang, *Meccanica Statistica*, (Zanichelli, 1997) Capp.14, 16, 18
- [7] L.S.Ornstein, F.Zernicke, *Proc. Sect. Sci. K. med. Akad. Wet.* **17** (1914) 793
- [8] E.Ising, *Z. Phys.* **31** (1925) 253
- [9] L.Onsager, *Phys. Rev.* **65** (1944) 117
- [10] B.Kaufmann, *Phys. Rev.* **76** (1949) 1232
- [11] C.N.Yang, *Phys. Rev.* **85** (1952) 809
- [12] H.W.Blote, E.Luijten, J.R.Heringa *J. Phys. A* **28** (1995) 6289
- [13] A.Pelissetto, E.Vicari, *Critical phenomena and renormalization-group theory* arXiv:cond-mat/0012164v6 (2002)
- [14] K.G.Wilson, *Phys. Rev. B* **4** (1971) 3174
- [15] K.G.Wilson, *Phys. Rev. B* **4** (1971) 3184
- [16] K.G.Wilson, J.Kogut, *Phys. Rep.* **12** (1974) 77
- [17] V.Privman, *Finite-size scaling and numerical simulation of statistical systems* (World Scientific, 1990)
- [18] L.P.Kadanoff, *Physics* **2** (1966) 263
- [19] H.G.Bellestero, L.A.Fernández, V.Martín-Mayor, A.Muñoz Sudupe, G.Parisi, J.J.Ruiz-Lorenzo, *J. Phys. A* **32** (1999)
- [20] T.Netterman, *Spin glasses and random fields*, ed. A.P.Young (World Scientific, 1998)

- [21] A.T.Ogielski, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1251
- [22] Y.Imry, S.-K.Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35** (1975) 1399
- [23] S.Fishman, A.Aharony, *J. Phys. C* **12** (1979) 729
- [24] I.B.Ferreira, A.R.King, V.Jaccarino, *Phys. Rev. B* **43** (1991) 10797
- [25] C.A.Ramos, A.R.King, V.Jaccarino, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 5483
- [26] U.A.Leitão, W.Kleemann, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 8696
- [27] D.P.Belanger, Z.Slanič, *J. Magn. Magn. Mater.* **186** (1998) 65
- [28] J.F.Fernandez, *Europhys. Lett.* **5** (1988) 129
- [29] P.G.de Gennes, *J. Phys. Chem.* **88** (1984) 6469
- [30] D.P.Belanger, *Experimental characterization of the Ising model in disordered antiferromagnets* arXiv:cond-mat/0009029v1 (2000)
- [31] G.Grinstein, S.-K.Ma, *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982) 685
- [32] G.Grinstein, S.-K.Ma, *Phys. Rev. B* **28** (1983) 2588
- [33] G.Parisi, N.Sourlas, *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979) 744
- [34] J.Villain, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 1543
- [35] J.Z.Imbry, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1747
- [36] J.Z.Imbry, *Comm. Math. Phys.* **98** (1985) 145
- [37] M.Schwartz, *Phys. Lett.* **107A** (1985) 199
- [38] J.Bricmont, A.Kupiainen, *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 1829
- [39] D.S.Fisher, A.A.Middelton, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 134411
- [40] N.G.Fytas, A.Malakias, *Eur. Phys. J. B* **61** (2008) 111
- [41] M.Mézard, A.P.Yuong, *Europhys. Lett.* **18** (1992) 653
- [42] M.Mézard, R. Monasson, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 7199
- [43] T.Schneider, E.Pytte, *Phys. Rev. B* **15** (1977) 1519
- [44] A.Aharony, *Phys. Rev. B* **18** (1978) 3318
- [45] A.J.Bray, M.A.Moore, *J. Phys. C* **18** (1985) L927
- [46] D.S.Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 416
- [47] A.Pelissetto, *Introduction to the Monte Carlo method*, Seminario di fisica teorica, Parma (1992)
- [48] A.Sokal, *Monte Carlo methods in statistical mechanics: foundations and new algorithms*, (1996)

- [49] L.M.Barone, E.Marinari, G.Organtini, F.Ricci-Tersenghi, *Programmazione scientifica*, (Pearson Education, 2006) Cap.19
- [50] N.Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.H.Teller, E.Teller *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087
- [51] M.Hasenbusch, F.Parisen Toldin, A.Pelissetto, E.Vicari, *J. Stat. Mech.* (2007) P02016
- [52] P.Odifreddi, *Il diavolo in cattedra*, (Einaudi, 2004) Cap.8
- [53] P.Burera, M.Comi, *A library of extended high-temperature expansions* arXiv:hep-lat/0204007v1 (2002)
- [54] M.Gofman, J.Adler, A.Aharony, A.B.Harris, M.Schwartz *Phys. Rev. B* **53** (1996) 6362