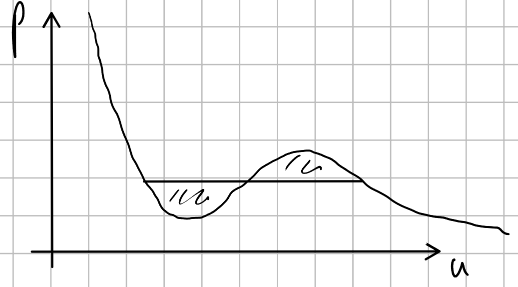
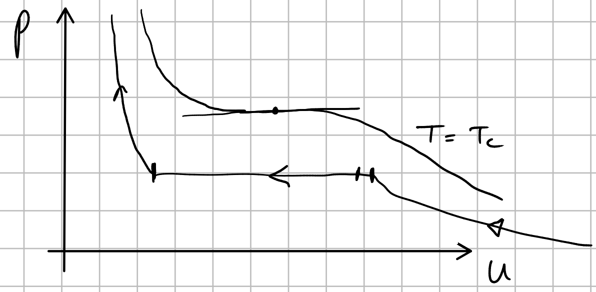
Teoria di Van Der Waals:





Per $T = T_c$ la funzione $u(p)$ ha derivata $+\infty$.

Definizione di Ehrenfest di transizione di fase:

quando troviamo un punto di non-analiticità di un potenziale termodinamico (entropia/energia libera/potenziale gran canonico).

Ora: per $T \to T_c$, la compressibilità isotermica

$$\chi := -\frac{\partial u}{\partial p} \sim |T - T_c|^{-\gamma}, \quad \text{con } \gamma = 1 \text{ (per teoria VdW)}.$$

Nell'esperimento per la transizione liquido-gas: $\gamma \approx 1.25$.

3.2 Modelli di gas sui reticoli:

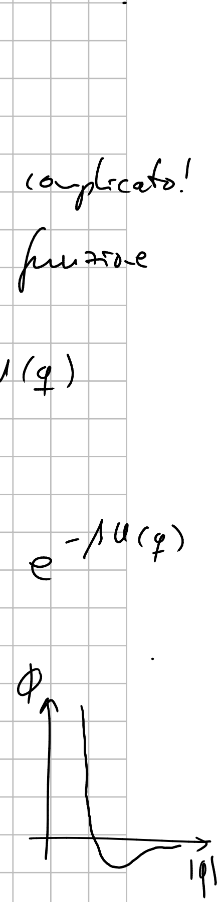
Sfortunatamente $H(p,q) = \sum_{i=1}^{N} p_i^2 + \sum_{i<j} \Phi(q_i - q_j)$ è troppo complicato!

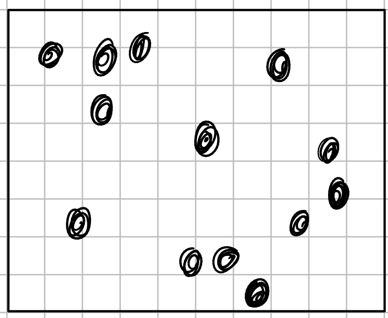
Cerchiamo un modello più semplice, iniziando dalla funzione di partizione canonica:

$$Z_N = \frac{1}{N!}\int dp\, dq\, e^{-\beta H(p,q)} = \frac{1}{N!}\int_{\mathbb{R}^{3N}} dp\, e^{-\beta |p|^2} \int_{\Lambda^N} dq\, e^{-\beta U(q)}$$

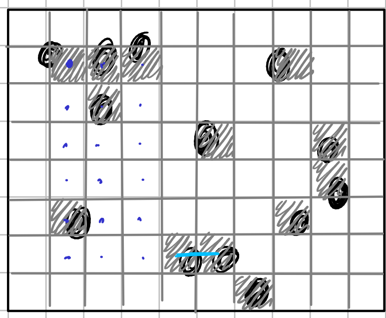
$$= \frac{1}{N!}\Big(\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-\beta p^2}}_{=\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}}\Big)^{3N} \int_{\Lambda^N} dq\, e^{-\beta U(q)} = \frac{1}{N!}\left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{3N/2} \int_{\Lambda^N} dq\, e^{-\beta U(q)}$$

Ipotesi:
- le particelle hanno un nucleo duro
- a distanze più lunghe c'è una forza attrattiva





configurazione q



Osservazione: • Ogni punto del reticolo è occupato da al massimo una particella.

• Se ci sono due particelle in due cellule direttamente vicini l'energia è abbassata per un $\varepsilon < 0$.
(solo interazione tra primi vicini, "nearest neighbour").

Scriviamo $\tau_i \in \{0,1\}$ per indicare se posizione $i \in \Lambda$ (adesso i punti del reticolo) è occupata.

$$\frac{1}{N!}\int_{\Lambda^N} dq\, e^{-\beta U(q)} \rightsquigarrow \sum_{(\tau_i)_{i\in\Lambda}} \delta\Big(N-\sum_{i\in\Lambda}\tau_i\Big)\exp\Big(\sum_{\langle i,j\rangle}\beta\varepsilon\tau_i\tau_j\Big)$$

notazione: primi vicini sul reticolo

per $\Lambda = \mathbb{Z}^2$:

$\sum_{\langle i,j\rangle}$ significa $\sum_{\substack{i,j\in\mathbb{Z}^2:\\ |i-j|=1}}$

Il fattore $\frac{1}{N!}$ non serve più:
nel integrale $\int_{\Lambda^2} dq$ conto 2 volte le configurazioni: $q=(x_1,x_2)$
e $q=(x_2,x_1)$.

Invece una configurazione $(\tau_i)_{i\in\Lambda}$ non contiene nessuna identificazione della particella, e lo scambio di due particelle viene contato solo una volta automaticamente.

Adesso andiamo dalla funzione di partizione canonica

$$Z_N = \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{3N/2}\sum_{(\tau_i)_{i\in\Lambda}}\delta\Big(N-\sum_{i\in\Lambda}\tau_i\Big)\exp\Big(\sum_{\langle i,j\rangle}\beta\varepsilon\tau_i\tau_j\Big)$$

alla funzione di partizione gran canonica per eliminare

$\delta(N - \sum_{i \in \Lambda} \tau_i)$:

$$\Xi(\mu, T, \Lambda) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta N \mu} Z_N(T, \Lambda)$$

$$= \sum_{(\tau_i)_{i\in\Lambda}} \sum_{N=0}^{\infty} e^{\left(\frac{3}{2}\log\left(\frac{\pi}{\beta}\right) + \beta\mu\right)N} \delta(N - \sum_{i\in\Lambda}\tau_i) \exp\left(\sum_{<i,j>} \beta \varepsilon \tau_i \tau_j\right)$$

$$= \sum_{(\tau_i)_{i\in\Lambda}} \exp\left(\left(\beta\mu + \frac{3}{2}\log\left(\frac{\pi}{\beta}\right)\right)\sum_{i\in\Lambda}\tau_i\right) + \sum_{<i,j>} \beta\varepsilon\tau_i\tau_j\Big)$$

$\underline{\tau} = (\tau_i)_{i\in\Lambda}$
$$= \sum_{\underline{\tau}} e^{-\beta H(\underline{\tau})}$$

dove $H(\tau) := -\sum_{<i,j>\in\Lambda\times\Lambda} \varepsilon \tau_i \tau_j - \sum_{i\in\Lambda} \hat{\mu} \tau_i$, $\hat{\mu} = -\mu + \frac{3}{2\beta}\log\left(\frac{\pi}{\beta}\right)$.

Questo si può ancora riscrivere in una forma più simmetrica:

3.3 Il modello di Ising

Invece di usare le variabili $\tau_i \in \{0, 1\}$ scriviamo

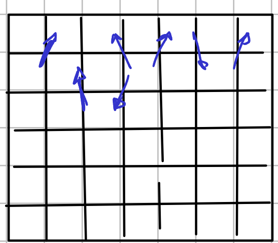
$\sigma_i = 2\tau_i - 1 \in \{-1, +1\}$.

Inseriamo questo nell'Hamiltoniana: il modello di Ising

$$\boxed{H(\underline{\sigma}) = -\sum_{<i,j>\in\Lambda\times\Lambda} J \sigma_i \sigma_j - \sum_{i\in\Lambda} h \sigma_i \quad \text{dove } \underline{\sigma} \in \{\pm 1\}^{\Lambda}}$$

(Si può ottenere J ed h da ε e $\hat{\mu}$.)

Interpretazione come sistema magnetico:



momenti magnetici delle spin

In un metallo ferromagnetico i spin hanno energia più bassa quando sono orientati per la stessa direzione.

Risultato: - a bassa temperatura: $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$

- ad alta temperatura: $\uparrow \downarrow \nearrow \searrow \swarrow \downarrow \uparrow \downarrow \rightarrow \swarrow$

Il modello di Ising è la versione classica:

$\sigma_i = +1$ significa spin $\uparrow$ nel punto $i \in \Lambda$

$\sigma_i = -1$ " " $\downarrow$ nel punto $i \in \Lambda$.

In $\Xi = \sum_{\underline{\sigma} \in \{\pm 1\}^\Lambda} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$, con $H(\underline{\sigma}) = -\sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in \Lambda} h \sigma_i$?

$J < 0$ implica che due spin con la stesso direzione hanno probabilità più alta di contribuire. $\to \sigma_i = \sigma_j = +1$
$\sigma_i = \sigma_j = -1$.

Invece $\sigma_i \sigma_j = -1$ ha meno peso in Ξ.

h viene interpretato come campo magnetico esterno, che crea una tendenza in una certa direzione.

3.4 La transizione ferromagnetica e la rottura di simmetria

Quando andiamo da temperatura alta ($T > T_c$) a temperatura bassa ($T < T_c$) il sistema preferisce l'orientazione parallela di tutti gli spin.

Ma quale direzione: $\sigma_i = +1$ $\forall i \in \Lambda$ o $\sigma_i = -1$ $\forall i \in \Lambda$?

Per $h = 0$, l'Hamiltoniana non ha nessuna preferenza:

Se definiamo una rappresentazione del gruppo $(\mathbb{Z}_2, \cdot)$ $= (\{\pm 1\}, \cdot)$ tramite

$$I(\pm 1)\underline{\sigma} := \pm \sigma_i \qquad \forall i = 1, \dots N,$$

l'Hamiltoniana è invariante: $H_{h=0}(I(\pm 1)\underline{\sigma}) = H_{h=0}(\underline{\sigma})$.

In particolare hanno lo stesso peso in Ξ.

Guardiamo la magnetizzazione

$$M_\Lambda(h) := \sum_{i\in\Lambda} \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}\in\{\pm1\}^\Lambda} \left(\sum_{i=\Lambda} \sigma_i \right) \exp\left(-\beta H_h(\underline{\sigma})\right).$$

Per ogni $\underline{\sigma}$ c'è anche $I(-1)\underline{\sigma}$ con lo stesso peso $e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$, allora $M_\Lambda = 0$ sempre.

<u>Idea:</u> Una qualsiasi piccola perturbazione della simmetria (per esempio $h>0$) spinge il sistema verso l'una o l'altra direzione.

<u>Dubbio:</u> Essendo una somma finita di funzioni continue anche $M_\Lambda(h)$ è continua,
allora se poi togliamo il campo esterno, $h \longrightarrow 0+$, troviamo $M_\Lambda(0) = 0$ come prima. Non realistico!

<u>Soluzione:</u> Dobbiamo ricordare il limite termodinamico!
Una serie infinita di funzioni continue non è necessariamente continua.
Allora $\lim_{h\to0} \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{M_h(\Lambda)}{|\Lambda|}$ può essere $\neq 0$.

$\Rightarrow$ <u>Rottura di simmetria:</u> anche se H è invariante rispetto una trasformazione, lo stato del sistema nel limite $\Lambda \to \infty$ non è necessariamente invariante.

Come qua: $H(I(\pm)\underline{\sigma}) = H(\underline{\sigma})$, ma per
$m := \lim_{h\to0} \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{M_\Lambda(h)}{|\Lambda|}$ possiamo avere $m > 0$,
e $I(-1)m = -m \neq m$. (solo per $m=0$).

$$\boxed{\text{La rottura di simmetria è possibile solo nel limite termodinamico.}}$$

La magnetizzazione m è un esempio di un <u>parametro d'ordine</u>.