UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BARI

Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
Corso di Dottorato in Fisica

Tesi di Dottorato

Aspetti statici e dinamici delle transizioni di fase: alcuni modelli e metodologie

Emilio N.M. Cirillo

Decimo ciclo

Indice

Introduzione

Lo studio degli aspetti sia statici che dinamici delle transizioni di fasi è uno degli argomenti di interesse della fisica contemporanea. Il comportamento di un sistema statistico al punto critico è intrinsecamente di difficile descrizione: il carattere cooperativo del fenomeno, l'effettiva interazione tra tutti i gradi di libertà del sistema, rende il problema molto complicato.

In Meccanica Statistica sono state sviluppate numerose tecniche per lo studio delle proprietà dei sistemi critici: il *Gruppo di Rinormalizzazione* ha permesso una comprensione molto profonda di ciò che avviene al punto critico ed è stato un utile strumento per lo studio dettagliato di alcuni sistemi particolari. D'altro canto approcci più naïf come la *Teoria di Campo Medio* o il *Metodo Variazionale a Cluster* (CVM), pur fornendo delle risposte più superficiali ed essendo basati su approssimazioni incontrollate, permettono di studiare il diagramma di fase di modelli notevolmente complicati ed hanno il pregio di permettere un controllo analitico del problema per mezzo di un insieme di equazioni in numero abbastanza ridotto. Ciò costituisce un grande vantaggio rispetto ad un'analisi puramente numerica, basata su simulazioni *Monte Carlo*, in cui i margini di miglioramento delle proprie misure sono legati soltanto alla possibilità di migliorare la potenza della macchina su cui si effettuano gli esperimenti numerici.

Il Monte Carlo è, a sua volta, divenuto una delle tecniche più usate in Meccanica Statistica (e non solo) grazie all'aumento della capacità di calcolo dei calcolatori nell'ultimo decennio. La sua versatilità e relativa facilità di applicazione lo rendono uno strumento adatto a qualsiasi problema, sia per l'analisi delle proprietà di equilibrio che per lo studio del comportamento dinamico di un modello. Il suo limite è che le transizioni di fase si osservano solo nel limite termodinamico, cioè quando il volume tende ad infinito, ed anche i calcolatori più potenti hanno grossi problemi quando il numero di gradi di libertà del sistema diventa dell'ordine di $10^6 - 10^7$.

Durante il dottorato di ricerca ho applicato alcuni dei metodi citati in precedenza a diversi problemi legati allo studio delle transizioni di fase in Meccanica Statistica. Il carattere eterogeneo della mia esperienza di dottorato si riflette sulla mia attività di ricerca che è stata condotta su tematiche diverse e con linguaggi differenti, pur essendo evidentemente incentrata sull'analisi delle trasizioni di fase nei modelli di spin. I linguaggi differenti, ma complementari, sono quelli della Fisica Matematica e della Fisica Teorica, il primo teso ad ottenere risultati rigorosi che permettano di fondare la Meccanica Statistica su solide basi matematiche; il secondo teso allo studio di modelli che descrivono le più svariate situazioni fisiche, ma che per la loro complessità intrinseca permettono solo l'uso di tecniche approssimate. In questo lavoro ho raccolto alcuni di questi lavori che mettono in luce i pregi, ma anche i limiti delle varie tecniche.

In particolare nel Capitolo 1 il Gruppo di Rinormalizzazione, più che un metodo per lo studio di un modello, è l'oggetto dello studio. Fin dalla metà degli anni settanta, si veda per esempio [CGa], la comunità scientifica si è posta il problema della corretta definizione delle trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione e in [G2, GP, Is] fu osservato per la prima volta che le trasformazioni del gruppo possono esibire delle "peculiarità", che a partire dalla pubblicazione di [EFS] sono note come "patologie" del gruppo di rinormalizzazione. In seguito il dibattito sul problema ha condotto ad una serie di lavori, per esempio [E1, EFK], in cui vengono esibiti ulteriori esempi di patologie del gruppo di rinormalizzazione cui fanno da controparte lavori in cui vengono dimostrati risultati positivi di due tipi: da un lato si mostra come in alcuni casi in cui si osserva un comportamento patologico questo possa essere opportunamente "curato" [MO4, MO5], dall'altro si cerca di dimostrare che nei casi di rilevanza fisica queste patologie non esistono [HK, BMO, CO2, Ke2]. Nel Capitolo 1 dopo una breve introduzione alla *Teoria di Dobrushin* per gli stati di volume infinito e alle idee fondamentali del Gruppo di Rinormalizzazione viene discusso il problema delle patologie e viene mostrato come nel caso del modello di Ising al punto critico il gruppo di rinormalizzazione non presenti alcun comportamento patologico [CO2].

Nel Capitolo 2 viene mostrato come il CVM permetta di ottenere notevoli informazioni sul diagramma di fase di alcuni modelli di superfici su reticolo, per i quali, a causa della loro complessità, esistono pochi risultati esatti. I modelli di superfici su reticolo sono stati sviluppati con l'intento di descrivere le proprietà delle membrane [Lip, NPW]. In biologia si distingue tra due tipi di membrane: le membrane fluide, costituite da un doppio strato di lipidi in cui si incastrano molecole di proteine e quelle rigide caratterizzate da una rete di proteine. Nel Capitolo 2 si studiano alcuni modelli di spin su reticolo che sono stati introdotti per la descrizione del comportamento sia delle membrane fluide che di quelle polimerizzate.

In particolare viene indagato il problema della transizione di *folding* di una superficie triangolata immersa in uno spazio bidimensionale e tridimensionale discreto: si utilizza il CVM per studiare il diagramma di fase di modelli di spin introdotti in [FG2, BFGG] per la descrizione di questo fenomeno e per stabilire l'ordine della transizione; l'aspetto interessante è che mentre modelli continui come quello introdotto in [KN] esibiscono una transizione critica, i modelli su reticolo suggeriscono che la transizione sia discontinua.

Per quanto riguarda i modelli di membrane fluide si mostra come il CVM possa essere utilizzato per descrivere in modo dettagliato il diagramma di fase della versione di Ising del modello ad otto vertici. In realtà si tratta di un modello dalle vaste applicazioni fisiche, che spaziano dalla meccanica statistica delle superfici [CCGM] alla teoria delle stringhe [SW]. Come modello di superfici il modello ad otto vertici presenta un diagramma di fase estremamente ricco che permette di spiegare molte delle fasi che si osservano in una miscela ternaria, per esempio una miscela di acqua, olio e surfatante.

Nel Capitolo 3 viene affrontato, mediante simulazioni Monte Carlo, lo studio della decomposizione spinodale in una fase *superantiferromagnetica*, cioè in una fase di bassa temperatura con periodicità uno, ovvero costituita da una successione di strisce di spin uno e meno uno larghe un passo reticolare. Quando un sistema viene raffreddato da una fase disordinata ad una ordinata, il processo di riordinamento non avviene istantaneamente, bensì tramite la crescita di domini ordinati delle due (o più) fasi in competizione. Si pensi, per esempio, al caso del modello di Ising ferromagnetico: se ad un certo istante il sistema viene portato dalla fase paramagnetica a quella ferromagnetica, il sistema deve riordinarsi tramite la crescita di domini di spin più e di spin meno a partire da una configurazione completamente disordinata.

Un problema analogo è quello della decomposizione spinodale nelle leghe binarie, problema studiato per molte decadi in metallurgia, dove gli stadi finali di crescita sono noti come "Ostwald ripening". La maniera più semplice di studiare questo problema è quella di considerare il modello di Ising interpretando spin più e meno come atomi di tipo A e B [MLK, RKLM] e considerando, però, una dinamica che conservi la magnetizzazione in modo da impedire la trasformazione di atomi di tipo A in atomi di tipo B.

Uno degli aspetti più interessanti di questo problema è che a tempi lunghi, cioè dopo la prima fase in cui si passa da una configurazione completamente disordinata ad una struttura ben definita di domini, la crescita delle regioni ordinate è caratterizzata da una sorta di invarianza di scala [Bat]: guardando i domini a tempi lunghi essi sembrano "statisticamente" simili a quelli osservati a tempi precedenti e la loro dimensione tipica $L(t)$ cresce con legge di potenza $L(t) \sim t^{\gamma}$. L'esponente di crescita γ risulta dipendere dalla dinamica del modello: nel caso di modelli con parametro d'ordine conservato (dinamiche di Kawasaki) $\gamma = \frac{1}{3}$ [LS, RKLM, MB], mentre per modelli con parametro d'ordine non conservato (dinamiche di Glauber) $\gamma = \frac{1}{2}$ [Lif, AC, HB].

Il caso del raffreddamento in una fase a strisce permette di porsi delle domande interessanti circa le proprietà di anisotropia del fenomeno di crescita. Nel Capitolo 3 si vedrà come per mezzo di simulazioni Monte Carlo sia possibile affrontare questo problema, misurare gli esponenti di crescita ed osservare un comportamento anisotropo nel senso che le correlazioni misurate lungo la direzione parallela ai domini risultano diverse da quelle misurate nella direzione trasversa.

Infine il Capitolo 4 è dedicato allo studio del comportamento metastabile di alcuni modelli di spin; questo studio viene condotto sia mediante simulazioni numeriche sia mediante la *teoria delle grandi deviazioni* che permette di ottenere dei risultati rigorosi nel limite di bassa temperatura. Lo schema che si segue per la definizione e lo studio degli stati metastabili è quello proposto in [CGOV], noto come *pathwise approach*, che si basa sulla convinzione che il fenomeno della metastabilità sia un fenomeno genuinamente dinamico, non interpretabile mediante la meccanica statistica degli stati di equilibrio [I, LR].

In particolare dopo una descrizione generale del tipo di risultati che possono essere ottenuti con il pathwise approach nel caso del modello di Ising bidimensionale, vengono discussi alcune situazioni fisicamente interessanti che ho affrontato durante il dottorato. In primo luogo si mostra come la scelta delle condizioni al bordo possa influenzare la vita media dello stato metastabile ed il meccanismo di uscita [CL], poi si studia il caso in cui sono presenti due stati metastabili in competizione. Questa situazione viene realizzata considerando il modello di Blume-Capel [CO2] e si mostra come modificando i parametri del modello venga modificata la traiettoria tipica che il sistema segue durante l'uscita dalla fase metastabile.

Il lavoro è organizzato nel modo seguente: ogni capitolo ha una sua introduzione al problema e nelle varie sezioni vengono esposti i risultati ottenuti sull'argomento con riferimento a lavori apparsi su riviste scientifiche che vengono allegati alla fine del capitolo stesso.

Ringraziamenti

Il dottorato di ricerca è stata per me un'esperienza molto stimolante sia a livello culturale che a livello scientifico, mi ha permesso di entrare in contatto con persone ed ambienti molto diversi tra loro e molto distanti da quelli cui ero abituato. Va quindi tutta la mia riconoscenza a chi ha reso possibile tutto ciò: in primo luogo ringrazio chi ha costantemente guidato il mio lavoro e ha suggerito molte delle mie scelte, E. Olivieri e G. Gonnella, M. Villani, il Gruppo Teorico, la sezione dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare e il Dipartimeno di Fisica di Bari.

Ringrazio, poi, tutti coloro con i quali ho collaborato durante questi anni, L. Bertini, J.L. Lebowitz, A. Pelizzola, E.R. Speer e S. Stramaglia, coloro con cui ho avuto molte discussioni utili ed interessanti, L. Angelini, A. Asselah, G. Benfatto, D. Caroppo, P. Cea, R. Cerf, D. Cosmai, N. Cufaro, G. Gallavotti, M. Lenci, M. Pellicoro, A. Polosa e I. Sardella, e gli istituti dove sono stato ospite per lunghi periodi, il Dipartimento di Matematica della II Università di Roma e il Mathematics Department della Rutgers University (NJ).

Ringrazio, infine, la mia famiglia e i miei amici.

Capitolo 1

Patologie del Gruppo di Rinormalizzazione

1.1 Introduzione

L'introduzione del gruppo di rinormalizzazione per lo studio dei fenomeni critici e per la caratterizzazione delle proprietà del punto critico risale ad un lavoro di Di Castro e Jona-Lasinio del 1969 [DJ]; ma la prima vera applicazione ad un modello concreto è apparsa nel lavoro di Wilson [Wi] del 1970. Dopo questi lavori pioneristici il gruppo di rinormalizzazione è stato uno degli strumenti fondamentali per lo studio delle proprietà critiche di numerosi modelli di Meccanica Statistica [NL1] e per la comprensione profonda del carattere universale dei fenomeni critici.

L'idea alla base della teoria del gruppo di rinormalizzazione è che se un sistema al punto critico viene guardato su una scala più grande di quella di partenza, integrando a livello microscopico alcuni gradi di libertà, le proprietà fisiche del sistema restano invariate.

Questa operazione viene effettuata trasformando il sistema di partenza (*sistema oggetto*) in uno nuovo sistema (*sistema immagine*) nel modo seguente: si considera un sistema definito su un reticolo quadrato finito $\Lambda \subset \mathbf{Z}^2$, ad ogni vertice del reticolo i è associata una variabile σ_i che assume valori in uno spazio finito e discreto S, per esempio $S := \{-1, +1\}$, ad ogni configurazione $\sigma \in \Omega_\Lambda := S^\Lambda$ viene associata l'energia $H_\Lambda(\sigma)$ e le proprietà di equilibrio del sistema a temperatura $1/\beta$ sono descritte dalla misura di Gibbs $\mu_{\Lambda,\beta}(\sigma)$.

Si considera, poi, un nuovo reticolo Λ' di passo più grande di Λ e ai suoi vertici vengono definite delle nuove variabili, dette variabili *rinormalizzate* o variabili *immagine* σ'_i $\forall i \in \Lambda'$, che assumono valori in uno spazio S'. Infine si fornisce una regola per costruire la misura di equilibrio del sistema immagine a partire da quella del sistema oggetto, ovvero si pone

$$\mu'_{\Lambda',\beta}(\sigma') := \sum_{\sigma \in \Omega_\Lambda} \mu_{\Lambda,\beta}(\sigma) T(\sigma \to \sigma') \qquad \forall \sigma' \in \Omega'_{\Lambda'} := S'^{\Lambda'} \tag{1.1}$$

dove $T(\sigma \to \sigma')$ è un nucleo di probabilità che contine la definizione della trasformazione di rinormalizzazione. Solitamente il nucleo $T(\sigma \to \sigma')$ viene definito in modo che le variabili σ'_i corrispondano all'integrazione delle vecchie variabili su una piccola scala: per esempio le nuove variabili possono essere la media delle vecchie variabili su certi blocchi in cui è stato suddiviso il reticolo Λ (*block averaging transformation*). Al sistema immagine può essere associata anche una nuova hamiltoniana ponendo

$$H'_{\Lambda'}(\sigma') := -\frac{1}{\beta} \log \mu'_{\Lambda,\beta}(\sigma') + \text{cost} \tag{1.2}$$

da cui è possibile estrarre le interazioni fra le variabili immagine. In altri termini è stata definita una trasformazione tra il sistema oggetto $(\Lambda, \Omega_\Lambda, \mu_{\Lambda,\beta})$ e quello immagina $(\Lambda', \Omega'_{\Lambda'}, \mu'_{\Lambda',\beta})$.

Lo schema descritto in precedenza crolla se si considera il caso di volume infinito: in questo caso, infatti, la nozione di hamiltoniana ha solo senso formale e la definizione di stato di equilibrio va data seguendo la *Teoria di Dobrushin* degli stati di volume infinito (si veda la Sezione 1.2). Una trasformazione di rinormalizzazione, allora, va vista necessariamente come una trasformazione tra misure piuttosto che tra hamiltoniane. Ma una volta costruita la misura $\mu'_{\Lambda',\beta}$ è spontaneo chiedersi se questa ha significato fisico, cioè se è gibbsiana nel senso che è derivabile da un opportuno potenziale che descriva l'interazione tra le variabiali immagine (per la definizione precisa di gibbsianità di una misura si rimanda alla Sezione 1.2).

Questo problema fu posto già nel 1975 da M. Cassandro e G. Gallavotti in [CGa] nel caso del Modello di Ising al punto critico; in seguito, in [G2, GP, Is] fu osservato che in alcuni casi le trasformazioni di rinormalizzazione esibiscono delle "peculiarità", nel senso che la misura immagine non è gibbsiana. Questi primi esempi furono chiariti da A.C.D. van Enter, R. Fernandez e A.D. Sokal in [EFS], in cui furono esibiti altri esempi di "patologie" del gruppo di rinormalizzazione. In seguito questo problema è stato indagato a fondo e in numerosi altri lavori, tra cui [E1, EFK], sono stati messi in risalto altre situazioni in cui il gruppo di rinormalizzazione esibisce un comportamento patologico nel senso descritto in precedenza.

Per i dettagli sui metodi utilizzati per dimostrare l'esistenza delle patologie si rimanda alla Sezione 1.4, qui ci si limita ad osservare che l'idea chiave sta nel mostrare che alla temperatura $1/\beta$ a cui si sta studiando il modello oggetto, almeno uno dei modelli intermedi esibisce una transizione di fase, ovvero è sotto il suo punto critico; dove per modello intermedio si intende un modello nelle variabili oggetto σ_i, definito sul reticolo Λ, ma con misura di equilibrio data da

$$\mu_{\Lambda,\beta,\sigma'}(\sigma) := \frac{\mu_{\Lambda,\beta}(\sigma)T(\sigma \to \sigma')}{\sum_{\eta \in \Omega_\Lambda} \mu_{\Lambda,\beta}(\eta)T(\eta \to \sigma')} \quad , \tag{1.3}$$

cioè fissata una configurazione rinormalizzata σ', una configurazione σ viene pesata tenendo presente quanto essa è "compatibile" con σ'.

Parallelamente ai risultati sulle patologie del gruppo di rinormalizzazione è stato profuso un notevole sforzo per tentare di dimostrare risultati positivi di due tipi: possibilità di "curare" le patologie del gruppo di rinormalizzazione, quando queste si presentano, tentativo di dimostrare che nei casi di interesse fisico, per esempio block averaging transformation applicata al modello di Ising al punto critico, le trasformazioni sono ben definite, cioè la misura rinormalizzata è gibbsiana. In [MO4] F. Martinelli ed E. Olivieri hanno dimostrato, per mezzo di metodi basati sulla cluster expansion, che la patologia esibita dalla trasformazione di decimazione per alcuni valori dei parametri del modello di Ising può essere eliminata quando si considera la stessa trasformazione definita su un passo più grande; in altri termini anche se dopo il primo passo di rinormalizzazione si ottiene una misura non gibbsiana, iterando per un numero sufficientemente elevato di volte la trasformazione si ripristina la gibbsianità della misura. Invece in [MO5] è stato visto come la patologia esibita dalla block averaging transformation possa essere eliminata premettendo un passo di decimazione.

Per quanto riguarda la seconda classe di risultati positivi è stato dimostrato in [HK] un teorema che assicura la gibbsianità della misura rinormalizzata se, fissata la temperatura inversa β a cui si studia la trasformazione, "tutti" i possibili modelli intermedi sono sopra il loro punto critico, cioè sono in assenza di transizione di fase. Si osserva che mentre per dimostare l'esistenza della patologia è sufficiente mostrare che almeno un modello intermedio è sotto il suo punto critico, per dimostrare la buona definizione della trasformazione è necessario controllare che tutti i modelli intermedi siano in regime di unicità di fase. In [HK] il teorema descritto in precedenza è stato usato per dimostrare la buona definizione della decimazione e della trasformazione di Kadanof nel caso del modello di Ising ad alta temperatura.

Il caso del modello di Ising al punto critico ovviamente è di gran lunga più interessante e complicato: in [Ke2] è stato mostrato, usando risultati di [Ke1], che al punto critico del modello di Ising bidimensionale alcuni modelli intermedi sono sopra il loro punto critico quando si considera la trasformazione nota come majority rule. Ma per quanto osservato in precedenza ciò non permette di concludere nulla sulla buona definizione della trasformazione, perchè è necessario controllare tutti i modelli intermedi.

Questo è esattamente il problema che ho affrontato in [CO2] in collaborazione con E. Olivieri, ma la strategia usata si differisce da quella di [Ke2]: per dimostrare che tutti i modelli intermedi sono sopra il loro punto critico alla temperatura critica di Ising, abbiamo mostrato che tutti questi modelli soddisfano ad una condizione di taglia finita [DS1, DS2] che assicura il rapido decadimento delle correlazioni, cioè assicura che le ipotesi del teorema di [HK] siano soddisfatte. La verifica delle condizioni di taglia finita è stata condotta tramite simulazioni Monte Carlo effettuate con una nuova dinamica particolarmente adatta al nostro problema, che costituisce un notevole miglioramento rispetto alla strategia seguita in [BMO] dove una domanda analoga è stata posta nel caso di un singolo modello intermedio relativo alla trasformazione di block averaging.

In questo capitolo vengono discussi alcuni dei risultati illustrati in precedenza; il capitolo si articola nel modo seguente: la Sezione 1.2 è dedicata ad una rapida carrellata sulla teoria degli stati di volume infinito, in particolare viene mostrato come sia possibile definire questi stati nel caso del modello di Ising; nella Sezione 1.3 si illustrano le idee fisiche alla base del gruppo di rinormalizzazione con riferimento al caso del modello di Ising bidimensionale. La Sezione 1.4 presenta alcuni esempi di patologie, mentre nell'ultima sezione vengono illustrati i risultati ottenuti nel caso del modello di Ising al punto critico in [CO2]. In particolare vengono discussi prima gli aspetti teorici del calcolo, mettendo evidenza come i nostri risultati siano possibili solo grazie alla profonda conoscenza degli aspetti sia statici [D, DS1, DS2] che dinamici [MOS, MO1, MO2, MO3, AH, SZ] degli stati di Gibbs, poi quelli numerici.

1.2 Modello di Ising in volume infinito

In questa sezione viene illustrata la Teoria di Dobrushin per gli stati di volume infinito con particolare attenzione al caso del Modello di Ising.

Si consideri il reticolo $\mathcal{L} := \mathbf{Z^2}$ e l'insieme $\mathcal{S}$ costituito da tutti i suoi sottoinsiemi finiti; ad ogni sito $x \in \mathcal{L}$ viene associata la *variabile di spin* $\sigma_x \in \{-1, +1\}$, si definisce *configurazione del sistema* la collezione $\sigma := (\sigma_x)_{x\in\mathcal{L}}$ e lo *spazio delle configurazioni* $\Omega := \{-1, +1\}^{\mathcal{L}}$. Dato un sottoinsieme $\Lambda \subset \mathcal{L}$ si definiscono in modo analogo gli oggetti σ_Λ e Ω_Λ; infine si osserva che nel seguito, data una configurazione $\sigma \in \Omega$ ed un insieme $\Lambda \subset \mathcal{L}$, con il simbolo σ_Λ si indicherà anche la restrizione di σ all'insieme Λ.

Lo spazio Ω è uno spazio topologico rispetto alla topologia prodotto delle topologie discrete sui singoli spazi finiti $\{-1, +1\}$ di cui esso è il prodotto cartesiano infinito su $\mathcal{L}$. La topologia discreta su $\{-1, +1\}$ è quella banale in cui tutti i sottoinsiemi di $\{-1, +1\}$ sono aperti, mentre la base di aperti della topologia su Ω è costituita dagli *insiemi cilindrici*

$$E_\Lambda^A := \{\sigma \in \Omega :\ \sigma_\Lambda \in A\} \tag{1.4}$$

dove Λ è un sottoinsieme finito di $\mathcal{L}$ e $A \subset \Omega_\Lambda$. Si osserva che A può ridursi ad una sola configurazione σ_Λ di Ω_Λ, in questo caso il cilindro è costituito da tutte le configurazioni di Ω coincidenti con σ_Λ in Λ ed arbitrarie all'esterno.

Si considera, inoltre, la σ-algebra $\mathcal{F}$ dei borelliani di Ω rispetto alla topologia dei cilindri, ovvero $\mathcal{F}$ è la più piccola σ-algebra di Ω contenente tutti i cilindri. In modo analogo si definisce la σ-algebra $\mathcal{F}_\Lambda$ di Ω_Λ.

Considerati i due numeri reali h e J, rispettivamente il *campo magnetico esterno* e l'*interazione tra spin primi vicini*, si introduce il *potenziale*

$$\Phi_X(\sigma) := \begin{cases} -h\sigma_x & \text{se X} = \{\text{x}\} \\ -J\sigma_x\sigma_y & \text{se X} =< \text{xy} > \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{1.5}$$

dove con il simbolo $< xy >$ si indica una coppia di siti primi vicini.

Considerato un sottoinsieme finito $\Lambda \in \mathcal{S}$ si definisce l'hamiltoniana di Ising di volume finito con condizioni al bordo libere

$$H_\Lambda^{\text{libere}}(\sigma) := \sum_{X\subset\Lambda} \Phi_X(\sigma) \tag{1.6}$$

è chiaro che la somma (1.6) ha contributo non nullo soltanto dai termini relativi alle coppie di primi vicini e ai singoli siti. È possibile definire l'hamiltoniana considerando anche l'interazione del sistema con l'esterno del volume finito Λ, in questo caso si deve fissare una configurazione τ_{Λ^c} nel complementare di Λ e si definisce

$$H_\Lambda^{\tau_{\Lambda^c}}(\sigma) := H_\Lambda^{\text{libere}}(\sigma) + W_{\Lambda,\Lambda^c}(\sigma_\Lambda \times \tau_{\Lambda^c}) \tag{1.7}$$

dove con il simbolo $\sigma_\Lambda \times \tau_{\Lambda^c}$ si denota la configurazione coincidente con σ_Λ in Λ e con τ_{Λ^c} in Λ^c e dove è stata introdotta l'interazione

$$W_{\Lambda,\Lambda^c}(\sigma_\Lambda \times \tau_{\Lambda^c}) := \sum_{X\in\mathcal{S},X\cap\Lambda\neq\emptyset,X\cap\Lambda^c\neq\emptyset} \Phi_X(\sigma_\Lambda \times \tau_{\Lambda^c}) \quad . \tag{1.8}$$

Si osserva che la somma (1.8) è a priori una somma infinita, per cui nel caso di un generico potenziale bisogna imporre dei requisiti di convergenza; ma nel caso del modello di Ising, in cui la sola interazione non nulla è quella tra primi vicini, il numero di termini della somma si riduce ad un numero finito. In altri termini nel caso del modello di Ising per specificare la condizione al bordo non è necessario fissare l'intera configurazione τ_{Λ^c}, è bensì sufficiente assegnare il valore dello spin nei siti di Λ^c che sono primi vicini di un sito di Λ.

Le proprietà di equilibrio del modello di Ising su un volume finito sono descritte dalla *misura di Gibbs di volume finito*

$$\mu_{\Lambda,\Phi,\beta}^{\tau_{\Lambda^c}}(\sigma) := \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}_\Lambda^{\tau_{\Lambda^c}}(\sigma)}}{Z_{\Lambda,\beta}^{\tau_{\Lambda^c}}} \tag{1.9}$$

dove $\beta := 1/T$ è l'inverso della temperatura e

$$Z_{\Lambda,\beta}^{\tau_{\Lambda^c}} := \sum_{\sigma\in\Omega:\sigma_{\Lambda^c}=\tau_{\Lambda^c}} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}_\Lambda^{\tau_{\Lambda^c}}(\sigma)} \tag{1.10}$$

è la *funzione di partizione* di volume finito.

Il caso fisicamente interessante è quello in cui il volume è infinito, solo in questo caso c'è la speranza che un modello su reticolo possa presentare una transizione di fase. Ma le definizioni date in precedenza non si estendono in modo ovvio al caso di volume infinito, infatti se si definisse

$$H(\sigma)\text{“}:=\text{”} \sum_{X\subset\mathcal{L}} \Phi_X(\sigma) \text{“}=\text{”} - J\sum_{<xy>} \sigma_x\sigma_y - h\sum_{x\in\Lambda} \sigma_x \tag{1.11}$$

si otterrebbe un oggetto dal valore puramente formale, infatti la somma (1.11) ha un valore finito solo per alcune configurazioni molto particolari, in sostanza si avrebbe energia infinita per quasi tutte le configurazioni.

La definizione corretta del modello nel caso di volume infinito può essere data seguendo la *Teoria di Dobrushin* [EFS, D, LR]. L'idea chiave è la seguente: la misura di volume infinito $\mu_{\Phi,\beta}$ è tale che, dato un insieme finito Λ ed una condizione al bordo τ_{Λ^c}, la misura di volume finito $\mu^{\tau_{\Lambda^c}}_{\Lambda,\Phi,\beta}$ coincide con la misura che si ottiene condizionando $\mu_{\Phi,\beta}$ all'evento che consiste nell'avere la configurazione τ_{Λ^c} all'esterno di Λ. Per formalizzare questa definizione si utilizza la nozione di *specificazione*: una specificazione è un insieme di probabilità condizionali per i sistemi definiti su sottovolumi finiti di $\mathcal{L}$; cioè, dato $\Lambda \in \mathcal{S}$ si vuole definire una funzione $\pi_\Lambda(\sigma_{\Lambda^c},A)$ con $\sigma_{\Lambda^c} \in \Omega_{\Lambda_c}$ e $A \in \mathcal{F}_\Lambda$ che fornisca la probabilità dell'evento A nel volume Λ condizionata ad avere la configurazione σ_{Λ^c} in Λ^c. L'oggetto che si presta a questo scopo è un nucleo di probabilità definito sullo spazio $(\Omega,\mathcal{F})$.

Definizione 1.1 *Dati due spazi di probabilità $(\Omega,\mathcal{F})$ e $(\Omega',\mathcal{F}')$ si dice nucleo (kernel) di probabilità di $(\Omega,\mathcal{F})$ in $(\Omega',\mathcal{F}')$*

$$\pi_\Lambda : (\sigma,A) \in \Omega \times \mathcal{F}' \longrightarrow \pi_\Lambda(\sigma,A) \in [0,1]$$

tale che

- $\forall \sigma \in \Omega$, *$\pi_\Lambda(\sigma,\cdot)$ è una misura di probabilità su $(\Omega',\mathcal{F}')$*
- $\forall A \in \mathcal{F}'$, *$\pi_\Lambda(\cdot,A)$ è una funzione $\mathcal{F}$-misurabile su Ω.*

Definizione 1.2 *Si dice specificazione una collezione di nuclei $(\pi_\Lambda)_{\Lambda\in\mathcal{S}}$ di $(\Omega,\mathcal{F})$ in se stesso tali che*

- $\forall A \in \mathcal{F}$, *$\pi_\Lambda(\cdot,A)$ è una funzione $\mathcal{F}_{\Lambda^c}$-misurabile*
- $\forall B \in \mathcal{F}_{\Lambda^c}$, *$\pi_\Lambda(\sigma,B) = \chi_B(\sigma)$, dove $\chi_B(\sigma)$ è la funzione caratteristica*

$$\chi_B(\sigma) := \begin{cases} 1 & \sigma_{\Lambda^c} \in B \\ 0 & \textit{altrimenti} \end{cases} \tag{1.12}$$

- *se $\Lambda \subset \Lambda'$ allora $\forall \sigma \in \Omega$, $\forall A \in \mathcal{F}$ si ha*

$$\int \pi_{\Lambda'}(\sigma,d\eta)\pi_\Lambda(\eta,A) = \pi_{\Lambda'}(\sigma,A) \quad .$$

Si osserva che le tre condizioni precedenti esprimono rispettivamente la necessità che la misura di A dipenda solo dal comportamento di σ fuori di Λ, che per osservazioni fuori di Λ la misura riproduca la configurazione σ_{Λ^c} e che ci sia una sorta di compatibilità tra volumi inclusi l'uno nell'altro.

Definizione 1.3 *Data una misura μ sullo spazio $(\Omega,\mathcal{F})$ e una specificazione $(\pi_\Lambda)_{\Lambda\in\mathcal{S}}$ si dice che la misura è consistente con la specificazione se e solo se*

$$\forall \Lambda \in \mathcal{S}, \forall A \in \mathcal{F} \quad \textit{si ha} \;\; \mu(\chi_A|\mathcal{F}_{\Lambda^c}) = \pi_\Lambda(\cdot,A) \qquad \mu-\textit{quasi ovunque} \;\; . \tag{1.13}$$

In altri termini prese due configurazioni $\sigma_\Lambda \in \Omega_\Lambda$ e $\tau_{\Lambda^c} \in \Omega_{\Lambda^c}$ si ha

$$\mu(E_\Lambda^{\sigma_\Lambda}|\tau_{\Lambda^c}) = \pi_\Lambda(\tau_{\Lambda^c},E_\Lambda^{\sigma_\Lambda}) \tag{1.14}$$

cioè la specificazione fornisce la probabilità condizionale di una configurazione su un volume finito.

Si consideri, ora, un potenziale Φ che soddisfi ai requisiti sufficienti ad assicurare la convergenza della somma (1.8) e la misura di Gibbs di volume finito $\mu_{\Lambda,\Phi,\beta}^{\tau_{\Lambda^c}}$ introdotta come in (1.9) per il generico potenziale Φ. Posto

$$\pi_{\Lambda,\Phi}(\tau,A) = \mu_{\Lambda,\Phi,\beta}^{\tau_{\Lambda^c}}(A) \;\; \forall\tau \in \Omega, \forall A \in \mathcal{F} \tag{1.15}$$

si verifica facilmente che $(\pi_{\Lambda,\Phi})_{\Lambda\in\mathcal{S}}$ è una specificazione; tale specificazione è detta *gibbsiana*. In alternativa si può dire che una specificazione gibbsiana è una specificazione che può essere dedotta da un potenziale con il procedimento descritto in precedenza.

Definizione 1.4 *Si definisce stato di equilibrio di volume infinito di un modello con potenziale Φ, una misura $\mu_{\Phi,\beta}$ su $(\Omega,\mathcal{F})$ consistente con la specificazione gibbsiana (1.15).*

In questo modo, quindi, quando Φ è il potenziale (1.5) si definisce lo stato di equilibrio $\mu_{\Phi,\beta}$ del modello di Ising nel caso di volume infinito.

Nel caso di una specificazione gibbsiana a partire dalla (1.14) si prova che data una configurazione $\sigma_\Lambda \in \Omega_\Lambda$ si ha

$$\mu_{\Phi,\beta}(E_\Lambda^{\sigma_\Lambda}) = \int \chi_{E_\Lambda^{\sigma_\Lambda}}(\tau)\pi_{\Lambda,\Phi}(\tau,\sigma_\Lambda)\mu_{\Phi,\beta}(d\tau) \quad \forall\sigma_\Lambda \in \Omega_\Lambda \quad . \tag{1.16}$$

Le equazioni (1.16) sono dette di Dobrushin Lanford e Ruelle (DLR) e si prova che sono necessarie e sufficienti per assicurare la gibbsianità di una misura [EFS, Ge].

Per concludere questa breve discussione della teoria di Dobrushin si enuncia un teorema utile per la caratterizzazione delle misure gibbsiane. Si premettono due definizioni:

Definizione 1.5 *Una specificazione $(\pi_\Lambda)_{\Lambda\in\mathcal{S}}$ è quasi-locale se e solo se*

$$\sup_{\sigma^1,\sigma^2:\, \sigma^1_{\Lambda'}=\sigma^2_{\Lambda'}} Var\left[\pi_\Lambda(\sigma^1,\cdot),\pi_\Lambda(\sigma^2,\cdot)\right] \xrightarrow{\Lambda'\to\mathcal{L}} 0 \tag{1.17}$$

dove $\Lambda' \supset \Lambda$ e dove è stata introdotta la distanza in variazione tra due misure

$$Var\left[\pi_\Lambda(\sigma^1,\cdot),\pi_\Lambda(\sigma^2,\cdot)\right] := \sup_{A\in\mathcal{F}} |\pi_\Lambda(\sigma^1,A) - \pi_\Lambda(\sigma^2,A)| \quad . \tag{1.18}$$

In altri termini in una specificazione quasi-locale la misura $\pi_\Lambda(\sigma,\cdot)$ dipende poco dal valore degli spin di σ "molto" lontani da Λ.

Definizione 1.6 *Una specificazione $(\pi_\Lambda)_{\Lambda\in\mathcal{S}}$ è non-nulla se e solo se $\forall\Lambda \in \mathcal{S}$, $\forall A \in \mathcal{F}_\Lambda$*

$$\pi_\Lambda(\sigma,A) > 0 \quad \forall\sigma \in \Omega \quad . \tag{1.19}$$

Teorema 1.1 *Una specificazione $(\pi_\Lambda)_{\Lambda\in\mathcal{S}}$ è gibbsiana se e solo se è non-nulla e quasi-locale.*

La condizione necessaria è semplice, per la condizione sufficiente si rimanda a [EFS].

1.3 Le idee fondamentali

Si considera, ora, il modello di Ising in due dimensioni, volume infinito, campo magnetico nullo ($h = 0$) e $J = 1$: tale sistema presenta una transizione di fase del secondo ordine a bassa temperatura, ovvero esiste un valore critico $\beta_c = \frac{1}{2}\log(\sqrt{2}+1)$ (valore critico di Onsager) in corrispondenza del quale l'energia libera $F_\beta := -\frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\to\infty}\log Z^{\text{free}}_{\Lambda,\beta}$ ha una singolarità essenziale [I]. Per valori della temperatura inversa $\beta < \beta_c$ il sistema è nella fase *paramagnetica*, ovvero esiste un'unica fase pura μ^0_β tale che la *magnetizzazione* $m^0_\beta := \mu^0_\beta(\sigma_O)$, ove σ_O è la variabile di spin definita nell'origine di $\mathcal{L}$, è nulla. Mentre per $\beta > \beta_c$ il sistema è nella fase *ferromagnetica*, esistono due fasi pure coesistenti $\mu^\pm_\beta$ tali che $m^\pm_\beta := \mu^\pm_\beta(\sigma_O) = \pm m_0 \neq 0$; ovvero nel sistema è presente una magnetizzazione spontanea m_0 non nulla.

Le fasi pure sono caratterizzate dal decadimento esponenziale delle correlazioni: considerati due siti x,$y \in \mathcal{L}$, denotata con r_{xy} la loro distanza si ha

$$\mu^{0,\pm}_\beta(\sigma_x;\sigma_y) := \mu^{0,\pm}_\beta(\sigma_x\sigma_y) - \mu^{0,\pm}_\beta(\sigma_x)\mu^{0,\pm}_\beta(\sigma_y) \overset{r_{xy}\to\infty}{\sim} \exp\left(-\frac{r_{xy}}{\xi^{0,\pm}_\beta}\right) \tag{1.20}$$

dove $\xi^{0,\pm}_\beta$, la *lunghezza di correlazione* nella corrispondente fase pura, è un numero reale e strettamente positivo. Ciò vuol dire che nelle fasi pure lo spin in un sito x è correlato soltanto con un numero finito di spin, in particolare con gli spin che distano meno della lunghezza di correlazione. D'altro canto quando la temperatura tende al suo valore critico la lunghezza di correlazione diverge con legge di potenza

$$\xi^{0,\pm}_\beta \sim |T - T_c|^{-1} \quad , \tag{1.21}$$

dove T_c è la temperatura critica. In altri termini, al punto critico il modello manifesta un comportamento molto peculiare: nonostante l'interazione esista soltanto tra spin primi vicini, cioè tra spin a distanza uno, al punto critico tutti gli spin sono correlati tra loro.

A $T > T_c$ il numero di spin correlati è finito, quindi si può pensare di approssimare il sistema con un sistema finito; ma al punto critico il numero di gradi di libertà effettivamente interagenti è infinito: i fenomeni critici sono *fenomeni cooperativi*. D'altro canto la divergenza della lunghezza di correlazione lascia supporre che il sistema sia in regime di *invarianza di scala*, cioè guardando il sistema su scale diverse esso presenta lo stesso comportamento. Ciò suggerisce, allora, di definire una trasformazione che associ al sistema di partenza (*sistema oggetto*) un nuovo sistema (*sistema immagine*) ottenuto integrando tutti i gradi su una certa scala fissata. In presenza di invarianza di scala il sistema immagine e quello oggetto avrebbero le stesse proprietà fisiche; in altri termini un sistema al punto critico dovrebbe essere un punto fisso di questo tipo di trasformazioni. Tali trasformazioni sono dette *trasformazioni di rinormalizzazione.*

Un esempio particolare di trasfromazione di rinormalizzazione è la *block averaging transformation* (BAT).

Definizione 1.7 (Trasformazione BAT) *Si suddivide il reticolo $\mathcal{L}$ in quadrati $L \times L$ disgiunti; ognuno di questi blocchi viene denotato con $B^{1,L}_i$; al blocco i-esimo viene associata la nuova variabile*

$$\sigma^{1,L}_i := \frac{1}{L}\sum_{j\in B^{1,L}_i}(\sigma_j - \mu_\beta(\sigma_j)) \quad . \tag{1.22}$$

I possibili valori della variabile rinormalizzata sono

$$\sigma^{1,L}_i + \frac{1}{L}\sum_{j\in B^{1,L}_i}\mu_\beta(\sigma_j) = \frac{-L^2}{L},\frac{-L^2+2}{L},\ldots,\frac{+L^2}{L} \quad . \tag{1.23}$$

Si denota con $\sigma^{1,L}$ una configurazione di queste nuove variabili, con $\Omega^{1,L}$ il nuovo spazio delle configurazioni e con $\mathcal{F}^{1,L}$ la relativa σ-algebra dei borelliani. Si dice che $\sigma \in \Omega$ è compatibile con un insieme misurabile $A \in \mathcal{F}^{1,L}$ se e solo se applicando la trasformazione (1.22) la configurazione σ viene trasformata in une elemento di A. Si definisce il nucleo di probabilità di $(\Omega,\mathcal{F})$ in $(\Omega^{1,L},\mathcal{F}^{1,L})$

$$T^L_{0,1}(\sigma,A) := \begin{cases} 1 & \sigma \textit{ compatibile con } A \\ 0 & \textit{altrimenti} \end{cases} \qquad \forall \sigma \in \Omega,\, \forall A \in \mathcal{F}^{1,L} \tag{1.24}$$

e la nuova misura

$$\mu^{1,L}_\beta(A) := \int \mu_\beta(d\sigma)\chi_A(\sigma)T^L_{0,1}(\sigma,A) \quad \forall A \in \mathcal{F}^{1,L} \tag{1.25}$$

Il nuovo sistema di spin così ottenuto viene denotato con il simbolo $S^{1,L}$.

Si osserva che la nuova misura è normalizzata correttamente come conseguenza della corretta normalizzazione del nucleo $T^L_{0,1}$. Iterando la trasformazione si ottengono sistemi definiti su scala sempre più grande: $S^{1,L}$,$S^{2,L}$,...,$S^{n,L}$,....

L'idea alla base della teoria del gruppo di rinormalizzazione è che al crescere di n, se il modello di partenza è al punto critico, il sistema $S^{n,L}$ presenta sempre le stesse proprietà fisiche; mentre se il sistema di partenza è in una regione con lunghezza di correlazione finita, allora le variabili rinormalizzate tendono a disaccoppiarsi, cioè nel limite $n \to \infty$ il sistema $S^{n,L}$ tende ad un sistema di variabili indipendenti.

Prima di discutere questo punto si premette un lemma che assicura che iterare la BAT equivale a considerare un solo passo della stessa trasformazione, ma su una taglia molto più grande.

Lemma 1.1 *Con le notazioni introdotte in precedenza:*

$$S^{n,L} = S^{1,L^n} \tag{1.26}$$

La dimostrazione è immediata, infatti identificando correttamente i siti dei reticoli rinormalizzati si ha $\sigma^{1,L^n}_i = \sigma^{n,L}_i$.

Per studiare, allora, l'effetto dell'iterazione della trasformazione di rinormalizzazione è sufficiente studiare il sistema $S^{1,L}$ quando $L \to \infty$. Si considera il caso $h = 0$ e $T > T_c$, pertanto si ha

$$\sigma^{1,L}_i = \frac{1}{L}\sum_{j\in B^{1,L}_i} \sigma_j \quad . \tag{1.27}$$

Quando L è molto grande, le variabili presenti nella somma (1.27) sono praticamente indipendenti, quindi per il teorema del limite centrale per la somma di variabili indipendenti la variabile $\sigma^{1,L}_i$ tende ad avere una distruzione gaussiana

$$\mu^{1,L}_\beta(\sigma^{1,L}_i = m) \overset{L\to\infty}{\sim} \frac{1}{L}\frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda_i}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{m}^2}{2\lambda_\mathrm{i}}} \tag{1.28}$$

dove λ_i è la varianza di $\sigma^{1,L}_i$. A priori la varianza λ_i dipende sia dalla taglia L sia dalle condizioni al bordo del blocco $B^{1,L}_i$; ma sfruttando il decadimento esponenziale delle correlazioni tipico della fase di alta temperatura, si può mostrare che $\lambda_i \overset{L\to\infty}{\sim} \frac{\chi}{\beta}$ dove $\chi := \left(\frac{\partial\mu_\beta(\sigma_i)}{\partial h}\right)_{h=0} = \beta\mu_\beta(\sigma_i\sum_{j\in\mathcal{L}}\sigma_j)$ è la suscettività. Infatti

$$\mu_\beta(\sigma^{1,L}_i;\sigma^{1,L}_i) = \frac{1}{L^2}\sum_{j\in B^{1,L}_i}\mu_\beta\left(\sigma_j\sum_{k\in B^{1,L}_i}\sigma_k\right) \overset{L\to\infty}{\sim} \frac{1}{L^2}\sum_{j\in B^{1,L}_i}\mu_\beta\left(\sigma_j\sum_{k\in\mathcal{L}}\sigma_k\right) = \mu_\beta\left(\sigma_j\sum_{k\in\mathcal{L}}\sigma_k\right)$$

dove si è usato il decadimento esponenziale delle correlazioni per estendere la somma dal blocco $B_i^{1,L}$ a tutto il reticolo $\mathcal{L}$.

Si osserva, infine, che al punto critico a causa della divergenza della lunghezza di correlazione il ragionamento precedente fallisce, infatti comunque grande si scelga la scala L, le variabili nella somma (1.27) non possono essere considerate approssimativamente indipendenti.

Lo schema illustrato in precedenza, pur sembrando del tutto naturale, non è stato mai dimostrato in modo rigoroso dopo quasi trent'anni dalla sua prima formulazione. L'interesse dei risultati esatti di questo tipo è del tutto evidente, inoltre negli ultimi anni è stato accresciuto dalla pubblicazione di numerosi lavori (si veda, per esempio, [EFS]) in cui sono stati discussi alcuni aspetti patologici delle trasformazioni di rinormalizzazione. Parallelamente si è sviluppata, o meglio ha trovato nuovo vigore, una linea di ricerca tesa a mostrare in modo rigoroso che nei casi di interesse fisico (per esempio il punto critico del modello di Ising) lo schema del gruppo di rinormalizzazione è corretto.

1.4 Alcuni esempi di patologie del gruppo di rinormalizzazione

In questa sezione viene illustrato l'esempio di Israel sull'esistenza delle patologie del gruppo di rinormalizzazione: l'esempio, proposto per la prima volta in [G2, GP] e formalizzato in [Is], viene discusso nel più profondo dettaglio in [EFS]. Nel seguito descriverò per sommi capi la dimostrazione della non gibbsianità della misura rinormalizzata, per chiarire il ruolo giocato dai modelli intermedi. In primo luogo si definisce la *trasformazione di decimazione* nel caso del modello di Ising e ci si limita a considerare il caso $J=1$, $h=0$ e $\beta<\beta_c$:

Definizione 1.8 (Trasformazione di decimazione) *Si considera il modello di Ising definito sul reticolo $\mathcal{L}:=\mathbf{Z}^2$; si denota con $\sigma\in\Omega_{\mathcal{L}}:=\{-1,+1\}^{\mathcal{L}}$ una configurazione, con $\mathcal{F}_{\mathcal{L}}$ la σ-algebra dei borelliani e con μ_β la misura di equilibrio con i parametri h,J e β specificati in precedenza. Si denota con $\mathcal{L}'$ il nuovo reticolo ottenuto a partire da $\mathcal{L}$ prendendo un sito ogni due (si veda la Fig. 1.1). Considerato il sito $x\equiv(x_1,x_2)\in\mathcal{L}'$ si denota con $2x$ il sito $(2x_1,2x_2)\in\mathcal{L}$, quindi si definisce la trasformazione che ad ogni $\sigma\in\Omega_{\mathcal{L}}$ associa una configurazione $\sigma'\in\{-1,+1\}^{\mathcal{L}'}=:\Omega'_{\mathcal{L}'}$ sul reticolo $\mathcal{L}'$:*

$$\sigma'_x=\sigma_{2x}\qquad\forall x\in\mathcal{L}'\quad .$$

Per costruire la misura del modello immagine si definisce il nucleo di probabilità $T:(\Omega_{\mathcal{L}},\mathcal{F}_{\mathcal{L}})\longrightarrow(\Omega'_{\mathcal{L}'},\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'})$ nel modo seguente:

$$T(\sigma,A):=\left\{\begin{array}{ll}1 & \sigma \textit{ tale che } \sigma'\in A\\ 0 & \textit{altrimenti}\end{array}\right.\qquad\forall\sigma\in\Omega_{\mathcal{L}},\forall A\in\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}$$

dove $\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}$ è la σ-algebra dei borelliani su $\Omega'_{\mathcal{L}'}$; quindi si definisce:

$$\mu'_\beta(A):=\int\mu_\beta(d\sigma)\chi_A(\sigma)T(\sigma,A)\qquad\forall A\in\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}\quad .$$

Si osserva che la definizione precedente corrisponde a costruire la misura rinormalizzata sommando su tutti i vecchi spin che non si trovano sul reticolo $\mathcal{L}'$; inoltre si osserva che le nuove variabili non sono altro che i vecchi spin che si trovano su siti di $\mathcal{L}$ con coordinate pari.

Si dimostra il seguente risultato:

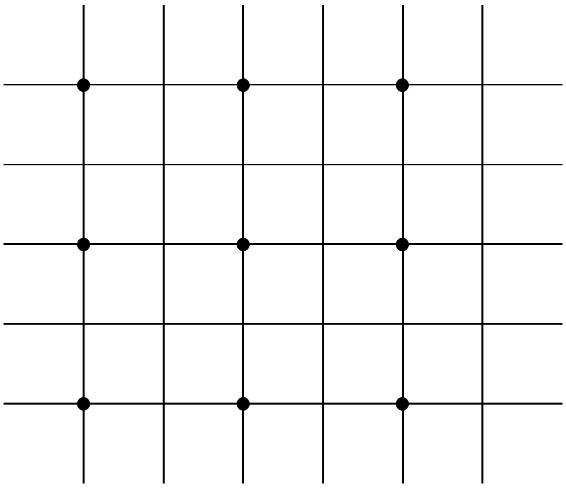


Figura 1.1. Le linee continue rappresentano il reticolo $\mathcal{L}$, i dischi neri i siti del reticolo $\mathcal{L}'$.

Teorema 1.2 *Con le notazioni introdotte in precedenza, se $\beta > \frac{1}{2}\cosh^{-1}(1+\sqrt{2}) \approx 1.73\beta_c$, dove β_c è il valore critico di Onsager, allora la misura rinormalizzata μ'_β non è gibbsiana.*

Per dimostrare il teorema precedente si prova che la misura rinormalizzata μ'_β non è consistente con nessuna specificazione quasi-locale e si usa in senso "negativo" il Teorema 1.1 che caratterizza le misure gibbsiane. In altri termini si dimostra che una funzione locale calcolata tramite la misura rinormalizzata, per esempio la quantità $\mu'_\beta(\sigma'_O)$ (il valor medio dello spin immagine nell'origine), dipende fortemente dai valori degli spin immagine molto lontati se gli spin vicini vengono scelti in modo opportuno; cioè il valore di $\mu'_\beta(\sigma'_O)$ cambia di una quantità finita se viene calcolato condizionando la misura immagine in modo diverso su siti arbitrariamente lontani dall'origine. Il problema, quindi, si riduce a determinare questa configurazione "opportuna" che è in grado di trasportare l'informazione da molto lontano fino all'origine. L'idea è di considerare una configurazione in corrispondenza della quale il relativo modello intermedio è in regime di transizione di fase, ovvero ha più fasi consistenti.

Più precisamente, a partire da μ'_β si costruisce la specificazione con cui la misura rinormalizzata è consistente:

$$\pi_{\Lambda'}(\sigma',A') = \mu'_\beta(A'|\sigma'_{\Lambda'^c}) \tag{1.29}$$

per ogni Λ' sottoinsieme finito di $\mathcal{L}'$, $\sigma' \in \Omega'_{\mathcal{L}'}$ e $A' \in \mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}$. La specificazione è quasi locale se e solo se comunque si prenda un volume finito $\Lambda' \subset \mathcal{L}'$ accade che

$$\sup_{\sigma'^1,\sigma'^2:\,\sigma'^1_{\Delta'}=\sigma'^2_{\Delta'}} Var\left[\pi_{\Lambda'}(\sigma'^1,\cdot),\pi_{\Lambda'}(\sigma'^2,\cdot)\right] =$$

$$= \sup_{\sigma'^1,\sigma'^2:\,\sigma'^1_{\Delta'}=\sigma'^2_{\Delta'}} \sup_{A'\in\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}} |\pi_{\Lambda'}(\sigma'^1,A') - \pi_{\Lambda'}(\sigma'^2,A')| \xrightarrow{\Delta'\to\infty} 0 \tag{1.30}$$

dove $\Delta' \subset \mathcal{L}'$ finito e $\Delta' \supset \Lambda'$. La strategia che si segue per dimostrare che la specificazione $(\pi_{\Lambda'})_{\Lambda' \text{ finito}\subset\mathcal{L}'}$ non è quasi-locale è la seguente: determinare un particolare evento $A' \in \mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}$, per esempio l'evento $A' = \{\sigma'_O = +1\}$, e far vedere che la misura di questo evento cambia molto se si condiziona a due configurazioni coincidenti nei pressi dell'origine, ma diverse lontano dall'origine stessa. Per essere più precisi bisogna dimostrare che esiste una configurazione $\underline{\sigma}'$ tale che è possibile trovare un $\delta > 0$ tale che in ogni intorno di $\underline{\sigma}'$ esistono due configurazioni σ'^1 e σ'^2, coincidenti in un certo $\Delta' \subset \mathcal{L}'$ finito, ma arbitrariamente grande, e diverse all'esterno, e

$$|\pi_O(\sigma'^1,\{\sigma'_O = +1\}) - \pi_O(\sigma'^2,\{\sigma'_O = +1\})| \geq \delta > 0 \tag{1.31}$$

Il primo problema da risolvere, quindi, è determinare la configurazione $\underline{\sigma}'$: si definiscono i modelli intermedi

Definizione 1.9 (Modelli intermedi) *Si consideri $\sigma' \in \Omega'_{\mathcal{L}'}$, si dice modello intermedio relativo a σ' un modello nelle vecchie variabili $\sigma \in \Omega_{\mathcal{L}}$ con misura di equilibrio*

$$\mu_{\sigma',\beta}(A) := \frac{\int \mu_\beta(d\sigma)\chi_A(\sigma)T(\sigma,\sigma')}{\int \mu_\beta(d\sigma)T(\sigma,\sigma')} \quad \forall A \in \mathcal{F}_{\mathcal{L}} \ .$$

Nel caso di volume infinito la notazione è necessariamente complicata, ma si osserva che un modello intermedio corrispondente a σ' altri non è che il modello di Ising con il vincolo di considerare soltanto quelle configurazioni tali che il valore dello spin su siti $x \in \mathcal{L}'$ sia σ'_x. Infatti dalla Definizione 1.8 si ha $T(\sigma,\sigma') = \chi_{\{\sigma_{\mathcal{L}'}=\sigma'\}}(\sigma)$ da cui si ottiene $\mu_{\sigma',\beta}(A) = \mu_\beta(A|\sigma_{\mathcal{L}'} = \sigma')$.

Ora si osserva che se esiste un modello intermedio $\mu_{\underline{\sigma}',\beta}$ che è sopra il suo punto critico, allora le grandezze calcolate su un volume finito $\Lambda \subset \mathcal{L}$ devono essere discontinue rispetto a variazioni delle condizioni al bordo. L'idea è che prendendo σ'^1 e σ'^2 uguali a $\underline{\sigma}'$ all'interno di Δ', ma diverse tra loro all'esterno, deve essere possibile sfruttare le "proprietà" di discontinuità della misura intermedia per trovare un δ in corrispondenza del quale sia valida la (1.31).

A questo punto si mostra come sia possibile realizzare il progetto enunciato in precedenza: si considera la configurazione σ'_{alt} completamente antiferromagnetica sul reticolo $\mathcal{L}'$ e si prova che il modello intermedio $\mu_{\sigma'_{\text{alt}},\beta}$ ha due fasi coesistenti se

$$\beta > \frac{1}{2}\cosh^{-1}(1+\sqrt{2}) \ . \tag{1.32}$$

Infatti, il modello intermedio è definito sul reticolo $\mathcal{L}$ con gli spin che cadono sul sottoreticolo coincidente con $\mathcal{L}'$ uguali agli spin di σ'_{alt} (si veda la Fig. 1.2). Ma il contributo all'hamiltoniana delle coppie di spin primi vicini in cui vi è uno degli spin fissati è nullo, perchè i vari contributi si cancellano a due a due. Quindi il modello intermedio diventa equivalente al modello di Ising con accoppiamento $J = 1$, temperatura $\frac{1}{\beta}$ e definito sul reticolo $\mathcal{L}''$ ottenuto rimuovendo in $\mathcal{L}$ tutti i siti del sottoreticolo coincidente con $\mathcal{L}'$ (si veda Fig. 1.2).

Come nel caso della decimazione nel modello di Ising unidimensionale, a questo punto, è possibile sommare su tutti gli spin che hanno due soli siti primi vicini: si ottiene un modello di Ising su reticolo $\mathbf{Z^2}$ con accoppiamento tra primi vicini $\frac{1}{2}\log\cosh 2\beta$. Allora il modello intermedio ha transizione di fase se β è maggiore di un certo $\bar{\beta}$ definito dall'equazione

$$\frac{1}{2}\log\cosh 2\bar{\beta} = \beta_c \ \ (= \frac{1}{2}\log(1+\sqrt{2})) \ .$$

dalla precedente si ottiene facilmente la condizione (1.32).

Per caratterizzare le proprietà di discontinuità della misura $\mu_{\sigma'_{\text{alt}},\beta}$ si procede nel modo seguente: preso un numero intero e positivo R, si considera

$$\mathcal{N}_R := \{\sigma' : \ \sigma' = \sigma'_{\text{alt}} \text{ su } \Lambda'_{\text{R}}, \, \sigma' \text{ arbitraria altrove}\} \tag{1.33}$$

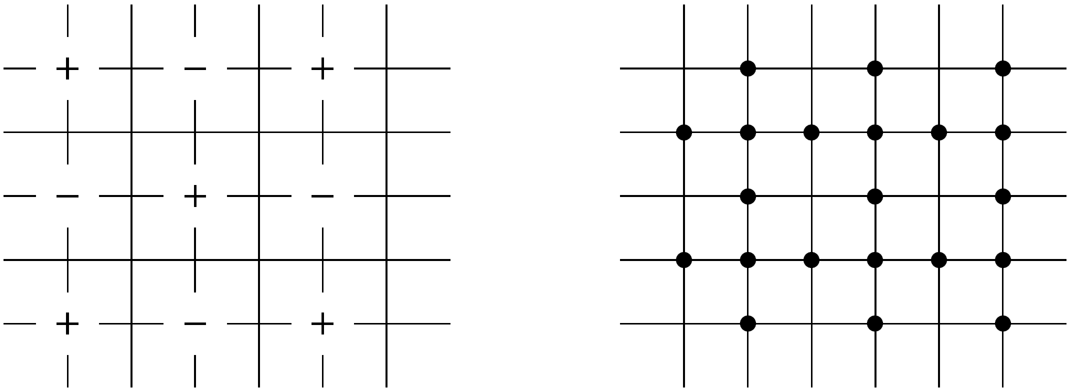


Figura 1.2. A sinistra è rappresentata la configurazione $\sigma'_{\rm alt}$ sul reticolo $\mathcal{L}$, mentre a destra è rappresentato il reticolo $\mathcal{L}''$.

dove Λ'_R è un quadrato centrato nell'origine di $\mathcal{L}'$ e di lato $2R+1$. Si osserva che al variare di R la famiglia degli insiemi $\mathcal{N}_R$ costituisce una base di intorni di $\sigma'_{\rm alt}$ nella topologia dei cilindri. Poi si dimostra [EFS] che esiste un numero $\delta > 0$ tale che comunque si prenda un $\mathcal{N}_R$ esistono due sottoinsiemi non vuoti $\mathcal{N}_+$ e $\mathcal{N}_-$ di $\mathcal{N}_R$ e due costanti c_+ e c_- tali che

$$\begin{cases} c_+ - c_- \geq \delta \\ \mu_{\sigma'^+,\beta}(\sigma_O) \geq c_+ \quad \text{se } \sigma'^+ \in \mathcal{N}_+ \\ \mu_{\sigma'^-,\beta}(\sigma_O) \leq c_- \quad \text{se } \sigma'^- \in \mathcal{N}_- \end{cases} . \tag{1.34}$$

Fissato R, gli insiemi aperti $\mathcal{N}_\pm$ vengono definiti scegliendo un opportuno $R' > R$ e ponendo:

$$\mathcal{N}_\pm := \{\sigma' : \ \sigma' = \sigma'_{\rm alt} \text{ su } \Lambda_{\rm R},\, \sigma' = \pm 1 \text{ su } \Lambda_{\rm R'} \setminus \Lambda_{\rm R},\, \sigma' \text{ arbitraria altrove}\} \ .$$

Le disequazioni (1.34) caratterizzano il comportamento discontinuo della misura intermedia relativa a $\sigma'_{\rm alt}$ in un intorno di questa configurazione; ma dalla definizione di intorno, nella topologia dei cilindri, è anche chiaro che deve essere possibile mettere in relazione la discontinuità della misura intermedia con la forte dipendenza dagli spin lontani della misura rinormalizzata.

In [EFS] si dimostra, infatti, a partire dalle (1.34), che esiste un $\delta > 0$ tale che comunque si prenda un intorno $\mathcal{N}$ di $\sigma'_{\rm alt}$ è possibile prendere R abbastanza grande in modo che $\mathcal{N}_{\frac{R}{2},\frac{R}{2}+1,\pm} \subset \mathcal{N}$ e si ha

$$\mu'_\beta(\sigma'_O|\sigma'^+ \text{ in } \{{\rm O}\}^{\rm c}) - \mu'_\beta(\sigma'_{\rm O}|\sigma'^- \text{ in } \{{\rm O}\}^{\rm c}) \geq \delta > 0 \tag{1.35}$$

con $\sigma'^\pm \in \mathcal{N}_{\frac{R}{2},\frac{R}{2}+1,\pm}$. La (1.35) mette in luce che il valore d'attesa dello spin rinormalizzato nell'origine dipende fortemente da ciò che avviene arbitrariamente lontano da essa e constituisce la prova che la specificazione con cui μ'_β è consistente non è quasi-locale e, quindi, la misura rinormalizzata non è gibbsiana.

In [EFS] l'approccio descritto in precedenza è stato generalizzato ed applicato a numerosi casi interessanti, per esempio la transformzazione di Kadanoff, quella di block averaging e la majority rule.

1.5 Assenza di patologie per il modello di Ising critico

Nella sezione precedente sono stati mostrati alcuni esempi di trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione che esibiscono un comportamente patologico; in questa sezione, invece, in un caso di grande interesse fisico, come il modello di Ising bidimensionale al punto critico, si "dimostra" che le trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione sono ben definite, cioè la misura rinormalizzata è gibbsiana [CO2] (si veda l'Allegato 1).

In realtà l'espressione "si dimostra" non è completamente corretta, perchè tramite una catena di implicazioni logiche basate su risultati di R.L. Dobrushin, F. Martinelli, E. Olivieri e S. Shlosman, si riduce la dimostrazione alla stima di una grandezza e la misura di questa quantità viene effettuata per mezzo di una simulazione numerica. La misura di questa grandezza, d'altro canto, è molto delicata e in [CO2] è stata sviluppata una dinamica, chiamata *dynamical surgery* (generalizzando la terminologia introdotta in [DS1]), adatta al nostro problema. In questa sezione verranno descritti i risultati di [CO2] e per i dettagli tecnici si rimanda all'Allegato 1.

Si considera il modello di Ising critico, cioè con le notazioni introdotte nelle sezioni precedenti si considera il caso $J = 1$, $h = 0$ e $\beta = \beta_c$; si denota la misura di equilibrio con il simbolo μ_{β_c}. Si definisce poi la trasformazione di rinormalizzazione nota come *majority rule* [NL1, NL2]:

Definizione 1.10 (Trasformazione MR) *Si suddivide il reticolo $\mathcal{L}$ in blocchi 2×2 denotati con B_i; al blocco i-esimo viene associata la variabile immagine*

$$\sigma'_i := \begin{cases} \mathrm{sign} \sum_{\mathrm{j} \in \mathrm{B_i}} \sigma_{\mathrm{j}} & \text{se } \sum_{\mathrm{j} \in \mathrm{B_i}} \sigma_{\mathrm{j}} \neq 0 \\ \sigma^*_{B_i} & \text{altrimenti} \end{cases} \quad ,$$

dove $\sigma^*_{B_i}$ rappresenta lo spin in alto a sinistra nel blocco B_i, ovvero il primo spin in ordine lessicografico. Si denota con σ' una configurazione delle variabili immagine, con $\mathcal{L}'$ il nuovo reticolo, con $\Omega'_{\mathcal{L}'} := \{-1, +1\}^{\mathcal{L}'}$ il nuovo spazio delle configurazioni e con $\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'}$ la relativa σ-algebra dei borelliani. Per costruire la misura del modello immagine si definisce il nucleo di probabilità $T : (\Omega_{\mathcal{L}},\mathcal{F}_{\mathcal{L}}) \longrightarrow (\Omega'_{\mathcal{L}'},\mathcal{F}'_{\mathcal{L}'})$ nel modo seguente:

$$T(\sigma,A) := \begin{cases} 1 & \sigma \text{ tale che } \sigma' \in A \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \qquad \forall \sigma \in \Omega_{\mathcal{L}}, \forall A \in \mathcal{F}'_{\mathcal{L}'} \quad ,$$

quindi si definisce:

$$\mu'_{\beta_c}(A) := \int \mu_{\beta_c}(d\sigma)\chi_A(\sigma)T(\sigma,A) \qquad \forall A \in \mathcal{F}'_{\mathcal{L}'} \quad .$$

Inoltre, considerata una configurazione σ' si definiscono i modelli intermedi come nel caso della decimazione (Definizione 1.9); in questo caso un modello intermedio è un modello di Ising in cui in ogni blocco B_i sono ammesse soltanto 8 delle 16 possibili configurazioni. Più precisamente, si dividono le 16 possibili configurazioni di un blocco 2×2 in due classi C_+ e C_- nel modo seguente:

- configurazioni di blocco appartenenti alla classe C_+

$$\begin{bmatrix} - & + \\ + & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & - \\ - & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & - \\ + & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & - \\ + & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & + \\ - & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & + \\ - & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & + \\ + & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & + \\ + & + \end{bmatrix}$$

- configurazioni di blocco appartenenti alla classe C_-

$$\begin{bmatrix} - & - \\ - & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & - \\ - & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & - \\ + & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & - \\ + & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & + \\ - & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & + \\ - & + \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & + \\ + & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + & - \\ - & - \end{bmatrix}$$

Ebbene nel modello intermedio μ_{σ',β_c} in corrispondenza del blocco B_i vanno considerate solo le 8 configurazioni di C_+, se $\sigma'_i = +1$, di C_- si $\sigma'_i = -1$.

La strategia seguita in [CO2] per dimostrare che la misura rinormalizzata μ'_{β_c} è gibbsiana consiste nell'utilizzare il Teorema 1.1 di [HK] che in sostanza dice: considerati tutti i possibili modelli intermedi $\mu^{\tau}_{\sigma',V}$ definiti sul volume finito V e con condizioni al bordo τ, se questi soddisfano ad una condizione di decadimento esponenziale delle correlazioni (che assicura l'assenza di transizione di fase nel limite termodinamico), allora la misura rinormalizzata è gibbsiana. In realtà piuttosto che verificare direttamente le ipotesi del teorema di Haller e Kennedy, l'idea è verificare che tutti i modelli intermedi soddisfano ad una condizione di *strong mixing*, da cui, con gli argomenti della dimostrazione di [HK], si deduce direttamente la gibbsianità della misura rinormalizzata.

Definizione 1.11 (Strong Mixing) *Un misura di Gibbs μ^{τ}_{Λ} definita sul volume finito Λ e con condizioni al bordo τ soddisfa ad una condizione di strong mixing con costanti C e γ se e solo se per ogni $\Delta \subset \Lambda$*

$$\sup_{\tau,\tau^{(y)}\in\Omega_{\Lambda^c}} Var(\mu^{\tau}_{\Lambda,\Delta},\mu^{\tau^{(y)}}_{\Lambda,\Delta}) \leq Ce^{-\gamma \mathrm{dist}(\Delta,\mathrm{y})} \tag{1.36}$$

dove $\tau^{(y)}_x = \tau_x$ per ogni $x \neq y$ e $\mu^{\tau}_{\Lambda,\Delta}$ è la relativizzazione di μ^{τ}_{Λ} al sottovolume $\Delta \subset \Lambda$. Questa condizione viene denotata con il simbolo $SM(\Lambda,C,\gamma)$.

In sostanza dire che una misura è $SM(\Lambda,C,\gamma)$ vuol dire che ciò che avviene all'interno del volume Λ dipende poco dal bordo, cioè in ogni sottovolume di Λ non "cambia nulla" se la condizione al bordo viene cambiata in un punto, perchè l'influenza del bordo decade in modo esponenziale quando ci si allontana dal punto in cui la condizione al bordo è stata modificata. Nella terminologia introdotta da Dobrushin e Shlosman una misura che soddisfa ad una condizione di strong mixing in tutti i volumi finiti è detta *completamente analitica*: se un sistema è in regime di completa analiticità non solo si dimostra l'unicità della misura di gibbs, e quindi l'assenza di transizione di fase, ma una serie di ulteriori proprietà, equivalenti fra loro, che caratterizzano completamente la misura stessa [DS2].

Assieme alla nozione di strong mixing si definisce quella di *weak mixing*:

Definizione 1.12 (Weak mixing) *Un misura di Gibbs μ^{τ}_{Λ} definita sul volume finito Λ e con condizioni al bordo τ soddisfa ad una condizione di weak mixing con costanti C e γ se e solo se per ogni $\Delta \subset \Lambda$*

$$\sup_{\tau,\tau'\in\Omega_{\Lambda^c}} Var(\mu^{\tau}_{\Lambda,\Delta},\mu^{\tau'}_{\Lambda,\Delta}) \leq C \sum_{x\in\Delta,y\in\partial\Lambda^+} e^{-\gamma|x-y|} \tag{1.37}$$

dove $\partial\Lambda^+ := \{x \in \Lambda^c : \ |x-y| = 1\}$. Questa condizione viene denotata con il simbolo $WM(\Lambda,C,\gamma)$.

La nozione di weak mixing è più debole di quella di strong mixing, infatti esistono esempi di modelli [Sc3] che soddisfano a condizioni di weak mixing, ma non a condizioni di strong mixing. Nel caso bidimensionale, però, F. Martinelli, E. Olivieri e R.H. Schonmann hanno provato la loro equivalenza nel senso illustrato dal seguente teorema [MOS]:

Teorema 1.3 (Martinelli, Olivieri, Schonmann) *Si consideri il caso bidimensionale: se esistono due costanti C e γ tali che la misura di Gibbs μ^{τ}_{Λ} soddisfa alla condizione $WM(\Lambda,C,\gamma)$ per ogni volume finito Λ, allora esistono due costanti positive C' e γ' tali che la misura di Gibbs μ^{τ}_{Λ} soddisfa alla condizione $SM(\Lambda,C',\gamma')$ per tutti i volumi Λ sufficientemente regolari, cioè per tutti i volumi multipli di un quadrato suficientemente grande.*

Poichè usando gli argomenti sviluppati da Haller e Kennedy e l'ipotesi che tutti i modelli intermedi siano strong mixing su volumi sufficientemente regolari è possibile dimostrare la gibbsianità della misura rinormalizzata, allora, grazie al Teorema 1.3, il nostro problema si riduce a verificare che tutti i modelli intermedi sono "weak mixing" su tutti i volumi finiti.

Le condizioni di weak e strong mixing sono delle condizioni di "taglia finita", perchè sono delle proprietà che un sistema deve soddisfare su un volume finito; ma per poter dedurre dei risultati sulla misura di volume infinito è necessario che queste siano valide per tutti i sottovolumi finiti o perlomeno per tutti i sottovolumi sufficientemente regolari. In [DS1] Dobrushin e Shlosman hanno introdotto una condizione di taglia finita, che chiamerò $DSU(\Lambda,\delta)$, tale che se esiste un volume finito sufficientemente grande Λ in cui il sistema soddisfa alla condizione $DSU(\Lambda,\delta)$, allora si possono dedurre una serie di proprietà del modello nel limite termodinamico, per esempio l'unicità della misura di Gibbs di volume infinito, in altri termini l'assenza di transizione di fase. La condizione DSU, quindi, è una condizione di volume finito molto forte: per ottenere informazioni sul limite termodinamico non bisogna esaminare direttamente la misura di volume infinito, oppure la misura di volume finito su tutti i sottovolumi finiti, ma basta studiare il sistema in un volume finito, purchè sia sufficientemente grande.

In particolare in [DS1] è stato dimostrato il seguente teorema:

Teorema 1.4 (Dobrushin, Shlosman) *Se $DSU(V,\delta)$ è soddisfatta per un volume sufficientemente grande V e per un $\delta < 1$, allora esistono due costanti positive C e γ tali che la condizione $WM(\Lambda,C,\gamma)$ è soddisfatta per ogni volume finito Λ.*

Dal punto di vista della dimostrazione della gibbsianità della misura rinormalizzata μ'_{β_c} è possibile usare i risultati enunciati in precedenza e ridursi a verificare che esiste un volume finito sufficientemente grande V tale che tutti i modelli intermedi soddisfano la condizione $DSU(V,\delta)$. Si enuncia, quindi, la condizione DSU:

Definizione 1.13 (Condizione DSU) *Si consideri una metrica sullo spazio di singolo spin $S := \{-1,+1\}$, preso un volume finito V si definisce la metrica su S^V:*

$$\rho_V(\sigma_V,\eta_V) := \sum_{x\in V} \rho(\sigma_x,\eta_x) \qquad \forall \sigma_V,\eta_V \in S^V \quad .$$

Si dice che la condizione $DSU_\rho(V,\delta)$ è soddisfatta se e solo se esiste un insieme finito V e un numero $\delta > 0$ tali che: per ogni $x \in \partial V^+$ esiste $\alpha_x > 0$ tale che comunque si prenda una coppia di condizioni al bordo $\tau,\tau' \in S^{V^c}$ con $\tau_y = \tau'_y$ per ogni $y \neq x$ si ha

$$\mathcal{D}_{\rho_V}(\mu_V^\tau,\mu_V^{\tau'}) \leq \alpha_x \rho(\tau_x,\tau'_x)$$

e

$$\sum_{x\in\partial V^+} \alpha_x \leq \delta|V| \quad ,$$

dove è stata introdotta la distanza di Vasserstein

$$\mathcal{D}_{\rho_V}(\mu_V^\tau,\mu_V^{\tau'}) := \inf_{\mu\in\mathcal{K}(\mu_V^\tau,\mu_V^{\tau'})} \sum_{\sigma_V,\eta_V\in S^V} \rho_V(\sigma_V,\eta_V)\mu(\sigma_V,\eta_V) \tag{1.38}$$

con $\mathcal{K}(\mu_V^\tau,\mu_V^{\tau'})$ l'insieme di tutte le rappresentazioni congiunte di μ_V^τ e $\mu_V^{\tau'}$.

Dire che un sistema soddisfa alla $DSU(V,\delta)$ con un $\delta < 1$ vuol dire che cambiando la condizione al bordo in un punto le due misure di Gibbs in V sono molto vicine, nel senso che la loro distanza di Vasserstein è più piccola del rapporto $\frac{|V|}{|\partial V^+|}$.

Per verificare che tutti i modelli intermedi soddisfano alla condizione DSU si procede nel modo seguente: si fissa un volume V, si sceglie una configurazione immagine σ' e si considera il modello intermedio $\mu^{\tau}_{V,\sigma',\beta_c}$ con condizione al bordo τ. Poi si calcola la quantità

$$\mathcal{E}^{\tau,\tau^{(x)}}_{V,\sigma',\beta_c} := \mathcal{D}_{\rho_V}(\mu^{\tau}_{V,\sigma',\beta_c},\mu^{\tau^{(x)}}_{V,\sigma',\beta_c})\frac{|\partial V^+|}{|V|} \tag{1.39}$$

dove si è scelta la metrica $\rho := 1 - \delta_{\eta_x,\eta'_x}$ sullo spazio di singolo spin $S = \{-1, +1\}$. È facile convincersi che se

$$\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c} := \sup_{x\in\partial V^+} \sup_{\tau\in S^{\partial V^+}} \mathcal{E}^{\tau,\tau^{(x)}}_{V,\sigma',\beta_c} < 1$$

allora il modello intermedio relativo alla configurazione σ' soddisfa alla condizione $DSU_\rho(V,\delta)$ con un $\delta < 1$. In definitiva il problema di dimostrare la gibbsianità della misura rinormalizzata si riduce a mostrare che la quantità $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ è minore di uno per tutti i modelli intermedi.

La grandezza $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ è stata misurata mediante simulazioni Monte Carlo. In [BMO] è stato posto un problema analogo nel caso della trasformazione di block averaging, ma il calcolo numerico è stato effettuato con l'usuale dinamica di Metropolis che ha permesso la misura di un estremo inferiore dell'estimatore $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ e ciò è chiaramente non sufficiente per dedurre la validità della condizione DSU. In [CO2], invece, è stata introdotta una nuova dinamica che permette di misurare un estremo superiore di $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ e quindi di "dimostrare" numericamente che tutti i modelli intermedi soddisfano la condizione di Dobrushin e Shlosman e che quindi la misura rinormalizzata è gibbsiana.

L'idea alla base della dinamica è la seguente: per calcolare esattamente la distanza di Vasserstein tra le due misure $\mu^{\tau}_{V,\sigma',\beta_c}$ e $\mu^{\tau^{(x)}}_{V,\sigma',\beta_c}$ si dovrebbe essere in grado di determinare la misura congiunta $\mu^* \in \mathcal{K}(\mu^{\tau}_{V,\sigma',\beta_c},\mu^{\tau^{(x)}}_{V,\sigma',\beta_c})$ che minimizza la somma (1.38), ma ciò risulta troppo difficile. D'altro canto è possibile calcolare la distanza di Vasserstein tra tra le misure relativizzate ad un singolo blocco (si veda la Sezione 4 dell'Allegato 1), allora si può considerare un Monte Carlo in cui due copie del sistema, che differiscono solo per la condizione al bordo in un punto, evolvono simultanemente e ad ogni passo la coppia di sistemi viene aggiornata in accordo con la misura congiunta che realizza il minimo nella distanza di Vasserstein su un singolo blocco.

Se si lascia evolvere il sistema per un tempo sufficientemente lungo, la coppia di sistemi termalizza su una misura congiunta che, sperabilmente, non è molto lontana dalla μ^*. Calcolando la media temporale della distanza tra due configurazioni, quindi, si calcola la somma (1.38) con una misura congiunta vicina alla μ^* che ottimizza la somma stessa, quindi si riesce a stimare la distanza di Vasserstein. In realtà, poichè il Monte carlo non realizza esattamente la misura μ^* ciò che si misura non è esattamente $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$, ma soltanto un suo estremo superiore $\mathcal{U}_{V,\sigma',\beta_c}$. Ma ciò è comunque un risultato che per noi è sufficiente, infatti se la nostra misura è minore di uno, a maggior ragione lo sarà la grandezza $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ e quindi avremo "dimostrato" numericamente che tutti i modelli intermedi soddisfano la condizione DSU. Ovviamente questa strategia presenta un rischio: se il Monte Carlo realizza una misura congiunta troppo lontana da μ^*, può accadere che noi misuriamo qualcosa che sia molto maggiore di $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ e che addirittura sia maggior di uno, pur essendo $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c} < 1$.

Dal punto di vista numerico il calcolo ha due aspetti contrastanti: a livello intuitivo ci si aspetta che la distanza tra le misure cresca con il crescere del volume perchè quando il volume cresce la differenza tra due configurazioni ha più spazio per propagarsi. Ma se il volume diventa abbastanza grande, tipicamente maggiore della lunghezza di correlazione del modello, allora la distanza tra le misure dovrebbe essere costante rispetto al volume. Inoltre il nostro estimatore (1.39) ha il fattore $\frac{|\partial V^+|}{|V|}$ che tende a farlo decrescere quando il volume cresce, quindi questo

l	$\mathcal{U}_{V,\beta_c}$	$\Delta\mathcal{U}_{V,\beta_c}$
2	1.452	0.0074
3	1.122	0.0071
4	0.877	0.0046
8	0.436	0.0026
16	0.207	0.0016

Tabella 1.1. Misura Monte Carlo di $\mathcal{U}_{V,\beta_c}$, ovvero dell'estremo superiore di $\mathcal{U}_{V,\sigma',\beta_c}$ su tutti i modelli intermedi considerati nelle simulazioni, eseguita per diversi volumi. La variabile l rappresenta la semilunghezza del lato del quadrato V.

argomento intuitivo suggerisce che quanto più è grande il volume tanto più facile dovrebbe essere la misura di valori piccoli di $\mathcal{E}_{V,\sigma',\beta_c}$ per tutti i modelli intermedi.

Ma, d'altro canto, quando si considerano volumi troppo grandi il numero di possibili modelli intermedi ed il numero di possibili condizioni al bordo che bisogna controllare, in altri termini il numero totale di esperimenti numerici che bisogna effettuare, cresce esponenzialmente. In [CO2] abbiamo cercato di ottimizzare questi aspetti contrastanti considerando volumi sufficientemente grandi, per assicurarci che il nostro estimatore fosse minore di uno, ma limitandoci ad eseguire una statistica su tutti i possibili modelli intermedi e su tutte le possibili condizioni al bordo.

Per la descrizione dettagliata di tutti i risultati numerici e del metodo seguito per eseguire la statistica si rimanda alla Sezione 5 dell'Allegato 1, qui si delinenano le idee guida e si espongono i risultati principali.

In primo luogo la quantità $\mathcal{U}_{V,\sigma',\beta_c}$ è stata misurata per volumi crescenti eseguiendo una statistica cieca sui modelli intermedi e sulle condizioni al bordo, cioè per ogni volume sono stati scelti a caso un certo numero di modelli intermedi e di condizioni al bordo.

I risultati in Tabella 1.1 suggeriscono che nel caso $l = 4$ tutti i modelli intermedi soddisfano la condizione

$$\mathcal{U}_{V,\sigma',\beta_c} < 1 \tag{1.40}$$

e che quindi $l = 4$ è il valore abbastanza grande del lato del volume sufficiente per i nostri scopi. Ma, già ad $l = 4$ non è possibile considerare tutti i modelli intermedi e tutte le possibili condizioni al bordo, in effetti il risultato in Tabella 1.1 è stato ottenuto considerando soltanto 50 dei 2^{16} modelli intermedi e 60 coppie di possibili condizioni al bordo. Quindi è possibile che esista un modello (o una condizione al bordo) particolarmente sfortunato, in corrispondenza del quale risulti $\mathcal{U}_{V,\sigma',\beta_c} > 1$.

Inoltre si osserva che la distanza tipica, $\frac{l}{4}\mathcal{U}_{V,\sigma',\beta_c}$, fra le due copie del sistema, cresce da 0.530 a 0.8415 quando si passa da $l = 1$ a $l = 3$ e poi resta approssimativamente costante, confermando la descrizione intuitiva del fenomeno data in precedenza; e ciò costituisce una ulteriore conferma che il volume corrispondente ad $l = 4$ dovrebbe essere sufficiente per affermare che tutti i modelli intermedi soddisfano DSU.

Ma per poter supportare questa tesi si è anche cercato di fare una sorta di "statistica intelligente": si è considerato il caso $l = 6$, in modo da avere un estimatore abbastanza piccolo (tra 0.436 e 0.877, come suggerisce la Tabella 1.1) e allo stesso tempo degli esperimenti numerici non troppo lunghi (alcuni giorni di CPU su un alpha 125). La statistica intelligente è stata effettuata cercando di individuare i modelli intermedi più pericolosi (σ' antiferromagnetica o lamellare) e la regione in cui la differenza tra le due copie del sistema si propaga a partire dal punto in cui le due condizioni al bordo sono diverse. Alla fine abbaimo ottenuto

$$\mathcal{U}_{V,\beta_c} = 0.633 \quad \Delta\mathcal{U}_{V,\beta_c} = 0.011 \ \ ,$$

che ci permette di affermare con notevole confidenza che in corrispondenza di $l = 6$ tutti i modelli intermedi soddisfano la condizione di taglia finita di Dobrushin e Shlosman e che , in virtù della catena di implicazioni logiche discusse in precedenza, la misura rinormalizzata μ'_{β_c} è gibbsiana.

Allegato 1

Renormalization-group at criticality and complete analiticity of constrained model: a numerical study.

E.N.M. Cirillo, E. Olivieri, Journ. Stat. Phys. 86, 1117-1151, 1997

Riassunto
Si studia la trasformazione nota con il come di Majority Rule appliacata alla misura di Gibbs del modello di Ising bidimensionale al punto critico. Lo scopo è dimostrare che la trasformazione è ben definita nel senso che la misura rinormalizzata è gibbsiana. Studiamo la validità della condizione di taglia finita di Dobrushin-Shlosman per i sistemi intermedi corrispondenti a diverse configurazioni del modello immagine. È noto che DSU implica, nel caso bidimensionale, la completa analiticità, da cui segue la gibbsianità, come è stato mostrato recentemente da Haller e Kennedy. Si introduce un algoritmo Monte Carlo per calcolare la distanza di Vasserstein tra misure di Gibbs di volume finito con diverse condizioni al bordo. Otteniamo delle forti indicazioni numeriche che la condizione DSU è verificata per volumi abbastanza grandi e per tutti i modelli intermedi.

Capitolo 2

Applicazione del CVM ad alcuni modelli di superfici

2.1 Introduzione

In questo capitolo verrà mostrato come il CVM permetta di ottenere notevoli informazioni sul diagramma di fase di alcuni modelli di superfici su reticolo, per i quali, a causa della loro complessità, esistono pochi risultati esatti.

I modelli di superfici su reticolo sono stati sviluppati con l'intento di descrivere le proprietà delle membrane [Lip, NPW]. In biologia si distingue tra due tipi di membrane: le membrane fluide sono costituite da un doppio strato di lipidi in cui si incastrano molecole di proteine. I lipidi, che costituiscono la struttura portante della molecola, hanno proprietà amfifile, posseggono una parte idrofila, la testa, ed una idrofoba formata da due code; le dimensioni tipiche di queste molecole sono dell'ordine di $10 - 20$ Angstrom. Le proteine, invece, sono i siti attivi della membrana e sono costituiti da una catena di aminoacidi. I lipidi sono molto mobili e forniscono alla membrana il carattere di fluido incompressibile bidimensionale, mentre le proteine diffondono lentamente nel fluido di lipidi.

Membrane costituite da un unico strato di molecole amfifile si formano all'interno delle miscele ternarie, per esempio le miscele di acqua, olio e surfatante (molecola amfifila, per esempio la lecitina). In sistemi di questo tipo si osserva una grande varietà di fasi diverse al cambiare della concentrazione relativa dei costituenti della miscela. Per esempio si osservano fasi lamellari, in cui acqua e olio si dispongono su strati alternati, separati da strati di surfatante; oppure si formano fasi disordinate in cui l'acqua e l'olio sono racchiuse in piccole micelle (*microemulsione*). All'aumentare della concentrazione di surfatante è possibile che si instauri una fase bicontinua, con un'interfaccia molto disordinata simile ad una spugna.

Un altro tipo di membrane è costituito da quelle che hanno una struttura rigida, per esempio a causa di una rete di proteine: una rete di spettrine è presente sulla membrana che costituisce il globulo rosso. Poichè il tempo tipico necessario per rompere o ridistribuire i legami tra le proteine è molto più grande della scala di tempo tipica per le fluttuazioni della struttura, il sistema può essere visto come una rete con connettività fissata.

Il passo tipico di una rete di proteine è dell'ordine di 100 nanometri, strutture più dense possono essere ottenute nel caso di molecole di lipidi polimerizzabili: esistono vari tipi di molecole fluide che sottoposte all'azione di raggi ultravioletti polimerizzano in reti bidimensionali. Su una scala grande rispetto al passo della rete, questi sistemi possono essere visti come dei fogli elastici il cui comportamento è regolato da un'energia di *bending*, che tende a rendere piatta la superficie, ed un termine di *stretching* che controlla la lunghezza dei legami [NP]. È stato osservato in [KKN] che per ogni temperatura maggiore di zero al variare del termine di bending la struttura passa da una fase piatta (*flat*) ad una fase accartocciata (*crumpled*).

Nella Sezione 2.2 si studieranno, con la tecnica del CVM, alcuni modelli per la descrizione della transizione di crumpling, mentre la Sezione 2.3 sarà dedicata allo studio della versione di Ising del modello ad otto vertici che si presta alla descrizione delle varie fasi presenti all'interno di una miscela ternaria; mentre nella Sezione 2.4 si discuteranno alcuni aspetti di questo modello in relazione con la Teoria delle Stringhe.

2.2 Il problema del folding

Come si è detto nell'introduzione un problema interessante connesso con i modelli di superfici è lo studio del *folding* (ripiegamento) di una superficie polimerizzata (una superficie triangolata). In modelli di questo tipo vengono introdotti, in generale, due termini di energia: un termine di *stretching* che cresce con il crescere della lunghezza del lato condiviso da due poligoni ed un termine, detto di *bending*, che tende a far stare sullo stesso piano due poligoni adiacenti, cioè tende a rendere piatta la superficie. È stato dimostrato che al variare dell'intensità del termine di bending dell'energia, il sistema subisce una transizione da una fase in cui è piatta ad una fase in cui ha delle pieghe (rispettivamente *flat* e *crumpled* phase).

Il problema di una superficie triangolata immersa in uno spazio ambiente di dimensione $D = 2$, con lunghezza dei lati dei triangoli fissata, è stato affrontato in [KJ, FG1, FG2]; in questo caso i vettori normali alle facce triangolari che costituiscono la superficie puntano o verso l'alto o verso il basso, ciò suggerisce una descrizione del problema in termini di un modello di Ising:

- si considera il reticolo esagonale (duale del reticolo triangolare);
- ad ogni sito viene associata una variabile di spin $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ il cui valore ci dice se la normale alla superficie punta verso l'alto o verso il basso;
- si impone che gli spin su un esagono regolare soddisfino al vincolo $\sum_{i \in \text{esagono}} \sigma_i = -6, 0, +6$, ciò assicura che la superficie sia continua, non abbia tagli;
- l'energia di bending viene scritta come interazione ferromagnetica tra spin associati a siti primi vicini: $-K \sum_{<ij>} \sigma_i \sigma_j$;
- viene introdotto un campo magnetico h che rompe la simmetria $\sigma_i \to -\sigma_i$.

In [FG1] questo modello è stato studiato con il metodo della matrice di trasferimento, in particolare, è stata determinata una transizione del primo ordine ad $h = 0$ e a $K = 0.11 \pm 0.01$ tra *flat* phase ed una *crumpled* phase.

Nel lavoro [CGP1] il modello di folding triangolare è stato generalizzato, supponendo che la superficie triangolare possa presentare tagli; ciò è stato realizzato supponendo che il vincolo sugli esagoni elementari possa essere violato, ma a ciò è stato assegnato un costo $L > 0$ in termini di energia. Pertanto il caso $L = 0$ corrisponde al puro modello di Ising su reticolo esagonale, mentre il caso $L \to \infty$ corrisponde al puro modello di folding. In altre parole l'hamiltoniana è stata definita come segue:

$$-\frac{\mathcal{H}}{k_B T} := K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i + L \sum_{\text{esagoni}} \delta\left(\{\sigma_i\}_{i \in \text{esagono}}\right) \quad , \tag{2.1}$$

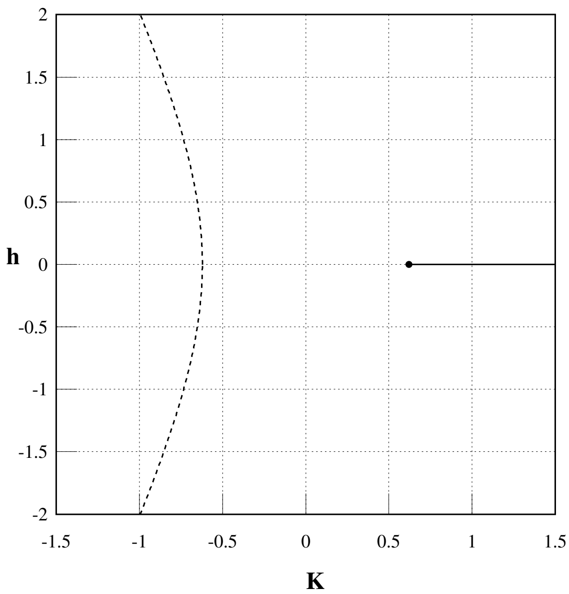


Figura 2.1. Diagramma di fase del modello (2.1) nel caso $L = 0$: modello di Ising. Le linee continue e quella tratteggiata indicano transizioni del primo e del secondo ordine rispettivamente.

ove la prima somma è effettuata su tutti i siti primi vicini e la funzione δ vale uno se il vincolo sulle celle elementari è soddisfatto, altrimenti vale zero.

Questo modello è stato studiato con il CVM: seguendo lo schema proposto in [A] si deve minimizzare l'energia libera

$$\begin{aligned} f(\rho_6) &= -\frac{3}{2}K\mathrm{Tr}(s_1 s_2 \rho_2(s_1,s_2)) - h\mathrm{Tr}(s_1\rho_1(s_1)) - \frac{1}{2}L{\sum}'\rho_6(\{s_i\}) \\ &+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\rho_6 \ln \rho_6) - \frac{3}{2}\mathrm{Tr}(\rho_2 \ln \rho_2) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\rho_{1A} \ln \rho_{1A}) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\rho_{1B} \ln \rho_{1B}) \\ &+\lambda(\mathrm{Tr}\rho_6 - 1), \end{aligned} \tag{2.2}$$

dove Tr vuol dire traccia, $\sum'$ è la somma sulle configurazioni che soddisfano il vincolo che definisce il modello, $\rho_{1A(B)}$, ρ_2 e ρ_6 sono rispettivamente le matrici densità di sito, coppia ed esagono e, infine, λ è un moltiplicatore di Lagrange che assicura la giusta normalizzazione di ρ_6 e, di conseguenza, di ρ_2 e di $\rho_{1A(B)}$. La minimizzazione dell'energia libera (2.2) è stata effettuata mediante le equazioni di iterazione naturale [Ki1, Ki2] (per maggiori dettagli si rimanda all'Allegato 2 [CGP1]).

Nel caso $L = 0$, corrispondente al modello di Ising su reticolo esagonale, si ottiene il classico diagramma di fase (Fig. 2.1) e la transizione critica tra fase ferromagnetica e paramagnetica viene trovata a $K = -0.6214$; il risultato è in ottimo accordo con il valore esatto $K = \frac{1}{2}\log(\sqrt{3}+2) \simeq 0.6585$ [HKW]. Nelle sezioni 3 e 4 dell'Allegato 2 è descritto come questo diagramma di fase si deforma al crescere di L fino a considerare il caso di puro folding. In Fig. 2.2 è riprodotto il diagramma di fase del modello (2.1) nel caso $L = 1.6$: i due punti critici che limitano il ramo superiore ed inferiore della linea del primo ordine hanno coordinate $K = 0.175$, $h = 0.0076$ e

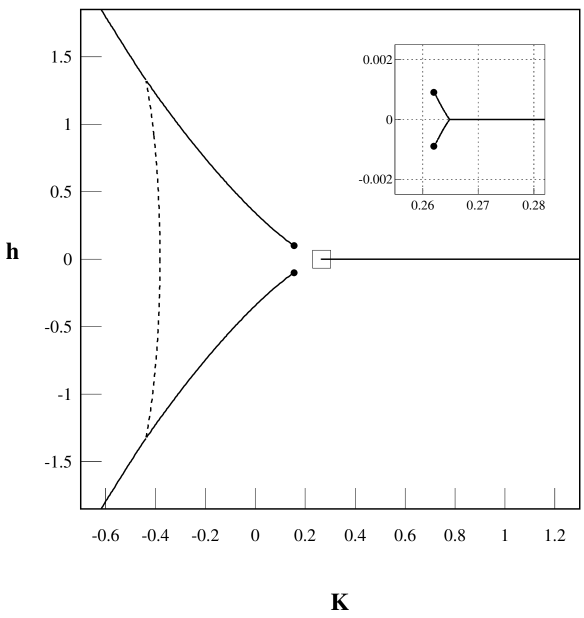


Figura 2.2. Diagramma di fase del modello (2.1) nel caso $L = 1.6$. Le linee continue e quella tratteggiata indicano transizioni del primo e del secondo ordine rispettivamente. I dischi neri rappresentano punti critici le cui coordinate sono date in Sezione 2.2. Il riquadro in alto a destra è un ingrandimento della regione del diagramma di fase racchiusa nel quadrato.

$K = 0.262$, $h = 0.0009$.

Il diagramma di fase del modello (2.1) nel caso di puro folding ($L \to \infty$) è mostrato in Fig. 2.3: i nostri risultati sono in ottimo accordo con quelli ottenuti in [FG2], ma tali risultati sono stati estesi alla regione $K < 0$ dove è stata trovata una transizione del primo ordine. Comunque, l'aspetto più interessante del diagramma 2.3 è che anche il CVM prevede una transizione non critica tra la fase flat e quella folded.

Questi risultati sono in contrasto con quelli ottenuti nel caso del modello di membrana polimerizzata introdotto in [KN]; tale modello è stato studiato sia con un approccio alla Landau-Ginzburg [NP, PKN, DG, AL, PK] sia mediante simulazioni numeriche [BEW, RK, HW, WS]: tutti questi risultati mostrano che al variare dell'energia di bending il sistema manifesta una transizione di fase critica da una fase crumpled ad una fase flat. Cosa accade, allora, se il modello di superficie triangolata con lunghezza dei legami fissa viene immerso in uno spazio ambiente tridimensionale?

In [BFGG] è stato proposto un modello in cui la superficie triangolata (varietà bidimensionale) viene immersa in un reticolo cubico a facce centrate (fcc), quindi in uno spazio di dimensione $D = 3$. In questo modello le placchette della superficie triangolata "poggiano" sulle facce del reticolo fcc, quindi due placchette adiacenti formano un angolo che può assumere soltanto quattro valori (si veda la Fig. 2.4).

In [BFGG] questo modello è stato scritto come un modello di spin: una coppia di variabili di spin z_i,$\sigma_i \in \{-1, +1\}$ viene associata ad ogni placchetta della superficie triangolata, ovvero ad ogni sito del reticolo esagonale bidimensionale duale della superficie triangolata. I valori di queste variabili su due placchette adicenti (per esempio $j = 1$ e $j = 2$) determinano l'angolo

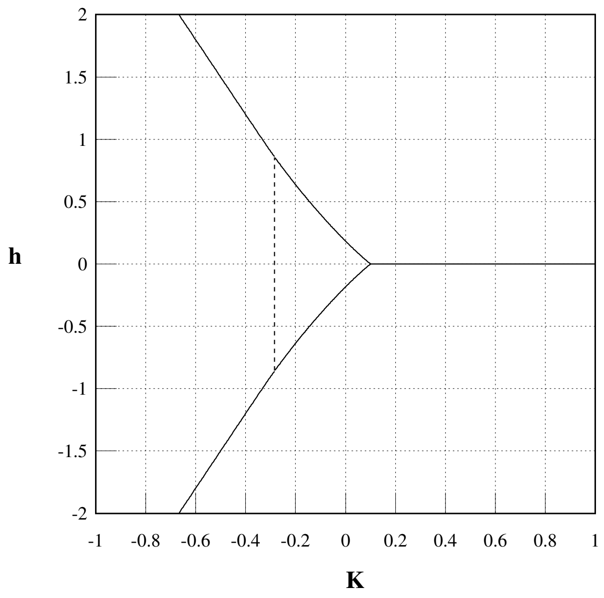


Figura 2.3. Diagramma di fase del modello (2.1) nel limite di puro folding. Le linee continue e quella tratteggiata indicano transizioni del primo e del secondo ordine rispettivamente.

fra le due placchette in accordo con le seguenti prescrizioni:

$$\begin{array}{lll} \frac{z_1}{z_2} = +1, & \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = +1 & \Rightarrow \text{assenza di piega} \\ \frac{z_1}{z_2} = -1, & \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = +1 & \Rightarrow \text{piega acuta} \\ \frac{z_1}{z_2} = -1, & \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = -1 & \Rightarrow \text{piega ottusa} \\ \frac{z_1}{z_2} = +1, & \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = -1 & \Rightarrow \text{piega completa} \end{array} \tag{2.3}$$

(si veda la Fig. 2.4). Perchè una configurazione delle variabili z_i e σ_i possa corrispondere effettivamente ad una configurazione della superficie triangolata sul reticolo fcc, le variabili di spin devono soddisfare i due vincoli seguenti:

$$\sum_{i=1}^{6} \sigma_i = 0 \bmod 3 \quad , \tag{2.4}$$

dove l'indice i è associato ai sei vertici di una cella elementare del reticolo esagonale, e

$$\sum_{i=1}^{6} \frac{1 - z_i z_{i+1}}{2} \Delta_{i,c} = 0 \bmod 2 \quad c = 1{,}2 \quad , \tag{2.5}$$

dove $z_7 = z_1$ e

$$\Delta_{i,c} := \begin{cases} 1 & \mathrm{se} \ \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{i}} \sigma_{\mathrm{j}} = \mathrm{c} \bmod 3 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad i = 1,\ldots,6,\ c = 1{,}2 \quad . \tag{2.6}$$

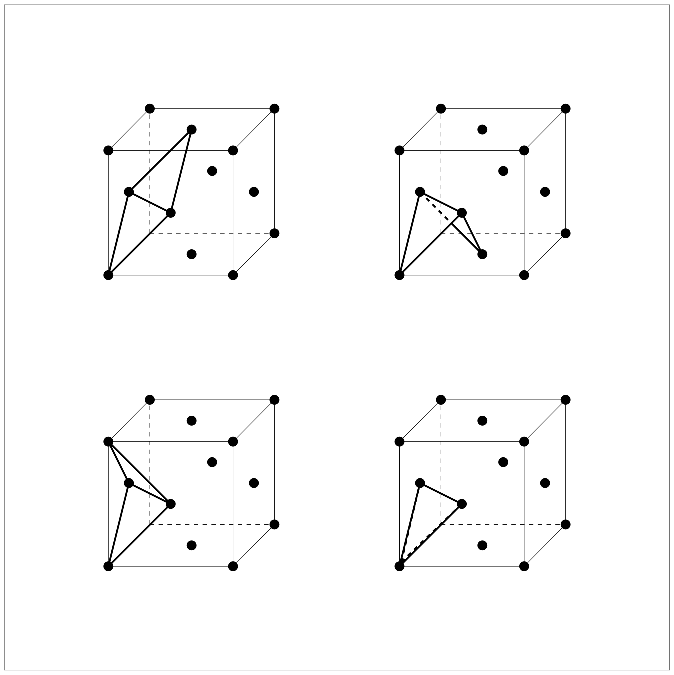


Figura 2.4. I quattro modi in cui è possibile piegare due placchette adiacenti della superficie triangolare immersa nel reticolo fcc. Da sinistra verso destra e dall'alto verso il basso: assenza di piega, piega acuta ($70^o32'$), piega ottusa ($109^o28'$) e piega completa. I dischi scuri rappresentano i vertici in una cella elementare del reticolo fcc.

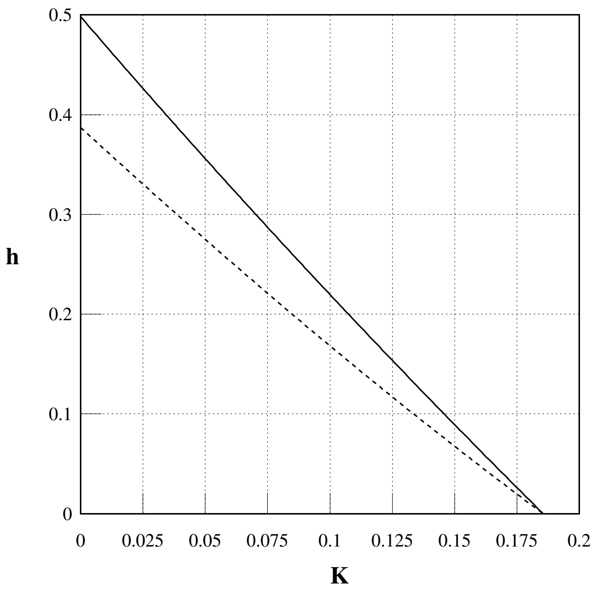


Figura 2.5. Diagramma di fase del modello (2.7).

Nel lavoro [CGP2] è stata definita l'hamiltoniana di questo modello

$$H(\sigma,z) := -\frac{K}{3}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j(1+2z_iz_j) - h\sum_i \delta_{z_i,1}\delta_{\sigma_i,1} \ , \tag{2.7}$$

per ogni configurazione (σ,z) ed è stato studiato il suo comportamento all'equilibrio termodinamico con il CVM (per i dettagli tecnici si rimanda all'Allegato 3). La funzione (2.7) è stata definita associando a due placchette adiacenti il costo energetico $-K\cos\theta$ con θ l'angolo tra le due normali alle placchette; tale contributo può essere scritto nella forma $-\frac{K}{3}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j(1+2z_iz_j)$ in termini delle variabili di spin. Per rompere la simmetria dell'hamiltonia sotto la trasformazione $z_i \to -z_i$ e $\sigma_i \to -\sigma_i$ $\forall i$ è stato introdotto il campo h.

Il diagramma di fase del modello (2.7) è stato riportato in Fig. 2.5. Si osserva che per ogni valore del campo h si trova una transizione del primo ordine da una fase flat ad una fase folded. Il CVM, quindi, suggerisce che non è sufficiente immergere la superficie triangolata nel reticolo fcc per ottenere le proprietà critiche della transizione di crumpling.

2.3 Le miscele ternarie

Lo studio delle miscele ternarie in Meccanica Statistica è stato condotto mediante l'introduzione di modelli di spin definiti su reticolo cubico tridimensionale. Gli spin $+1$ e -1 rappresentano due elementi della miscela, per esempio acqua e olio, mentre il surfatante è rappresentato dalle superfici di Peierls che separano le isole di più da quelle di meno. Le varie fasi possone essere controllate introducendo dei parametri opportuni nell'hamiltoniana del modello.

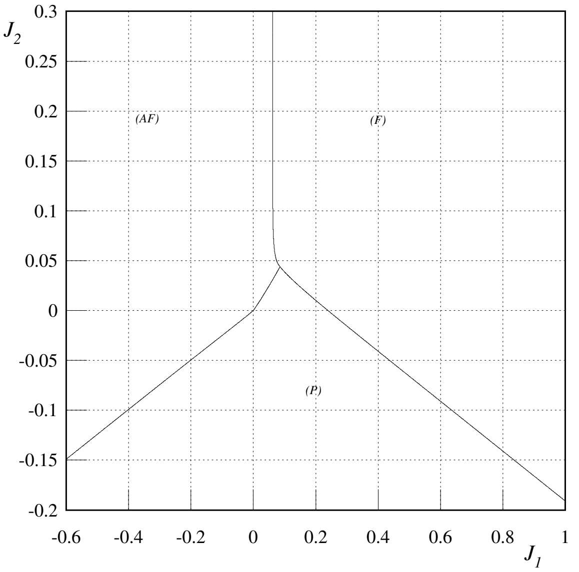


Figura 2.6. Diagramma di fase del modello (2.8) nel caso $J_4 = J_2$. F,P e AF denotano rispettivamente le fasi ferromagnetica, paramagnetica ed antiferromagnetica.

Un modello particolarmente interessante è quello in cui si considera l'accoppiamento tra spin primi vicini, secondi vicini e placchette. L'hamiltoniana del modello è la seguente

$$H := J_1 \sum_{<ij>} \sigma_i\sigma_j + J_2 \sum_{<<ij>>} \sigma_i\sigma_j + J_4 \sum_{{}^{i}_{l}\square^{j}_{k}} \sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l \quad , \tag{2.8}$$

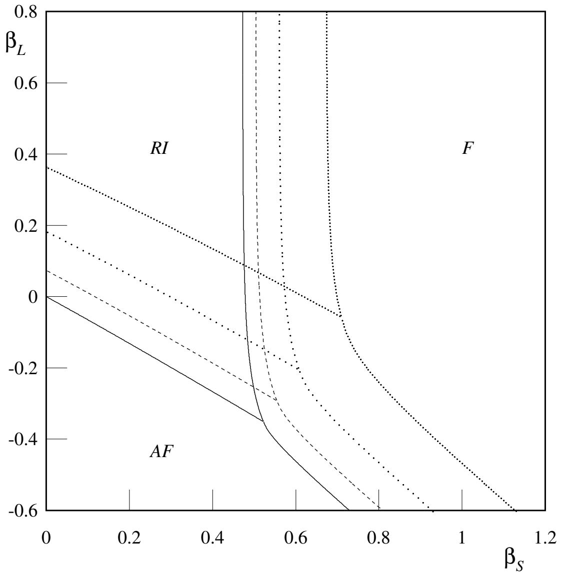


Figura 2.7. Diagramma di fase del modello (2.8) nel piano $\beta_L - \beta_S$ per diversi valori di β_C. Le diverse curve, da destra verso sinistra, si riferiscono ai valori $\beta_C = -0.2, -0.1, -0.04, 0$. I simboli F, AF e RI denotano rispettivamente le fasi ferromagnetica, antiferromagnetica e *random isotropic*, ovvero paramagnetica.

dove J_1, J_2 e J_4 sono numeri reali, $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ è la variabile di spin associata al sito i e le tre somme sono eseguite rispettivamente su tutte le coppie di siti primi vicini, secondi vicini e su tutte le placchette del reticolo cubico tridimensionale. I parametri J_1, J_2 e J_4 possono essere espressi in termini dei parametri β_S, β_C e β_L che rappresentano, rispettivamente, il costo in termini di energia di una placchetta, di due placchette ad angolo retto e di quattro placchette che condividono un lato [CCGM]:

$$J_1 = \frac{\beta_S + \beta_L}{2} + \beta_C, \;\; J_2 = -\frac{\beta_L}{8} - \frac{\beta_C}{4}, \;\; J_4 = -\frac{\beta_L}{8} + \frac{\beta_C}{4} \;\; . \tag{2.9}$$

Valori positivi di β_C favoriscono le configurazioni piatte, in sostanza β_C corrisponde ad una energia media di curvatura; mentre valori positivi del termine β_L inibiscono la presenza di contatti tra le varia superfici, nel limite $\beta_L \to \infty$ si ha un modello di superfici autoevitantesi (*self-avoiding*).

Il modello (2.8) è stato introdotto come un semplice modello statistico atto a descrivere il comportamento delle superfici random [NPW, CCGM, Ka] e delle microemulsioni [GS]; di recente è stata proposta la sua interpretazione come modello discreto di stringhe (*gonihedric Ising model*) [ASSS, SW, SSW, JM, PW, CGJP].

Il comportamento critico della versione bidimensionale del modello (2.8) è stato studiato a lungo ed è, oramai, ben noto [Le, Bax]; il caso tridimensionale è un problema tutt'ora aperto. I risultati ottenuti con la teoria di campo medio [CCGM, GLM] suggeriscono che il diagramma di fase di tale modello sia estremamente ricco e che presenti fasi ordinate lamellari e bicontinue e fasi di disordine strutturato e non-strutturato [W, CGM]. Il diagramma di fase appare molto interessante perché riproduce alcune delle fasi che vengono osservate sperimentalmente.

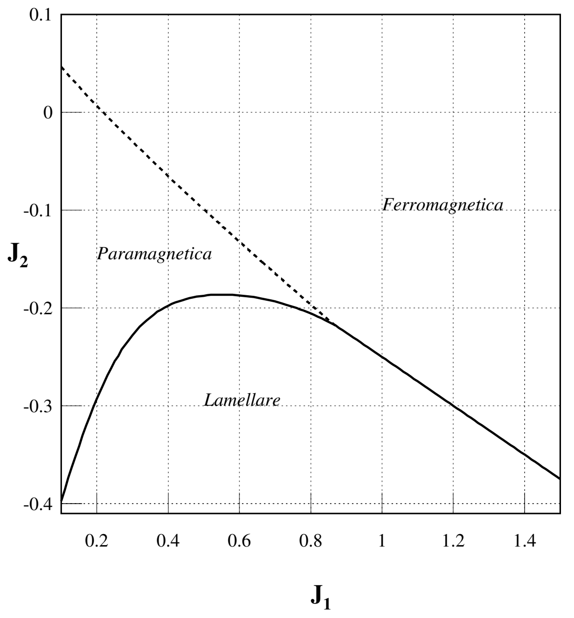


Figura 2.8. Diagramma di fase del modello (2.8) nel caso $J_4 = 0$. La linea continua e quella a tratti rappresentano, rspettivamente, una transizione del primo e del secondo ordine.

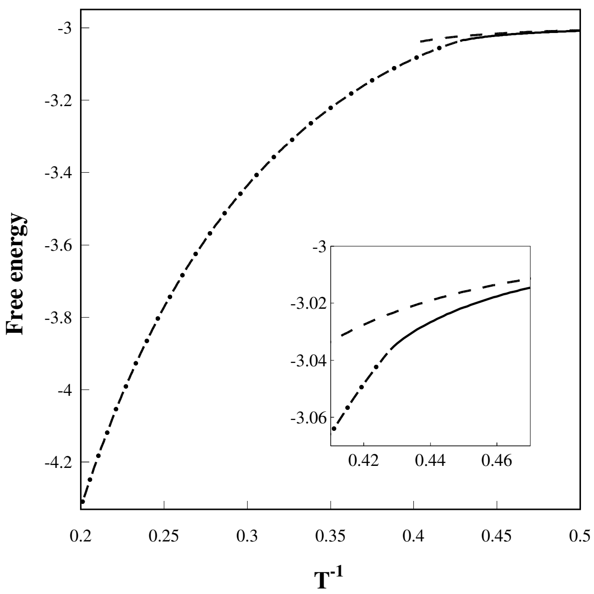


Figura 2.9. La linea continua, quella tratto-punto e quella a tratti rappresentano rispettivamente l'energia libera della fase ferromagnetica, paramagntica e lamellare nel caso $J_4 = 0$.

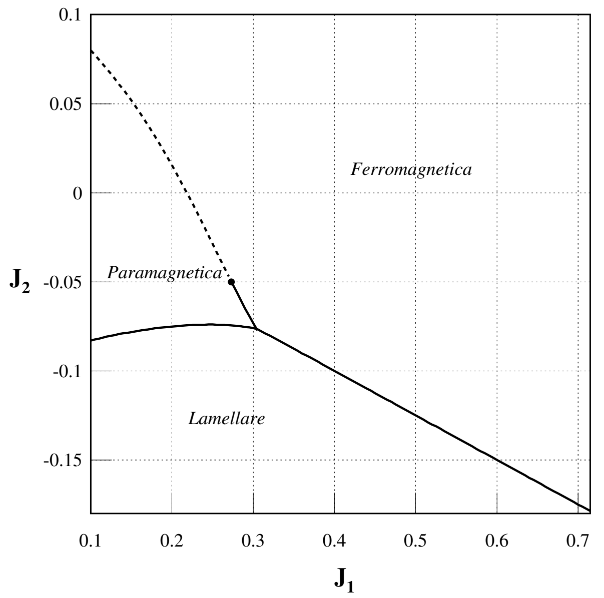


Figura 2.10. Diagramma di fase del modello (2.8) nel caso $J_4/J_2 = -2$. La linea continua e quella a tratti rappresentano, rspettivamente, una transizione del primo e del secondo ordine. Il disco nero rappresenta il punto tricritico, lei cui coordinate sono $J_1^{\mathrm{tric}} = 0.273$ e $J_2^{\mathrm{tric}} = -0.05$.

Nel lavoro [CG] abbiamo affrontato il problema della descrizione del diagramma di fase del modello (2.8) utilizzando la "Lower Bound Renormalization Group Transformation" (LBRG) introdotta da Kadanoff in [K]. Per la definizione della trasformazione e per tutti gli aspetti tecnici relativi si rimanda alla Sezione 2 dell'Allegato 4, qui si descrivono i prncipali risultati di interesse fisico. In Fig. 2.6 è riportato il diagramma di fase nel piano $J_4 = J_2$: la transizione di Ising viene descritta molto bene, il punto critico viene trovato a $\beta_{\mathrm{crit}} = 0.23925$ e per l'esponente critico della lunghezza di correlazione si trova $\nu = 0.6288$, mentre le migliori stime ottenute in [FL] con raffinate procedure Monte Carlo sono $\beta_{\mathrm{crit}} = 0.22165$ e $\nu = 0.6289 \pm 0.0008$.

Una diversa rappresentazione del diagramma di fase può essere data in termini dei parametri β_S, β_C e β_L; in Fig. 2.7 è rappresentato il diagramma di fase del modello (2.8) nel piano $\beta_L - \beta_S$ a diversi valori del parametro β_C. A valori grandi di β_S la fase ferromagnetica descrive una fase con piccole superfici diluite; quando β_S decresce viene favorita la presenza di superfici e si ottiene una fase in cui l'interfaccia invade tutto il sistema. Ma se β_L è sufficientemente grande si stabilisce una fase completamente isotropica, la fase paramagnetica.

La trasformazione LBRG, pur fornendo degli ottimi risultati pe la transizione di Ising, ha dei grossi limiti in altre regioni dello spazio dei parametri: per esempio per $J_1 < 0$ e per per $J_2 < 0$. Ciò si spiega perchè in quelle regioni la trasformazione non rispetta le simmetrie degli stati fondamentali dell'hamiltoniana. Per esempio, la transizione F-P a J_1 piccolo è stata studiata in dettaglio anche mediante simulazioni numeriche [CCGM, Ka] e sono stati trovati alcuni punti tricritici con esponenti classici; mentre la LBRG non prevede l'esistenza di punti tricritici sulla linea di transizione F-P: nell'approssimazione LBRG la transizione è critica lungo tutta la linea (superficie).

Per studiare le regioni del diagramma di fase non accessibili mediante la LBRG in [CGJP, CGP3, CGP4] abbiamo utilizzato l'approssimazione di cubo del CVM (si veda l'Appendice A, [Ki1, A, M]) e il calcolo degli esponenti critici è stato effettuato con il *cluster variation-Padè approximant method* (CVPAM) [Pe1, Pe2]. In particolare è stato studiato il diagramma di fase del modello (2.8) nella regione $J_2 < 0$ dove si osserva una transizione di fase tra le fasi ferromagnetica e paramagnetica ed una fase caratterizzata da una successione alternata di piani di spin più e meno alti un passo reticolare (fase *lamellare*).

Nel caso bidimensionale le linee che delimitano la fase ferromagnetica e la superantiferromagnetica (l'equivalente della fase lamellare in due dimensioni) non si incontrano mai, ovvero la fase paramagnetica si estende fino all'infinito; in altri termini scegliendo opportunamente il rapporto J_2/J_1 nel caso bidimensionale si osserva la fase paramagnetica per temperatura arbitrariamente bassa [Bax].

Nel caso tridimensionale, invece, la fase paramagnetica è racchiusa in una zona limitata: in Fig. 2.8 è rappresentato il diagramma di fase del modello (2.8) ottenuto con il CVM nell'approssimazione di cubo nel caso $J_4 = 0$. La linea che separa la fase ferromagnetica da quella paramagnetica è una linea del secondo ordine; il punto critico del modello di Ising standard è a $J_1 = 0.218$ (la stima del punto critico del modello di Ising standard è molto più accurata rispetto a quella fornita dalla LBRG). La fase lamellare è separata da quella ferromagnetica e da quella paramagnetica da una linea del primo ordine che nel limite di bassa temperatura si avvicina asintoticamente alla linea $J_2 = -J_1/4$ [St]. La linea critica interseca la line di coesistenza nel "critical end point" di coordinate $J_1^{\rm end} = 0.865$ e $J_2^{\rm end} = -0.2176$. Lungo la linea $J_2 = -J_1/4$ il sistema manifesta un transizione critica dalla fase ferromagnetica a quella paramagnetica (alta temperatura); la natura critica di questa transizione è evidente in Fig. 2.9 dove sono stati disegnati gli andamenti dell'energia libera delle tre fasi.

All'interno della fase paramagnetica è possibile distinguere tra due regioni: una detta *non-strutturata*, per valori grandi di J_2, caratterizzata dal decadimento esponenziale delle correlazioni, ed una detta *strutturata* in cui il decadimento esponenziale è accompagnato da oscillazioni su una piccola scala. Queste oscillazioni su piccola scala segnalano la presenza di strutture ordinate sulla scala di qualche passo reticolare: si tratta di una fase di microemulsione con presenza di micelle [CGT].

Modificando il valore del rapporto J_4/J_2 la topologia del diagramma di fase resta simile a quella descritta nel caso $J_4 = 0$, ma quando J_4/J_2 diventa più piccolo di $-1/4$ allora sulla linea ferro-para compare un punto tricritico; ovvero la transizione ferromagnetica-paramagnetica diventa del primo ordine quando la linea si avvicina alla fase lamellare. A titolo di esempio in Fig. 2.10 è stato riportato il diagramma di fase del modello (2.8) nel caso $J_4/J_2 = -2$; sulla linea ferro-para compare un punto tricritico le cui coordinate sono $J_1^{\rm tric} = 0.273$ e $J_2^{\rm tric} = -0.05$.

2.4 Il modello goniedrico

Il comportamento del modello lungo la linea $J_2/J_1 = -1/4$ è di particolare interesse, perché lungo quella linea il modello (2.8) coincide con il "gonihedric Ising model" [ASSS, SW, SSW, JM, PW, CGJP]. Tale modello, infatti, è definito scegliendo i parametri J_1,J_2,J_4 nel modo seguente

$$J_1 = 2\kappa\beta \ , \quad J_2 = -\frac{\kappa}{2}\beta \quad \text{e} \quad \mathrm{J}_4 = \frac{1-\kappa}{2}\beta \ , \tag{2.10}$$

con κ un parametro reale e positivo e β la temperatura inversa. In altre parole il modello goniedrico è il modello (2.8) con $\beta_S = 0$ e $\beta_C = 1$; $\beta_S = 0$ implica che l'estensione della superficie non è controllata da un parametro esterno, mentre $\beta_C = 1$ implica che le superfici piatte sono preferite.

	κ						
	0	0.25	0.5	1	2	5	10
T_c^{-1} CVM	0.550	0.464	0.443	0.427	0.421	0.420	0.420
T_c^{-1} MC[JM]	0.505	-	0.44	0.44	0.44	0.44	0.44
T_c^{-1} MF[JM]	0.325	0.31	0.278	0.167	0.09	0.0335	0.02

Tabella 2.1. Risultati ottenuti in [CGJP] per la temperatura inversa di transizione β_c del gonihedric Ising model per diversi valori di κ.

La caratteristica principale del modello goniedrico è l'elevato grado di degenerazione degli stati fondamentali: tutte le possibili sequenze di piani di spin più alternati a piani di spin meno (nel caso $J_4/J_1 > -1/4$) sono minimi degeneri dell'energia. La situazione cambia drasticamente quando $\beta_S \neq 0$: per valori positivi di β_S lo stato fondamentale è quello ferromagnetico, mentre per valori negativi lo stato fondamentale è costituito da una sequenza di piani di spin più alternati a piani di spin meno (massima estensione della superficie).

Nel lavoro [CGJP] è stato trovato che il modello (2.10), a bassa temperatura, manifesta la transizione dalla fase paramagnetica a quella ferromagnetica per ogni valore di $\kappa \geq 0$. Inoltre, si è ottenuto che la transizione è critica per $\kappa \geq 0.87$, mentre per piccoli valori di κ la transizione è del primo ordine. In Tabella 2.1 sono riportati i valori di β ai quali si manifesta la transizione per alcuni valori di κ e i nostri risultati vengono confrontati con risultati ottenuti in precedenza mediante simulazioni Monte Carlo e teoria di campo medio. Per una descrizione più dettagliata dei risultati ottenuti si rimanda agli Allegati 5,6 e 7.

Di recente numerosi studi basati su sviluppi ad alta temperatura [SSS] e su simulazioni Monte Carlo [JM] hanno posto il problema dell'universalità degli esponenti critici del modello goniedrico (l'esistenza di una fase con ordine su larga scala è stata dimostrata analiticamente nel caso $J_4 = 0$ in [PW]). In [SSS, JM] è stata proposta la congettura che il modello goniedrico sia nella classe di universalità del modello di Ising bidimensionale, ma ulteriori misure Monte Carlo [BEJM] forniscono stime degli esponenti critici incompatibili con la congettura su esposta. Anche simulazioni precedenti effettuate in [H] non riescono a dare una stima definitiva degli esponenti critici.

In [CGJP, CGP3] l'analisi degli esponenti critici effettuata con il metodo CVMPAM mostra la presenza di forti effetti di crossover, probabilmente dovuti alla vicinanza della fase lamellare, che potrebbero essere responsabili dei risultati contrastanti ottenuti nelle simulazioni [JM, BEJM]; il valore trovato per l'esponente della magnetizzazione è $\beta = 0.062 \pm 0.003$ che è in buon accordo con i risultati di precedenti simulazioni $\beta/\nu = 0.04(1)$ e $\nu = 1.2(1)$ [JM].

Per tentare di approfondire il problema abbiamo effettuato in [CGP4] delle simulazioni Monte Carlo con l'algoritmo di Metropolis. In Fig. 2.11 è riportato il calore specifico in funzione della temperatura inversa nel caso $\kappa = 1$ per diversi valori della taglia del reticolo ($L = 12,16,18$). I dati sono stati ottenuti mediando su 2000 misure decorrelate per ogni valore di L e della temperatura inversa β. La stima del tempo di decorrelazione è stata di 1000 iterazioni (una iterazione corrisponde ad un intero aggiornamento del reticolo) nei casi più sfavorevoli. Questi tempi sono molto più grandi di quelli usati in [JM, BEJM] ma sono stati necessari per ottenere delle stime stabili del calore specifico.

I nostri dati sono stati interpolati con la curva $C_{\max}/b[(\beta-\beta_c)^2+1]$ e i valori dei parametri $C_{\max}$ e β_c ottenuti per i diversi valori di L sono riportati in Tabella 2.2. Il fit della posizione

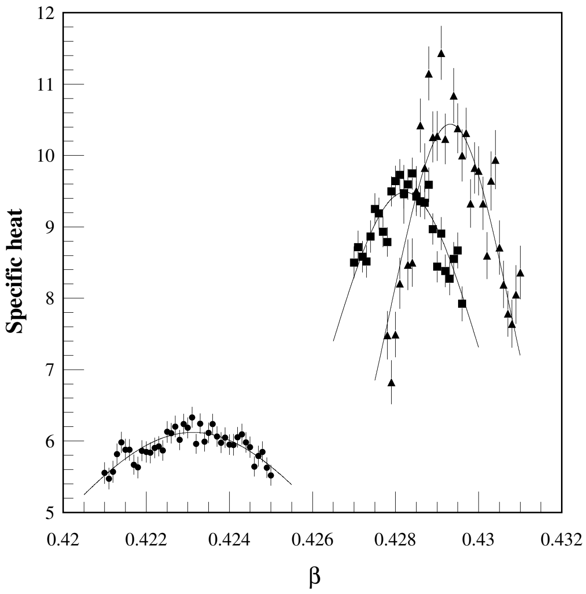


Figura 2.11. Misura del calore specifico del modello goniedrico nel caso $\kappa = 1$. I dischi, i quadrati e i triangoli si riferiscono rispettivamente ai casi L = 12,16,18. Le linee continue rappresentano l'interpolazione ottenuta mediante la funzione $C_{\max}/b[(\beta - \beta_c)^2 + 1]$.

L	$C_{\max}$	β_c
8	2.8041 ± 0.0237	0.41182 ± 0.00021
10	4.3707 ± 0.0706	0.41872 ± 0.00018
12	6.1137 ± 0.0334	0.42300 ± 0.00010
16	9.4068 ± 0.0586	0.42794 ± 0.00004
18	10.6710 ± 0.0883	0.42937 ± 0.00002

Tabella 2.2. Valori di $C_{\max}$ e β_c per diverse scelte della dimensione L del reticolo.

del picco con la funzione $\beta_c = \beta_{\text{crit}} + aL^{-\frac{1}{\nu}}$ fornisce le stime $\beta_{\text{crit}} = 0.4370 \pm 0.0001$ e $1/\nu = 1.483 \pm 0.001$. Poichè la miglior stima di $1/\nu$ per il modello di Ising è $1/\nu = 1.594 \pm 0.004$ [FL] sembra necessario dover considerare reticoli molto più grandi per chiarire in modo definitivo la classe di universalità del modello goniedrico.

Questo problema mette in luce alcuni limiti del Monte Carlo: a causa della presenza di tre fasi "praticamente" coesistenti, i tempi di decorrelazione delle grandezze misurate sono molto elevati e ciò implica la necessità di esperimenti numerici molto lunghi. Pertanto ci si limita a considerare reticoli abbastanza piccoli $L \leq 18$, ma ciò comporta una scarsa affidabilità del *finite-size scaling.*

2.5 Accoppiamenti a soglia

Nella sezione precedente si è visto come, per effetto di interazioni in competizione, è possibile avere delle fasi di bassa temperatura costituite da un alternarsi regolare di strutture unidimensionali. Più precisamente il modello (2.8) in due dimensioni esibisce la fase superantiferromagnetica, una struttura modulata con passo uno, quando si considera un accoppiamento tra secondi vicini antiferromagnetico e abbastanza intenso. Il modello di Ising con accoppiamento assiale tra secondi vicini (ANNNI model) è il più semplice tra i modelli che descrivono strutture modulate con passo aribitrario; tali strutture possono essere osservate sperimentalmente nelle leghe binarie [Y, Se].

Nel lavoro [CS] è stato proposto un modello in cui ogni spin tende ad allinearsi con la maggioranza degli spin che lo circondano ed è stato mostrato che il modello presenta una fase di bassa temperatura caratterizzata da strisce di spin "su" alternate a strisce di spin "giù" (*striped phase*).

Il modello è definito sul reticolo bidimensionale $\Lambda = \mathbf{Z^2}$, ad ogni sito $i \in \Lambda$ è associata una variabile di spin $s_i \in \{-1, +1\}$, $\Omega := \{-1, +1\}^\Lambda$ rappresenta lo spazio delle configurazioni, un suo generico elemento $s \in \Omega$ rappresenta una configurazione del sistema e la sua energia è data dall'hamiltoniana del sistema

$$H(s) := -\beta \sum_{i \in \Lambda} s_i \phi_i(s) \quad \forall s \in \Omega \ , \tag{2.11}$$

dove β è un numero reale positivo (l'inverso della temperatura) e

$$\phi_i(s) := \text{sign } \{\sum_{j=1}^{9} s_{i,j}\} \ \ \forall i \in \Lambda \ , \tag{2.12}$$

dove con $s_{i,j}$ $j = 1$,...,9 sono stati denotati i nove spin associati ai siti appartenenti al quadrato 3×3 B_i centrato sul sito i. Il comportamento del sistema all'equilibrio è descritto dalla funzione di partizione

$$Z_\Lambda(\beta) := \sum_{s \in \Omega} \exp(-H(s)) \ . \tag{2.13}$$

Se $\beta > 0$ il modello è caratterizzato da un accoppiamento di tipo ferromagnetico, cioè gli spin vicini tendono ad allinearsi, ma si tratta di un accoppiamento diverso da quello tra spin primi vicini tipico dell'usuale modello di Ising. Si può parlare di "accoppiamento ferromagnetico con soglia" nel senso di seguito descritto: se $s_i = +1$, nel modello di Ising il contributo del sito i all'energia totale del sistema è tanto più basso, quanto più alto è il numero di spin + tra i suoi primi vicini; cioè se il numero degli spin + primi vicini aumenta, si ottengono configurazioni ad energia sempre più bassa. Nel modello (2.11), invece, il contributo all'energia totale del sistema da parte del sito i ha due soli possibili valori: $+\beta$ se il numero di spin + in B_i è minore di cinque, $-\beta$ altrimenti; quindi dal punto di vista del sito i la situazione energeticamente preferibile viene raggiunta quando in $B_i \setminus \{i\}$ ci sono almeno quattro spin +, non vi è nessun ulteriore vantaggio se il numero di spin + in $B_i \setminus \{i\}$ diventa maggiore di quattro.

Dal punto di vista entropico è preferibile avere solo quattro spin + in $B_i \setminus \{i\}$ piuttosto che averne più di quattro (al limite 8), perchè questa è la situazione in cui si ha il più alto numero di configurazioni possibili. Questa osservazione suggerisce che non è affatto ovvio che a bassa temperatura il sistema preferisca la fase ferromagnetica.

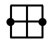
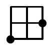
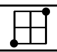
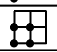
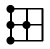
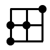
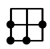
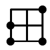
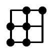
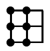
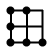
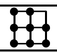
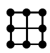
i	γ_i	description of Γ_i	typical cluster in Γ_i
1	+200	pairs of nearest neighbors sites	
2	+240	pairs of next to the nearest neighbors sites	
3	-60	pairs of second–neighbor sites along the lattice directions	
4	-40	two–site clusters with sites at distance $\sqrt{5}$ lattice spacings	
5	-20	pairs of second–neighbor sites along the lattice diagonals	
6	-80	plaquettes	
7	-40	four–site clusters containing the center of the block B and occupying a 3×2 rectangular block	
8	-20	four–site clusters containing the center of the block B and occupying the whole B	
9	+24	four–site clusters not containing the center of the block B and occupying a 3×2 rectangular block	
10	+12	four–site clusters not containing the center of the block B and occupying the whole B	
11	+12	six–site clusters containing the center of the block B and occupying the whole B	
12	+24	six–site clusters containing the center of the block B and occupying a 3×2 rectangular block	
13	-20	six–site clusters not containing the center of the block B and, necessarily, occupying the whole block B	
14	-20	eight–site clusters containing the center of the block B	
15	+140	eight–site clusters not containing the center of the block B	

Tabella 2.3. Lista dei coefficienti γ_i, introdotti in (2.11). Nella terza colonna vengono descritte brevemente le famiglie Γ_i cui sono legati i coefficienti γ_i. Nella quarta colonna viene rappresentato un tipico elemento $\zeta \in \Gamma_i$: la griglia rappresenta il blocco 3×3 B in cui è contenuto ζ, i siti di B appartenenti a ζ sono rappresentati dai dischi neri.

D'altro canto il modello (2.11) non è strettamente ferromagnetico, nel senso che la sua hamiltoniana non soddisfa le ipotesi sotto cui sono valide le disuguaglianze di Griffiths [G]. Infatti la sua hamiltoniana può essere scritta come somma di potenziali a più corpi e si ottiene che non tutti questi accoppiamenti sono positivi, cioè certi potenziali, per esempio tutti quelli a due corpi diversi da primi-vicini e secondi-vicini, sono di tipo antiferromagnetico. In altri termini l'hamiltoniana può essere scritta nella forma

$$H(s) = -\frac{\beta}{2^9} \sum_{i=1}^{15} \gamma_i \sum_{\zeta \in \Gamma_i} s(\zeta) \quad , \tag{2.14}$$

dove γ_i è un numero reale, Γ_i è una famiglia di sottoinsiemi di un blocco di siti 3×3 e, preso $\zeta \in \Gamma_i$, $s(\zeta)$ è il prodotto degli spin associati ai siti appartenenti a ζ. L'elenco completo di tutte le famiglie Γ_i e dei relativi coefficienti γ_i è dato nella Tabella 2.3. A titolo di esempio si osserva che Γ_1 è la famiglia costituita da tutte le coppie di siti primi vicini e Γ_6 è quella costituita da tutte le placchette.

Il diagramma di fase a bassa temperatura è stato studiato utilizzando la trasformazione del gruppo di rinormalizzazione nota come "majority rule" [NL1, NL2]; la funzione hamiltoniana rinormalizzata è stata calcolata effettuando una espansione in cumulanti [NL2]. Nell'ambito di questa approssimazione il modello esibisce una transizione di fase critica a bassa temperatura, cioè esiste un valore critico β_c del parametro β, tale che se $\beta < \beta_c$ il sistema è nella fase paramagnetica, altrimenti è in una fase a strisce larghe tre passi reticolari.

Per il dettaglio dei calcoli si rimanda all'Allegato 8 [CS], dove è stato studiato anche un altro modello con accoppiamento ferromagnetico a soglia, ottenuto considerando dei blocchi a forma di croce al posto dei blocchi quadrati B_i.

Verificare la bontà dei risultati ottenuti in [CS] mediante uno studio numerico del problema è senza dubbio interessante, ma ci si scontra contro la necessità di considerare valori troppo bassi della temperatura; l'ostacolo potrebbe essere aggirato utilizzando la dinamica "BKL" che è particolarmente adatta a studiare il comportamento di sistemi statistici a temperatura molto bassa [BMB, BKL].

Allegato 2
Folding transitions of the triangular lattice with defects.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, Phys. Rev. E 53, 1479, 1996

Riassunto
Si generalizza un modello introdotto in lavori recenti per la descrizione della transizione di folding in un reticolo triangolare e si studia il modello risultante per mezzo dell'approssimazione esagonale del CVM. In particolare si studia il passaggio dal modello di puro folsing al modello di Ising e si ottiene una struttura molto ricca nei diagrammi dei fase. I nostri risultati sono in buon accordo con quelli esatti e con quelli ottenuti per mezzo della matrice di trasferimento.

Allegato 3

Folding transition of the triangular lattice in a discrete three-dimensional space.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, Phys. Rev. E 53, 3253, 1996

Riassunto
Si studia un modello a vertici introdotto in [BFGG] per la descrizione del "folding" di una superficie triangolare posta sul reticolo a facce cubiche centrate per mezzo dell'approssimazione esagonale del CVM. Il modello descrive il comportamento di una membrana polimerizzata posta in uno spazio tridimensionale discreto. Abbiamo introdotto un'energia di curvatura ed un campo che rompe la simmetria e abbiamo studiato il diagramma di fase del modello risultante. Variando il parametro di curvatura il modello esibisce una transizione di fase del primo ordine tra una fase piatta ed una in cui la superficie è accartocciata.

Allegato 4
Renormalization Group results for lattice surface models.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, J. phys. A: Math. Gen. 28 , 867-877, 1995

Riassunto
Si studia il diagramma di fase di un modello statistico di superfici chiuse ed aperte costruite su un reticolo cubico. Le superfici chiuse interagenti posso essere scritte come un modello di Ising, mentre quelle aperte come un modello di gauge $Z(2)$. Quando le superfici aperte si riducono a quelle chiuse con pochi difetti, anche il modello di gauge può essere scritto come un modello di Ising, Si applica la *lower bound renormalization group transformation* (LBRG) introdotta da Kadanoff (Phys. Rev. Lett. 34, 1005 (1975)) per studiare il modello di Ising che descrive le superfici chiuse e quelle aperte con pochi difetti. I nostri risultati vengono paragonati a quelli presentati in lavori numerici precedenti. I limiti della LBRG emergono quando si cerca di descrivere il diagramma di fase in regioni corrispondenti a stati fondamentali non ferromagnetici.

Allegato 5
The Phase Diagram of the Gonihedric 3d Ising Model via CVM.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, D.A. Johnston, A. Pelizzola, Physics Letters A 226, 59-64, 1997

Riassunto
Per mezzo dell'approssimazione di cubo del CVM si studia il diagramma di fase del modello goniedrico tridimensionale definito da Savvidy e Wegner. I risultati ottenuti con il CVM sonoin buon accordo con quelli ottentuti tramite simulazioni Monte Carlo per le temperature critiche e per l'ordine della transizione quando il parametro κ viene variato. Il valore dell'esponente critico della magnetizzazione $\beta = 0.062 \pm 0.003$ è statop calcolato con con il metodo degli approssimanti di Padè e risulta in buon accordo con il valore ottenuto dalle simulazioni.

Allegato 6

Critical behaviour of the three-dimensional Ising model with nearest neighbor, next nearest neighbor and plaquette interactions.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, Phys. Rev. E 55, R17, 1997

Riassunto

Il comportamento critico e multi-critico del modello di Ising tridimensionale con accoppiamento tra primi vicini, secondi vicini e placchette viene studiato nell'ambito dell'approssimazione di cubo del CVM. Particolare attenzione è rivolta alla linea costituita dai punti ove termina la linea che separa la fase ferromagnetica e quella paramagnetica: si calcolano gli esponenti (multi)critici e il loro valore suggerisce che la transizione appartiene ad una nuova classe di universalità. Si fornisce, inoltre, un stima degli esponenti di crossover.

Allegato 7
Critical behaviour of the three-dimensional gonihedric Ising Model.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, Proceedings of the Conference "Lattice 1997", Preprint BARI-TH/97-287

Riassunto
approssimazione CVM viene studiato il diagramma di fase del modello goniedrico tridimensionale proposto da Savvidy e Wegner. Questo modello corrisponde all'usuale modello di Ising tridimensionale con accoppiamenti tra primi vicini, secondi vicini e placchette nella regione con stati fondamentali lamellari degeneri. Il diagramma di fase fornito dal CVM è in buon accordo con i risultati Monte Carlo e si mostra che il modello è nella stessa classe di universalità dell'ordinario modello di Ising tridimensionale.

Allegato 8
Polymerization in a Ferromagnetic Spin Model with threshold.

E.N.M. Cirillo, S. Stramaglia, Phys. Rev. E 54, 1096, 1996

Riassunto
Si propone un modello di spin con un nuovo tipo di interazione ferromagnetica, che può essere chiamata *interazione ferromagnetica a soglia.* In questo modello il contributo di uno spin all'energia totale ha due possibili valori in funzione del numero di spin ad esso paralleli tra i suoi primi e secondi vicini. Trasformando il nostro modello nella versione di Ising del modello ad otto vertici viene messa in evidenza l'esistenza di una fase di bassa temperatura caratterizzata da una successione alternata di polimeri di spin positivi e negativi.

Capitolo 3

Analisi Monte Carlo della crescita di domini anisotropi

3.1 Introduzione

In questo capitolo verrà discusso il problema della *decomposizione spinodale* nell'ambito del modello ad otto vertici bidimensionale introdotto nella Sezione 2.3, quando il sistema viene raffreddato dalla fase disordinata alla fase ordinata superantiferromagnetica (SAF).

Quando un sistema viene raffreddato da una fase disordinata ad una ordinata, il processo di riordinamento non avviene istantaneamente, bensì tramite la crescita di domini ordinati delle due (o più) fasi in competizione. Si pensi, per esempio, al caso ferromagnetico del modello stocastico di Ising con dinamica di Metropolis (si veda l'Appendice B): se all'istante $t = 0$ il sistema viene portato dalla fase paramagnetica a quella ferromagnetica, il sistema deve riordinarsi tramite la crescita di domini di spin più e di spin meno a partire da una configurazione completamente disordinata. Dopo lavori pioneristici come [Lif, LS, Wa], è stata dedicata grande attenzione al problema, come è testimoniato da alcuni lavori di rassegna [Gun, Br].

Un problema analogo è quello della decomposizione spinodale nelle leghe binarie, problema studiato per molte decadi in metallurgia, dove gli stadi finali di crescita sono noti come "Ostwald ripening". La maniera più semplice di pensare a questo problema è quella di trasformarlo in un modello di Ising interpretando spin più e meno come atomi di tipo A e B [MLK, RKLM]. Le proprietà di equilibrio del modello di Ising descrivono molto bene le caratteristiche statiche delle leghe binarie, ma dal punto di vista dinamico c'è una differenza profonda: la dinamica di Metropolis permette l'inversione di uno spin, che nel linguaggio delle leghe binarie corrisponderebbe alla trasformazione di un atomo di tipo A in un atomo di tipo B, o viceversa, cosa ovviamente inammissibile. Quindi nel caso di leghe binarie è necessario utilizzare una dinamica che conservi il numero totale di spin più e meno, cioè conservi la magnetizzazione e permetta soltanto lo scambio tra due spin di segno diverso; solitamente si utilizza la dinamica di Kawasaki [Kaw].

Uno degli aspetti più interessanti di questo problema è che a tempi lunghi, cioè dopo la prima fase in cui si passa da una configurazione completamente disordinata ad una struttura ben definita di domini, la crescita delle regioni ordinate è caratterizzata da una sorta di invarianza di scala [Bat]. Ovvero guardando i domini a tempi lunghi essi sembrano "statisticamente" simili a quelli osservati a tempi precedenti, a meno di una variazione della scala. In altri termini si osserva ("ipotizza", dimostrazioni esistono solo nel caso di modelli semplificati come il modello unidimensionale di Glauber [DGY]) che a tempi lunghi il sistema è caratterizzato da una singola lunghezza $L(t)$, la dimensione tipica dei domini ordinati, e che riscalando le lunghezze con $L(t)$

la struttura dei domini è indipendente dal tempo.

L'invarianza di scala è stata osservata in numerosi lavori sia nel caso di dinamica conservata che in quello di singolo spin flip; ma la legge con cui cresce la dimensione tipica dei domini è diversa nei due casi. In entrambe le situazioni si osserva una legge di potenza $L(t) \sim t^\gamma$, ma l'esponente di crescita γ risulta dipendere dal fenomeno alla base della crescita dei domini: nel caso di modelli con parametro d'ordine conservato (dinamiche di Kawasaki) la crescita è dovuta alla diffusione del parametro d'ordine da regioni ad alta curvatura verso regioni a bassa curvatura e $\gamma = \frac{1}{3}$ [LS, RKLM, MB], mentre per modelli con parametro d'ordine non conservato (dinamiche di Glauber) la crescita è guidata dalla curvatura e $\gamma = \frac{1}{2}$ [Lif, AC, HB].

In [CGS1, CGS2] (Allegati 9 e 10) abbiamo studiato come si riordina il modello (2.8) in dimensione due quando viene raffreddato nella fase superantiferromagnetica (lamellare in tre dimensioni). Considerare una fase di bassa temperatura anisotropa, permette di porsi delle domande suggestive sulle eventuali proprietà di anisotropia del processo di crescita.

Il raffreddamento del modello (2.8) nella fase ferromagnetica con $J_4 = 0$ è stato studiato in [SHS, RC]. Quando $J_2 < 0$ esistono barriere energetiche che impediscono il raggiungimento dell'equilibrio a temperatura nulla; queste barriere non crescono con la dimensione dei domini a $D = 2$, cosa che avviene a $D = 3$ e che implica una dinamica estremamente lenta (crescita logaritmica delle dimensioni dei domini. Mentre il raffreddamento del modello (2.8) nella fase SAF in $D = 2$ è stato studiato in [SB], dove è stato mostrato che gli esponenti di crescita sono $\frac{1}{3}$ ed $\frac{1}{2}$ rispettivamente nel caso di una dinamica di scambio di spin ed in quello di una dinamica di singolo spin flip.

I risultati di [SB] sembrano suggerire che anche nella fase SAF il processo di riordinamento avvenga secondo lo schema descritto in precedenza, in particolare a tempi lunghi vale l'ipotesi di scala e non si nota alcuna anisotropia nella velocità di crescita dei domini. D'altro canto in [CGS1, CGS2] abbiamo mostrato che le funzioni di correlazione misurate nelle direzioni parallele e trasverse, rispetto ai domini, sono diverse come è suggerito dalle diverse energie di interfaccia tra i vari stati fondamentali del modello (le funzioni di correlazione dipendono dai dettagli del sistema [Ru]). In altri termini è vero che i domini crescono con la stessa legge nelle due direzioni, ma la dimensione parallela e quella trasversa dei domini sono diverse.

Nella Sezione 3.2 si mostra come nel caso della SAF è possibile misurare gli esponenti di crescita. Nella Sezione 3.3 si definisce una sorta di funzione di correlazione trasversa ed una longitudinale rispetto alla direzione dei domini, e si mostra come per queste funzioni valga l'ipotesi di scala. Infine nella Sezione 3.4 si interpretano i risultati delle simulazioni alla luce della Teoria di Ohta-Jasnow-Kawasaki.

3.2 Misura degli esponenti di crescita

Il diagramma di fase del modello (2.8) in dimensione $D = 2$ presenta una linea critica che separa la fase paramagnetica da quella superantiferromagnetica nella regione $J_2 < 0$, $|J_1| < 2|J_2|$ e J_4 piccolo (si veda [Bax]). Nella regione SAF il modello ha quattro stati fondamentali degeneri che consistono di righe (colonne) di più alternate a righe (colonne) di meno; il parametro d'ordine della fase SAF è, quindi, la differenza tra le magnetizzazioni delle righe (colonne) pari e dispari. Pertanto la tipica configurazione del sistema nel regime di scaling è un insieme di domini di quattro tipi diversi (si veda Fig. 3.1). In Fig. 3.2 sono state evidenziati, invece, i siti di interfaccia tra domini diversi.

La definizione di iterfaccia tra domini differenti non è completamente ovvia nel caso della fase SAF, perchè esistono diversi tipi di interfaccia, come è stato evidenziato nei riquadri di Fig. 3.2. Per capire se un sito appartiene ad un dominio o è un difetto bisogna confrontare

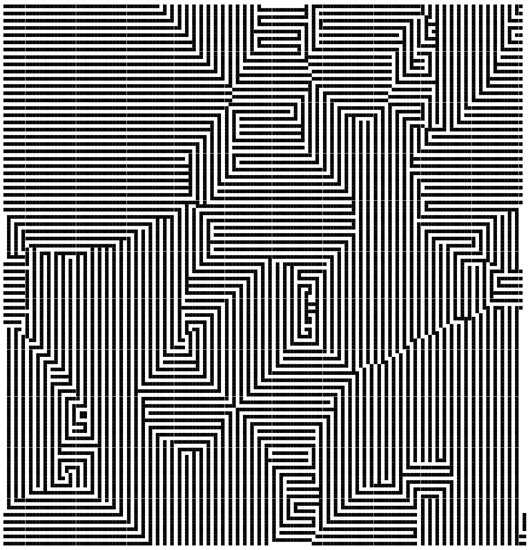


Figura 3.1. Tipica configurazione del modello (2.8) nel regime di scaling. I quadrati bianchi e neri rappresentano gli spin meno e più. La figura è stata ottenuta in un reticolo 100×100, a temperatura zero, dopo 150 interi aggiornamenti del reticolo.

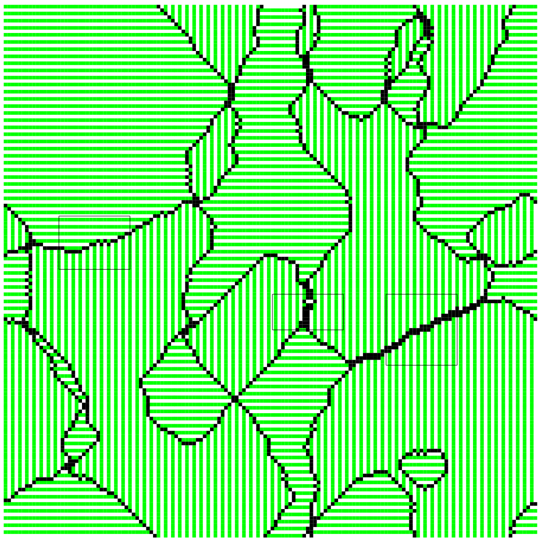


Figura 3.2. In figura è rappresentata la stessa configurazione mostrata in Fig. 3.1; in questo caso i quadrati neri rappresentano i siti di interfaccia.

la configurazione del sistema in un intorno di questo sito con tutte le possibili configurazioni di un dominio SAF, orizzontali e verticali. Dove per domini orizzontali e verticali si intendono domini che hanno rispettivamente righe o colonne magnetizzate.

Lo schema che è stato utilizzato in [CGS1, CGS2] è il seguente: preso un sito (i,j), con i l'indice di riga e j quello di colonna, si denota con $s(i,j)$ lo spin corrispondente. Preso un numero intero L si denota con $B(i,j)$ il blocco $(2L+1) \times (2L+1)$ centrato sul sito (i,j) e si calcolano le due quantità seguenti:

$$\begin{aligned} d_h &= \sum_{k,l=-L}^{L} \left(1 - \delta\left(s(i+k,j+l),(-1)^k s(i,j)\right)\right) \\ d_v &= \sum_{k,l=-L}^{L} \left(1 - \delta\left(s(i+k,j+l),(-1)^l s(i,j)\right)\right) \end{aligned} \tag{3.1}$$

dove $\delta(\cdot,\cdot)$ rappresenta la delta di Kroneker. Si osserva che d_h e d_v rappresentano, rispettivamente, la "distanza" in $B(i,j)$ tra la configurazione attuale del sistema e le due configurazioni SAF orizzontali e verticali. Se d_h o d_v sono più piccole di un certo numero intero M, allora il sito (i,j) viene considerato appartenente ad un dominio orizzontale o verticale, altrimenti viene considerato un difetto. Si è visto che tutti i risultati che verranno discussi in seguito sono sostanzialmente indipendenti dalla scelta di L ed M, nell'analisi delle simulazioni si è usato sempre $L = 1$ e $M = 2$.

I metodi classici di misura dell'esponente di crescita γ si basano sullo studio di alcune proprietà delle funzioni di correlazione a due punti; questi metodi verranno discussi nella sezione successiva, ora si descrivono altri due metodi di più facile applicazione nel caso della fase SAF.

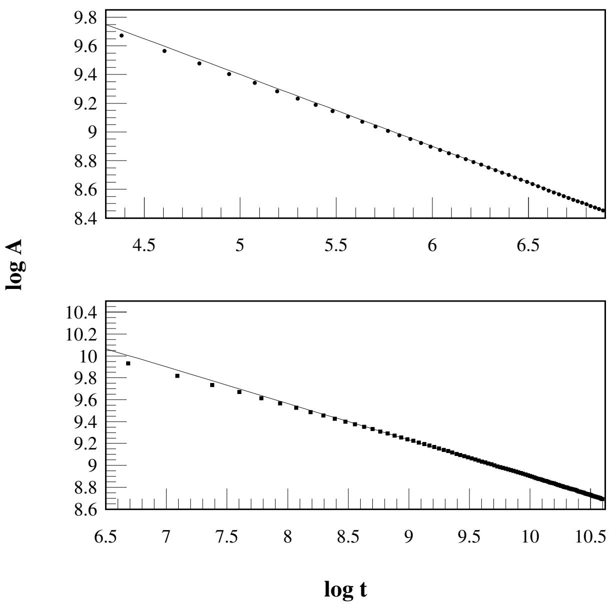


Figura 3.3. Il logaritmo naturale del numero totale A dei difetti è riportato in funzione in funzione del logaritmo naturale del tempo. La figura si riferisce ad un reticolo 512×512, a temperatura finita $\beta = 1$ e parametri $J_1 = 0.1$, $J_2 = -1$ e $J_4 = 0.1$. I dischi e i quadrati neri (figura in alto e figura in basso) sono i risultati ottenuti in una simulazione Monte Carlo mediando su 50 storie indipendenti del sistema, rispettivamente con dinamica di Metropolis e Kawasaki. La pendenza della linea continua è $-\frac{1}{2}$ in alto, $-\frac{1}{3}$ in basso.

Si osserva che se il sistema è in regime di invarianza di scala, allora tutte le dimensioni che descrivono il sistema devono avere un andamento con il tempo simile a quello di $L(t)$, allora una prima maniera per ricavare l'esponente γ è quella di studiare come si riduce al crescere del tempo il numero totale dei siti di interfaccia. In Fig. 3.3 è riportato il logaritmo naturale del numero totale A dei difetti in funzione in funzione del logaritmo naturale del tempo. La figura si riferisce ad un reticolo 512×512, a temperatura finita $\beta = 1$ e parametri $J_1 = 0.1$, $J_2 = -1$ e $J_4 = 0.1$. I dischi e i quadrati neri (figura in alto e figura in basso) sono i risultati ottenuti in una simulazione Monte Carlo mediando su 50 storie indipendenti del sistema, rispettivamente con dinamica di Metropolis e Kawasaki. I risultati numerici soddisfano alla legge di scala $A \sim t^{-\gamma}$ con $\gamma = \frac{1}{2}$ nel caso di dinamica di singolo spin flip e $\gamma = \frac{1}{3}$ nel caso della dinamica di Kawasaki. Ciò conferma i risultati di [SB] dove la misura di γ è stata effettuata secondo uno schema completamente diverso (si veda l'Allegato 10).

In [CGS1, CGS2] è stato anche osservato che sia la validità della legge di scala, sia la stima di γ non dipendono nè dai parametri J_1, J_2 e J_4, nè dalla temperatura. Nel caso di dinamica di singolo spin flip è stata considerata anche la situazione $\beta = \infty$, ovvero il riordinamento a temperatura zero (dinamica di Bagno Termico) [HB].

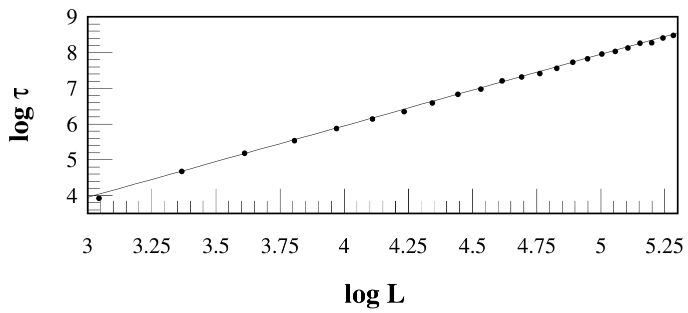


Figura 3.4. Il logaritmo naturale del tempo di contrazione τ_L è riportato in funzione del logaritmo naturale di L. I dischi neri sono i risultati Monte Carlo ottenuti mediando su 10 prove indipendenti nel caso di temperatura zero, con parametri $J_1 = 0.1$, $J_2 = -1$ e $J_4 = 0$. La pendenza della linea continua è 2.

Un modo alternativo per la misura dell'esponente di crescita consiste nello studio della contrazione di una goccia di una fase immersa nel mare di una fase diversa. In [Br] è mostrato come il tempo tipico in cui avviene questa contrazione scala con la dimensione della goccia iniziale con l'inverso dell'esponente di crescita: in altri termini, detto τ_L il tempo di contrazione di una goccia quadrata di taglia L, si ha $\tau_L \sim L^{\frac{1}{\gamma}}$. Nel caso della dinamica di singolo spin flip abbiamo studiato la contrazione di una goccia di una certa fase SAF immersa in tutti i diversi possibili sfondi; in Fig. 3.4 è stato riportato il logaritmo naturale di τ_L in funzione del logaritmo naturale di L. I dati numerici confermano la legge di scala e l'esponente trovato è 2, in perfetta armonia con il risultato $\gamma = \frac{1}{2}$.

3.3 Funzioni di correlazione longitudinale e trasversa

Il metodo classico con cui si misurano gli esponenti di crescita nel caso della decomposizione spinodale in seguito al raffreddamento in una fase ferromagnetica, si basa sullo studio delle proprietà della funzione di correlazione a tempi uguali. In sostanza, denotato con $s_t(i,j)$ il valore dello spin al tempo t sul sito (i,j), si considera:

$$C(\mathbf{r},t) =< s_t(i+r_x,j+r_y)s_t(i,j) > \tag{3.2}$$

con la media estesa a tutti i siti del reticolo e a storie diverse del sistema. Questa funzione è tipicamente diversa da zero all'interno di un dominio e nulla all'esterno, quindi il suo primo zero è una stima della dimensione tipica $L(t)$ dei domini. Alternativamente si può considerare la sua trasformata di Fourier $S(\mathbf{k},t)$, detta anche fattore di struttura, e stimare la dimensione tipica dei domini con la posizione del suo massimo. Inoltre la funzione di correlazione (3.2) in regime di invarianza di scala è tale che scelta opportunamente una funzione f si ha

$$C(\mathbf{r},t) = f\left(\frac{r}{L(t)}\right) \quad . \tag{3.3}$$

Nel caso di raffreddamento nella fase SAF, la funzione (3.2) oscilla su scala uno, quindi non permette di stimare le dimensioni dei domini. In [CGS1] abbiamo introdotto due funzioni che permettono di calcolare le correlazioni tra gli spin misurate in direzione longitudinale e trasversa ai domini. Considerato il sito (i,j) si definisce $\epsilon(i,j)$ uguale a uno se il sito appartiene ad un dominio orizzontale, zero se appartiene ad un dominio verticale e si calcola

$$\begin{aligned} C_\ell(r,t) &= \langle s_t\,(i,j)\,s_t\,(i+\epsilon(i,j)r\ ,\, j+(1-\epsilon(i,j))r)\,\rangle \\ C_t(r,t) &= \langle (-1)^r s_t\,(i,j)\,s_t\,(i+(1-\epsilon(i,j))r\ ,\, j+\epsilon(i,j)r)\,\rangle \end{aligned} \tag{3.4}$$

dove la media è effettuata su tutti i siti che non sono dei difetti e su storie indipendenti del sistema. Queste funzioni di correlazione hanno la proprietà di annullarsi all'esterno dei domini, quindi il loro primo zero, o il massimo del relativo fattore di struttura fornisce una stima di $L(t)$. L'analisi delle simulazioni effettuata con questi nuovi estimatori fornisce risultati analoghi a quelli discussi nella sezione precedente.

Un altro aspetto molto interessante delle funzioni (3.4) è che in regime di scala soddisfano ad una proprietà di collasso come la (3.3) con due opportune funzioni f_ℓ e f_t. In Fig. 3.5 è mostrato il comportamento di scala delle funzioni (3.4) nel caso della dinamica di singolo spin flip: i dati ottenuti a tempi diversi sono stati riportati in funzione della variabile di scala $z = \frac{r}{\sqrt{t}}$ e si osserva come tutte le funzioni si sovrappongono perfettamente (i dettagli relativi ai parametri utilizzati nelle simulazioni sono nella didascalia). Risultati analoghi (si veda la Fig. 3.6) vengono ottenuti nel caso della dinamica di Kawasaki, ma in quel caso la variabile di scala è $z = \frac{r}{t^{1/3}}$ e il regime di scala viene raggiunto a tempi molto più elevati; ciò costringe a simulazioni molto più lunghe.

Si osserva che le funzioni di scala longitudinale e trasversa f_ℓ e f_t sono diverse e analoghi risultati sono stati ottenuti considerando le funzioni definite in [SB] secondo uno schema completamente diverso da quello illustrato in precedenza. Nel caso della dinamica di Kawasaki la differenza è meno evidente ma comunque può essere spiegata con gli stessi argomenti: la presenza di un accoppiamento $J_1 > 0$ favorisce i domini longitudinali rispetto a quelli trasversi, in effetti simulazioni effettuate con gli stessi parametri di quelli usati in Fig. 3.5 e Fig. 3.6, ma con J_1 con segno opposto, forniscono figure analoghe con f_ℓ e f_t invertite. Inoltre fissati J_2 e

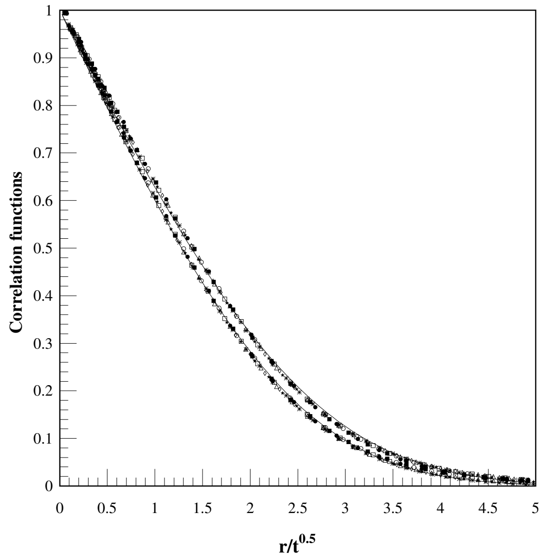


Figura 3.5. Funzioni di scala $f_\ell(z)$ e $f_t(z)$, $z = r/\sqrt{t}$ nel caso della dinamica di singolo spin flip a $T = 0$, $J_1 = 0.1$, $J_2 = -1$ e $J_4 = 0$. I dati numerici sono stati ottenuti mediando su 50 storie indipendenti di un reticolo 400×400. Le correlazioni longitudinali (sopra) e trasverse (sotto) sono mostrate ai tempi 180($\bullet$), 220($\blacksquare$), 260($\circ$), 300($\square$), 340($\triangle$), 380($\diamondsuit$), 420($\star$) e 460($*$). La linea continua rappresenta il miglior fit eseguito con la funzione OJK.

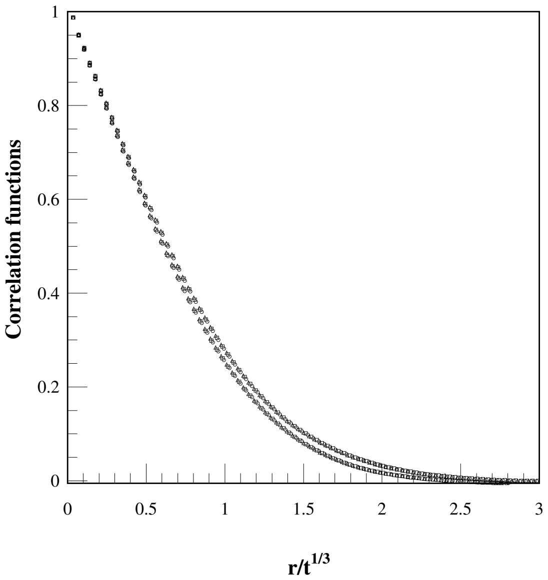


Figura 3.6. Funzioni di scala $f_\ell(z)$ e $f_t(z)$, $z = r/t^{1/3}$ nel caso della dinamica di kawasaki a $\beta = 1$, $J_1 = 0.4$, $J_2 = -1$ e $J_4 = 0$. I dati numerici sono stati ottenuti mediando su 50 storie indipendenti di un reticolo 800×800. Le correlazioni longitudinali (sopra) e trasverse (sotto) sono mostrate ai tempi 68000($\circ$), 70000($\square$) e 72000($\triangle$).

J_4 si ha che f_ℓ è più grande di f_t se $J_1 > 0$, viceversa se $J_1 < 0$ e il comportamento di queste due funzioni è simmetrico nello scambio $J_1 \to -J_1$.

Il comportamento delle funzioni di correlazioni può essere spiegato con il seguente argomento euristico: per semplicità si considerano solo interfacce tra domini paralleli alle direzioni del reticolo e si suppone $J_4 = 0$. In Fig. 3.2 sono messe in evidenza tre di queste interfacce: a sinistra un'interfaccia tra un dominio verticale ed uno orizzontale, che riduce sia la correlazione longitudinale che quella trasversa. L'interfaccia mostrata al centro riduce solo le correlazioni trasverse, mentre quella a destra riduce solo quelle longitudinali. A $T = 0$ l'eccesso di energia dell'interfaccia al centro è $2J_2 - J_1$, mentre per quella di destra si ha $2J_2 + J_1$; la differenza del segno di J_1 spiega il diverso comportamento delle funzioni di correlazione al variare del segno di J_1.

3.4 Teoria Ohta-Jasnow-Kawasaki

Esistono varie teorie che permettono di prevedere il comportamento della funzione di correlazione (3.2), ma quella che presenta il miglior accordo con le simulazioni numerica sembra essere [HB] quella di Ohta-Jasnow-Kawasaki [OJK]. Anche se le nostre funzioni (3.4) non sono delle vere e proprie funzioni di correlazioni a due punti abbiamo osservato che l'accordo con le previsioni OJK è comunque sorprendentemente buono. In Fig. 3.5 le linee continue rappresentano il miglior fit eseguito con la funzione proposta da OJK.

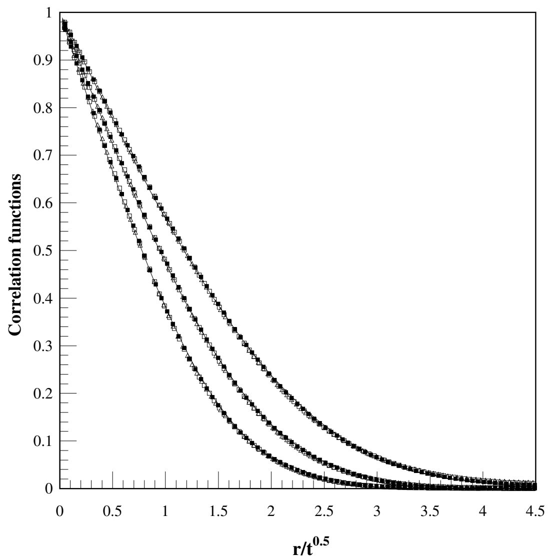


Figura 3.7. Collasso delle funzioni di correlazione del modello di Ising a temperatura finita. I dati sono stati ottenuti mediando su 250 storie indipendenti, nel modello di Ising anisotropo con $J_x = 2$ e $J_y = 1$, e su 447 storie nel caso del modello isotropo $J_x = J_y = 1$, nel caso di un reticolo quadrato 400×400. Dall'alto verso il basso sono riportate le correlazioni lungo l'asse x del modello anisotropo, quelle del modello isotropo e, infine, le correlazioni lungo l'asse y nel caso anisotropo. I dati si riferiscono ai tempi 350(■), 450(□) e 500($\triangle$). Le linee continue sono i migliori fit con la legge OJK.

La funzione di scala della teoria OJK è la seguente:

$$f(z) = \frac{2}{\pi} \sin^{-1}[\exp(-z^2/D)] \tag{3.5}$$

dove $z = r/t^{1/2}$, $D = 8(d-1)/d$ e d la dimensione del reticolo. Questa fornisce il comportamento lineare di Porod [Po] a piccoli z della funzione $f(z) \sim 1 - \alpha z$ con $\alpha = 2\sqrt{2}/(\pi\sqrt{D})$. In pratica i risultati Monte Carlo possono essere paragonati alla previsione teorica imponendo lo stesso comportamento di Porod. Applicando questa procedura ai nostri dati si è ottenuto: $\alpha_\ell = 0.383$ e $\alpha_t = 0.414$ per $J_1 = 0.1$, rispettivamente per il caso longitudinale e quello trasverso. La simmetria discussa in precedenza corrisponde al fatto che nel caso $J_1 = -0.1$ i valori dei paramtri α si scambiano, infatti si trova: $\alpha_\ell = 0.406$ e $\alpha_t = 0.376$.

I risultati discussi in precedenza mostrano che la funzioni di OJK descrive bene i risultati numerici anche nel caso in cui il sistema è anisotropo. Il modello di campo più semplice con un termine cinetico anisotropo è cosituito dal modello di Ginzburg-Landau dipendente dal tempo

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = B_x \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + B_y \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - V'(\varphi) \tag{3.6}$$

dove $V(\varphi)$ è l'usuale potenziale a doppia buca. Il cambiamento di variabili $x \to x' = \sqrt{B_x} x$ e $y \to y' = \sqrt{B_y} y$ elimina l'anisotropia e restituisce l'equazione usuale della teoria OJK [Br]. Ma le correlazioni in termini delle vecchie variabili spaziali hanno un comportamento anisotropo e mostrano diverse pendenze di Porod con $\alpha_x/\alpha_y = \sqrt{B_y/B_x}$.

Il comportamento anisotropo del modello (3.6) è stato controllato studiando il comportamento di scala del modello di Ising con accoppiamento J_x e J_y lungo i due assi del reticolo. In Fig. 3.7 sono riportate le funzioni di correlazioni lungo i due assi e viene fatto il confronto con la funzione OJK (per i dettagli sui parametri usati nelle simulazioni si rimanda alla didascalia). Inoltre sono riportati anche i dati relativi all'usuale modello di Ising nel caso $J_x = J_y = 1$.

L'argomento precedente suggerisce $\alpha_x/\alpha_y = \sqrt{J_y/J_x}$: i valori misurati forniscono il rapporto $\alpha_y/\alpha_x = 1.548$ che non è lontano da quello sperato 1.414 e conferma il fatto che la teoria OJK riproduce bene le simulazioni anche nel caso anisotropo. L'accordo cresce notevolmente se si considera il caso a temperatura zero: il rapporto misurato è, infatti, $\alpha_y/\alpha_x = 1.4304$.

Allegato 9
Anisotropic dynamical scaling in a spin model with competing interactions.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, S. Stramaglia, Phys. Rev. E 56, 5065, 1997

Riassunto
Si discutono alcuni risultati sulle proprietà cinetiche della crescita di domini in un modello con interazioni in competizione raffreddato dalla fase paramagnetica ad una fase a strisce. Gli esponenti di crescita sono $\beta = 1/2$ e $\beta = 1/3$ rispettivamente nel caso di dinamica di singolo spin-flip e di spin-exchange. Comunque le funzioni di correlazione misurate in direzione parallela ai domini sono diverse da quelle misurate in direzione trasversa. Nel caso della dinamica di singolo spin-flip i nostri dati possono essere studiati usando una versione anisotropa della teoria di Ohta-Jasnow-Kawasaki.

Allegato 10
Monte Carlo study of the growth of striped domains.

E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, S. Stramaglia, Proceedings of the Conference "Morphology and kinetics of phase separating complex fluids", Preprint BARI-TH/97-283

Riassunto
Si analizza il comportamento di scala dinamico in un modello di spin bidimensionale con interazioni in competizione dopo un rapido raffreddamento nella fase a strisce. Si misurano gli esponenti di crescita studiando le proprietà di scala delle interfacce e del tempo di contrazione di una goccia di una fase immersa in una fase differente. I nostri risultati confermano le previsioni di un lavoro precedente. Le funzioni di correlazione misurate nella direzione parallela e trasversa rispetto alle strisce sono diverse, come viene suggerito dall'esistenza di diverse energie di interfaccia tra gli stati fondamentali del modello. Le nostre simulazioni mostrano un comportamento anisotropo delle funzioni di correlazione sia nel caso di dinamiche di singolo spin-flip sia in quello di dinamiche di spin-exchange.

Capitolo 4

Metastabilità nei modelli di spin

4.1 Introduzione

Un sistema fisico è in uno stato *metastabile* se, fissati i parametri termodinamici, esso si trova in una fase diversa da quella favorita termodinamicamente. Lo stato di *vapore sovrasaturo* è una fase metastabile della materia, perchè essa si trova nella fase di vapore, nonostante la pressione e la temperatura vengano scelti in modo che la fase liquida sia favorita termodinamicamente (fase di equilibrio stabile).

Un secondo esempio di fase metastabile lo si ritrova studiando il comportamento dei materiali ferromagnetici al di sotto della temperatura di Curie: l'isteresi magnetica di uno qualsiasi di questi materiali prevede stati in cui il campo magnetico esterno e la magnetizzazione del ferromagnete hanno verso opposto. La termodinamica non li prevede come stati stabili di un ferromagnete; si tratta di stati metastabili.

Le proprietà fondamentali di uno stato metastabile possono essere riassunte come segue [PL]:

- nel sistema è presente una sola fase, anche se i parametri termodinamici assumono valori tali che lo stato di equilibrio dovrebbe consistere di due o più fasi. In corrispondenza di piccole variazioni dei parametri termodinamici lo stato del sistema subisce cambiamenti piccoli e reversibili in accordo con le leggi della termodinamica.

- Se il sistema è isolato, l'uscita dalla fase metastabile avviene mediante delle fluttuazioni lente e casuali, che possono indurre la crescita della fase stabile; ma tali fluttuazioni sono così poco probabili, che la *vita media* dello stato metastabile è lunghissima, praticamente infinita.

- L'uscita dalla fase metastabile, spontanea o indotta dall'esterno, è un processo irreversibile.

La Meccanica Statistica ha sviluppato un ben definito formalismo che permette di studiare le proprietà di un sistema all'equilibrio; manca, invece, una formulazione teorica organica che permetta di studiare gli stati di non-equilibrio [I, LR]. Anche per il problema della metastabilità non esiste un formalismo generale analogo a quello gibbsiano; in altre parole non esiste una teoria universalmente accettata che permetta di calcolare grandezze relative ad uno stato metastabile di un sistema (per esempio la sua vita media) a partire dalle interazioni elementari fra i suoi costituenti microscopici (atomi, molecole, ioni, ...).

È di grande utilità, pertanto, studiare in modo rigoroso il problema della metastabilità nel caso di alcuni modelli "semplici" quali i modelli stocastici di spin su reticolo [Lig]. Nell'ambito di questi modelli è possibile porre problemi matematicamente ben definiti e stabilire dei risultati certi. La chiarificazione concettuale che ne deriva è certamente di grande utilità in un campo in cui esistono solo teorie semi-fenomenologiche, ricche di assunzioni "ad hoc" e di approssimazioni incontrollate.

Un grande impulso in questo senso è stato dato dal lavoro [CGOV] in cui è stato proposto un "nuovo" approccio al problema della metastabilità, oggi noto come *pathwise approach*. Questo metodo è stato applicato con successo alla descrizione dell'uscita di un sistema dalla fase mestabile per numerosi modelli di spin. In [NS1, NS2, Sc1] è stato risolto il problema nel caso del modello di Ising con accoppiamento ferromagnetico tra primi vicini, utilizzando delle tecniche, però, estremamente ad "hoc". In [KO1, KO2] sono state introdotte delle tecniche più generali e sono state applicate, rispettivamente, al modello di Ising asimmetrico ed al modello di Ising con accoppiamento tra primi e secondi vicini. In [NO] è stato studiato il modello di Ising con campo magnetico alternato e in [BC] è stato risolto il problema della metastabilità nel caso del modello di Ising in tre dimensioni.

Tutti i lavori precedenti si riferiscono al caso di volume finito, campo magnetico finito e temperatura che va a zero. Altri regimi molto interessanti dal punto di vista fisico e matematico, ma molto più complicati (temperatura finita, reticolo infinito e campo magnetico tendente a zero) sono stati presi in esame in [Sc2, SS]. Ancora aperti restano problemi come la metastabilità nel caso di dinamiche conservate e di dinamiche parallele [BCLS].

Il caso di temperatura finita è stato studiato in modo esaustivo anche dal punto di vista delle simulazioni Monte Carlo per esempio in [Bi, BM, BS, LNR, M, TM1]; una descrizione chiara e completa di questi risultati numerici può essere trovata in [RTMS, No1, No2, RG, RSNR]. Il caso di temperatura finita è stato studiato anche con il metodo della matrice di trasferimento in [PS1, PS2, GRN].

In questo capitolo dopo alcuni brevi richiami sul pathwise approach applicato al caso del modello di Ising, verranno discussi alcuni modelli di interesse fisico studiati in collaborazione con il Prof. E. Olivieri (Dipartimento di Matematica, II Università di Roma) e con il Prof. J.L. Lebowitz (Mathematics Department, Rutgers University, NJ). In particolare nella Sezione 4.3 si discuterà l'effetto delle condizioni al bordo sull'uscita dalla fase metastabile, nella Sezione 4.4 si esaminerà il caso di stati metastabili in competizione.

4.2 Il pathwise approach

Il problema degli stati metastabili è di natura puramente dinamica, la sua descrizione dal punto di vista della Meccanica Statistica di equilibrio è inadeguata. In [CGOV] è stato proposto un modo rigoroso di definire gli stati metastabili, oggi noto come *pathwise approach*, ma solo in [NS1, NS2] è stato possibile utilizzare questo approccio per studiare casi di interesse fisico come il Modello di Ising in due dimensioni. Nel seguito vengono illustrati i risultati in [NS1] seguendo, però, lo schema più generale proposto in [OS1, OS2]. In Appendice C sono elencate alcune definizioni che verranno utilizzate nel corso di questa sezione ed in seguito.

Si consideri il Modello di Ising in due dimensioni definito su un quadrato finito $\Lambda = \{1,...,M\} \subset \mathbf{Z^2}$ (si veda la Sezione 1.2) con condizioni periodiche al bordo e con campo magnetico h. Si considera, quindi, lo spazio delle configurazioni Ω_Λ e la misura di Gibbs di equilibrio $\mu_{\Lambda,\beta,h}$ associata all'hamiltoniana che per comodità viene riscritta nel modo seguente:

$$H(\sigma) = -\frac{J}{2} \sum_{<x,y>} \sigma(x)\sigma(y) - \frac{h}{2} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) \quad \forall \sigma \in \Omega_\Lambda \quad . \tag{4.1}$$

Si denota con σ_t la configurazione del modello all'istante $t = 0,1,...$ e si suppone che il sistema evolva secondo la dinamica di Metropolis (si rimanda all'Appendice B per la sua definizione).

Si considera il caso $h > 0$ e piccolo: il minimo assoluto dell'energia $H(\sigma)$ del modello è ottenuto in corrispondenza della configurazione $+\underline{1}$ in cui tutti gli spin assumono valore $+1$. D'altro canto, se h è piccolo, anche la configurazione $-\underline{1}$ in cui tutti gli spin sono -1 è un minimo locale di $H(\sigma)$ pur non essendo il suo minimo assoluto.

Nell'ambito del pathwise approach porre il problema della metastabilità del modello di Ising vuol dire considerare l'evoluzione del modello quando questo viene preparato nella configurazione iniziale $-\underline{1}$. In altri termini si considera il processo $(\sigma_t)_{t\in\mathbf{N}}$ con condizione iniziale $\sigma_0 = -\underline{1}$, con temperatura molto bassa (limite $\beta \to \infty$) e ci si chiede se il sistema esibisce comportamente metastabile ovvero se in qualche senso viene intrappolato nel minimo locale $-\underline{1}$.

L'evoluzione sotto la dinamica di Metropolis favorisce i salti verso configurazioni ad energia minore, una volta "proposta" una transizione verso uno stato ad energia più bassa essa viene effettuata con probabilità uno; mentre transizioni che comportanto variazioni di energia $\Delta H > 0$ vengono pagate in probabilità con un fattore $\exp(-\beta\Delta H)$. Ciò suggerisce che se il sistema parte da una configurazione $\eta \in \Omega_\Lambda$ esso tenderà a raggiungere un minimo locale dell'energia connesso con η tramite una successione di salti tra configurazioni ad energia via via minore. In altri termini, a partire da η il sistema giungerà in un tempo dell'ordine dell'unità in un minimo locale accessibile tramite un cammino in discesa.

D'altro canto il sistema può effettuare dei salti contro la *deriva*, ma tali eventi avvengono con probabilità esponenzialmente piccola in β, quindi richiedono un tempo tipico esponenzialmente lungo in β. In sostanza il processo è regolato da due scale di tempi: i tempi dell'ordine dell'unità, in cui il sistema rilassa verso il fondo del bacino d'attrazione di un certo minimo locale, e i tempi esponenziali in β, che il sistema impiega per giungere sulla frontiera di un bacino d'attrazione e quindi per uscirne. È chiaro, quindi, che i minimi locali dell'hamiltoniana giocano un ruolo fondamentale nella descrizione della dinamica del modello, perchè il sistema spenderà la maggior parte del tempo effettuando delle fluttuazioni aleatorie attorno ad essi, senza uscire dal loro bacino d'attrazione, fino a quando grazie ad un fluttuazione di piccola probabilità giungono sulla frontiera del bacino d'attrazione e, in un tempo dell'ordine dell'unità, entrano nel bacino d'attrazione di un nuovo minimo locale. L'evoluzione del sistema può essere pensata come una successione di salti tra diversi minimi locali che avvengono su una scala di tempo esponenzialmente lunga in β.

Il primo passo nella comprensione del problema è la caratterizzazione dei minimi locali dell'hamiltoniana:

Lemma 4.1 *Si consideri il modello (4.1) con $J > h > 0$ e $M > 2$, $\sigma \in \mathcal{M}$ se e solo se $\sigma(x) = -1$ $\forall x \in \Lambda$ eccetto per i siti che si trovano all'interno di alcuni rettangoli $R_1,...,R_n$ giacenti sul reticolo duale $\Lambda + \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$, non interagenti e con lati di lunghezza maggiore o uguale a due.*

I minimi locali, quindi, sono delle gocce rettangolari di spin più immerse in un mare di spin meno. Si denota con $\mathcal{R}(l_1,l_2)$, ove $0 \leq l_1,l_2 \leq M$, l'insieme di tutte le configurazioni con tutti spin -1 tranne quelli in un rettangolo di lati l_1 e l_2. Inoltre, considerato un minimo locale $\sigma \in \mathcal{R}(l_1,l_2)$, esso verrà denotato con il simbolo $R_{l,m}$ dove

$$l := \min\{l_1,l_2\} \quad \text{e} \quad \mathrm{m} := \max\{\mathrm{l}_1,\mathrm{l}_2\} \quad . \tag{4.2}$$

A questo punto ci si pone il problema di capire cosa accade al sistema quando esso parte da un minimo locale $R_{l,m}$: dopo un tempo abbastanza lungo esso uscirà dal suo bacino d'attrazione e raggiungerà una nuova configurazione stabile, ma si vuole capire quale. In alti termini si vuole capire se una goccia tende a crescere o a contrarsi.

Il meccanismo di crescita più efficiente è la *comparsa di una protuberanza*: uno spin meno adiacente ad uno dei lati del rettangolo viene trasformato in $+1$ (si veda la Fig. 4.1). L'incremento in energia è $\Delta H = 2J - h$, quindi il tempo tipico necessario per osservare l'evento è $\tau_{\text{cresc}} \sim \exp(\beta(2J - h))$.

Il meccanismo di contrazione più efficiente è l'*erosione d'angolo*: a partire da uno degli angoli del lato più corto del rettangolo $R_{l,m}$ vengono in successione trasformati in -1 tutti gli spin di una striscia tranne uno (si veda la Fig. 4.1). Il tempo tipico che bisogna attendere per osservare tale fenomeno è dell'ordine $\tau_{\text{contr}} \sim \exp(\beta h(l-1))$, perchè l'erosione di uno spin in un angolo costa $+h$ dal punto di vista energetico.

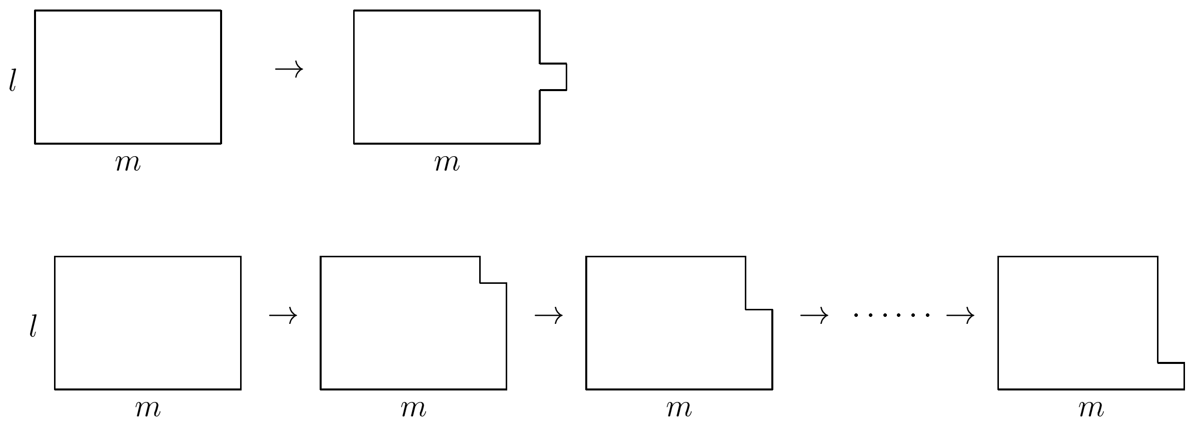


Figura 4.1. In alto è raffigurato il meccanismo di comparsa di una protuberanza, in basso quello di erosione d'angolo per una goccia di spin $+1$ immersa nel mare di spin -1.

Dal confronto dei tempi τ_{cres} e τ_{contr} emerge che posto

$$l^* := \left[\frac{2J}{h}\right] + 1 \tag{4.3}$$

dove con $[a]$ si denota la parte intera del numero reale a, ovvero il più grande numero intero minore di a, si ha che il tempo tipico di crescita è inferiore a quello di contrazione se $l \geq l^*$. Questa osservazione suggerisce che l^* gioca il ruolo di lunghezza critica, cioè permette di discriminare tra gocce *sottocritiche* e *supercritiche*, dove si è definito

Definizione 4.1 *Considerato un minimo locale $\sigma \in \mathcal{M}$*

$$\begin{aligned} \sigma \textit{ supercritico} &\iff P(\tau^{\sigma}_{+\underline{1}} < \tau^{\sigma}_{-\underline{1}}) \stackrel{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1 \\ \sigma \textit{ sottocritico} &\iff P(\tau^{\sigma}_{-\underline{1}} < \tau^{\sigma}_{+\underline{1}}) \stackrel{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Si dimostra, infatti, il seguente Lemma che discrimina tra gocce supercritiche e sottocritiche e fornisce la stima asintotica del tempo di contrazione e di crescita.

Lemma 4.2 *Considerato il rettangolo $R_{l,m}$, preso $\varepsilon > 0$ si ha*

- $l < l^* \Rightarrow R_{l,m}$ *è sottocritico e*

$$P(e^{\beta(l-1)h-\beta\varepsilon} < \tau_{-\underline{1}}^{R_{l,m}} < e^{\beta(l-1)h+\beta\varepsilon}) \stackrel{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

- $l \leq l^* \Rightarrow R_{l,m}$ *è supercritico e*

$$P(e^{\beta(2J-h)-\beta\varepsilon} < \tau_{+\underline{1}}^{R_{l,m}} < e^{\beta(2J-h)+\beta\varepsilon}) \stackrel{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

Se si considera un minimo locale con più di un rettangolo questo sarà sottocritico se tutti i suoi rettangoli lo sono; è possibile dimostrare una versione più forte del Lemma 4.2 che fornisce una descrizione più dettagliata della contrazione e della crescita delle gocce (si vedano i Lemma 3 e 4 in [KO1] e il Teorema 1 in [NS1]).

La dimostrazione del Lemma 4.2 procede nel modo seguente: si considera il bacino d'attrazione $B(R_{l,m})$ e la sua frontiera $\partial B(R_{l,m})$. Per uscire da $B(R_{l,m})$ il sistema deve necessariamente attraversare la sua frontiera: è intuitivo che lo farà in corrispondenza di quella configurazione che minimizza l'energia del sistema sull'insieme $\partial B(R_{l,m})$. Pertanto il primo passo, nella dimostrazione del Lemma, è il calcolo del minimo dell'energia sulla frontiera del bacino d'attrazione. Nel caso $l < l^*$ si prova che questo minimo è realizzato dalla configurazione $\mathcal{P}_1$ ottenuta a partire da $R_{l,m}$ trasformando in meno tutti gli spin più che si trovano su uno dei suoi due lati con lunghezza minima tranne uno. Per dimostrare che quando il sistema giunge sulla frontiera vi giunge in $\mathcal{P}_1$ si stima dall'alto e dal basso il tempo di primo arrivo sulla frontiera. Per la stima dal basso si usa il Lemma di reversibilità:

Lemma 4.3 (di reversibilità) *Si considerino $\sigma,\eta \in \Omega_\Lambda$ e si supponga $H(\sigma) < H(\eta)$, allora preso $\varepsilon > 0$ si ha*

$$P(\tau_\eta^\sigma > e^{\beta(H(\eta)-H(\sigma))-\beta\varepsilon}) \stackrel{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

La stima dall'alto, invece, procede esibendo esplicitamente un evento che porta il sistema in $\mathcal{P}_1$ e che ha un probabilità non molto bassa, cioè detto $\mathcal{E}_{R_{l,m}\to\mathcal{P}_1}$ questo evento e preso $\delta > 0$ deve accadere $P(\mathcal{E}_{R_{l,m}\to\mathcal{P}_1}) > \exp[-\beta(H(\mathcal{P}_1) - H(R_{l,m})) - \beta\delta]$. Tale evento può essere costruito considerando un cammino in salita che congiunge $R_{l,m}$ con $\mathcal{P}_1$. Per i dettagli si rimanda a [NS1, KO1, CO1].

Si consideri, ora, il sistema con condizione iniziale $-\underline{1}$: il sistema presenterà fluttuazioni aleatorie attorno a tale minimo dell'hamiltoniana e su tempi abbastanza lunghi si formeranno delle piccole gocce di più all'interno del mare di meno. Queste gocce, destinate a scomparire, persisteranno per un tempo dell'ordine di τ_{contr} e poi il sistema tornerà in $-\underline{1}$. Si pone il problema di capire se il sistema esce dalla fase metastabile, in quanto tempo e in che modo.

È intuitivo che l'uscita non può avvenire per coalescenza di numerose piccole gocce, perchè queste tendono a scomparire in tempi rapidissimi, molto minori del tempo necessario a formarne altre. È quindi necessario aspettare una fluttuazione di bassa probabilità che generi una goccia sufficientemente grande per invadere tutto il sistema, cioè una goccia supercritica, ma tale che sia la più piccola possibile. Tale goccia è detta *protocritica* ed è un rettangolo di lati l^* e $l^* - 1$ con una protuberanza adiacente ad uno dei due lati più lunghi. Questa configurazione viene denotata con $\mathcal{P}$: si osserva che la goccia può essere traslata in un punto qualsiasi del sistema, pertanto $\mathcal{P}$ indica in realtà un insieme di configurazioni.

In modo più preciso si pone

$$\Gamma := H(\mathcal{P}) - H(-\underline{1}) = 2Jl^* - h(l^{*^2} - l^* + 1) \tag{4.5}$$

e si introduce il tempo in cui il sistema visita $-\underline{1}$ per l'ultima volta prima di giungere in $+\underline{1}$:

$$\bar{\tau}_{-\underline{1}} := \sup\{t < \tau_{+\underline{1}}^{-\underline{1}} : \ \sigma_t^{-\underline{1}} = -\underline{1}\} \quad . \tag{4.6}$$

Poi si definisce il primo istante che il sistema giunge nella goccia protocritica dopo $\bar{\tau}_{-\underline{1}}$, ovvero

$$\bar{\tau}_{\mathcal{P}} := \inf\{t > \bar{\tau}_{-\underline{1}} : \ \sigma_t^{-\underline{1}} = \mathcal{P}\} \tag{4.7}$$

e si dimostra

Teorema 4.1 *Dato $\varepsilon > 0$ si ha*

- $P(\bar{\tau}_{\mathcal{P}} < \tau_{+\underline{1}}^{-\underline{1}}) \overset{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1$
- $P(e^{\beta\Gamma-\beta\varepsilon} < \tau_{+\underline{1}}^{-\underline{1}} < e^{\beta\Gamma+\beta\varepsilon}) \overset{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1$

Il Lemma 4.2 e il Teorema 4.1 forniscono una descrizione abbastanza accurata del comportamente del sistema nella fase metastabile e della sua uscita: partendo da $-\underline{1}$ il sistema passa un tempo molto lungo "vicino" alla configurazione $-\underline{1}$; di tanto in tanto appaiono delle piccole gocce di più che scompaiono in un tempo dell'ordine di τ_{contr}. Solo dopo un tempo molto lungo, in confronto alla durata tipica delle fluttuazioni, il sistema "nucleerà" la goccia protocritica $\mathcal{P}$ e raggiungerà la fase stabile. È possibile dare una descrizione molto più dettagliata del meccanismo di uscita: è possibile scrivere il tubo di traiettorie che il sistema segue durante la sua prima escursione da $-\underline{1}$ a $+\underline{1}$. Si rimanda a [Sc1, KO1].

Per dimostrare il Teorema 4.1 è cruciale l'introduzione di una sorta di bacino d'attrazione allargato della configurazione $-\underline{1}$: in sostanza si definisce un insieme $\mathcal{A} \subset \Omega_\Lambda$ che contiene tutte le configurazioni sottocritiche. Una volta che uno ha definito questo oggetto la dimostrazione procede mostrando che il minimo dell'energia sulla frontiera di $\mathcal{A}$ è dato dalla configurazione protocritica: allora il sistema per giungere in $+\underline{1}$ deve uscire da $\mathcal{A}$, ma per uscire da $\mathcal{A}$ deve attraversarne la frontiera e ciò avverà nel punto ad energia più bassa, cioè attraverso la goccia protocritica.

Le configurazione $\sigma \in \mathcal{A}$ devono essere tali che se il sistema ha una di esse come stato iniziale, allora con grande probabilità giungerà in $-\underline{1}$ prima che in $+\underline{1}$; cioè se $\sigma \in \mathcal{A}$ e deve accadere $P(\tau_{-\underline{1}}^{\sigma} < \tau_{+\underline{1}}^{\sigma}) \longrightarrow 1$ nel limite $\beta \to \infty$. Caratterizzare le configurazioni che godono di questa proprietà non è impresa banale, infatti una generica $\sigma \in \Omega_\Lambda$ può essere estremamente complicata. Si costruisce allora una applicazione che ad ogni $\sigma \in \Omega_\Lambda$ associa un minimo locale $\hat{\sigma}$ e la condizione di appartenenza al bacino $\mathcal{A}$ viene data su $\hat{\sigma}$; ciò non alcuna comporta difficoltà perchè la criticità dei minimi locali è nota dal Lemma 4.2. L'applicazione $S: \ \sigma \longrightarrow \ \hat{\sigma}$, viene definita costruendo il più grande minimo locale, partendo da σ ed effettuando una serie di singoli spin flip favoriti energeticamente; la locuzione "più grande" va intesa nel senso della relazione d'ordine parziale definita su Ω_Λ nel modo seguente

$$\sigma \prec \eta \iff \sigma(x) \le \eta(x) \ \ \forall x \in \Lambda \quad . \tag{4.8}$$

Si illustra ora in dettaglio la definizione dell'insieme $\mathcal{A}$: sia $\sigma \in \Omega_\Lambda$, si definisce $c(\sigma)$ l'unione di tutti i quadrati unitari chiusi centrati sui siti $x \in \Lambda$ tali che $\sigma(x) = +1$. Evidentemente $c(\sigma)$ è un sottoinsieme del piano su cui giace il reticolo. Assegnare la configurazione σ è del tutto equivalente ad assegnare l'insieme $c(\sigma)$. Si definiscono, quindi, i *contorni* di $c(\sigma)$ come le componenti connesse massimali della frontiera di $c(\sigma)$; in sostanza un contorno γ è una poligonale chiusa sul reticolo duale.

Si introducono le componenti connesse massimali $c_1,c_2,...,c_k$ dell'insieme $c(\sigma)$, tali oggetti sono degli $\star$–cluster, nel senso che i siti appartenenti ad essi possono essere connessi per siti primi o secondi vicini. Una configurazione $\sigma \in \Omega_\Lambda$ può essere identificata con la collezione $\{c_1,...,c_k\}$. Ad ognuno degli $\star$–cluster c_j viene associato il rettangolo circoscritto $R(c_j)$ il più piccolo rettangolo chiuso contenente c_j tracciato sul reticolo duale. Si dice che una configurazione σ è *ammissibile* se e solo se tutti i rettangoli $R(c_1),...,R(c_k)$ hanno i lati minori o uguali ad $M-1$; cioè nelle configurazioni ammissibili gli $\star$–cluster di spin $+1$ non devono estendersi su tutto il reticolo.

Il sottospazio di Ω_Λ costituito da tutte le configurazioni ammissibili viene indicato con Ω^*_Λ. Se $\sigma \in \Omega^*$ allora si possono definire i *contorni esterni* degli $\star$–cluster c_j; infatti se $\sigma \in \Omega^*_\Lambda$, esiste un'unica componente di spin -1 che invade tutto il reticolo, allora si dirà contorno esterno γ_j di c_j il sottoinsieme della frontiera di c_j costituito da tutti i segmenti unitari del reticolo duale, che separano uno spin $+1$ di c_j da uno spin -1 della componente che invade tutto il reticolo. Si osserva che ogni lato di $R(c_j)$ contiene almeno un segmento appartenente a γ_j.

Si considerino, ora, i rettangoli $R_1,...,R_m$, si dice che costituiscono una catena $\Xi := \{R_1,...,R_m\}$ se e solo se comunque si scelgano due di essi R_n ed R_p con $n,p \in \{1,...,m\}$, si possa determinare una sequenza di rettangoli $R_{i_1},...,R_{i_k} \in \Xi$ tale che $R_{i_1} = R_n$, $R_{i_k} = R_m$ e R_{i_l}, $R_{i_{l+1}}$ sono interagenti $\forall l = 1,...,k-1$.

Si definisce, ora, l'applicazione $S : \sigma \longrightarrow \hat{\sigma}$:

Definizione 4.2 *La definizione dell'applicazione viene data in sei passi: data una configurazione $\sigma \in \Omega^*_\Lambda$*

1. *si considerano $c(\sigma)$, le sue componenti massimali $c_1,...,c_k$ ed i rettangoli $R(c_1),...,R(c_k)$;*

2. *vengono trasformati in $+1$ tutti gli spin -1 che si trovano all'interno dei rettangoli $R(c_1),...,R(c_k)$, in modo che questi ultimi contengano solo spin $+1$;*

3. *a partire dai rettangoli $R(c_1),...,R(c_k)$ vengono costruite tutte le possibili catene massimali*

$$\Xi^{(1)}_1,..., \Xi^{(1)}_{k_1} \quad ,$$

dette catene di prima generazione; la generica catena $\Xi^{(1)}_j$ è massimale nel senso che aggiungendo ad essa uno qualsiasi dei rettangoli $R(c_1),...,R(c_k)$ che non le appartiene, l'insieme di rettangoli così ottenuto non costituisce una catena.

4. *Si definisce una legge che permette di passare dalle catene di r–esima generazione, a quelle di $(r+1)$–esima generazione: si considera l'oggetto*

$$\bigcup_{R \in \Xi^{(r)}_j} R \quad ,$$

che non è necessariamente uno $\star$-cluster, ed il suo inviluppo rettangolare $R^{(r)}_j$ $\forall j = 1,...,k_r$; a partire da questi k_r rettangoli si ottengono le catene di $(r+1)$-esima generazione $\Xi^{(r+1)}_1,...,\Xi^{(r+1)}_{k_{r+1}}$ costruendo tutte le possibili catene massimali.

5. *La procedura illustrata al punto precedente viene iterata fino a quella generazione f-esima, in cui ogni catena consta di un singolo rettangolo*

$$\Xi^{(f)}_1 = \{\bar{R}_1\},..., \Xi^{(f)}_{k_f} = \{\bar{R}_{k_f}\} \quad ;$$

tali rettangoli sono non interagenti per costruzione.

6. *L'applicazione S associa ad ogni configurazione $\sigma \in \Omega^*_\Lambda$ la configurazione $\hat{\sigma}$ in cui gli spin $+1$ sono precisamente quelli racchiusi nei rettangoli $\bar{R}_j$ con $j \in \{1,...,k_f\}$.*

L'applicazione S appena definita gode delle seguenti notevoli proprietà

$$\begin{cases} \sigma \prec \hat{\sigma} \ \ \forall \sigma \in \Omega^*_\Lambda \\ H(\sigma) \geq H(\hat{\sigma}) \ \ \forall \sigma \in \Omega^*_\Lambda \\ \sigma \prec \eta \Longrightarrow \hat{\sigma} \prec \hat{\eta} \ \ \forall \sigma,\eta \in \Omega^*_\Lambda \end{cases} , \tag{4.9}$$

l'ultima delle tre proprietà si può esprimere dicendo che l'applicazione S è crescente nel senso della relazione d'ordine parziale (4.8). La prima e la terza delle (4.9) sono di dimostrazione immediata se si tiene presente che durante la costruzione della configurazione $\hat{\sigma}$ non vengono mai invertiti spin $+1$; mentre per la seconda bisogna tener presente che tutte le operazioni che si fanno sono favorite energeticamente.

Infine si definisce il bacino di attrazione allargato della configurazione $-\underline{1}$:

Definizione 4.3 *Con le notazioni introdotte in precedenza:*

$$\mathcal{A} := \{\sigma \in \Omega^*_\Lambda : \ \bar{R}_1,...,\bar{R}_{k_f} \text{ sono sottocritici}\} \quad , \tag{4.10}$$

cioè $\mathcal{A}$ è l'insieme di tutte le configurazioni ammissibili, che per effetto di S vengono trasformate in configurazioni in cui tutti gli spin $+1$ si trovano in rettangoli non interagenti e sottocritici.

Si osserva, inoltre, che $\mathcal{A}$ costituisce solo una stima del bacino d'attrazione generalizzato di $-\underline{1}$, infatti si possono determinare configurazioni che non appartengono ad $\mathcal{A}$, ma tali che a partire da esse il sistema giunge con grande probabilità in $-\underline{1}$ prima che in $+\underline{1}$.

Dopo aver definito l'insieme $\mathcal{A}$ è possibile procedere nella dimostrazione del Teorema 4.1: lo spirito della dimostrazione è simile a quello descritto a proposito del Lemma 4.2, ma i dettagli tecnici sono estremamente più complicati. Si rimandano i dettagli a [NS1, KO1], qui ci si limita ad osservare che, ai fini della dimostrazione, le proprietà chiave del bacino d'attrazione allargato $\mathcal{A}$ sono le seguenti:

- $\mathcal{A}$ è connesso; $-\underline{1} \in \mathcal{A}$ e $+\underline{1} \notin \mathcal{A}$.
- Esiste un cammino ω che connette $-\underline{1}$ con $\mathcal{P}$ contenuto in $\mathcal{A}$ e tale che

  $$H(\sigma) < H(\mathcal{P}) \quad \forall \sigma \in \omega, \ \sigma \neq \mathcal{P}$$

  Esiste un cammino ω' che connette $\mathcal{P}$ con $+\underline{1}$ contenuto in $\mathcal{A}^c$ e tale che

  $$H(\sigma) < H(\mathcal{P}) \quad \forall \sigma \in \omega', \ \sigma \neq \mathcal{P}$$

- Il minimo dell'energia sulla frontiera di $\mathcal{A}$ è ottenuto sulla sella protocritica, ovvero

  $$\min_{\sigma \in \partial\mathcal{A}} [H(\sigma) - H(-\underline{1})] = H(\mathcal{P}) - H(-\underline{1}) = \Gamma$$

  e

  $$\min_{\sigma \in \partial\mathcal{A}\setminus\{\mathcal{P}\}} [H(\sigma) - H(\mathcal{P})] > 0$$

- Con probabilità più grande di zero, uniformemente in β, il sistema partendo da $\mathcal{P}$ raggiunge $+\underline{1}$ prima di visitare $-\underline{1}$; ovvero dato $\varepsilon > 0$

  $$P(\tau^{\mathcal{P}}_{+\underline{1}} < \tau^{\mathcal{P}}_{-\underline{1}}) \geq e^{-\beta\varepsilon}$$

  e

  $$P(\tau^{\mathcal{P}}_{+\underline{1}} < e^{\beta(2J-h)+\beta\varepsilon} | \tau^{\mathcal{P}}_{+\underline{1}} < \tau^{\mathcal{P}}_{-\underline{1}}) \overset{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

4.3 Il problema delle condizioni al bordo

La scelta delle condizioni al bordo nel caso di volume finito influenza notevolmente le proprietà dinamiche della fase metastabile. Questo problema è stato messo in evidenza in [RKLRN, SG] e in [CL] è stato studiato approfonditamente, sia nel senso dei risultati esatti sia in quello delle simulazioni Monte Carlo, nel caso del modello di Ising con le condizioni al bordo libere [TM2].

Tra le possibili scelte delle condizioni al bordo, quelle libere hanno un certo interesse tecnologico: durante il processo di registrazione di un nastro magnetico le diverse parti del materiale sono esposte a diversi campi magnetici, ciò risulta in domini con diversa orientazione della magnetizzazione. Questi materiali devono essere in grado di mantenere il loro stato di magnetizzazione per tempi lunghissimi anche in presenza di deboli campi magnetici esterni. Lo studio dell'uscita dalla fase metastabile in presenza di condizioni al bordo periodiche trascura l'effetto dei domini che circondano quello preso in esame, questo effetto può essere modellizzato scegliendo delle condizioni al bordo libere.

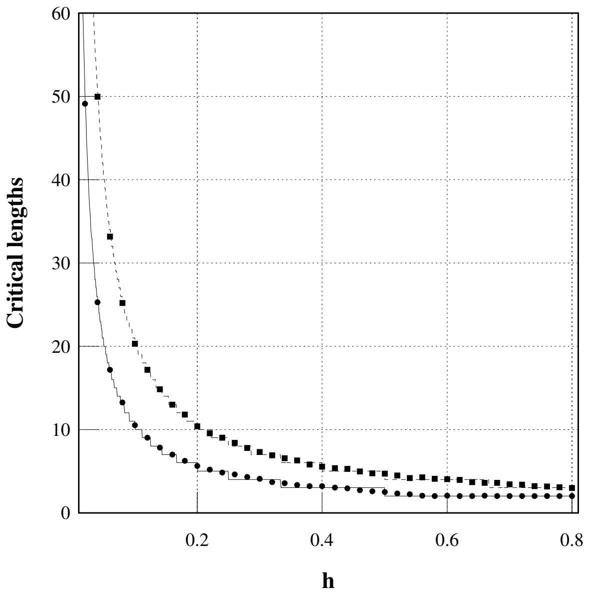


Figura 4.2. Lunghezze critiche λ_1 e λ_2 in funzione del campo magnetico esterno h. La linea continua e quella tratteggiata rappresentano le previsioni teoriche (4.11). I cerchi e i quadrati neri rappresentano, rispettivamente, le stime numeriche di λ_1 e λ_2.

Si considera, quindi, il modello (4.1), con la dinamica di Metropolis e con le condizioni al bordo libere; inoltre si scelgono i parametri $J >> h > 0$ e ci si pone la domanda della metastabilità come descritto nella sezione precedente. Dal punto di vista dei risultati rigorosi la tecnica utilizzata è simile a quella descritta nel caso di condizioni al bordo periodiche, pertanto si rimanda a [CL] (Allegato 11), qui si discutono gli aspetti principali.

Le caratteristiche qualitative dello stato metastabile non cambiano rispetto al caso delle condizioni al bordo periodiche studiato in [NS1, RTMS, Sc1, TM1] e descritte nella Sezione 4.2, ma dal punto di vista quantitativo le stime sono diverse: si osserva sia una diversa dimensione critica, sia una diversa vita media $\tau_\beta \sim \exp(\beta J^2/h)$ dello stato metastabile, contro la stima

$\tau_\beta^{\text{period}} \sim \exp(4\beta J^2/h)$ valida nel caso di condizioni al bordo periodiche. La vita media dello stato metastabile risulta più piccola perchè le condizioni al bordo libere favoriscono l'inversione di spin meno che si trovano vicini al bordo.

Questo effetto giustifica anche la necessità di introdurre due dimensioni critiche

$$\lambda_1 := \left[\frac{J}{h}\right] + 1 \quad \text{e} \quad \lambda_2 := \left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{h}}\right] + 1 \quad , \tag{4.11}$$

la prima caratteristica delle gocce con un lato sul bordo o a distanza uno da esso, la seconda caratteristica delle gocce lontane dal bordo. Ovviamente la dimensione critica delle gocce vicine al bordo è più piccola, perchè le condizioni al bordo libere ne favoriscono la crescita.

Ma la novità più interessante è la seguente: mentre nel caso del modello di Ising con condizioni al bordo periodiche la goccia critica è un quadrato di lato $[\frac{2J}{h}]+1$ posto in un qualsiasi punto del toro, nel caso delle condizioni al bordo libere si tratta ancora di un quadrato, con lato $[\frac{J}{h}]+1$, ma posto in uno dei quattro angoli del reticolo quadrato. In altri termini, non solo la geometria, ma anche la posizione nel reticolo della grande fluttuazione che permette l'uscita dalla fase metastabile può essere prevista.

I risultati descritti in precedenza sono stati discussi in [CL] sia con metodi esatti nel limite di bassa temperatura, sia con simulazioni Monte Carlo a β fissato. Nel seguito descrivo come è stato possibile misurare la lunghezza critica e come si è messa in evidenza la nucleazione nel vertice del reticolo.

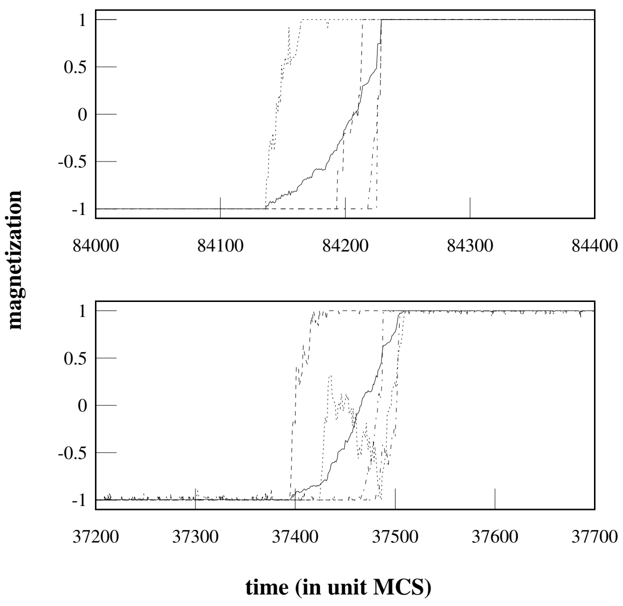


Figura 4.3. La linea solida rappresenta m_0, quelle tratteggiate rappresentano m_1, m_2, m_3 e m_4 in funziuone del numero di iterazioni. La figura in alto è relativa al caso $\beta = 3$, $h = 0.24$ ($\lambda_1 = 5$) e $M = 16$; quella in basso a $\beta = 2$, $h = 0.14$ ($\lambda_1 = 8$) e $M = 32$.

Abbiamo considerato un reticolo $M \times M$ e tipicamente abbiamo usato $\beta \geq 2$, $h \leq 0.5$ e $J = 1$. Questo range di parametri è diverso da quello usato in lavori numerici precedenti, per esempio [RTMS, TM1], dove sono stati usati campi magnetici e temperature più elevate. La scelta dei parametri è dovuta alla necessità di confrontare il dato numerico con la previsione teorica che è valida solo nel limite $T \to 0$, pertante è necessario porre il sistema nella cosiddetta *single droplet region*, ovvero nella regione in cui l'uscita dalla fase metastabile avviene mediante la nucleazione di una singola goccia [RTMS].

Per stimare λ_1 abbiamo fissato β e h, abbiamo posto il sistema nella configurazione in cui tutti gli spin sono -1 eccetto quelli in un quadrato di lato l posto in un angolo del reticolo, abbiamo lasciato evolvere il sistema ed abbiamo ripetuto l'esperimento per valori decrescenti di l. Il valore più piccolo di l per cui la goccia cresceva è stato scelto come stima di λ_1. In modo analogo si è proceduto per la stima di λ_2.

In Fig. 4.2 (si veda anche la Fig. 1 dell'Allegato 11) è riportata la media su 60 misure indipententi di λ_1 e λ_2, ottenute con temperature inverse rispettivamente uguali a $\beta = 10$ e $\beta = 6$. La linea solida e quella tratteggiata rappresentano il risultato esatto (4.11) valido nel limite $\beta \to \infty$, mentre i cerchi e i quadrati neri rappresentano, rispettivamente, le stime numeriche di λ_1 e λ_2. L'accordo è eccellente, ma la struttura a scala non viene riprodotta dai dati numerici perchè β, sebbene sia stato scelto grande, non è infinito.

In Fig. 4.3 (si veda anche la Fig. 2 dell'Allegato 11), invece, viene messa in evidenza la localizzazione della goccia critica: in figura sono state riportate la magnetizzazione per spin misurata sull'intero reticolo m_0 e le quattro magnetizzazione m_1, m_2, m_3 e m_4 ottenute mediando su quadrati di lato λ_1 posti nei vertici del reticolo. Le curve sono tracciate in funzione del numero di iterazioni (MCS = Monte Carlo Sweeps) relativamente ad una singola storia del sistema, che viene lasciato evolvere dopo essere stato preparato nella configurazione $-\underline{1}$. In entrambe le figure la linea solida rappresenta m_0, mentre le linee tratteggiate sono relative alle altre quattro magnetizzazione definite in precedenza.

In entrambi i casi è evidente che il sistema passa un tempo molto lungo (circa 10^4 MCS) nella configurazione $-\underline{1}$; le fluttuazioni sono visibili nel caso $\beta = 2$, del tutto trascurabili nel caso $\beta = 3$. Dopo questo tempo lungo la magnetizzazione in uno dei quattro angoli diventa rapidamente uno (nucleazione della goccia protocritica); una volta avvenuto questo evento raro tutte le altre magnetizzazioni saturano ad uno, cioè il sistema raggiunge rapidamente la fase stabile.

4.4 Modello di Blume-Capel

In [CO1], in collaborazione con il Prof. E. Olivieri, ho affrontato il problema della metastabilità nel caso del modello di Blume-Capel bidimensionale; questo problema ha un notevole interesse fisico per via della presenza di più stati metastabili in competizione; una versione di questo modello con debole accoppiamento a lunga portata è stata analizzata numericamente in [FGRN]. In [CO1] è stato mostrato, utilizzando risultati di [OS1, OS2], come il meccanismo di uscita dalla fase metastabile e la sua vita media dipendano dai parametri del modello. Dal punto di vista tecnico il calcolo è molto simnile a quello illustrato in Sezione 4.2 nel caso del modello di Ising bidimensionale; ovviamente i problemi dipendenti dal modello che sono stati risolti sono di gran lungo più complicati per via della struttura molto varia dei minimi locali. Per i dettagli si rimanda all'Allegato 12, qui si descrivono i risultati fisicamente più interesanti.

Il modello bidimensionale di Blume-Capel è definito su un reticolo finito $\Lambda \subset \mathbf{Z}^2$, ad ogni sito reticolare $x \in \Lambda$ è associata una variabile di spin $\sigma(x) \in \{-1, 0, +1\}$. L'hamiltoniana del modello, cioè l'energia associata ad ogni configurazione $\sigma \in \{-1,0,+1\}^{\Lambda}$, è data da

$$H(\sigma) := J \sum_{<x,y>} (\sigma(x) - \sigma(y))^2 - h \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x) - \lambda \sum_{x \in \Lambda} \sigma^2(x) \quad , \tag{4.12}$$

dove J è una costante reale e positiva (accoppiamento ferromagnetico), h e λ sono due numeri reali qualsiasi. I parametri h e λ hanno rispettivamente il significato fisico di campo magnetico esterno e di potenziale chimico. Si considera il caso di condizioni al bordo periodiche e l'evoluzione del sistema è descritta dal processo $(\sigma_t)_{t \in \mathbf{N}}$ con dinamica di Metropolis (si veda l'Appendice B).

Si denotano con $-\underline{1}$, $\underline{0}$ e $+\underline{1}$ le configurazioni di Ω_Λ in cui tutti gli spin sono rispettivamente uguali a -1, 0 e $+1$. La struttura degli stati fondamentali è descritta in modo dettagliato nella Sezione 2 dell'Allegato 12 [CO1], qui ci si limita ad osservare che per $\lambda = h = 0$ le tre configurazioni $-\underline{1}$, $\underline{0}$ e $+\underline{1}$ sono i soli stati fondamentali del sistema; inoltre si ricorda che per mezzo della teoria di Pirogov-Sinai è possibile dimostrare che questa transizione di fase persiste anche a bassa temperatura ([Bl, C, BrS, DM]).

Dal punto di vista della metastabilità la regione dello spazio dei parametri più interessante è quella in cui h e λ sono piccoli, il volume è grande, ma finito, e la temperatura T tende a zero; in altri termini siamo interessati alla regione attorno al punto triplo $h = \lambda = T = 0$. In particolare si considera la regione $h > \lambda$ dove il minimo assoluto dell'hamiltoniana è dato dalla configurazione $+\underline{1}$. Il problema che ci si pone è il solito problema della metastabilità: il sistema viene preparato nella configurazione metastabile $-\underline{1}$ e si vuole descrivere la sua prima escursione verso la configurazione $+\underline{1}$. L'aspetto più interessante di questo modello è che oltre alla fase metastabile $-\underline{1}$ c'è anche quella $\underline{0}$, quale sarà il suo ruolo non è assolutamente chiaro a priori. In Fig. 4.4 è data una rappresentazione schematica del panorama delle energie in questa regione.

Come nel caso del modello di Ising un ruolo fondamentale nella descrizione dell'uscita dalla fase metastabile è giocato dalla struttura dei minimi relativi dell'hamiltoniana. Nella regione dello spazio dei parametri che abbiamo considerato e limitandoci alle configurazioni in cui è ben definito il "mare" di spin -1 si ottiene una struttura complicata dei minimi locali. Si dimostra (Sezione 3 dell'Appendice 12) che le interfacce dirette tra uno spin meno ed un più sono instabili, quindi sono proibite nei minimi locali. Inoltre si dimostra che il più generale minimo locale è costituito da rettangoli di spin 0 non interagenti immersi nel mare di -1, con eventuali famiglie di rettangoli non interagenti di spin $+1$ al loro interno; tali configurazioni sono state chiamate *plurirettangoli*. In Fig. 3.8 dell'Allegato 12 è rappresentato un possibile esempio di tali configurazioni. Si osserva che come casi particolari dei plurirettangoli ci sono i semplici *rettangoli* di zero immersi nel mare di meno e le cosiddette *cornici*, costituite da un rettangolo di più separato dal mare di meno da un bordo di zero di larghezza unitaria.

Come la struttura dei minimi locali suggerisce è lecito chiedersi se la fase stabile viene raggiunta direttamente attraverso la nucleazione e la crescita di una cornice, oppure se, tramite la crescita di un rettangolo di zero, si tocca il minimo metastabile $\underline{0}$ prime di giungere nel minimo stabile $+\underline{1}$.

In modo abbastanza sorprendente si trova che entrambi i meccanismi sono possibili ed è possibile discriminare tra loro controllando il rapporto h/λ. Più precisamente: si suddivide lo spazio dei parametri in quattro zone

$$\begin{aligned} \pi_I &:= \{(\lambda,h) : \ 0 < h < \lambda\} \\ \pi_{II} &:= \{(\lambda,h) : \ 0 < \lambda < h < 2\lambda\} \\ \pi_{III} &:= \{(\lambda,h) : \ 0 < 2\lambda < h\} \\ \pi_{IV} &:= \{(\lambda,h) : \ 0 < -\lambda < h\} \end{aligned} \tag{4.13}$$

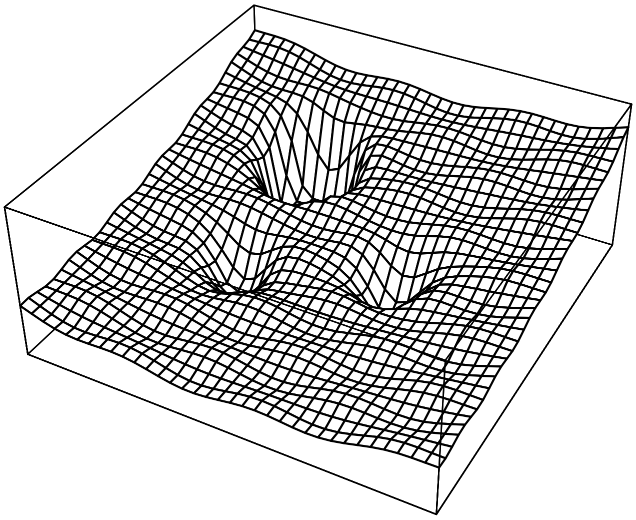


Figura 4.4. Panorama dell'energia nel modello di Blume-Capel.

e in ognuna di queste zone si trova un particolare meccanismo di uscita e si trova una certa stima della vita media $T_{\lambda,h}$ dello stato metastabile. In Fig. 4.5 viene riportata la nostra stima asintotica dei tempi $T_{\lambda,h}$ in funzione di λ ad h fissato.

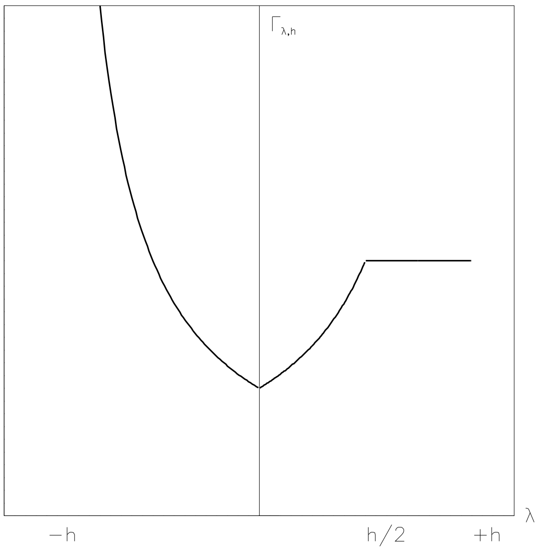


Figura 4.5. Grafico della funzione $\frac{1}{\beta} \log T_{\lambda,h}$ in funzione di h a λ fissato.

Nella regione π_I si ha

$$H(\underline{0}) > H(-\underline{1}) > H(+\underline{1})$$

è quindi ragionevole aspettarsi e facile provare che nel decadimento $-\underline{1} \to +\underline{1}$ lo stato $\underline{0}$ non giochi alcun ruolo; è sufficiente esibire un meccanismo di transizione che coinvolga una barriera energetica minore di $H(\underline{0}) - H(-\underline{1})$. Nelle restanti tre regioni si ha, invece,

$$H(-\underline{1}) > H(\underline{0}) > H(+\underline{1})$$

quindi non si può dire nulla di ovvio sul ruolo giocato da $\underline{0}$ durante la transizione $-\underline{1} \to +\underline{1}$.

Nella regione π_{II} si prova che la sella minima locale (configurazione protocritica) $\mathcal{P}_1$ tra $-\underline{1}$ e $+\underline{1}$ è una cornice quadrata di lato interno $l^* := \left[\frac{2J-(h-\lambda)}{h}\right] + 1$ in cui su uno dei lati del quadrato di più sono stati trasformati in zero $l^* - 1$ spin (si veda la Fig. 5.1 dell'Allegato 12). Allora la transizione $-\underline{1} \to +\underline{1}$ avviene in modo diretto è la vita media dello stato metastabile è data da $T_{\lambda,h} \sim \exp(\beta \Gamma_{\lambda,h})$ dove

$$\Gamma_{\lambda,h} = H(\mathcal{P}_1) - H(-\underline{1}) \sim \frac{8J^2}{h} \quad . \tag{4.14}$$

Nella regione π_{III}, invece, la sella protocritica $\mathcal{P}_2$ è un quadrato di zero di lato $M^* := \left[\frac{2J}{h-\lambda}\right] + 1$ in cui sono stati trasformati in meno $M^* - 1$ spin su uno dei suoi quattro lati. Quindi il sistema visiterà il minimo $\underline{0}$ prima di giungere in $+\underline{1}$ e la nucleazione della fase stabile, a partire da $\underline{0}$ avverrà tramite la formazione di una goccia quadrata $\mathcal{P}_3$ di $+1$ nel mare di zero di lato $L^* := \left[\frac{2J}{h+\lambda}\right] + 1$. Poichè risulta $H(\mathcal{P}_2) - H(-\underline{1}) > H(\mathcal{P}_3) - H(\underline{0})$ si ha che nella regione π_{III} la vita media è controllata da

$$\Gamma_{\lambda,h} = H(\mathcal{P}_2) - H(-\underline{1}) \sim \frac{4J^2}{h-\lambda} \quad . \tag{4.15}$$

Si osserva che attraversando la linea $h = 2\lambda$ nello spazio dei parametri, ovvero passando dalla regione π_{II} alla regione π_{III}, il meccanismo di uscita e la stima sulla vita media della fase metastabile cambiano in modo brusco. Ebbene la linea in questione non ha "nessun significato" dal punto di vista del comportamente del sistema all'equilibrio, cioè è una linea che ha rilevanza soltanto dinamica, ma non statica. Ciò non è sorprendente perchè nello studio della metastabilità la regione dello spazio delle fasi che regola il fenomeno è una regione molto improbabile quando il sistema è all'equilibrio.

Infine si considera la regione π_{IV}: il meccanismo di uscita è simile a quello desccritto a proposito della regione π_{III}, ma in questo caso la stima sulla vita media è controllata dall'asintotica sulla transizione $\underline{0} \to +\underline{1}$. Quindi si ha

$$\Gamma_{\lambda,h} = H(\mathcal{P}_3) - H(\underline{0}) \sim \frac{4J^2}{h+\lambda} \quad . \tag{4.16}$$

Allegato 11
Metastability in the two-dimensional Ising model with free boundary conditions.

E.N.M. Cirillo, J.L. Lebowitz, Journ. Stat. Phys. 90, 211-226, 1998

Riassunto
In questo lavoro viene studiato il comportamento metastabile del modello di Ising bidimensionale con condizioni al bordo libere nel limite di bassa temperatura. Il sistema viene posto nella configurazione in cui tutti gli spin sono negativi e si trova in presenza di un piccolo campo magnetico positivo: si dimostra che l'uscita da questo stato metastabile avviene attraverso la formazione di una goccia critica in uno dei quattro angoli del sistema. La vita media dello stato metastabile viene calcolata analiticamente nel limite $T \to 0$ e $h \to 0$ e via simulazioni Monte Carlo a temperatura e campo magnetico esterno fissati. Questo sistema modella l'effetto di domini adiacenti in un sistema magnetico, per esempio un nastro magnetico, quando questo esce dal suo stato metastabile per effetto di un campo esterno.

Allegato 12

Metastability and nucleation for the Blume-Capel model. Different mechanisms of transition.

E.N.M. Cirillo, E. Olivieri, Journ. Stat. Phys. 83 , 473-554, 1996

Riassunto

In questo lavoro vengono studiate la metastabilità e la nucleazione nel modello di Blume-capel: un sistema su reticolo bidimensionale con accoppiamento ferromagnetico tra spin primi vicini tra variabili di spin che assumono valori $\{-1,0,+1\}$. Si considera il caso di un volume grande, ma finito, piccolo campo esterno e potenziale chimico nel limite di temperatura nulla. Si studia la prima escursione dalla fase metastabile -1 a quella stabile $+1$. Si calcola il comportamento asintotico del tempo di transizione e si studia il tubo delle traiettorie durante la transizione. Si mostra, infine, che il meccanismo di transizione cambia improvvisamente quando si attraversa la linea $h = 2\lambda$ nello spazio dei parametri del modello.

Appendice A

Il Cluster Variation Method

Si consideri un modello statistico definito su un reticolo finito $\Lambda \subset \mathbf{Z}^{\mathbf{d}}$, ad ogni sito $i \in \Lambda$ sia associata una variabile di spin σ_i che assume valori in un insieme finito $\mathcal{S}$. Si denota con $\Omega := \mathcal{S}^{\Lambda}$ lo spazio delle configurazioni, con $\sigma \in \Omega$ una configurazione del sistema e con $H(\sigma)$ la sua hamiltoniana. Si ipotizza che l'hamiltoniana contenga soltanto interazioni di portata finita (ipotesi di corto range).

Il comportamento del sistema all'equilibrio è descritto dalla matrice densità (misura di Gibbs)

$$\rho_{\Lambda}^{G}(\sigma) := \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_{\Lambda}} \quad , \tag{A.1}$$

con $\beta := \frac{1}{T}$ la tempertaura inversa e

$$Z_{\Lambda} := Tr_{\Lambda}[e^{-\beta H(\sigma)}] \tag{A.2}$$

la funzione di partizione; è stato introdotto il simbolo

$$Tr_X \equiv \sum_{\sigma_i \in \mathcal{S}\ i \in X} \qquad \forall X \subset \Lambda \ . \tag{A.3}$$

Tutte le funzioni termodinamiche possono essere ricavate a partire dall'energia libera

$$F_{\Lambda} := -\frac{1}{\beta} \log Z_{\Lambda} \ ; \tag{A.4}$$

è facile verificare che

$$F_{\Lambda} = Tr_{\Lambda}[\rho_{\Lambda}^{G}(\sigma) H(\sigma)] - T\ Tr_{\Lambda}[-\rho_{\Lambda}^{G}(\sigma) \log \rho_{\Lambda}^{G}(\sigma)] \ , \tag{A.5}$$

dalla (A.5) si ottiene ovviamente che l'entropia è data da

$$S = -Tr_{\Lambda}[\rho_{\Lambda}^{G}(\sigma) \log \rho_{\Lambda}^{G}(\sigma)] \ . \tag{A.6}$$

La misura di Gibbs può essere definita mediante un principio variazionale: si considera lo spazio Ξ costituito da tutte le funzioni $\rho_{\Lambda} : \sigma \in \Omega \to \rho_{\Lambda}(\sigma) \in \mathbf{R}$ tali che $Tr_{\Lambda}[\rho_{\Lambda}(\sigma)] = 1$ e si definisce il funzionale

$$\mathcal{F}_{\Lambda}(\rho_{\Lambda}) := Tr_{\Lambda}[\rho_{\Lambda} H] - T\ Tr_{\Lambda}[-\rho_{\Lambda} \log \rho_{\Lambda}] \qquad \forall \rho_{\Lambda} \in \Xi \ , \tag{A.7}$$

la misura di Gibbs può essere definita come quella particolare $\rho_{\Lambda}^{G} \in \Xi$ che minimizza il funzionale (A.7). Vale banalmente la relazione

$$\mathcal{F}(\rho_{\Lambda}^{G}) = F_{\Lambda} \ . \tag{A.8}$$

Dato un cluster $\alpha \subset \Lambda$ (un cluster è un qualsiasi sottoinsieme del reticolo Λ), data $\rho_\Lambda \in \Xi$ si definisce la funzione

$$\rho_\alpha := Tr_{\Lambda\setminus\alpha}\rho_\Lambda \tag{A.9}$$

e l'entropia di cluster

$$S_\alpha := -Tr_\alpha[\rho_\sigma \log \rho_\alpha] \quad . \tag{A.10}$$

Si dimostra (si veda, per esempio, [A]) che, posto

$$\widetilde{S}_\beta := \sum_{\gamma\subseteq\beta}(-1)^{|\beta|-|\gamma|}S_\gamma \qquad \forall\beta\subseteq\Lambda \quad , \tag{A.11}$$

e dato un cluster $\alpha \subseteq \Lambda$ si ha

$$S_\alpha = \sum_{\beta\subseteq\alpha}\widetilde{S}_\beta \quad . \tag{A.12}$$

L'espressione (A.12) è detta sviluppo in cumulanti dell'entropia di cluster. Sviluppare l'entropia in cluster vuol dire scrivere in modo ordinato i contributi all'entropia dei cluster di varie dimensioni.

Poiché l'interazione ha portata finita, deve esistere un cluster $\tilde{\mu}$ che "contiene" tutte le interazioni (la definizione potrebbe essere data in modo più preciso considerando lo sviluppo in potenziali dell'hamiltoniana); allora si considera la famiglia M costituita da tutti i cluster di tipo $\tilde{\mu}$ e da tutti i loro sotto-cluster. Il funzionale (A.7) può essere scritto nella forma

$$\mathcal{F}_\Lambda(\rho_\Lambda) = \sum_{\alpha\in M} Tr_\alpha[\rho_\alpha H_\alpha] - T\sum_{\alpha\subseteq\Lambda}\widetilde{S}_\alpha \quad , \tag{A.13}$$

dove H_α è l'interazione a $|\alpha|$ corpi associata al cluster α.

L'ipotesi alla base del CVM è che per cluster il cui diametro è maggiore della lunghezza di correlazione il cumulante $\widetilde{S}_\alpha$ è piccolo; allora nella (A.13) l'ultima somma viene estesa alla classe M, cioè si scrive

$$\mathcal{F}_\Lambda^{\mathrm{CVM}}(\rho_\Lambda) = \sum_{\alpha\in M} Tr_\alpha[\rho_\alpha H_\alpha] - T\sum_{\alpha\in M}\widetilde{S}_\alpha \quad , \tag{A.14}$$

e si dimostra [A]

$$\mathcal{F}_\Lambda^{\mathrm{CVM}}(\rho_\Lambda) = \sum_{\alpha\in M} Tr_\alpha[\rho_\alpha H_\alpha] - T\sum_{\alpha\in M}a_\alpha S_\alpha \quad , \tag{A.15}$$

dove i coefficienti a_α sono numeri reali tali che

$$\sum_{\beta\supseteq\alpha,\,\beta\in M} a_\beta = 1 \qquad \forall\alpha\in M \quad . \tag{A.16}$$

Costruire una certa approssimazione CVM vuol dire considerare un certo cluster massimo $\tilde{\mu}$; ovviamente più è grande questo cluster tanto migliore è l'approssimazione. Per minimizzare il funzionale (A.16) si pongono uguali a zero le sue derivate rispetto ai vari termini della matrice $\rho_{\tilde{\mu}}$ e si ottiene un sistema di equazione che viene risolto con il metodo delle iterazioni naturali [Ki1, Ki2].

Appendice B

Dinamica di Metropolis

Per descrivere la metastabilità del modello di Ising è necessario capire come il punto rappresentativo del sistema si muova nello spazio delle configurazioni Ω_Λ, in altri termini fissata la configurazione iniziale σ_0 bisogna capire qual è la traiettoria che il sistema descrive nello spazio Ω_Λ.

In primo luogo si può osservare che è sensato richiedere che la dinamica sia *stocastica*: fissata la configurazione all'istante t, $\sigma_t = \eta \in \Omega_\Lambda$, non è possibile prevedere in modo deterministico quale sarà la configurazione all'istante generico $t' > t$, tutto ciò che si può dire è con quale probabilità accadrà $\sigma_{t'} = \xi \in \Omega_\Lambda$. Si richiede, inoltre, che la dinamica sia *markoviana*, cioè nota $\sigma_t = \eta$, il comportamento del sistema ad istanti $t' > t$ può essere previsto indipendentemente da ciò che è accaduto ad istanti $t' < t$. In altri termini se un sistema evolve secondo una dinamica markoviana, allora il sistema stesso non ha memoria del "passato", è sufficiente conoscere il "presente" per prevedere il "futuro". Si richiede, quindi, che la dinamica soddisfi alla *proprietà di Markov*

$$P(\sigma_{t+1} = \eta_{t+1} | \sigma_0 = \eta_0, \ldots, \sigma_t = \eta_t) = P(\sigma_{t+1} = \eta_{t+1} | \sigma_t = \eta_t) \tag{B.1}$$

ove $\eta_0, \ldots, \eta_{t+1}$ sono delle generiche configurazioni di Ω_Λ. Il processo $(\sigma_t)_{t \in \mathbf{N}}$ soddisfacente (B.1) è detto *catena di Markov*. Si richiede, infine, che la catena di Markov sia stazionaria, cioè che a probabilità condizionale $P(\sigma_{t+1} = \eta | \sigma_t = \xi)$ $\forall \eta, \xi \in \Omega_\Lambda$ sia indipendente dall'istante di tempo t.

Per definire in modo completo la dinamica del sistema bisogna introdurre la *funzione di transizione*

$$P(\eta, \xi) = P(\sigma_1 = \xi | \sigma_0 = \eta) \ \ \forall \eta, \xi \in \Omega_\Lambda \tag{B.2}$$

che deve godere delle proprietà

$$\begin{cases} P(\eta, \xi) \geq 0 & \forall \eta, \xi \in \Omega_\Lambda \\ \sum_{\xi \in \Omega} P(\eta, \xi) = 1 & \forall \eta \in \Omega_\Lambda \end{cases} \tag{B.3}$$

e che fornisce la probabilità che il sistema ad un generico istante di tempo salti dallo stato η allo stato ξ, infatti in virtù della stazionarietà della probabilità di transizione si può scrivere $P(\sigma_{t+1} = \xi | \sigma_t = \eta) = P(\eta, \xi)$ $\forall \eta, \xi \in \Omega_\Lambda$, $\forall t \geq 1$. Una possibile scelta della funzione di transizione è quella di Metropolis: prese due configurazioni $\sigma, \eta \in \Omega_\Lambda$ si pone

$$P(\sigma, \eta) := \begin{cases} \frac{1}{|\Lambda|} e^{-\beta [H(\eta) - H(\sigma)]^+} & \text{se } \exists \mathrm{x} \in \Lambda : \ \sigma^{\mathrm{x}} = \eta \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{B.4}$$

dove a^+ denota la parte positiva del numero reale a e σ^x è la configurazione che si ottiene a partire da σ cambiando il segno dello spin in $x \in \Lambda$.

È facile verificare che la dinamica di Metropolis è reversibile rispetto alla misura di Gibbs di equilibrio, cioè soddisfa al *principio del bilancio dettagliato*

$$P(\sigma,\eta)\mu_{\Lambda,\beta,h}(\sigma) = P(\eta,\sigma)\mu_{\Lambda,\beta,h}(\eta) \quad \forall\sigma,\eta \in \Omega_\Lambda \quad . \tag{B.5}$$

Da tale reversibilità si deduce, anche, che la misura di Gibbs è stazionaria per l'evoluzione del sistema.

Nel caso del modello di Blume-Capel discusso nella Sezione 4.4, si utilizza ancora una volta la dinamica di Metropolis, ma la sua definizione viene leggermente modificata, rispetto alla (B.4), per tenere in conto il fatto che una variabile di spin può assumere tre diversi valori. In questo caso la funzione di transizione viene scelta nel modo seguente: prese due configurazioni $\sigma,\eta \in \Omega_\Lambda$ si pone

$$P(\sigma,\eta) := \begin{cases} \frac{1}{2|\Lambda|}e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]^+} & \text{se } \exists \mathrm{x} \in \Lambda : \ \sigma^{\mathrm{x}} = \eta \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{B.6}$$

dove, ora, con σ^x si denota una configurazione ottenuta a partire da σ modificando in uno dei due modi possibili lo spin in $x \in \Lambda$, si sottolinea che data σ, la configurazione σ^x non è univocamente determinata.

Appendice C

Alcune definizioni

Si consideri un reticolo finito $\Lambda \subset \mathbf{Z^2}$, uno spazio finito e discreto $S := \{1,2,...,n\} \subset \mathbf{N}$ e lo spazio delle configurazioni $\Omega_\Lambda := S^\Lambda$. Si denota con σ una configurazione di Ω_Λ, con $\sigma(x)$ il valore dello spin nel sito $x \in \Lambda$ e, considerata la variabile naturale $t = 0,1,2,....$, si denota con σ_t^η la catena di Markov che descrive l'evoluzione del sistema con condizione iniziale $\sigma_0^\eta = \eta$ ove η è una configurazione di Ω_Λ. Si suppone, infine, che al sistema sia associata un'hamiltoniana $H(\sigma)$ e che la dinamica sia reversibile rispetto alla misura di Gibbs relativa a questa hamiltoniana. Si danno le seguenti definizioni:

1. data $\sigma \in \Omega_\Lambda$ si denota con σ^x una configurazione tale che $\sigma^x(x) \neq \sigma(x)$ e $\sigma^x(y) = \sigma(y)\ \forall y \in \Lambda$. Si sottolinea che data σ, la configurazione σ^x non è determinata in modo univoco.

2. Due configurazioni $\sigma,\eta \in \Omega_\Lambda$ si dicono *prime vicine* se e solo se $\exists x \in \Lambda$ tale che $\eta = \sigma^x$.

3. Un *cammino in* Ω_Λ è una sequenza di configurazioni $\sigma_0,\sigma_1,...,\sigma_n$ tale che σ_{i-1} e σ_i sono prime vicine $\forall i = 1,...,n$. Un cammino si dice *in discesa* se e solo se $H(\sigma_{i+1}) \leq H(\sigma_i)$ per ogni $i = 0,1,...,n-1$.

4. Dato $A \subset \Omega_\Lambda$ e $\eta \in \Omega_\Lambda$ si definisce *tempo di primo arrivo* del processo σ_t^η su A il tempo
$$\tau_A^\eta := \inf\{t \geq 0 :\ \sigma_t^\eta \in A\} \quad . \tag{C.1}$$

5. Un *minimo locale* dell'hamiltoniana $H(\sigma)$ è una configurazione σ tale che $H(\sigma^x) > H(\sigma)\ \forall x \in \Lambda$. Un minimo locale verrà anche detto *una configurazione stabile*, perchè un processo che parte da un minimo locale impiega un tempo esponenzialmente lungo in β per muoversi dal minimo.

6. Si indica con $\mathcal{M}$ l'insieme di tutti i minimi locali dell'hamiltoniana.

7. Dato $\sigma \in \mathcal{M}$ si definisce il suo *bacino di attrazione*
$$B(\sigma) := \{\eta \in \Omega_\Lambda :\ \text{tutti i cammini in discesa che partono da } \eta \text{ terminano in } \sigma\} \tag{C.2}$$
Si osserva che, essendo h la più piccola variazione di energia tra due qualsiasi configurazioni di Ω_Λ, dopo un numero di passi pari a
$$\mathcal{T} := \frac{\max_{\eta\in\Omega_\Lambda} H(\eta) - \min_{\eta\in\Omega_\Lambda} H(\eta)}{h}$$
un cammino in discesa termina necessariamente in un minimo locale.

8. Dato $\mathcal{G} \subset \Omega_\Lambda$, $\mathcal{G}$ è *connesso* se e solo se $\forall \sigma, \eta \in \Omega_\Lambda$ $\exists$ un cammino $\omega \subset \mathcal{G}$ che parte da σ e termina in η; si dirà che ω connette σ con η.

9. Dato un insieme connesso $\mathcal{G} \subset \Omega_\Lambda$ si definisce *frontiera* di $\mathcal{G}$ l'insieme

$$\partial\mathcal{G} := \{\eta \in \Omega_\Lambda : \ \eta \notin \mathcal{G}, \exists x \in \Lambda, \sigma^x \in \mathcal{G}\} \tag{C.3}$$

10. Dati due rettangoli R_1 e R_2 sul reticolo duale $\Lambda + \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, si dice che R_1 ed R_2 sono *interagenti* se e solo se si intersecano oppure sono separati da una distanza reticolare. Due rettangoli che hanno soltanto gli angoli a distanza uno sono considerati non interagenti.

Bibliografia

[A] G. An, *J. Stat. Phys.* **52**, 727 (1988).

[AC] S.M. Allen, J.W. Cahn, *Acta Metall.* **27**, 1085 (1979).

[AL] J.A. Aronovitz, T.C. Lubensky, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2634 (1988).

[AH] M. Aizenman, R. Holley, Rapid convergence to equilibrium of stochastic ising models in the Dobrushin-Shlosman regime percolation theory and ergodic theory of infinite particle systems, eds. H. Kesten, IMS volumes in Math. and Appl., Berlin Spinger 1987, pp. 1-11.

[ASSS] R.V. Ambartzumian, G.S. Sukiasan, G.K. Savvidy, K.G. Savvidy, *Phys. Lett. B* **275**, 99 (1992).

[Bat] S.F. Bates, *Science* **251**, 898 (1991).

[Bax] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic, London, 1982).

[Bi] K. Binder, *Phys. Rev B* **8**, 3423 (1973).

[Bl] M. Blume, *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).

[Br] A.J. Bray, *Advanc. in Phys.*, to appear, cond-mat/9501089.

[BC] G. Ben Arous, R. Cerf, "Metastability of the three dimensional Ising model on a torus at very low temperatures." *Electronic Journal of Probability* **1**, 1-55 (1996).

[BCLS] S. Bigelis, E.N.M. Cirillo, J.L. Lebowitz, E.R. Speer, "Critical droplets in metastable states of probabilistic cellular automata." In preparation.

[BEJM] M. Baig, D. Espriu, D.A. Johnston, R.P.K.C. Malmini, preprint hep-lat/9703008.

[BEW] M. Baig, D. Espriu, J. Wheater, *Nucl. Phys. B* **314**, 587 (1989).

[BFGG] M. Bowick, P. Di Francesco, O. Golinelli, E. Guitter, "Three-dimensional Folding of the Triangular Lattice." *Nucl. Phys. B* **450**, 463 (1995).

[BKL] A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, *Journ. Comp. Phys.* **17**, 10-18 (1975).

[BM] K. Binder, H. Müller-Krumbhaar, *Phys. Rev. B* **9**, 2328 (1974).

[BMB] G.T. Barkema, J.F. Marko, J. de Boer, *Europhys. Lett.* **26**, 653 (1994).

[BMO] G. Benfatto, E. Marinari, E. Olivieri, "Some numerical results on the block spin transformation for the 2D Ising Model at the critical point." *Jour. Stat. Phys.* **78**, 731-757 (1995).

[BS] K. Binder, E. Stoll, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 47 (1973).

[BiS] K. Binder, D. Stauffer, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1006 (1974).

[BrS] J. Bricmont, J. Slawny, *Journ. Stat. Phys.* **54**, 89 (1989).

[C] H.W. Capel, *Physica* **32**, 96 (1966); **33**, 295 (1967); **37**, 423 (1967).

[CCGM] A. Cappi, P. Colangelo, G. Gonnella, A. Maritan, *Nucl. Phys. B* **370**, 659 (1992).

[CG] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, "Renormalization Group results for lattice surface models." *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 867-877 (1995).

[CGa] M. Cassandro, G. Gallavotti, "The Lavoisier law and the critical point." *Il Nuovo Cimento* **25B**, 691 (1975).

[CGM] P. Colangelo, G. Gonnella, A. Maritan, *Phys. Rev. E* **47**, 411 (1993).

[CGJP] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, D.A. Johnston, A. Pelizzola, "The Phase Diagram of the Gonihedric 3d Ising Model via CVM." *Physics Letters A* **226**, 59-64 (1997).

[CGOV] M. Cassandro, A. Galves, E. Olivieri, M.E. Vares, "Metastable behaviour of stochastic dynamics: A pathwise approach." *Journ. Stat. Phys.* **35**, 603-634 (1984).

[CGP1] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, "Folding transitions of the triangular lattice with defects." *Phys. Rev. E* **53**, 1479 (1996).

[CGP2] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, "Folding transitions of the triangular lattice in a discrete three-dimensional space." *Phys. Rev. E* **53**, 3253 (1996).

[CGP3] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, "Critical behaviour of the three-dimensional Ising model with nearest neighbor, next nearest neighbor and plaquette interactions." *Phys. Rev. E* **55**, R17 (1997).

[CGP4] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola, "Critical behaviour of the three-dimensional gonihedric Ising model." Inviato per i Proceedings della conferenza *Lattice 97, International Symposium on Lattice Field Theory* (Edinburgh, Scotland, July 22 - 26, 1997).

[CGS1] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, S. Stramaglia, "Anisotropic dynamical scaling in a spin model with competing interactions." *Phys. Rev. E* **56**, 5065 (1997).

[CGS2] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, S. Stramaglia, "Monte Carlo study of the growth of striped domains." Inviato per i Proceedings della conferenza *Morphology and Kinetics of Phase Separating Complex Fluids* (24 - 28 Giugno 1997, Messina).

[CGT] E.N.M. Cirillo, G. Gonnella, M. Troccoli, "Correlation functions via CVM: an application to microemulsions." In preparazione.

[CL] E.N.M. Cirillo, J.L. Lebowitz, "Metastability in the two-dimensional Ising model with free boundary conditions." In fase di stampa su Journal of Statistical Physics.

[CO1] E.N.M. Cirillo, E. Olivieri, "Metastability and nucleation for the Blume-Capel model. Different mechanisms of transition." *Journ. Stat. Phys.* **83**, 473-554 (1996).

[CO2] E.N.M. Cirillo, E. Olivieri, "Renormalization-Group at criticality and complete analyticity of constrained models: a numerical study." *Journ. Stat. Phys.* **86**, 1117-1151 (1997).

[CS] E.N.M. Cirillo, S. Stramaglia, "Polymerization in a Ferromagnetic Spin Model with Threshold." *Phys. Rev. E* **54**, 1096 (1996).

[D] R.L. Dobrushin, "The description of a random field by means of conditional probabilities and conditions of its regularity." *Theor. Prob. Appl.* **13**, 197-224 (1968).

[DJ] C. Di Castro, G. Jona Lasinio, *Phys. Lett. A* **29**, 322-323 (1969).

[DG] F. David, E. Guitter, *Europhys. Lett.* **5**, 709 (1988).

[DGY] B. Derrida, C. Godrèche, I. Yekutieli, *Phys. Rev. A* **44**, 6241 (1991).

[DM] E.I. Dinanburg, A.E. Mazel, *Comm. Math. Phys.* **125**, 27 (1989).

[DS1] R.L. Dobrushin, S. Shlosman, "Constructive criterion for the uniqueness of Gibbs fields." In *Stat. Phys. and Dyn. Syst.*, Birkhäuser 1985, pp. 347-370.

[DS2] R.L. Dobrushin, S. Shlosman, "Completely analytical Gibbs fields." In *Stat. Phys. and Dyn. Syst.*, Birkhäuser 1985, pp. 371-403.

[E1] A.C.D. van Enter, *Journ. Stat. Phys.* **83**, (1996).

[EFK] A.C.D. van Enter, R. Fernández, R. Kotecký, *Journ. Stat. Phys.* **79**, 969-992 (1995).

[EFS] A.C.D. van Enter, R. Fernández, A.D. Sokal, *Jour. Stat. Phys.* **72**, 879-1167 (1993).

[FG1] P. Di Francesco, E. Guitter, *Europhys. Lett.* **26**, 455 (1994).

[FG2] P. Di Francesco, E. Guitter, "Folding transition of the triangular lattice." *Phys. Rev. E* **50**, 4418-4426 (1995).

[FGRN] T. Fiig, B.M. Gorman, P.A. Rikvold, M.A. Novotny, *Phys. Rev. E* **50**, 1930 (1994).

[FL] A.M. Ferrenberg, D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **44**, 5081 (1991).

[G] R.B. Griffiths, *Journ. Math. Phys.* **8**, 478 (1967); R.B. Griffiths, *Journ. Math. Phys.* **8**, 484 (1967).

[G2] R.B. Griffiths, *Physica A* **136**, 59-69 (1981).

[Ge] H.-O. Georgii, *Gibbs measures and phase transitions* (de Gruyter, Berlin, 1988).

[Gun] J.D. Gunton et al., in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 8, eds. C. Domb, J.L.Lebowitz (Academic Press, New York 1983).

[GLM] G. Gonnella, S. Lise, A. Maritan, *Europhys. Lett.* **32**, 735 (1995).

[GP] R.B. Griffiths, P.A. Pearce, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 917-920 (1978); *Journ. Stat. Phys* **20**, 499-545 (1979).

[GRN] C.C.A. Günther, P.A. Rikvold, M.A. Novotny, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3898 (1993); *Physica A* **212**, 194-229 (1994).

[GS] G. Gompper, M. Schick, "Self-assembling Amphiphilic Systems", in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb, J.L. Lebowitz (Academic, London, 1994).

[H] R.K. Heilmann et al., in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics IV*, eds. D.P. Landau, K.K. Mon, H.B. Schüttler, Springer Proceedings in Physics vol. 72 (Springer, Berlin 1993).

[HB] K. Humayun, A. Bray, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24**, 1915 (1991).

[HK] K. Haller, T. Kennedy, "Absence of renormalization group pathologies near the critical temperature–two examples", University of Arizona Preprint, Austin Archives 95-505, (1995).

[HKW] A. Hintermann, H. Kunz, F.Y. Wu, *Journ. Stat. Phys.* **19**, 623 (1978).

[HW] R. Harnish, J. Wheater, *Nucl. Phys. B* **350**, 861 (1991).

[I] S.N. Isakov, "Nonanalytic feature of the first order phase transition in the Ising model." *Comm. Math. Phys.* **95**, 427-443 (1984).

[Is] R.B. Israel, "Banach algebras and Kadanoff transformations", in *Random Fields* (Esztergom, 1979), vol. II, eds. J. Fritz, J.L. Lebowitz, D. Szas (North-Holland, Amsterdam, 1981).

[JM] D.A. Johnston, R.P.K.C. Malmini, "Gonihedric 3d Ising Actions", *Phys. Lett. B* **378**, 87 (1996).

[K] L.P. Kadanoff, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1005 (1975).

[Ka] M. Karowski, *J. Phys. A: Math. Gen.* **19**, 3375 (1986).

[Kaw] K. Kawasaki, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 2, eds. C. Domb, M. Green (Academic Press, London 1970).

[Ke1] T. Kennedy, *Journ. Stat. Phys.* **59**, 195 (1990).

[Ke2] T. Kennedy, "Some Rigorous Results on Majority Rule Renormalization Group Transformations near the Critical Point." *Journ. Stat. Phys.* **72**, 15 (1993).

[Ki1] R. Kikuchi, *Phys. Rev* **81**, 988 (1951).

[Ki2] R. Kikuchi, *J. Chem. Phys.* **60** (1974) 1071.

[KJ] Y. Kantor, M.V. Jarić, *Europhys. Lett.* **11**, 157 (1990).

[KKN] Y. Kantor, M. Kardar, D.R. Nelson, *Phys. Rev. A* **35**, 3056-3071 (1987).

[KN] Y. Kantor, D.R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2774 (1987); *Phys. Rev. A* **36**, 4020 (1987).

[KO1] R. Kotecky, E. Olivieri, "Droplet dynamics for asymmetric Ising model." *Journ. Stat. Phys.* **70**, 1121-1148 (1993).

[KO2] R. Kotecky, E. Olivieri, "Shapes of growing droplets - a model of escape from a metastable phase." *Journ. Stat. Phys.* **75**, 409-507 (1994).

[Le] J.M.J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1056 (1975).

[Lif] I.M. Lifshitz, *Zh. Eskp. Teor. Fiz.* **42**, 1354 (1962).

[Lig] T.M. Ligget, "Interacting Particle System", (Springer-Verlag, New York).

[Lip] R. Lipowsky, *Nature* **349**, 475-481 (1991).

[LNR] J.Lee, M.A. Novotny, P.A. Rikvold, *Phys. Rev. E* **52**, 356 (1995).

[LR] O. Lanford, D. Ruelle, "Observable at infinity and states with short range correlations in statistical mechanics." *Commun. Math. Phys.* **13**, 194-215 (1969).

[LS] I.M. Lifshitz, V.V. Slyozov, *J. Chem. Solids* **19**, 35 (1961).

[M] T. Morita, *J. Stat. Phys.* **59**, 819 (1990).

[MB] J.F. Marko, J.T. Barkema, *Phys. Rev. E* **52**, 2522 (1995).

[MLK] J. Marro, J.L. Lebowitz, M.H. Kalos, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 282 (1979).

[MO1] F. Martinelli, E. Olivieri, Proceedings of 1992 Les Houches Conference on Cellular automata and Cooperative Systems, eds. N. Boccara, E. Goles, S. Martinez e P. Picco (kluwer 1993).

[MO2] F. Martinelli, E. Olivieri, *Comm. Math. Phys.* **161**, 447-486 (1994).

[MO3] F. Martinelli, E. Olivieri, *Comm. Math. Phys.* **161**, 487-514 (1994).

[MO4] F. Martinelli, E. Olivieri, *Jour. Stat. Phys.* **72**, 1169-1177 (1994).

[MO5] F. Martinelli, E. Olivieri, *Jour. Stat. Phys.* **79**, 25-42 (1995).

[MOS] F. Martinelli, E. Olivieri, R. Schonmann, *Comm. Math. Phys.* **165**, 33-47 (1994).

[No1] M.A. Novotny, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1 (1995).

[No2] M.A. Novotny, in *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics IX*, eds. D.P. Landau, K.K. Mon, H.B. Schüttler (Springer, Berlin, 1997).

[NL1] Th. Niemeijer, M.J. van Leeuwen, "Renormalization theory for Ising-like spin systems." In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 6, eds. C. Domb, M.S. Green (Academic Press, London 1976).

[NL2] Th. Niemeijer, J.M.J. van Leeuwen, *Physica* **71**, 17 (1974); Th. Niemeijer, J.M.J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1411 (1973).

[NO] F.R. Nardi, E. Olivieri, "Low temperature Stochastic Dynamics for an Ising Model with Alternating Field." *Markov Proc. and Rel. Fields* **2**, 117-166 (1996).

[NP] D.R. Nelson, L. Peliti, *J. Phys.* (France) **48**, 1085 (1987).

[NPW] D.R. Nelson, T. Piran, S. Weinberg, "Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces." (World Scientific, Singapore, 1989).

[NS1] E.J. Neves, R.H. Schonmann, "Critical Droplets and Metastability for a Glauber Dynamics at Very Low Temperatures." *Comm. Math. Phys.* **137**, 209 (1991).

[NS2] E.J. Neves, R.H. Schonmann, "Behaviour of droplets for a class of Glauber dynamics at very low temperatures." *Prob. Theor. Rel. Fields* **91**, 331 (1992).

[OJK] T. Ohta, D. Jasnow, K. Kawasaki, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1223 (1982).

[OS1] E. Olivieri, E. Scoppola, "Markov chains with exponentially small transition probabilities: First exit problem from a general domain - I. The reversible case." *Journ. Stat. Phys.* **79**, 613-647 (1995).

[OS2] E. Olivieri, E. Scoppola, "Markov chains with exponentially small transition probabilities: First exit problem from a general domain - II. The general case". *Journ. Stat. Phys.* **84**, 987-1041 (1996).

[Pe1] A. Pelizzola, *Physica A* **211**, 107 (1994).

[Pe2] A. Pelizzola, *Phys. Rev. E* **49**, R2503 (1994).

[Po] G. Porod, in *Small Angle X-Ray Scattering*, eds. O. Glater, O. Kratsky (Academic, New York, 1982).

[PK] M. Paczuski, M. Kardar, *Phys. Rev. A* **39**, 6086 (1989).

[PKN] M. Paczuski, M. Kardar, D.R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2638 (1988).

[PL] O. Penrose, J.L. Lebowitz, "Molecular theory of metastability: An update." Appendix to the reprinted edition of the article "Towards a rigorous molecular theory of metastability" by the same authors. In *Fluctuation Phenomena* (second edition), eds. E.W. Montroll, J.L. Lebowitz (North-Holland Physics Publishing, Amsterdam 1987).

[PS1] V. Privman, L.S. Schulman, *J. Phys. A* **15**, L321 (1982).

[PS2] V. Privman, L.S. Schulman, *Journ. Stat. Phys.* **31**, 205 (1982).

[PW] R. Pietig, F.J. Wegner, "Phase Transition in Lattice Surface System with Gonihedric Action", *Nucl. Phys. B* **466**, 513 (1996).

[Ru] A.D. Rutenberg, *Phys. Rev. E* **54**, R2181 (1996).

[RC] M. Rao, A. Chakrabarti, *Phys. Rev. E* **52**, R13 (1995).

[RG] P.A. Rikvold, B.M. Gorman, in *Annual Reviews of Computational Physics I*, eds. D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1994).

[RK] R. Renken, J. Kogut, *Nucl. Phys. B* **342**, 753 (1990).

[RKLM] M. Rao, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, J. Marro, *Phys. Rev. B* **13**, 4328 (1976).

[RKLRN] H.L. Richards, M. Kolesik, P.A. Lindgård, P.A. Rikvold, M.A. Novotny, "Effects of boundary conditions on magnetization switching in kinetic Ising moldels of nanoscale ferromagnets." *Phys. Rev. B* **55**, 11521 (1997).

[RSNR] H.L. Richards, S.W. Sides, M.A. Novotny, P.A. Rikvold, *Journ. Magnetism Magn. Materials* **150**, 37-50 (1995).

[RTMS] P.A. Rikvold, H. Tomita, S. Miyashita, S.W. Sides, *Phys. Rev. E* **49**, 5080 (1994).

[Sc1] R.H. Schonmann, "The pattern of escape from metastability of a stochastic Ising model." *Comm. Math. Phys.* **147**, 231-240 (1992).

[Sc2] R.H. Schonmann, "Slow droplet-driven relaxation of stochastic Ising models in the vicinity of the phase coexistence region." *Comm. Math. Phys.* **161**, 1-49 (1994).

[Sc3] R.H. Schonmann, "Uniqueness and half-space non-uniqueness of Gibbs states in Czech models." *Teor. Math. Phys.* **66**, 284-293 (1986).

[Se] W. Selke, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 15, eds. C. Domb, J.L. Lebowitz (Academic Press, New York 1992).

[St] J. Stephenson, *J. Math. Phys.* **11**, 420 (1970).

[SB] A. Sadiq, K. Binder, *Journ. Stat. Phys.* **35**, 517 (1984).

[SG] P.A. Serena, N. Garcia, in *Quantum Tunneling of Magnetization - QTM'94*, eds. L. Gunther, B. Barbara (Kluwer, Dordrecht, 1995).

[SHS] J.D. Shore, M. Holzer, J.P.Sethna, *Phys. Rev. B* **46**, 11379 (1992).

[SS] S. Shlosman, R.H. Schonmann, Preprint UCLA (1994).

[SSS] G.K. Savvidy, K.G. Savvidy, P.G. Savvidy, *Phys. Lett. A* **221**, 233 (1996).

[SSW] G.K. Savvidy, K.G. Savvidy, F.J. Wegner, *Nucl. Phys. B* **443**, 565 (1995).

[SW] G.K. Savvidy, F.J. Wegner, *Nucl. Phys. B* **413**, 605 (1994).

[SZ] D.W. Stroock, B. Zegarlinski, *Comm. Math. Phys.* **149**, 175-194 (1992).

[TM1] H. Tomita, S. Miyashita, *Phys. Rev. B* **46**, 8886 (1992).

[TM2] H. Tomita, S. Miyashita, "Statistical properties of the relaxation processes of metastable states in the kinetics Ising model (II) - Free boundary conditions." Kyoto University, Preprint.

[W] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **90**, 2437 (1989).

[Wa] C. Wagner, *Z. Elektrochem.* **65**, 581 (1961).

[Wi] K.G. Wilson, *Phys. Rev. D* **2**, 1438-1472 (1970).

[WS] J. Wheater, P. Stephenson, *Phys. Lett. B* **302**, 447 (1993).

[Y] J. Yeomans, in *Solid State Physics*, vol. 41 (Academic Press, Orlando, 1988).