UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BARI

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI

CORSO DI LAUREA IN FISICA

TESI DI LAUREA IN FISICA

Metastabilità e nucleazione: studio rigoroso di alcune dinamiche microscopiche.

Relatori:

Chiar.^{mo} Prof. Enzo Olivieri

Chiar.^{mo} Prof. Matteo Villani

Laureando:

Emilio Cirillo

ANNO ACCADEMICO 1992/93

Introduzione

Nello studio delle transizioni di fase del primo ordine emerge il problema degli stati metastabili, di cui l'esempio più noto si riferisce alla transizione di fase liquido–vapore. In Fig.0.1 viene riportata l'isoterma di un gas reale relativa ad una temperatura inferiore a quella critica: la curva descrive gli stati di vapore puro nel tratto $v > v_B$, quelli di liquido puro nel tratto $v < v_A$; negli stati corrispondenti ai punti del tratto orizzontale sono presenti entrambe le fasi in equilibrio. È proprio l'esistenza di stati, in cui due diverse fasi termodinamiche dello stesso sistema coesistono, che differenzia le transizioni del prim'ordine da quelle del secondo.

Si consideri il sistema "gas reale" e si supponga che la pressione e la temperatura siano tali che il sistema si trova nella fase di vapore puro; si comprima il gas isotermicamente, il sistema si avvicina al punto B del grafico in Fig.0.1. Quando la pressione è tale che il volume specifico vale v_B, nel sistema ha inizio la transizione di fase; ma sotto opportune condizioni sperimentali il sistema permane nella fase di vapore. Si dice, allora, che il vapore è *sovrasaturo*.

Per piccole variazioni della pressione il sistema si comporta in accordo con le leggi della termodinamica, come se lo stato di vapore sovrasaturo fosse uno stato di equilibrio termodinamico. Ma se, per effetto di perturbazioni esterne o di fluttuazioni spontanee, ha inizio la transizione di fase, il sistema fuoriesce in modo irreversibile dalla fase di vapore sovrasaturo; si dice che la fase di vapore sovrasaturo di un gas reale è una fase *metastabile*.

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

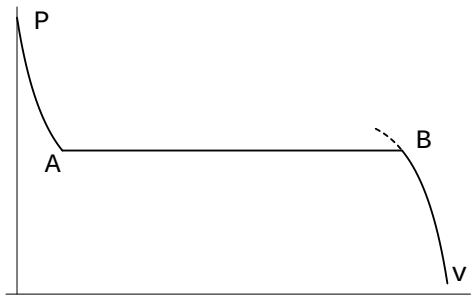


Fig.0.1 Isoterma di un gas reale a temperatura inferiore al valore critico.

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.

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. 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, come la sua vita media, a partire dalle interazioni elementari fra i suoi costituenti microscopici (atomi, molecole, ioni,ecc.).

Nell'affrontare una simile tematica di fisica fondamentale, particolare importanza è rivestita dall'analisi rigorosa di alcuni modelli quali le dinamiche stocastiche di tipo Glauber. 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 approssima-

zioni incontrollate.

È in questa logica che va inserito il presente lavoro di tesi, in cui viene analizzato il comportamento del modello di Blume–Capel, un particolare modello di spin, supponendo che la sua evoluzione sia descritta dalla dinamica di Metropolis, che è un particolare esempio di dinamica di Glauber.

Il primo capitolo è dedicato ad una breve introduzione storica al problema della metastabilità; in esso si illustrano i primi tentativi di descrizione degli stati metastabili e si mette in luce la necessità di un approccio dinamico al problema. In particolare vengono descritti gli aspetti principali della *teoria classica della nucleazione* e se ne evidenziano i limiti: in essa si dice che il meccanismo di uscita dalla fase metastabile è quello della *nucleazione*, ma non si chiarisce per quale motivo, a bassa temperatura, si può trascurare la *coalescenza*; inoltre la descrizione che viene fornita della nucleazione è molto parziale, nulla viene detto sulla geometria del fenomeno, e l'unico parametro che viene introdotto per caratterizzare le gocce di liquido, che si formano all'interno del vapore, è il numero di particelle da cui esse sono costituite. In altri termini la teoria classica della nucleazione spiega che l'uscita del vapore dalla fase metastabile non avviene mediante una lenta crescita delle gocce di liquido, bensì con il realizzarsi dell'evento raro costituito dalla formazione di una goccia *supercritica*, cioè di una goccia che in un tempo rapido raggiunge dimensioni comparabili con quelle di tutto il sistema; ma nulla dice sulla forma della goccia e non chiarisce per quale motivo si può trascurare il fenomeno della coalescenza, cioè della "fusione" delle gocce di liquido.

Un altro approccio al problema della metastabilità che viene brevemente descritto nel primo capitolo, è quello che si basa sulla nozione di *ensemble statistico ristretto*; ma anche questa teoria fornisce una descrizione non soddisfacente

della fase metastabile. Suo grande difetto è l'arbitrarietà nella scelta dell'ensemble stesso.

Nel secondo capitolo si introduce il *pathwise approach* e nel caso particolare del modello di Ising stocastico si mostra come può essere discusso il comportamento metastabile del sistema. In sostanza vengono riportati i risultati ottenuti da R. Schonmann e J. Neves con una serie di argomenti "ad hoc" applicabili esclusivamente al modello di Ising [NS] [S]; ma parte di tali risultati viene ricavata in modo originale seguendo uno schema, proposto da E. Olivieri e R. Koteckzi nei loro lavori sul comportamento dinamico di modelli di Ising asimmetrici [KO1] [KO2], che cerca di essere indipendente dal particolare modello in esame.

Di importanza chiave, in questo approccio al problema, è la *reversibilità* della dinamica di Glauber rispetto alla misura di Gibbs (cioè la validità del principio del bilancio dettagliato): essa viene sfruttata per stimare il tempo che il sistema impiega per giungere in una qualsiasi configurazione dello spazio delle fasi, supponendo nota la condizione iniziale; ciò viene fatto applicando il lemma 2.2, la cui dimostrazione viene fornita nell'appendice A.

Nei capitoli successivi viene introdotto un nuovo modello di spin, quello di Blume–Capel, che, tra l'altro, riveste notevole interesse perchè permette di studiare il comportamento di una miscela He^3–He^4 a bassa temperatura. Le proprietà statiche a bassa temperatura di tale modello sono state studiate facendo uso della teoria di Pirogov e Sinai; di tali proprietà si dà un rapido cenno nel primo paragrafo del capitolo 3. La descrizione del comportamento dinamico di tale modello, su cui non esistono risultati in letteratura, viene poi effettuata seguendo lo schema introdotto nel capitolo 2; in sostanza ci si chiede se vi può essere uno stato metastabile caratterizzato da magnetizzazione negativa, in presenza di un campo magnetico

esterno piccolo e positivo. Nel modello di Blume–Capel le variabili di spin associate ai siti reticolari possono assumere i tre valori $+1, 0$ e -1. Ci si porrà il problema di descrivere la formazione di gocce di spin $+1$ e 0, a partire dalla configurazione in cui tutti gli spin valgono -1. Lo studio della dinamica del modello di Blume–Capel risulta interessante, tra l'altro, perchè coinvolge il moto dei tre tipi di interfacce $+-$, $+0$ e -0, mentre nel caso del modello di Ising, e delle sue generalizzazioni non simmetriche, l'unica interfaccia coinvolta è $-+$.

Il capitolo 3 viene dedicato alla caratterizzazione del più generale minimo locale dell'hamiltoniana del modello di Blume–Capel, cioè all'individuazione della geometria delle gocce (forma e posizione relativa), e ad uno studio intuitivo della dinamica del sistema; studio che viene effettuato calcolando l'energia dei minimi locali ed individuando i meccanismi di crescita e di contrazione a loro disposizione. L'analisi dei tempi tipici in cui si realizzano questi eventi di crescita e di contrazione permette di introdurre le dimensioni critiche, che nei capitoli successivi permettono di discriminare tra minimi locali sottocriti e supercritici.

Nel capitolo 4 viene discusso in modo rigoroso il problema della criticità di alcuni particolari minimi locali, che vengono detti *cornici* ed i risultati vengono condensati nel teorema 4.1. La dimostrazione presenta una serie di problemi strettamente legati al particolare modello in esame, essi vengono discussi e risolti con argomenti originali, che non si ritrovano in lavori precedenti dedicati al problema della metastabilità. Ad esempio nel calcolo del minimo dell'energia sulla frontiera dei bacini d'attrazione dei minimi locali e nella determinazione dei meccanismi d'uscita da questi stessi bacini emergono problemi assenti nel caso del modello di Ising, come conseguenza della maggiore complessità della struttura dei minimi locali.

Nel capitolo 5 viene descritta in modo rigoroso la sorte di un generico minimo locale sfruttando i metodi introdotti e sviluppati a proposito delle cornici; in sostanza viene risolto il problema di quale sia la sorte di una qualsiasi goccia di spin $+1$ e 0 immersa nel mare di -1.

Viene, infine, definito il bacino d'attrazione allargato $\mathcal{A}$ della configurazione in cui tutti gli spin hanno valore -1, si tratta dell'insieme all'interno del quale si muove il punto rappresentativo del sistema, quando questo è nella fase metastabile. L'insieme $\mathcal{A}$ riveste un ruolo di fondamentale importanza nella descrizione del comportamento metastabile del sistema, infatti è proprio con la sua uscita da $\mathcal{A}$ che viene raggiunta la fase stabile; pertanto caratterizzare l'insieme $\mathcal{A}$ è un passo fondamentale che si deve compiere per poter descrivere la nucleazione della fase stabile.

L'aver determinato le dimensioni critiche dei minimi locali dell'energia è un passo importante nella descrizione del comportamento dinamico del modello di Blume–Capel, infatti permette di capire cosa avviene prima dell'uscita dalla fase metastabile e permette di definire il bacino d'attrazione allargato della configurazione $-\underline{1}$ (configurazione in cui tutti gli spin hanno valore -1). Lo sviluppo successivo del lavoro consisterà nel calcolare la vita media dello stato metastabile e nel descrivere il raggiungimento della fase stabile. A tal fine bisognerà determinare il tubo di traiettorie nello spazio delle configurazioni che, con grande probabilità, il sistema percorre per uscire dall'insieme $\mathcal{A}$.

Capitolo 1.

La metastabilità.

1.1 Teoria di van der Waals–Maxwell.

La teoria di van der Waals–Maxwell cerca di descrivere la transizione di fase liquido–vapore con argomenti termodinamico-cinetici; nel 1873 van der Waals propose una equazione di stato per descrivere il comportamento di una mole di gas reale; tale equazione, detta di van der Waals, viene generalmente scritta nella forma seguente

$$(v - v_o)\left(p + \frac{\alpha}{2v^2}\right) = kT \tag{1.1}$$

ove v è il volume specifico e p la pressione del gas, k è la costante di Boltzmann, T la temperatura assoluta alla quale si trova il gas; v_o e α sono due costanti caratteristiche del gas in esame, che vanno scelte in modo da riprodurre al meglio i risultati sperimentali.

La (1.1) permette di ricavare le isoterme del gas reale, il loro andamento è riportato nella Fig.1.1; l'andamento di tali curve dipende fortemente dal valore della temperatura che le caratterizza. Si può definire la temperatura critica T_c come

Fig.1.1 Isoterme del gas reale.

quella temperatura al di sopra della quale le isoterme sono funzioni decrescenti. A temperature $T \geq T_c$ la teoria di van der Waals prevede per il gas reale un comportamento analogo a quello del gas ideale; mentre a $T < T_c$ nell'isoterma compare una "gobba" di non immediata interpretazione fisica.

Il problema è che a temperature minori del valore critico vi è un tratto dell'isoterma cui corrisponde una compressibilità negativa, cioè

$$-\frac{1}{v}\frac{\partial v}{\partial p} < 0 \; ; \tag{1.2}$$

ciò è evidentemente inaccettabile; in altri termini si può dire che gli stati che cadono sul tratto crescente dell'isoterma sono meccanicamente instabili.

Questa instabilità è legata alla concavità della energia libera, infatti dalla relazione

$$\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} = -\frac{\partial p}{\partial v} \tag{1.3}$$

e dal fatto che $v > 0$, si ottiene

$$\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} < 0 \Longleftrightarrow -\frac{1}{v}\frac{\partial v}{\partial p} < 0. \tag{1.4}$$

Quindi dire che il gas ha compressibilità negativa, è equivalente a dire che la sua funzione energia libera ha concavità rivolta verso il basso.

Una possibile interpretazione degli stati instabili delle isoterme di van der Waals fu proposta da J.C. Maxwell nel 1874; la sua idea si può riassumere dicendo che la (1.1) non va interpretata come equazione di stato del sistema omogeneo gas reale, bensì come equazione che descrive la transizione di fase liquido–vapore. Tale interpretazione può essere dedotta tramite la *costruzione di Maxwell* [H].

Si consideri l'isoterma $p = p(v)$ caratterizzata dalla temperatura T che si suppone fissata; facilmente si ottiene l'energia libera lungo l'isoterma sfruttando la relazione seguente

$$f(v) = f(T, v) = -\int_{isoterma} p(v)\, dv \tag{1.5}$$

ove T è la fissata temperatura; l'andamento della funzione $f(v)$ è riportato nella Fig.1.2. Si osserva che al tratto crescente dell'isoterma corrisponde il tratto concavo dell'energia libera, ovvia conseguenza della (1.4).

Si considerino gli stati 1 e 2 sull'isoterma, caratterizzati dalla stessa pressione e dalla stessa energia di Gibbs

$$\begin{cases} p_1 = p_2 \\ \\ g_1 = g_2 \end{cases} \tag{1.6}$$

ove g è l'energia libera di Gibbs per particella; si prova agevolmente che richiedere la validità delle (1.6) è equivalente a richiedere l' uguaglianza delle aree A e B (Fig.1.2). Sfruttando le (1.6) si può facilmente provare che le rette tangenti al grafico di $f(v)$ nei punti 1 e 2 coincidono.

A questo punto si asserisce che l'esatto andamento dell'energia libera del gas reale in funzione del volume specifico e a temperatura fissata, lo si ottiene sostituendo il tratto compreso tra i punti 1 e 2 sul grafico di $f(v)$, con il corrispondente

Fig.1.2 Costruzione di Maxwell.

tratto sulla retta tangente prima costruita. Inoltre tenendo presente che l'energia libera di Gibbs sul tratto rettilineo della $f(v)$ esatta coincide con $g_1 = g_2$ e che l'energia libera di tali stati può essere scritta come combinazione lineare di f_1 e f_2, si può dare la seguente interpretazione: nello stato 1 il sistema è nella fase liquida, nello stato 2 è in quella di vapore, nei rimanenti stati descritti dal tratto rettilineo della curva $f(v)$ esatta il sistema presenta le due fasi in equilibrio.

1.2 Stati metastabili nella teoria di van der Waals–Maxwell.

Si considera una isoterma di van der Waals con temperatura T inferiore al valore critico T_c e su di essa gli stati A e D, corrispondenti alla stessa pressione e alla stessa energia libera di Gibbs. Con riferimento alla Fig.1.1 si nota che gli stati

instabili sono quelli rappresentati dai punti dell'arco BC; se su un piano $T - v$ si riportano i luoghi geometrici dei punti A, B, C e D, si ottengono la curva di coesistenza e quella "spinodale" (Fig.1.3).

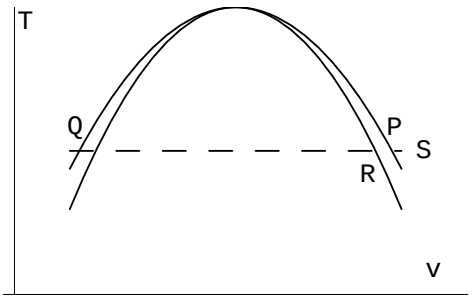


Fig.1.3 Curva spinodale e di coesistenza.

Fissata la temperatura, sulla curva di coesistenza si possono leggere i valori del volume specifico delle fasi pure liquido e vapore alla pressione cui avviene la transizione di fase; mentre la curva spinodale fornisce le coordinate termodinamiche degli estremi dell'arco di instabilità.

Si supponga di considerare il sistema nello stato descritto dal punto S in Fig.1.3 e di farne aumentare la pressione; ad un certo punto il sistema raggiungerà lo stato P. Sperimentalmente si osserva che possono accadere due cose: comincia la transizione di fase vapore–liquido, oppure, sotto opportune condizioni sperimentali, facendo aumentare la pressione il sistema permane nella fase di vapore. In quest'ultimo caso si dice che il vapore è *sovrasaturo*. Gli stati di vapore sovrasaturo sono previsti dalle isoterme di van der Waals; essi corrispondono ai punti dell'arco CD nella Fig.1.1.

Gli stati descritti dai punti dell'arco CD esistono in natura, cioè sono osservati sperimentalmente, ma non corrispondono ad un minimo dell'energia libera; questi

stati sono detti *metastabili.*

1.3 Derivazione dell'equazione di van der Waals in Meccanica Statistica.

La teoria di van der Waals–Maxwell si fonda su argomenti di tipo cinetico e prescinde dal formalismo gibbsiano della Meccanica Statistica. Nel 1908 Ornstein ricavò la (1.1) nell'ambito del modello statistico descritto di seguito: si considera un sistema costituito da N particelle nel volume V descritto dall'hamiltoniana

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;\vec{p}_1,...\vec{p}_N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \sum_{1\le i<j\le N} \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \tag{1.7}$$

ove m è la massa delle particelle e ϕ è il potenziale che descrive l'interazione tra le particelle. Il potenziale fu scelto da Ornstein nella forma seguente

$$\phi(r) = q(r) - \frac{\alpha}{V} \qquad (\alpha > 0) \tag{1.8}$$

ove r è la distanza tra due particelle e $q(r)$ è la funzione

$$q(r) = \begin{cases} \infty & se\ r \le r_o \\ \\ 0 & se\ r > r_o \end{cases} \tag{1.9}$$

ove r_o rappresenta il diametro delle particelle che vengono immaginate come sfere dure. L'interazione è a due corpi, in essa $q(r)$ rappresenta il contributo dell'*hard–core*, mentre $\frac{\alpha}{V}$ rappresenta il termine attrattivo costante in r.

Il problema, come sempre accade in meccanica statistica, è rappresentato dal calcolo della funzione di partizione

$$Z(V,N,T) = \frac{1}{N!}\int_V ... \int_V d\vec{r}_1...d\vec{r}_N \int ... \int d\vec{p}_1...d\vec{p}_N\ e^{-\beta\mathcal{H}(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N;\vec{p}_1,...\vec{p}_N)} \tag{1.10}$$

avendo posto $\beta = \frac{1}{kT}$. Con facili calcoli si trova

$$Z(V,N,T) = \lambda^N e^{\beta\alpha V \frac{N(N-1)}{2}} Z_{hc}(V,N) \tag{1.11}$$

ove

$$\lambda = (2\pi mkT)^{\frac{3}{2}} \tag{1.12}$$

è stato ottenuto integrando sui momenti e

$$Z_{hc}(V,N) = \frac{1}{N!}\int_V ... \int_V d\vec{r}_1 ... d\vec{r}_N e^{-\beta \sum_{1\le i<j\le N} q(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)} \tag{1.13}$$

rappresenta la funzione di partizione di un sistema di sfere dure di diametro r_o.

Il calcolo della funzione $Z_{hc}(V,N)$ è tutt'altro che banale, lo si sa effettuare in modo esatto solo nel caso unidimensionale; questo sistema costituito da sbarrette impenetrabili di lunghezza r_o è detto gas di Tonks. Si ottiene

$$Z_{hc}^{d=1}(V,N) = \frac{1}{N!}[V-(N-1)v_o]^N \tag{1.14}$$

avendo posto $v_o = r_o$. Questa espressione rappresenta un valore approssimato della $Z_{hc}(V,N)$ nel caso di dimensione maggiore di uno; usando questo risultato si può scrivere la funzione di partizione del gas in modo approssimato e quindi calcolare l'energia libera per particella nel limite termodinamico.

Con rapidi calcoli si ottiene l'energia libera per particella

$$-\beta f(v,T) = \lim_{N,V\to\infty} \frac{1}{N} \ln\ Z(V,N,T) = \frac{3}{2}\ln(2\pi mkT) + 1 + \frac{\beta\alpha}{2v} + \ln(v - v_o) \tag{1.15}$$

ove il limite è stato calcolato mantenedo $v = \frac{V}{N}$ costante, e quindi la pressione del gas

$$p = -\frac{\partial f}{\partial v}(v,T) = kT(v-v_o)^{-1} - \frac{\alpha}{2v^2} \ ; \tag{1.16}$$

le isoterme del modello di Ornstein hanno, quindi, lo stesso andamento di quelle di van der Waals e l'energia libera non è una funzione convessa del volume specifico.

In meccanica statistica si prova che la funzione energia libera di un qualsiasi modello è convessa [T], purchè il potenziale che descrive l'interazione tra le particelle del sistema soddisfi a certi requisiti di decadimento a grandi distanze; per esempio un'interazione di portata finita rientra tra quelle accettabili. La convessità dell'energia libera implica, come abbiamo visto poc'anzi, che gli stati di equilibrio descritti dalla distribuzione di Gibbs sono stabili, cioè quantità come la compressibilità isoterma, la suscettibilità magnetica ed il calore specifico sono non negative. Nel caso del modello di Ornstein la funzione energia libera risulta non convessa perchè la portata dell'interazione è dello stesso ordine delle dimensioni del sistema.

Nel 1963 Kac, Uhlenbeck e Hemmer introdussero un modello di gas reale più aderente alla realtà fisica, in cui le particelle vengono considerate come sfere dure, ma la loro interazione ha portata finita; in una serie di tre articoli dimostrarono, nel caso unidimensionale, che l'energia libera del loro modello ha lo stesso andamento di quella che si ottiene con la costruzione di Maxwell [K],[U] e [HE]. Una discussione più generale del problema fu fornita da Lebowitz e Penrose nel 1966 [LP] e [PL2]; questi autori considerarono il solito sistema costituito da N sfere dure nel volume V, ma come potenziale attrattivo scelsero

$$\phi(\vec{r}) = -\gamma^d K(\gamma|\vec{r}|) \tag{1.17}$$

ove d è il numero di dimensioni, γ è una costante strettamente positiva il cui inverso rappresenta la portata dell'interazione attrattiva e K è una funzione non negativa e sufficientemente regolare.

Lebowitz e Penrose riuscirono a provare che nel limite $\gamma \to \infty$ l'energia libera del sistema è convessa e coincide con quella ottenuta mediante la costruzione di

Maxwell con

$$\alpha = -\int \phi(\vec{r}) d\vec{r} \tag{1.18}$$

ove l'integrale è esteso a tutto lo spazio di dimensione d.

1.4 Stati metastabili nel modello di Ising.

Il modello di Ising è il più semplice dei modelli statistici che tentano di simulare il comportamento di un materiale ferromagnetico. Si consideri il reticolo finito d–dimensionale $\Lambda_N = \{1, 2, ...N\}^d \subset \mathcal{Z}^d$, ad ognuno dei suoi $|\Lambda_N| = N^d$ vertici si associa la variabile di spin s_x con $x \in \Lambda_N$; tale variabile può assumere i due valori $+1$ e -1. Lo spazio delle configurazioni associato al sistema è $\Omega = \{-1, +1\}^{\Lambda_N}$ e consta di $2^{|\Lambda_N|}$ elementi, in altri termini si può asserire che per il sistema vi sono $2^{|\Lambda_N|}$ possibili configurazioni. La definizione del modello viene completata assegnando la funzione hamiltoniana

$$\mathcal{H}(S_{\Lambda_N}) = -J \sum_{<x,y>} s_x s_y - h \sum_{x \in \Lambda_N} s_x \tag{1.19}$$

ove $S_{\Lambda_N} \in \Omega$ è una qualsiasi configurazione del sistema, la prima delle due somme è estesa alle coppie di siti primi vicini, s_x è il valore della variabile di spin nel sito x quando il sistema è nella configurazione S_{Λ_N}, J è una costante strettamente positiva che regola l'accoppiamento tra due spin primi vicini ed h è una costante reale che rappresenta il campo magnetico esterno.

Detta T la temperatura del sistema all'equilibrio termico, il sistema è descritto dalla distribuzione di Gibbs

$$\nu_{\beta,h,\Lambda_N} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(S_{\Lambda_N})}}{Z_{\Lambda_N}(\beta, h)} \tag{1.20}$$

ove $\beta = \frac{1}{kT}$, k è la costante di Boltzmann e la normalizzazione $Z_{\Lambda_N}(\beta, h)$, detta funzione di partizione, è data da

$$Z_{\Lambda_N}(\beta, h) = \sum_{S_{\Lambda_N} \in \Omega} e^{-\beta \mathcal{H}(S_{\Lambda_N})}. \tag{1.21}$$

Tutte le proprietà termodinamiche del sistema all'equilibrio termico possono essere ricavate a partire dalla funzione di partizione. Ad esempio la funzione energia libera per sito nel limite termodinamico è definita dalla relazione

$$f(T, h) = \lim_{|\Lambda_N| \to \infty} \frac{-kT \ \ln Z_{\Lambda_N}(\beta, h)}{|\Lambda_N|} \tag{1.22}$$

e da questa si deduce la magnetizzazione per sito nel limite termodinamico

$$m(T, h) = -\left(\frac{\partial f}{\partial h}\right)_T \ . \tag{1.23}$$

Nel 1944 Onsager risolse il modello di Ising bidimensionale in assenza di campo magnetico esterno e mostrò che il sistema alla temperatatura T_c data da

$$\frac{J}{kT_c} = \frac{\ln(1+\sqrt{2})}{2} \simeq 0.4406868 \tag{1.24}$$

presenta una transizione di fase del secondo ordine. Il sistema è nella fase paramagnetica quando $T \geq T_c$, altrimenti è in quella ferromagnetica. Il parametro d'ordine di tale transizione è la magnetizzazione spontanea

$$m(T, 0) = \lim_{h \to 0} m(T, h) \tag{1.25}$$

che fu calcolata da Yang nel 1952 [Y]:

$$m(T, 0) = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \pm\{1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\}^{\frac{1}{8}} & T < T_c \end{cases} . \tag{1.26}$$

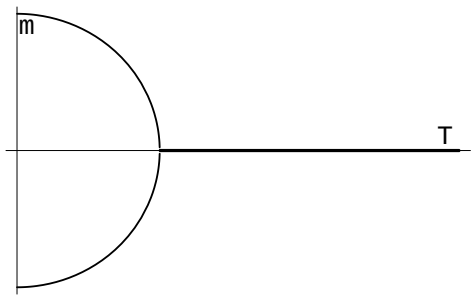


Fig.1.4 Magnetizzazione spontanea in funzione della temperatura.

L'andamento della magnetizzazione spontanea in funzione della temperatura è riportato in Fig.1.4.

L'esistenza di una transizione di fase del secondo ordine può essere evidenziata anche con un calcolo approssimato della funzione di partizione; seguendo il metodo dell'approssimazione di Bragg–Williams, [H], si ottiene l'equazione di campo medio

$$m = \tanh[\beta(4Jm + h)] \tag{1.27}$$

ove m è la magnetizzazione alla temperatura T e con il campo esterno h. Riportando h in funzione di m a temperatura fissata, si ottengono i grafici di Fig.1.5, dai quali risulta evidente che alla temperatura T_c^{bw} avviene la transizione dalla fase ferromagnetica a quella paramagnetica. La temperatura critica T_c^{bw} è tale che

$$\frac{J}{kT_c^{bw}} = 0.25 \tag{1.28}$$

ed è maggiore di quella che si ottiene risolvendo esattamente il modello.

Si consideri una isoterma a temperatura $T < T_c^{bw}$ e, con riferimento alla Fig.1.6, si supponga che il sistema sia nello stato descritto dal punto F. Si supponga di far aumentare h mantenendo T costante, il punto rappresentativo del sistema si sposterà verso A lungo l'isoterma. Quando il campo esterno raggiungerà il valore

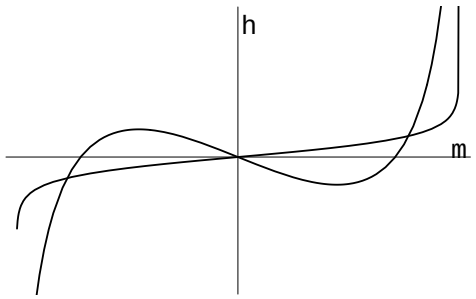


Fig.1.5 Rappresentazione grafica dell'equazione di campo medio.

zero, il sistema presenterà magnetizzazione spontanea negativa, ovvero vi sarà predominanza di spin giù.

Si supponga, ora, di portare il campo magnetico esterno ad un valore strettamente positivo, ma piccolo. Il sistema si porterà nella fase con predominanza di spin su, cioè il suo punto rappresentativo sarà H; ciò avviene perchè l'energia libera dello stato H è inferiore a quella dello stato G, in altri termini lo stato di equilibrio stabile con i fissati valori di temperatura e di campo esterno è rappresentato dal punto H.

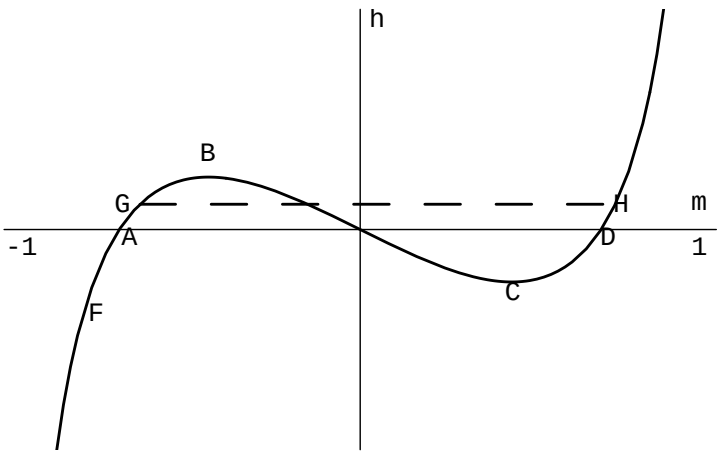


Fig.1.6 Rappresentazione grafica dell'equazione di campo medio $T < T_c$.

Sotto opportune condizioni sperimentali, può accadere che il sistema permanga nella fase con maggioranza di spin giù, il suo punto rappresentativo sarà G. In questo caso si dirà che il sistema è in uno stato metastabile: il sistema ha raggiunto uno stato di equilibrio corrispondente ad un minimo relativo, ma non al minimo assoluto dell'energia libera.

Il problema di calcolare le funzioni termodinamiche nella fase metastabile non può essere risolto con il formalismo gibbsiano: se per *stato* si intende una misura di probabilità sullo spazio delle fasi del sistema e per *stato gibbsiano* si intende quello che corrisponde alla misura di probabilità di Gibbs, allora gli stati di Gibbs sono necessariamente stati di equilibrio termodinamico, cioè corrispondono al minimo dell'energia libera [LR].

Si supponga di aver fissato la temperatura ad un valore $T < T_c$, si considera la funzione energia libera $f(H)$, con $H = \frac{2h}{T}$, il cui andamento è riportato in Fig.1.7; tale funzione non descrive il comportamento metastabile del sistema perchè è l'energia libera associata agli stati di equilibrio stabile. Agli stati metastabili è associata una funzione energia libera che in Fig.1.7 è rappresentata dalla curva tratteggiata.

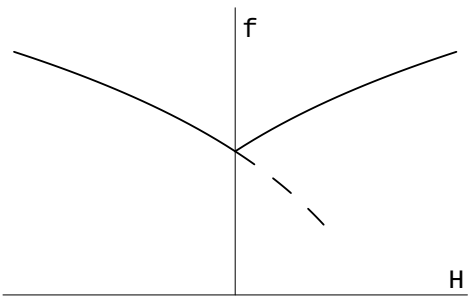


Fig.1.7 Energia libera del modello di Ising a $T < T_c$.

Come ottenere questo tratto di curva? Si può considerarae la funzione $f(H)$ nella variabile reale e non positiva H e quindi considerare il suo prolungamento analitico $\mathcal{F}(H)$ a tutto il piano complesso $\mathcal{C}$; la funzione $\mathcal{F}(H)$ per $H > 0$ ed H piccolo sarà l'energia libera della fase metastabile. È evidente che in questo approccio è insito un problema: spiegare il motivo per cui estrapolando ad $H > 0$ le funzioni termodinamiche ottenute per $H < 0$ si ottengono delle funzione che descrivono la fase metastabile.

Ma c'è di più: il teorema dimostrato da Isakov nel 1984 mette in luce l'impossibilità di effettuare il prolungamento analitico di $f(H)$ nella regione $H > 0$.

Teorema 1.1
Posto

$$\lim_{H \to 0} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k f}{\partial H^k} = A_k,$$

si ha

$$A_k = (k!)^{\frac{1}{d-1}} [2(d-1)(E + C\zeta)]^{-\frac{k\,d}{d-1}} \qquad k > E^d \tag{1.29}$$

ove $H \in \{H \in \mathcal{C} : \ \frac{\pi}{2} + M < arg H < \frac{3\pi}{2} - M\}$, $M \in \mathcal{R}$, $E = \frac{2J}{T}$ e C è una variabile reale che dipende solo dalla dimensione $d \geq 2$.

Conseguenza di questo teorema è la non sviluppabilità in serie di Taylor della funzione $f(H)$ in un intorno del punto $H = 0$, infatti la serie

$$A_0 + A_1 H + A_2 H^2 + ... + A_k H^k + ... \tag{1.30}$$

non converge per ogni $H \neq 0$. Pertanto il punto $H = 0$ è un punto di non analiticità per la funzione $f(H)$, quindi non è possibile prolungare analiticamente la funzione $f(H)$ sul semiasse reale positivo. Si deve quindi concludere che non è possibile ottenere le funzioni termodinamiche della fase metastabile estrapolando quelle ottenute per la fase stabile.

1.5 Teoria classica della nucleazione.

Si è visto come gli stati metastabili possono essere descritti nell'ambito di una teoria di campo medio; il primo tentativo di darne una descrizione cinetica è costituito dalla *teoria classica della nucleazione* formulata da Becker e Döring nel 1935; la necessità di una descrizione dinamica del fenomeno era stata intuita già da J.C.Maxwell [B],[BD] e [PL1].

Egli sosteneva che uno stato metastabile può esistere se non vi sono tracce della seconda fase; ad esempio il vapore può essere sovrasaturo se al suo interno non vi sono gocce di liquido. Allora saper descrivere lo stato di vapore sovrasaturo vuol dire saper descrivere la formazione di una goccia di liquido all'interno del vapore stesso; in altri termini capire perchè un sistema permane in uno stato metastabile vuol dire capire come il sistema fuoriesce da questo e si porta nello stato stabile [M].

Si considera il sistema costituito da una massa M di vapore contenuta in un recipiente di volume V, si denota con $\mathcal{C}_l$ una goccia di liquido costituita da l particelle (nel seguito si userà la locuzione l–cluster) . Si considera l'energia libera F_l di una goccia di liquido di dimensione l e con m_l^{eq} si indica il numero di l–cluster per unità di volume che si trovano all'interno della fase di vapore all' equilibrio termodinamico.

Si può ragionevolmente ipotizzare che l'energia libera abbia due contributi, uno di volume ed uno superficiale; pertanto si scrive

$$F_l = lf + l^{\frac{d-1}{d}} s \tag{1.31}$$

ove f va intesa come l'energia libera per particella nella fase densa, s è proporzionale alla tensione superficiale e d è il numero di dimensioni dello spazio in cui

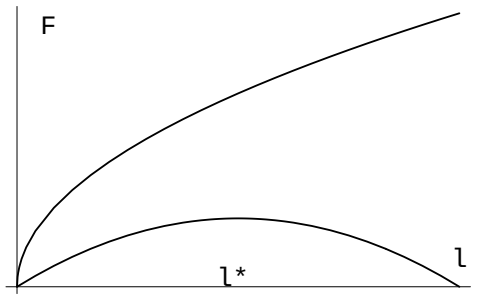


Fig.1.8 Energia libera di un l-cluster.

si trova il gas. L'andamento di F_l dipende dai valori delle due costanti f ed s; le due possibili situazioni sono illustrate nella Fig.1.8.

Si vuole ora descrivere la dinamica delle gocce $\mathcal{C}_l$, si ipotizza che un siffatto cluster possa crescere e ridursi per condensazione ed evaporazione di una singola particella. Allora si possono scrivere le equazioni

$$\begin{cases} \dfrac{\partial m_l}{\partial t}(t) = G_{l-1}m_{l-1}(t) - G_l m_l(t) + S_{l+1}m_{l+1}(t) - S_l m_l(t) & l \geq 2 \\ \dfrac{\partial m_1}{\partial t}(t) = -G_1 m_1(t) + S_2 m_2(t) & l = 1 \end{cases} \tag{1.32}$$

ove G ed S sono i tassi di crescita e di scomparsa di un l-cluster.

È ragionevole assumere che all'equilibrio valga la condizione del bilancio dettagliato tra il processo di crescita e di scomparsa

$$G_l m_l^{eq} = S_{l+1} m_{l+1}^{eq} \equiv W(l,1) \tag{1.33}$$

allora le (1.32) si riscrivono come segue

$$\frac{\partial m_l}{\partial t}(t) = W(l-1,1)\left(\frac{m_{l-1}(t)}{m_{l-1}^{eq}} - \frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right) + W(l,1)\left(\frac{m_{l+1}(t)}{m_{l+1}^{eq}} - \frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right) \quad l \geq 2. \tag{1.34}$$

Si effettuano gli sviluppi in serie di Taylor troncati al second'ordine

$$\begin{aligned} \frac{m_{l\pm1}(t)}{m_{l\pm1}^{eq}} &= \frac{m_l(t)}{m_l^{eq}} \pm \frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial l^2}\left(\frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right) \\ W(l-1,1) &= W(l,1) - \frac{\partial W(l,1)}{\partial l} \end{aligned} \tag{1.35}$$

e si trasforma la (1.34) nella seguente equazione differenziale

$$\frac{\partial m_l}{\partial t}(t) = \frac{\partial}{\partial l}\left[W(l,1)\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right)\right]. \tag{1.36}$$

Questa equazione differenziale ha la struttura di una equazione di continuità nello spazio delle dimensioni dei cluster ed è l'equazione che descrive l'evoluzione di una goccia di liquido all'interno della fase vapore.

Se si suppone che la crescita e la scomparsa di una goccia possono avvenire per condensazione ed evaporazione di cluster di dimensione maggiore di 1, allora la (1.36) si generalizza nel modo seguente

$$\begin{aligned}\frac{\partial m_l}{\partial t}(t) =& \frac{\partial}{\partial l}\left[m_l^{eq} R_l \frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right)\right] \\ =& \frac{\partial}{\partial l}\left[R_l \frac{\partial}{\partial l} m_l(t) - \frac{\partial}{\partial l}(\beta F_l) R_l m_l(t)\right]\end{aligned} \tag{1.37}$$

ove R_l gioca il ruolo di $W(l,1)$ nella (1.36) e tiene in conto la possibilità che due cluster $\mathcal{C}_l$ e $\mathcal{C}_{l'}$ coalescano. Tenendo presente la (1.37) si può definire la corrente di cluster nello spazio delle sue dimensioni

$$J_l = -\frac{\partial}{\partial l}\left[m_l^{eq} R_l \frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{m_l(t)}{m_l^{eq}}\right)\right] \tag{1.38}$$

che è costituita da due termini: il termine di diffusione $-R_l \frac{\partial}{\partial l} m_l(t)$ ed il termine di drift $\frac{\partial}{\partial l}(\beta F_l) R_l m_l(t)$.

La soluzione generale della (1.37) non può essere trovata, ciononostante si possono ottenere numerose informazioni sul comportamento del sistema. Si supponga che F_l sia non monotona, allora per $l < l^*$ il termine di drift si oppone alla diffusione, mentre per $l > l^*$ la favorisce. Questo è evidente anche in modo intuitivo: per $l < l^*$ la funzione F_l è crescente, pertanto l'energia del sistema diminuisce quando scompare un cluster di dimensione inferiore a quella critica.

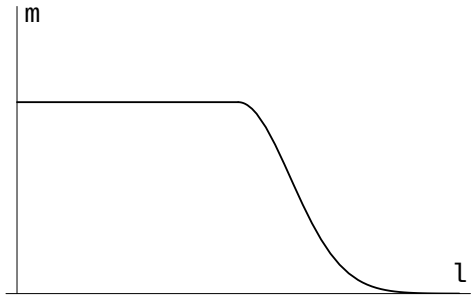


Fig.1.9 Distribuzione stazionaria degli l-cluster.

È lecito aspettarsi che il sistema, dopo un certo transiente, raggiunga una situazione stazionaria; questa funzione m_l^{ss} la si ricava come soluzione stazionaria della (1.37) con condizioni ai limiti

$$\begin{array}{l} \lim\limits_{l\to 0} \dfrac{m_l^{ss}}{m_l^{eq}} = 1 \\ \lim\limits_{l\to \infty} \dfrac{m_l^{ss}}{m_l^{eq}} = 0 \end{array} \quad ; \tag{1.39}$$

l'andamento di tale funzione è riportato in Fig.1.9.

Se le coordinate termodinamiche del sistema sono tali che lo stato di equilibrio stabile è quello in cui vi è coesistenza tra le due fasi, ma l'energia libera dei cluster è non monotona, allora il sistema permane nella fase di vapore. Al suo interno si formano delle piccole gocce di liquido, cioè gocce di taglia inferiore a quella critica, che tendono a scomparire; si raggiunge una situazione stazionaria in cui la distribuzione delle gocce di liquido in funzione della loro dimensione è costante nel tempo. Ma nello spazio delle dimensioni dei cluster vi è una corrente J_l che è non nulla anche per $l = l^*$, ciò vuol dire che nel sistema si formeranno gocce supercritiche ad una *velocità* J_{l^*}. Queste gocce tenderanno a crescere per via del termine di drift e saranno responsabili della fuoriuscita del sistema dallo stato metastabile e dello stabilirsi della fase liquida. Il fenomeno ora descritto è detto

nucleazione e la velocità alla quale avviene, J_{l^*}, è detta *velocità di nucleazione*.

La teoria classica della nucleazione mette il luce gli stati metastabili del sistema liquido–vapore e permette di dare una descrizione qualitativa del suo comportamento in tale stato e della fuoriuscita da esso. Questa teoria è senza dubbio non soddisfacente, in essa l'energia libera dei cluster gioca un ruolo di primaria importanza pur non essendo stata introdotta a partire dai principi della meccanica statistica; però è interessante perchè mette in evidenza l'importanza della nozione di goccia critica, frutto della competizione tra energia libera di volume e tensione superficiale. Ma la teoria classica della nucleazione ha il grande limite di fornire una descrizione troppo semplificata del fenomeno della nucleazione: il problema non viene studiato nello spazio delle configurazioni, che ha dimensione praticamente infinita, ma nello spazio dei valori delle taglie dei cluster, che è unidimensionale; così facendo si perde completamente la possibilità di una descrizione della geometria del fenomeno, perchè l'unico parametro che caratterizza una goccia è il numero di particelle contenute in essa.

La teoria classica della nucleazione prevede che a bassa temperatura il meccanismo di uscita dalla fase metastabile sia quello della nucleazione, ma non chiarisce per quale motivo si può trascurare la coalescenza: all'interno del sistema, nella fase metastabile di vapore, si potrebbero formare delle gocce di liquido, la loro "fusione" potrebbe essere responsabile del raggiungimento della fase stabile da parte del sistema. Ciò può essere giustificato in modo intuitivo osservando che a bassa temperatura la concentrazione di gocce di liquido è estremamente bassa, pertanto la loro distanza media è elevata e quindi la probabilità che due cluster coalescano è trascurabile. Ma questo argomento è valido all'equilibrio, durante la fase di nucleazione non è applicabile; in sostanza manca una giustificazione rigorosa del fatto

che a bassa temperatura si può trascurare il fenomeno della coalescenza quando si descrive l'uscita del vapore dalla fase metastabile.

Nel seguito l'uscita da uno stato metastabile verrà descritta studiando in modo rigoroso sistemi stocastici del tipo delle dinamiche di Glauber; lo studio verrà effettuato sempre a bassa temperatura e si dimostrerà che in questa situazione il fenomeno della coalescenza può essere trascurato. Inoltre il fenomeno della nucleazione verrà descritto in modo dettagliato, tenendo presente anche la geometria dei cluster e non soltanto la loro taglia.

1.6 Metodo degli ensemble statistici ristretti.

Si vuole ora esaminare un primo tentativo di descrizione rigorosa degli stati metastabili; si tratta del metodo degli *ensemble statistici ristretti* proposto da Penrose e Lebowitz nel 1971 [PL1] [PL2].

La teoria deve cercare di riprodurre le proprietà fondamentali degli stati termodinamici metastabili; ciò che emerge dalla teoria di campo medio, dalla teoria classica della nucleazione e dall'osservazione sperimentale può essere così sintetizzato:

(i) se il sistema è in uno stato metastabile, allora in esso è presente una sola fase, nonostante le coordinate termodinamiche abbiano valori tali da far prevedere la presenza di due o più fasi in equilibrio. Per piccole variazioni delle variabili termodinamiche il sistema si comporta in accordo con le leggi della termodinamica, come se fosse in uno stato di equilibrio stabile; ma grandi variazioni dei parametri possono causare l'uscita del sistema dallo stato metastabile.

(ii) Se il sistema è isolato, allora può uscire dallo stato metastabile per effetto di

grandi fluttuazioni (ad esempio nel caso del vapore sovrasaturo, una grande fluttuazione di densità può condurre alla formazione di una goccia supercritica che nuclea la fase stabile), ma queste sono assai improbabili, pertanto il sistema permane nella fase metastabile per tempi lunghissimi.

(iii) L'uscita del sistema dallo stato metastabile è un processo irreversibile.

La prima di questa tre proprietà riguarda il comportamento statico del sistema nello stato metastabile, mentre le altre due riguardano il suo comportamento dinamico; una teoria rigorosa deve cercare di spiegare entrambi questi aspetti. In altri termini bisogna chiarire sia il comportamento d'equilibrio di uno stato metastabile, sia quello di non–equilibrio, ovvero l'uscita dallo stato metastabile medesimo.

Nel formalismo gibbsiano della meccanica statistica un sistema a temperatura fissata T viene descritto mediante l'ensemble canonico: si consideri un sistema fisico, sia Γ il relativo spazio delle fasi e sia ξ l'insieme delle variabili che individuano i punti di Γ; si considerino infinite copie dello stesso sistema e si supponga che queste siano distribuite in Γ secondo la funzione densità $\rho(\xi)$, cioè la frazione di sistemi che si trovano nel volumetto $d\xi$ dello spazio delle fasi centrato sullo stato individuato da ξ è dato da

$$\rho(\xi)\, d\xi \,. \tag{1.40}$$

L'insieme di sistemi prima considerato costituisce un ensemble statistico, per descrivere un sistema a temperatura costante bisogna considerare l'*ensemble canonico*, che è caratterizzato dalla funzione densità di Gibbs

$$\rho(\xi) = \frac{1}{Z(T)}\, e^{-\beta \mathcal{H}(\xi)} \tag{1.41}$$

ove $\mathcal{H}(\xi)$ è l'hamiltoniana del sistema e $Z(T)$ è la funzione di partizione $Z(T) =$

$\int_\Gamma d\xi\ e^{-\beta\mathcal{H}(\xi)}$. Considerata una qualsiasi osservabile fisica $\mathcal{E}(\xi)$ associata al sistema in esame, il suo valore all'equilibrio termodinamico è dato dal valor medio di $\mathcal{E}(\xi)$ calcolato sull'ensemble canonico

$$\langle\mathcal{E}\rangle = \frac{\int_\Gamma d\xi\ \mathcal{E}(\xi)e^{-\beta\mathcal{H}(\xi)}}{\int_\Gamma d\xi\ e^{-\beta\mathcal{H}(\xi)}}\ . \tag{1.42}$$

Per descrivere le proprietà statiche di uno stato metastabile, si può pensare di introdurre delle restrizioni al moto del punto rappresentativo del sistema nello spazio delle fasi; così facendo si può impedire al sistema la nucleazione della fase stabile. Le proprietà di questo sistema modificato, potranno essere usate come un'approssimazione del comportamento del sistema reale nella fase metastabile. In altri termini l'idea è di precludere una regione dello spazio delle fasi al punto rappresentativo del sistema, in modo che il calcolo dei valori medi su questo ensemble ristretto fornisca uno stato di quasi equilibrio in cui è presente una sola fase.

Detta $R \subset \Gamma$ la regione dello spazio delle fasi in cui il punto rappresentativo del sistema viene confinato, si definisce la funzione densità ristretta

$$\rho_R(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{Z_R(T)}\ e^{-\beta\mathcal{H}(\xi)} & \xi \in R \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{1.43}$$

ove $Z_R(T)$, la funzione di partizione associata all'ensemble canonico ristretto, viene scelta in modo che $\int_\Gamma d\xi\ \rho_R(\xi) = 1$.

Perchè l'ensemble ristretto descriva lo stato metastabile, devono essere soddisfatte anche le proprietà (ii) e (iii) precedentemente elencate. Una volta definito l'ensemble ristretto R bisogna verificare che siano piccole

la probabilità $P(t)$ che il punto rappresentativo del sistema esca da R in un tempo t supposto che all'istante iniziale 0 si trovava in R;

la probabilità che, una volta uscito da R, il sistema vi rientri.

Per verificare che $P(t)$ sia piccola si definisce $\lambda(t) = -\frac{dP(t)}{dt}$, che rappresenta la "velocità" con cui i sistemi fuoriescono da R, e si dimostra che $\lambda(t) \leq \lambda(0)\ \forall t \geq 0$; pertanto per verificare che l'uscita dallo stato metastabile è lenta, bisogna calcolare $\lambda(0)$ e mostrare che è piccola.

Quelle appena delineate sono le idee guida alla base del metodo dell'ensemble ristretto per la descrizione di uno stato metastabile; a questo punto il problema diventa dipendente dal particolare caso in esame; cioè, dato il sistema fisico di cui si vogliono studiare gli stati metastabili, bisogna capire come definire l'ensemble ristretto. A titolo di esempio si mostra come può essere definito l'ensemble ristretto per il sistema di Van der Waals: sia V il volume all'interno del quale si trova il gas, si suddivide questo volume in cellette ω e si impone che la densità all'interno di queste cellette non sia troppo alta; inoltre le cellette ω non vanno scelte troppo grandi, altrimenti la separazione tra le fasi potrebbe avvenire all'interno delle cellette stesse.

Il metodo dell'ensemble ristretto permette di dare una definizione rigorosa degli stati metastabili e di studiarne le proprietà, ma comunque si tratta di un approccio non soddisfacente, in primo luogo per l'arbitrarietà nella scelta delle restrizioni da imporre al moto del punto rappresentativo del sistema nello spazio delle fasi. In secondo luogo non fornisce una descrizione soddisfacente delle proprietà dinamiche del fenomeno, l'unica quantità che emerge è la *velocità di fuga* $\lambda(0)$, che dà indicazioni solo sulla tendenza iniziale del sistema ad abbandonare l'ensemble ristretto R.

Ma vi è un problema ancora più profondo: l'approccio basato sulla "evoluzione

degli ensembles" non permette di discriminare tra il fenomeno della nucleazione ed un meccanismo d'uscita lento dalla fase metastabile. Studiando le dinamiche di Glauber si capisce che la nucleazione avviene a causa di grandi fluttuazioni, che danno origine ad una goccia supercritica che invade rapidamente tutto il sistema. L'istante in cui si forma la goccia supercritica, cioè l'istante in cui avviene la nucleazione, è completamente indeterminato, il suo valore di aspettazione e lo scarto quadratico medio sono dello stesso ordine di grandezza. In conclusione la nucleazione della fase stabile non è un fenomeno di crescita lenta di "frammenti" della fase stabile all'interno di quella metastabile (ad esempio gocce di liquido che crescono lentamente nel vapore sovrasaturo), bensì si tratta di un fenomeno che repentinamente conduce il sistema nella fase stabile, per effetto del manifestarsi di una goccia supercritica ad un istante di tempo imprevedibile.

In contrasto con l'evoluzione brusca del singolo sistema, l'evoluzione dell'ensemble è lenta e regolare: infatti mediando su tutto l'ensemble, per effetto della grande incertezza sull'istante in cui avviene la nucleazione, si ha che grandezze macroscopiche (come la magnetizzazione nel caso di sistemi magnetici) evolvono lentamente ed in modo regolare. Pertanto la descrizione che il metodo basato sull'evoluzione degli ensembles fornisce dell'uscita di un sistema dalla fase metastabile è compatibile sia con il meccanismo della nucleazione, sia con una evoluzione lenta e regolare.

Capitolo 2.

Metastabilità nel modello di Ising stocastico.

2.1 Dinamiche di Glauber.

Nel capitolo precedente è stata illustrata la problematica degli stati metastabili e sono stati esposti alcuni tentativi di descriverne le principali proprietà; da quanto detto emerge l'assenza di una teoria rigorosa e generale che permetta di descrivere la fase metastabile. È quindi evidente l'importanza che riveste il tentativo di stabilire risultati esatti sull'argomento, perlomeno nel caso di sistemi semplici come il modello di Ising.

Per descrivere la metastabilità del modello di Ising è necessario capire come il punto rappresentativo del sistema si muova nello spazio delle configurazioni Ω (per la notazione ci si rifà a quella introdotta nel paragrafo 1.4), in altri termini fissata la configurazione iniziale $\sigma_0 \in \Omega$ bisogna capire qual è la traiettoria che il sistema descrive nello spazio Ω. Il problema è, quindi, definire una legge che permetta di dedurre la dinamica del modello.

In primo luogo si può osservare che è sensato richiedere che la dinamica sia

stocastica: fissata la configurazione all'istante t, $\sigma_t = \eta \in \Omega$, 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 $\sigma_{t'} = \xi \in \Omega$.

Si richiede, inoltre, che la dinamica sia *markoviana*, cioè nota $\sigma_t = \eta \in \Omega$, 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".

Per descrivere l'evoluzione del sistema si considera una variabile temporale discreta

$$t = 0, 1, 2, ... \tag{2.1}$$

e si indica con σ_t lo stato del sistema all'istante t; poichè si richiede che la dinamica sia non deterministica, allora le variabili $\sigma_t \ \forall t \geq 0$ vanno intese come variabili stocastiche definite su un comune spazio di probabilità e questo spazio è Ω. L' evoluzione del sistema avviene rispetto ad una variabile temporale discreta, pertanto si dirà che la dinamica del sistema è costituita da una *catena*.

Per far sì che il sistema non abbia memoria, si impone che la dinamica soddisfi alla *proprietà di Markov*

$$P(\sigma_{t+1} = \eta_{t+1} | \sigma_0 = \eta_0, ..., \sigma_t = \eta_t) = P(\sigma_{t+1} = \eta_{t+1} | \sigma_t = \eta_t) \tag{2.2}$$

ove $\eta_0 ... \eta_{t+1}$ sono delle generiche configurazioni di Ω. Si può quindi concludere che l'evoluzione del modello di Ising è descritta da una *catena di Markov*.

La probabilità condizionale $P(\sigma_{t+1} = \eta | \sigma_t = \xi) \ \forall \eta, \xi \in \Omega$ è detta *probabilità di transizione*, si suppone che essa sia indipendente dall'istante di tempo t; allora si dirà che il modello evolve secondo una *catena di Markov stazionaria*. Da quanto

appena detto appare evidente che per definire in modo completo la dinamica del sistema bisogna introdurre la *funzione di transizione*

$$P(\eta,\xi) = P(\sigma_1 = \xi | \sigma_0 = \eta) \;\; \forall \eta,\xi \in \Omega \tag{2.3}$$

che deve godere delle proprietà

$$\begin{cases} P(\eta,\xi) \geq 0 & \forall \eta,\xi \in \Omega \\ \sum_{\xi\in\Omega} P(\eta,\xi) = 1 & \forall \eta \in \Omega \end{cases} \tag{2.4}$$

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

$$P(\sigma_{t+1} = \xi | \sigma_t = \eta) = P(\eta,\xi) \quad \forall \eta,\xi \in \Omega, \forall t \geq 1 \;\; . \tag{2.5}$$

Si considerino infinite copie del sistema e si supponga che all'istante iniziale $t = 0$ siano distribuite in Ω in accordo con la distribuzione di probabilità $\rho_0(\eta) \;\; \forall \eta \in \Omega$, cioè:

$$\rho_0(\eta) = P(\sigma_0 = \eta) \quad \forall \eta \in \Omega \;\; ; \tag{2.6}$$

la funzione $\rho_0(\eta)$ è detta *distribuzione iniziale* della catena, le condizioni cui deve soddisfare sono

$$\begin{cases} \rho_0(\eta) \geq 0 & \forall \eta \in \Omega \\ \sum_{\eta\in\Omega} \rho_0(\eta) = 1 \end{cases} \;\; . \tag{2.7}$$

A partire da $\rho_0(\eta)$ è possibile determinare la misura evoluta al tempo $t > 0$; detta $\rho_t(\eta)$ la legge di distribuzione all'istante $t \geq 0$, si ha:

$$\rho_t(\eta) = \sum_{\xi\in\Omega} \rho_0(\xi) P^t(\xi,\eta) \quad \forall t \geq 1, \forall \eta \in \Omega \tag{2.8}$$

avendo introdotto la *funzione di transizione dopo t passi*

$$P^t(\xi,\eta) = \sum_{\xi_1\in\Omega} \dots \sum_{\xi_{t-1}\in\Omega} P(\xi,\xi_1)P(\xi_1,\xi_2)\dots P(\xi_{t-1},\eta) \;\; \forall \xi,\eta\in\Omega,\; \forall t\geq 2 \;\; . \quad (2.9)$$

Si consideri la funzione di distribuzione $\rho(\eta)$ soddisfacente la condizione di normalizzazione analoga alla (2.7), si dice che $\rho(\eta)$ è *stazionaria* rispetto alla catena di Markov se e solo se

$$\sum_{\xi\in\Omega} \rho(\xi)P(\xi,\eta) = \rho(\eta) \quad \forall \eta\in\Omega \;\; ; \quad (2.10)$$

questa definizione è interessante perchè si dimostra che se la distribuzione iniziale della catena $\rho_0(\eta)$ è stazionaria, allora la funzione di distribuzione non dipenderà dall'istante t e sarà sempre coincidente con $\rho_0(\eta)$, cioè

$$\rho_0(\eta) \;\text{ stazionaria} \Longrightarrow \rho_t(\eta) \equiv \rho_0(\eta) \;\; \forall t\geq 1 \;\; . \quad (2.11)$$

Si introduce, ora, l'importante nozione di reversibilità di una catena di Markov rispetto ad una funzione di distribuzione: considerata la distribuzione $\rho(\eta)$ soddisfacente le solite condizioni di normalizzazione, si dice che la catena di Markov è *reversibile* rispetto a $\rho(\eta)$ se e solo se

$$\rho(\eta)P(\eta,\xi) = \rho(\xi)P(\xi,\eta) \;\; . \quad (2.12)$$

Vale il seguente risultato

$$\text{catena reversibile rispetto a } \rho(\eta) \Longrightarrow \;\rho(\eta) \text{ stazionaria} \;\; , \quad (2.13)$$

infatti facendo uso della (2.12) si ha

$$\sum_{\eta\in\Omega} \rho(\eta)P(\eta,\xi) = \sum_{\eta\in\Omega} \rho(\xi)P(\xi,\eta) \;\; ,$$

e quindi

$$\sum_{\eta\in\Omega} \rho(\eta)P(\eta,\xi) = \rho(\xi)\sum_{\eta\in\Omega} P(\xi,\eta) = \rho(\xi) \ .$$

Se la distribuzione di Gibbs ν_{β,h,Λ_N}, definita dalla (1.10), è stazionaria rispetto alla catena di Markov, allora qualunque sia la distribuzione iniziale la catena converge a ν_{β,h,Λ_N} nel limite $t \to \infty$. Pertanto è sensato richiedere che la dinamica del modello di Ising sia descritta da una catena di Markov reversibile rispetto a questa distribuzione, ovvero

$$\nu_{\beta,h,\Lambda_N}(\eta)P(\eta,\xi) = \nu_{\beta,h,\Lambda_N}(\xi)P(\xi,\eta) \ \ \forall\xi,\eta\in\Omega \ \ ; \tag{2.14}$$

ciò vuol dire che la funzione di transizione deve soddisfare al principio del bilancio dettagliato.

Una ulteriore condizione che si impone alla dinamica del modello, è che l'evoluzione del sistema avvenga per singola inversione di spin, cioè la funzione di transizione $P(\xi,\eta)$ deve essere uguale a zero se η non può essere ottenuta a partire da ξ invertendo un solo spin.

In conclusione si può asserire che l'evoluzione del modello di Ising avviene per inversione di un singolo spin alla volta ed è descritta da una catena di Markov caratterizzata da una funzione di transizione stazionaria e soddisfacente al principio del bilancio dettagliato; una dinamica così definita è detta *dinamica di Glauber.*

2.2 Dinamica di Metropolis.

Per descrivere l'evoluzione del modello di Ising nel seguito verrà usata la dinamica di Metropolis, si tratta di un particolare esempio di dinamica di Glauber. Per caratterizzarla in modo definitivo bisogna definire la funzione di transizione; per

capire in base a quali criteri questa viene definita, è utile una descrizione intuitiva del moto del punto rappresentativo del sistema nello spazio delle configurazioni Ω.

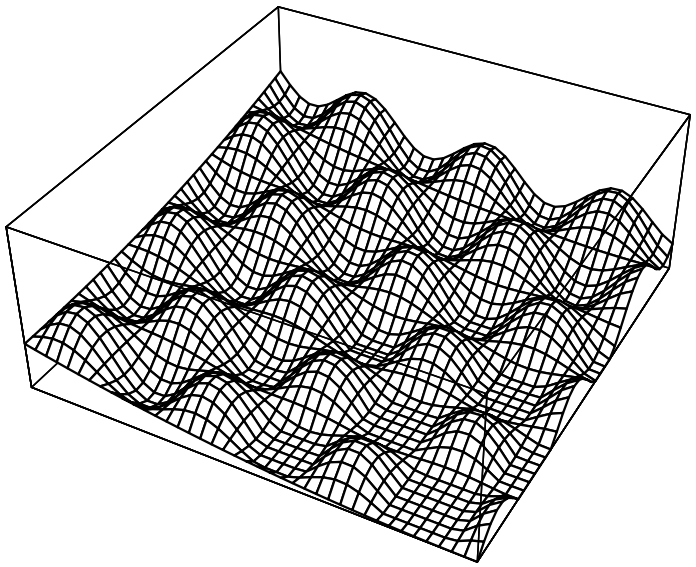


Fig.2.1 Panorama delle energie nel modello di Ising.

Ad ogni configurazione $\sigma \in \Omega$ è associata l'energia $H(\sigma)$, in modo del tutto simbolico si può tentare di rappresentare graficamente la funzione $H(\sigma)$ riportando su un piano lo spazio Ω e su un asse ad esso ortogonale i valori dell'energia $H(\sigma)$; ciò che si ottiene è riportato in Fig.2.1. Il moto del punto rappresentativo del sistema va immaginato in questo tortuoso panorama delle energie fatto di valli e di picchi distribuiti in modo complicato; il sistema si muoverà saltando da una configurazione all'altra cambiando, però, ad ogni salto il valore di un solo spin. Il sistema, quindi, si muove nello spazio delle configurazioni Ω seguendo traiettorie costituite da configurazioni *prime vicine*:

$$\eta, \sigma \in \Omega \text{ configurazioni prime vicine} \iff \exists x \in \Lambda_N : \ \sigma = \eta^x \tag{2.15}$$

essendo η^x la configurazione di seguito definita

$$\eta^x(y) = \begin{cases} \eta(y) & \forall y \in \Lambda_N \; e \; y \neq x \\ -\eta(y) & y = x \end{cases} . \tag{2.16}$$

Si può supporre che i salti del sistema avvengano verso configurazioni ad energia più bassa, ma accanto a questo moto di deriva va considerata anche una componente entropica, che permette al sistema di muoversi verso stati ad energia più alta; in altri termini per effetto del termine entropico il sistema può scavalcare barriere energetiche. La probabilità di transizioni sfavorite energeticamente deve essere piccola e deve annullarsi a temperatura zero, cioè per $T \to 0$ solo gli eventi favoriti energeticamente devono essere permessi.

Sulla base di quanto è stato appena detto si definisce la funzione di transizione nel modo seguente: prese due configurazioni $\sigma, \eta \in \Omega$ si pone $P(\sigma, \eta) = 0$ se non si tratta di configurazioni prime vicine. In caso contrario $\exists x \in \Lambda_N : \; \eta = \sigma^x$, si pone

$$\Delta_x H(\sigma) = H(\sigma^x) - H(\sigma) = H(\eta) - H(\sigma) \tag{2.17}$$

e si assume che la transizione $\sigma \to \eta$ avvenga con probabilità $\frac{1}{|\Lambda_N|}$ se $\Delta_x H(\sigma) \leq 0$, oppure con probabilità $\frac{e^{-\beta \, \Delta_x H(\sigma)}}{|\Lambda_N|}$. In conclusione la funzione di transizione è così definita:

$$P(\sigma, \eta) = \begin{cases} \frac{e^{-\beta \, [H(\eta) - H(\sigma)]^+}}{|\Lambda_N|} & se \; \exists x \in \Lambda_N : \; \sigma^x = \eta \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{2.18}$$

avendo introdotto la notazione

$$a^+ = \begin{cases} a & \text{se } a \geq 0 \\ 0 & \text{se } a < 0 \end{cases} \quad \forall a \in \mathcal{R} \; . \tag{2.19}$$

La dinamica costituita da una catena di Markov stazionaria caratterizzata dalla funzione di transizione (2.18) è detta *dinamica di Metropolis.*

Il significato della definizione (2.18) risulta più trasparente se il processo di aggiornamento viene immaginato nel modo seguente:

(i) all'istante di tempo t viene scelto in modo aleatorio un sito del reticolo Λ_N con probabilità uniforme $\frac{1}{|\Lambda_N|}$;

(ii) detto $x \in \Lambda_N$ il sito scelto e σ la configurazione attuale del sistema, lo spin s_x viene invertito con probabilità $e^{-\beta[\Delta_x H(\sigma)]^+}$.

Perchè la dinamica di Metropolis possa essere utilizzata per descrivere l' evoluzione del modello di Ising bisogna provare che si tratta di un esempio di dinamica di Glauber, cioè bisogna verificare la validità del principio del bilancio dettagliato

$$\frac{e^{-\beta H(\xi)}}{Z_{\Lambda_N}(\beta,h)} P(\xi,\eta) = \frac{e^{-\beta H(\eta)}}{Z_{\Lambda_N}(\beta,h)} P(\eta,\xi) \quad \forall \eta,\xi \in \Omega \quad . \tag{2.20}$$

La tesi è del tutto ovvia se ξ ed η non sono prime vicine, altrimenti $\exists x \in \Lambda_N$: $\xi^x = \eta$ e si può scrivere

$$e^{-\beta H(\xi)} P(\xi,\eta) = e^{-\beta H(\xi)} \frac{e^{-\beta(\Delta_x H(\xi))^+}}{|\Lambda_N|} \quad ;$$

con semplici passaggi si ottiene

$$e^{-\beta H(\xi)} P(\xi,\eta) = e^{-\beta H(\eta)} \frac{e^{-\beta\{\Delta_x H(\eta)+[-\Delta_x H(\eta)]^+\}}}{|\Lambda_N|} \quad .$$

Sfruttando la proprietà

$$a + (-a)^+ = a^+ \quad \forall a \in \mathcal{R} \tag{2.21}$$

si ottiene la tesi.

2.3 Dinamica di Metropolis in tempo continuo.

L'aver usato una variabile temporale discreta per descrivere l'evoluzione del modello di Ising si spiega con le semplificazioni tecniche che ne derivano; la dinamica può essere definita anche con una variabile temporale continua ed ora si mostra come ciò possa essere realizzato.

Si supponga di associare ad ogni sito reticolare una sorta di "orologio" costituito da una variabile temporale aleatoria $\tau \geq 0$ caratterizzata dalla distribuzione di Poisson con valor medio uguale ad 1; cioè detta $P(\tau \geq t)$ la probabilità che τ sia maggiore o uguale a $t \geq 0$ si deve avere

$$P(\tau \geq t) = e^{-t} \quad t \geq 0 \ . \tag{2.22}$$

L'orologio viene scelto "poissoniano" per far sì che la dinamica non abbia memoria, infatti si dimostra

$$P(\tau > t + s | \tau > s) = P(\tau > t) \ \ \forall s, t \geq 0 \ . \tag{2.23}$$

Si supponga che all'istante di tempo t l'orologio τ_x associato al sito reticolare $x \in \Lambda_N$ "suoni", allora il sistema cambierà configurazione aggiornando lo spin s_x; l'inversione dello spin avverrà con probabilità

$$e^{-\beta[\Delta_x H(\sigma)]^+} \tag{2.24}$$

ove σ è la configurazione del sistema prima dell'inversione; ovviamente la probabilità che lo spin non venga invertito è $1 - e^{-\beta[\Delta_x H(\sigma)]^+}$. In questo caso si dice che l'evoluzione del sistema è descritta da un *processo di Markov di puro salto*; si dimostra

$$P(\sigma_\varepsilon = \xi | \sigma_0 = \eta) = \begin{cases} c(x,\eta)\varepsilon + o(\varepsilon) & se \ \exists \ x \in \Lambda_N : \xi = \eta^x \\ o(\varepsilon) & \text{altrimenti} \end{cases} \ , \tag{2.25}$$

la quantità $c(x,\eta)$, che nel caso in esame vale proprio $e^{-\beta[\Delta_x H(\eta)]^+}$, è detta *tasso di aggiornamento.*

È interessante notare che il processo di Markov può essere ottenuto dalla catena di Markov nel limite $|\Lambda_N| \to \infty$, purchè si supponga che l'aggiornamento della catena avvenga agli istanti di tempo

$$t_k = k \frac{1}{|\Lambda_N|} \quad k = 0, 1, 2, \ldots \ ; \tag{2.26}$$

tale scelta è necessaria perchè $\widetilde{\tau} = \min\{\tau_x\}_{x\in\Lambda_N}$ è una variabile aleatoria con distribuzione poissoniana e con valor medio $\frac{1}{|\Lambda_N|}$, pertanto nel processo di Markov l'aggiornamento del sistema avviene ad intervalli di tempo approssimativamente uguali a $\frac{1}{|\Lambda_N|}$.

Se si tiene presente che il rate di aggiornamento nel caso a tempo continuo è stato definito come la funzione di transizione nel caso discreto, allora bisogna provare che la probabilità $P_{|\Lambda_N|}(x,t)$ che un sito $x \in \Lambda_N$ nel caso discreto venga selezionato ad un istante di tempo $t' < t$ è tale che

$$\lim_{|\Lambda_N|\to\infty} P_{|\Lambda_N|}(x,t) = 1 - e^{-t} \ ; \tag{2.27}$$

in sostanza si dimostra che l'orologio associato al sito $x \in \Lambda_N$ è di tipo poissoniano.

Nell'intervallo di tempo $[0,t]$ avvengono $t|\Lambda_N|$ aggiornamenti, la probabilità che all'istante t_k il sito x non venga scelto è $1 - \frac{1}{|\Lambda_N|}$; allora la probabilità che nell'intervallo $[0,t]$ il sito x non venga mai scelto è $(1 - \frac{1}{|\Lambda_N|})^{t|\Lambda_N|}$, pertanto

$$P_{|\Lambda_N|}(x,t) = 1 - \left(1 - \frac{1}{|\Lambda_N|}\right)^{t|\Lambda_N|} \ . \tag{2.28}$$

Calcolando il limite $|\Lambda_N| \to \infty$ si ottiene facilmente la tesi.

2.4 Il pathwise approach.

Nel presente paragrafo e nel seguito di questo capitolo verranno illustrati i risultati ottenuti con metodi "ad hoc" da R. Schonmann e J. Neves sulla metastabilità nel modello di Ising [NS] [S]. Tali risultati verranno discussi e, in un certo senso, ricavati seguendo lo schema alternativo proposto da E. Olivieri e R. Kotecky nei loro lavori sui modelli di Ising non simmetrici [KO1] [KO2]; tale schema

cerca di essere il più possibile indipendente dal particolare modello in esame e per molti versi riesce nel suo intento. In questo capitolo viene, quindi, presentato questo schema con riferimento al modello di Ising, nei capitoli successivi si cercherà di applicarlo ad un altro modello che sarà introdotto in seguito, il modello di Blume–Capel.

Lo stato fondamentale dell'hamiltoniana del modello di Ising $H(\sigma)$ è di facile determinazione: nel caso $h = 0$ è doppiamente degenere e le due configurazioni che minimizzano l'energia sono $-\underline{1}$ e $+\underline{1}$ (con i simboli $-\underline{1}$ e $+\underline{1}$ vengono indicate le configurazioni in cui tutti gli spin hanno valore rispettivamente -1 e $+1$). Nel caso $h = 0$ la funzione $H(\sigma)$ può essere grossolanamente vista come una doppia buca di potenziale simmetrica; questa simmetria si perde se $h \neq 0$, ma non si perde la struttura a doppia buca se il modulo di h resta piccolo: per $h > 0$ il minimo assoluto sarà la configurazione $+\underline{1}$, mentre sarà la configurazione $-\underline{1}$ nel caso $h < 0$.

Si supponga che il campo magnetico esterno sia piccolo e positivo, il panorama delle energie apparirà al sistema come in Fig.2.2: la più profonda delle due buche corrisponde allo stato fondamentale $+\underline{1}$, l'altra alla configurazione $-\underline{1}$; da un punto di vista intuitivo risulta chiaro che lo stato di equilibrio stabile avrà magnetizzazione positiva. Si immagini, ora, che all'istante iniziale $t = 0$ il sistema venga preparato nello stato $-\underline{1}$ e che poi lo si lasci libero di evolvere sotto l'azione del campo magnetico esterno positivo e piccolo; per giungere all'equilibrio stabile il sistema deve invertire la sua magnetizzazione, ma per fare ciò deve uscire dalla buca centrata sulla configurazione $-\underline{1}$, ovvero dal *bacino di attrazione* dello stato $-\underline{1}$. Perchè questo avvenga si devono verificare una serie di transizioni sfavorite energeticamente, ma a bassa temperatura questi eventi sono caratterizzati da una

probabilità piccola; allora se la temperatura T è bassa, il sistema può impiegare un tempo molto lungo per uscire dal bacino di attrazione di $-\underline{1}$ e raggiungere la fase stabile. Questo spiega per quale motivo a bassa temperatura il sistema può presentare per un tempo lunghissimo, praticamente infinito, magnetizzazione negativa anche in presenza di un campo magnetico positivo: affrontando dinamicamente lo studio di un sistema statistico appare subito chiara, almeno a livello intuitivo, la natura del suo comportamento metastabile; il problema è darne una definizione rigorosa.

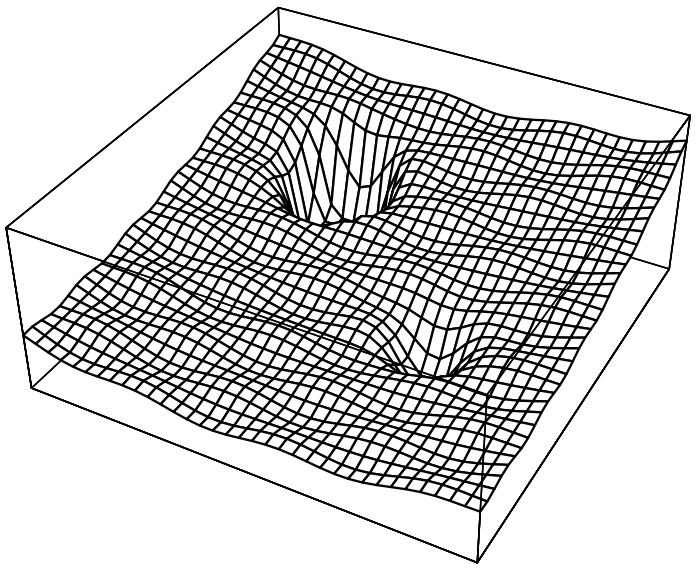


Fig.2.2 Panorama delle energie nel caso $h > 0$.

Si definisce il tempo di primo arrivo nello stato $+\underline{1}$

$$\tau_{+\underline{1}} = \inf\{t > 0 : \ \sigma_t = +\underline{1}\} \tag{2.29}$$

e con $E\tau_{+\underline{1}}$ si indica il suo valor medio, ottenuto mediando su tutte le possibili traiettorie. L'aggiornamento microscopico del sistema, il cambio di configurazione, avviene sulla scala del tempo unitario; ma i comportamenti macroscopici

del sistema vanno visti su una scala di tempo più grande. Allora a partire dal processo di Markov σ_t con condizione iniziale $\sigma_0 = -\underline{1}$, si considera la nuova catena σ_u ove $u = t\ E\tau_{+\underline{1}}$, cioè si è effettuato un riscalamento del tempo adottando come nuova unità di misura il valor medio del tempo di primo arrivo nello stato $+\underline{1}$.

Osservato che il processo σ_u dipende dalla temperatura T perchè il tempo $E\tau_{+\underline{1}}$ dipende da T, si stabilisce un criterio per definire il comportamento metastabile del sistema:

> il sistema ha un comportamento metastabile alla temperatura T, se il processo riscalato σ_u è un processo di salto dallo stato $-\underline{1}$ allo stato $+\underline{1}$ con la variabile temporale u distribuita esponenzialmente e con valor medio 1.

Questo criterio è intuitivamente sensato, infatti se si verifica la condizione da esso richiesta, il processo riscalato passa un tempo u nello stato $-\underline{1}$ per poi saltare in quello $+\underline{1}$ e questo tempo u ha valor medio uguale ad 1; questa situazione è illustrata in Fig.2.3. In questo modo di definire la metastabilità consiste il *pathwise approach* [CGOV].

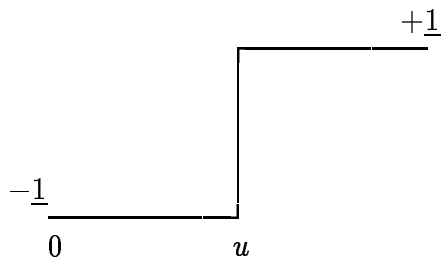


Fig.2.3 Comportamento metastabile nel senso del pathwise approach.

Nel caso del modello di Ising si dimostra che il sistema ha comportamento metastabile nel limite $\beta \to \infty$, cioè solo in questo limite il processo riscalato si comporta come un processo di salto dallo stato $-\underline{1}$ allo stato $+\underline{1}$ [NS]. Nel

seguito il comportamento metastabile del sistema verrà caratterizzato in modo molto più preciso, in particolare verrà definito il bacino d'attrazione dello stato $-\underline{1}$, verrà calcolata la vita media dello stato metastabile e verrà determinato il tubo di traiettorie che il sistema percorre per uscire dalla fase metastabile.

2.5 Minimi locali e loro dimensioni critiche.

In analogia con la nozione di minimo relativo di una funzione di variabile reale, si può definire la nozione di minimo locale per la funzione $H(\sigma)$:

$$\eta \text{ minimo locale di } H(\sigma) \Longleftrightarrow \begin{cases} \forall \xi \in \Omega \text{ prima vicina di } \eta \\ \\ \quad \text{si ha } \; H(\xi) > H(\eta) \end{cases} ; \tag{2.30}$$

Per semplicità si suppone che i parametri J ed h vengano scelti in modo tale che due configurazioni prime vicine abbiano sempre diversa energia; inoltre si osserva che la definizione dell' hamiltoniana è stata lievemente modificata:

$$\mathcal{H}(\sigma) = -\frac{J}{2} \sum_{<x,y>} s_x s_y - \frac{h}{2} \sum_{x \in \Lambda_N} s_x \quad \forall \sigma \in \Omega \tag{2.31}$$

con $0 < h < 2$, valori più elevati del campo magnetico esterno renderebbero il problema poco interessante; si dimostra che $h = 2$ si comporta come campo coercitivo: per $h \in (2,4)$ il "bacino d'attrazione" di $-\underline{1}$ coincide con l'unica configurazione $-\underline{1}$; per $h \geq 4$ lo stato $-\underline{1}$ diventa addirittura instabile.

Si vogliono ora caratterizzare questi minimi locali, considerando, però, solo quelle configurazioni in cui gli spin $+1$ sono immersi in un mare di spin -1. Con il simbolo $R(l_1, l_2) \quad 2 \leq l_1, l_2 \leq N-1$ si indica l'insieme delle configurazioni in cui gli spin $+1$ sono precisamente quelli associati ai siti che si trovano all'interno di un rettangolo di lati l_1 ed l_2 tracciato sul reticolo duale; ovviamente queste

configurazioni sono ottenute l'una dall'altra per traslazione. Si denota con $\Re$ l'insieme di tutte le configurazioni $R(l_1, l_2)$ al variare di l_1 ed l_2 su tutti i possibili valori.

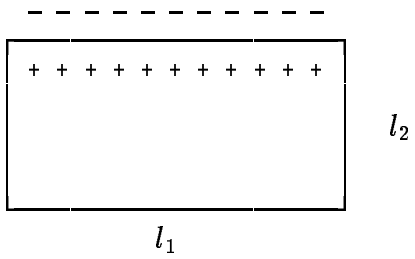


Fig.2.4 Configurazione $R(l_1, l_2)$.

Non è difficile dimostrare che tutti gli elementi di $\Re$ sono minimi locali, basta tener presente che da un punto di vista energetico è conveniente (diminuisce l'energia) invertire uno spin $+1$ se questo ha tre o più spin -1 primi vicini, mentre è conveniente invertire uno spin -1 se questo ha due o più spin $+1$ primi vicini; tutti questi possibili casi sono illustrati in Fig.2.5.

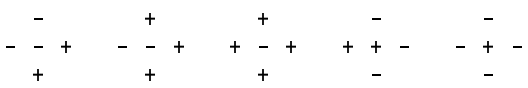


Fig.2.5 Situazioni in cui risulta conveniente invertire uno spin.

Ma gli elementi dell'insieme $\Re$ non esauriscono tutti i possibili minimi locali, infatti sono minimi locali anche quelle configurazioni in cui sono presenti più rettangoli di spin $+1$, purchè siano sufficientemente lontani. Considerata una configurazione in cui tutti gli spin $+1$ siano racchiusi nei due rettangoli R_1 ed R_2, si dice che R_1 ed R_2 sono *interagenti*, se e solo se è verificata almeno una delle due condizioni seguenti

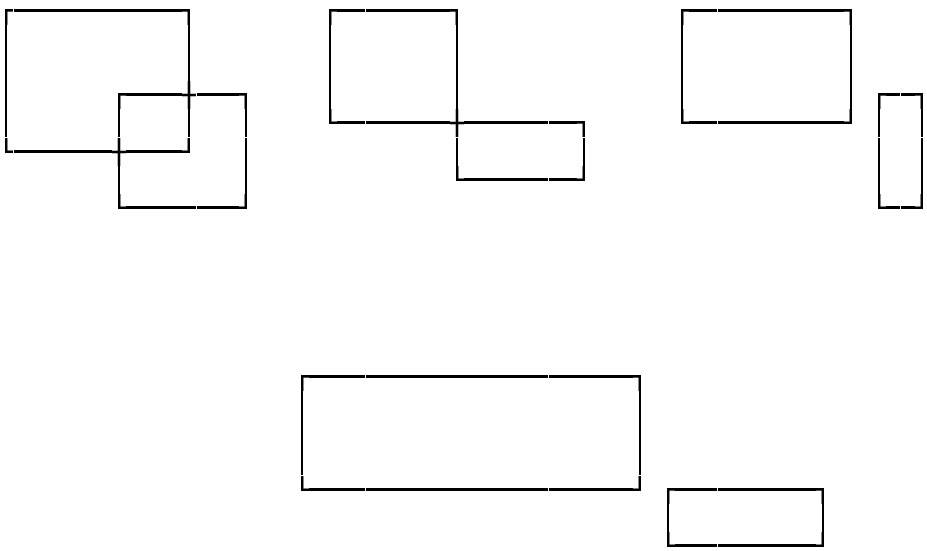


Fig.2.6 In alto rettangoli interagenti, in basso rettangoli non interagenti.

(i) R_1 ed R_2, visti come rettangoli disegnati sul reticolo duale, hanno almeno un punto di intersezione,

(ii) esiste un quadrato unitario con un lato appartenente ad R_1 ed un altro ad R_2 .

In sostanza due rettangoli interagenti possono coalescere tramite eventi favoriti energeticamente, pertanto la loro coalescenza avviene in un tempo tipico dell'ordine dell'unità. È quindi evidente che sono minimi locali anche quelle configurazioni in cui tutti gli spin $+1$ sono racchiusi in rettangoli tra loro non interagenti.

Limitandosi a considerare gli elementi dell'insieme $\mathfrak{R}$, i minimi locali sono costituiti da un rettangolo di spin $+1$ in un mare di spin -1, queste configurazioni ricordano le gocce, gli l-cluster, introdotte nella teoria classica della nucleazione. In quel caso si riusciva a definire la nozione di goccia critica, cioè di goccia che tendeva ad invadere tutto lo spazio; anche nel caso del modello di Ising si vorrebbe

dare una definizione analoga: bisogna quindi studiare il comportamento del sistema supponendo che lo stato iniziale sia un minimo locale e capire se il sistema evolve verso $-\underline{1}$ oppure verso $+\underline{1}$.

Si considerino le configurazioni $Q(l) = R(l,l) \quad 2 \leq l \leq N-1$, si tratta di configurazioni in cui tutti gli spin $+1$ sono racchiusi all'interno di un quadrato di lato l disegnato sul reticolo duale; è facile calcolare l' energia associata a tali configurazioni:

$$e(h,l) := H(Q(l)) - H(-\underline{1}) = 4Jl - hl^2 \quad . \tag{2.32}$$

Il termine $4Jl$ può essere visto come contributo superficiale all'energia della goccia, mentre il termine $-hl^2$ è il contributo di volume. Si può rappresentare l'energia $e(h,l)$ in funzione di l e si ottiene il grafico riportato in Fig.2.7; si pone $l^* = [\frac{2J}{h}]+1$, ove con il simbolo $[\frac{2J}{h}]$ si intende la parte intera di $\frac{2J}{h}$, avendo supposto che $\frac{2J}{h}$ non è un numero naturale; si osserva che

$$e(h,l) \text{ crescente per } \quad l < l^*$$
$$e(h,l) \text{ decrescente per } l > l^*.$$

È quindi lecito aspettarsi che il quadrato di lato l tenda a scomparire se $l < l^*$, ad invadere tutto il reticolo se $l \geq l^*$, pertanto si dirà che il quadrato è *sottocritico* nel primo caso, *supercritico* nel secondo; la lunghezza l^* è detta *dimensione critica* dei quadrati.

Per capire meglio il comportamento critico dei minimi locali è necessario analizzare i loro meccanismi di crescita e di contrazione; si consideri la configurazione $\eta = R(l_1, l_2)$ e si ponga

$$l(\eta) := \min(l_1, l_2) \quad . \tag{2.33}$$

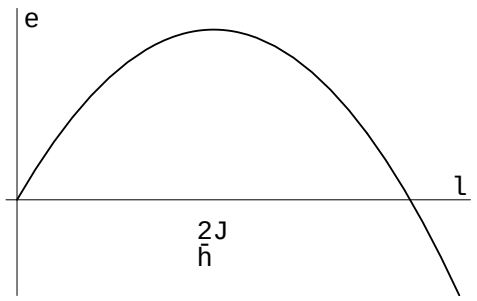


Fig.2.7 Energia dei minimi locali $Q(l)$.

Si supponga di voler descrivere l'evoluzione del sistema con condizione iniziale $\sigma_0 = \eta$, poichè si tratta di un minimo locale tutte le configurazioni prime vicine sono ad energia più elevata, allora l'evoluzione del sistema deve necessariamente passare attarverso eventi sfavoriti energeticamente.

L'evento di crescita meno sconveniente, cioè quello che costa meno dal punto di vista energetico, è la crescita di una protuberanza costituita da un quadrato unitario; il prezzo che il sistema deve pagare in energia è $\Delta H_1 = 2J - h$. Dopo la crescita della protuberanza il sistema può giungere in un nuovo minimo locale, un rettangolo più grande di quello di partenza, con una successione di spin–flip energeticamente convenienti; il tutto è illustrato in Fig.2.8.

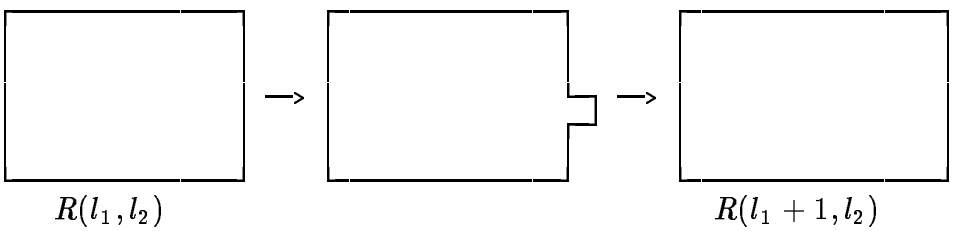


Fig.2.8 Crescita di una protuberanza.

Il meccanismo di contrazione che costa meno dal punto di vista energetico è

l'erosione d'angolo, il costo energetico è $\Delta H_2 = h$; ma per giungere in un nuovo minimo locale la goccia deve perdere un'intera "striscia" di lunghezza l. Il numero di eventi sfavoriti energeticamente che si devono succedere è $l - 1$, infatti l'inversione dell'ultimo spin della striscia è favorita energeticamente.

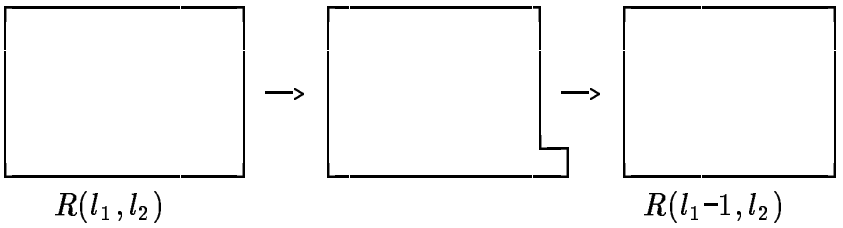


Fig.2.9 Scomparsa di una striscia.

Da quanto detto appare chiaro che il tempo tipico per la crescita di una protuberanza è $e^{\beta(2J-h)}$, mentre il tempo tipico per la scomparsa di una striscia di lunghezza l è $e^{\beta h(l-1)}$; per capire in quale direzione evolverà il sistema bisogna confrontare questi due tempi, infatti la sottocriticità o la supercriticità di una configurazione è frutto della competizione tra il processo di crescita di una protuberanza e quello di scomparsa di una striscia unitaria. Facilmente si ottiene

$$e^{\beta(2J-h)} < e^{\beta h(l-1)} \iff l > \frac{2J}{h} \quad , \tag{2.34}$$

pertanto anche dall'analisi dei meccanismi di crescita e di scomparsa si evince che l^* gioca il ruolo di dimensione critica; l'argomento appena illustrato è nuovo rispetto a quello basato sulla semplice analisi delle energie dei quadrati, si tratta di un argomento dinamico.

Fino ad ora la criticità dei minimi locali è stata discussa in modo intuitivo, si possono stabilire dei risultati rigorosi che chiarificano il ruolo giocato da l^*. Sia $\eta = R(l_1, l_2) \in \Re$ la configurazione iniziale del sistema, preso $\varepsilon > 0$ si dice che si verifica l'evento $S_\varepsilon(\eta)$, se si realizzano le seguenti tre circostanze

(i) $\tau^{\eta}_{-\underline{1}} < \tau^{\eta}_{+\underline{1}}$;

(ii) nell'intervallo $[0, \tau^{\eta}_{-\underline{1}}]$ non si verificano inversioni degli spin che valevano -1 all'istante iniziale ed inoltre tutti gli spin $+1$ formano un unico cluster;

(iii) $\forall \varepsilon > 0$ e per valori di β sufficientemente elevati si ha

$$e^{\beta h(l-1)-\beta\varepsilon} < \tau^{\eta}_{-\underline{1}} < e^{\beta h(l-1)+\beta\varepsilon} \quad ; \tag{2.35}$$

ove con $\tau^{\eta}_{-\underline{1}}$ e $\tau^{\eta}_{+\underline{1}}$ sono stati indicati i tempi di primo arrivo in $-\underline{1}$ ed in $+\underline{1}$, ed inoltre con la locuzione cluster di spin $+1$ si intende un insieme di siti i cui spin relativi hanno valore $+1$ e comunque se ne scelgano due di essi è possibile determinare una successione di siti primi vicini che li congiunge; l'evento $S_{\varepsilon}(\eta)$ è detto *contrazione regolare*. Traducendo le tre condizioni precedentemente elencate, si può dire che se l'evento $S_{\varepsilon}(\eta)$ si realizza, allora la goccia di spin $+1$ scompare prima che il sistema raggiunga la configurazione $+\underline{1}$, e la scomparsa avviene in un tempo stimato da $e^{\beta h(l-1)}$.

In modo del tutto analogo si definisce l'evento di *crescita regolare* $G_{\varepsilon}(\eta)$ richiedendo che siano verificate le seguenti tre condizioni

(i) $\tau^{\eta}_{+\underline{1}} < \tau^{\eta}_{-\underline{1}}$;

(ii) nell'intervallo $[0, \tau^{\eta}_{+\underline{1}}]$ il numero di spin $+1$ non scende mai al di sotto del valore $l_1 l_2 - (l-1)$, ed inoltre tali spin formano un singolo cluster il cui rettangolo circoscritto contiene il rettangolo di partenza $l_1 \times l_2$;

(iii) $\forall \varepsilon > 0$ e per valori di β sufficientemente elevati si ha

$$e^{\beta(2J-h)-\beta\varepsilon} < \tau^{\eta}_{+\underline{1}} < e^{\beta(2J-h)+\beta\varepsilon} \quad ; \tag{2.36}$$

per rettangolo circoscritto ad un cluster si intende il più piccolo tra i rettangoli che contengono il cluster.

Si può ora enunciare il seguente lemma che chiarisce il problema della criticità dei minimi locali ed in particolare asserisce che l^* è la dimensione critica delle configurazioni $R(l_1, l_2)$:

Lemma 2.1

$$l(\eta) < l^* \implies \lim_{\beta \to \infty} P(S_\varepsilon(\eta)) = 1$$
$$l(\eta) > l^* \implies \lim_{\beta \to \infty} P(G_\varepsilon(\eta)) = 1 \quad .$$

Per la dimostrazione di questo lemma si rimanda al lavoro di Schonmann e Neves [NS], va però sottolineato che una prova alternativa può essere data seguendo lo schema dimostrativo che si vedrà quando verrà affrontato il problema analogo per il modello di Blume–Capel (Cap. 4).

2.6 Bacino di attrazione allargato della configurazione $-\underline{1}$.

Dalla descrizione intuitiva del comportamento del modello di Ising, emerge il ruolo decisivo che viene giocato dal bacino di attrazione allargato $\mathcal{A}$ della configurazione $-\underline{1}$, pertanto è strettamente necessario darne una definizione rigorosa; si osserva che $\mathcal{A}$ non va confuso con il bacino d'attrazione stretto di $-\underline{1}$, cosituito da tutte le configurazioni σ tali che eseguendo una qualsiasi successione di inversioni di spin favorite energeticamente si giunge necessariamente in $-\underline{1}$. Vengono ora illustrate le idee fondamentali che stanno alla base della definizione del bacino $\mathcal{A}$.

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

$\sigma \in \mathcal{A}$, allora deve accadere $P_\sigma(\tau_{-\underline{1}} < \tau_{+\underline{1}}) \longrightarrow 1$ nel limite $\beta \to \infty$. Caratterizzare le configurazioni che godano di questa proprietà non è impresa banale, infatti una generica $\sigma \in \Omega$ può essere estremamente complicata. Si costruisce allora una applicazione che ad ogni $\sigma \in \Omega$ associ un minimo locale $\hat{\sigma}$, la condizione di appartenenza al bacino $\mathcal{A}$ viene quindi data su $\hat{\sigma}$; ciò non comporta difficoltà perchè la criticità dei minimi locali è nota dal lemma 2.1. 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 di ordine parziale definita su Ω nel modo seguente

$$\sigma \prec \eta \iff \sigma(x) \leq \eta(x) \ \ \forall x \in \Lambda_N \ . \tag{2.37}$$

Si illustra ora in dettaglio la definizione dell'insieme $\mathcal{A}$: sia $\sigma \in \Omega$, si definisce

$$c(\sigma) = \left\{ \begin{array}{l} \text{unione di tutti i quadrati unitari chiusi} \\ \\ \text{centrati sui siti } x \in \Lambda_N \ : \ \sigma(x) = +1 \end{array} \right. , \tag{2.38}$$

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 $c(\sigma)$; la Fig.2.10 illustra le nozioni appena introdotte. In sostanza un contorno γ è una poligonale chiusa sul reticolo duale $\mathcal{Z}^2 + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

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 $\sigma \in \Omega$ può essere identificata con la collezione $\{c_1, ...c_k\}$. Ad ognuno degli $\star$–cluster c_j viene associato il rettangolo circoscritto

$$R(c_j) := \left\{ \begin{array}{l} \text{il più piccolo rettangolo chiuso contenente } c_j, \\ \\ \text{tracciato sul reticolo duale} \end{array} \right. . \tag{2.39}$$

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 $N-1$; cioè nelle configurazioni ammissibili gli $\star$–cluster di spin $+1$ non devono estendersi su tutto il reticolo.

Fig.2.10 Insieme $c(\sigma)$ e suoi contorni.

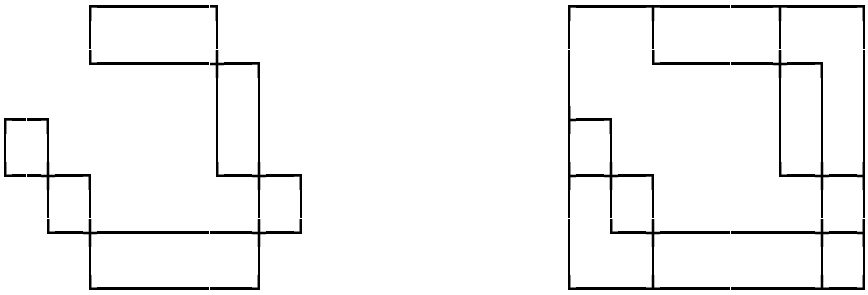


Fig.2.11 Rettangolo circoscritto ad uno $\star$–cluster.

Il sottospazio di Ω costituito da tutte le configurazioni ammissibili viene indicato con Ω^*. Se $\sigma \in \Omega^*$ allora si possono definire i *contorni esterni* degli $\star$–cluster c_j; infatti se $\sigma \in \Omega^*$, 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 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

$$\begin{array}{l} R_{i_1} = R_n \ \text{ ed } \ R_{i_k} = R_m \\ R_{i_l} \ \text{ ed } \ R_{i_{l+1}} \ \text{ interagenti } \ \forall l = 1, ...k-1 \end{array} \quad . \tag{2.40}$$

A questo punto possono considerarsi esauriti tutti i preliminari e si può quindi dare la definizione dell'applicazione S

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

(ii) 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 $+1$;

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

$$\Xi_1^{(1)}, ..., \ \Xi_{k_1}^{(1)} \ ,$$

dette *catene di prima generazione*; la generica catena $\Xi_j^{(1)}$ 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.

(iv) 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

$$\bigcup_{R \in \Xi_j^{(r)}} R \ ,$$

che non è necessariamente uno $\star$–cluster, ed il suo inviluppo rettangolare $R_j^{(r)} \ \ \forall j = 1, ..., k_r$; a partire da questi k_r rettangoli si ottengono le catene

di $(r+1)$–esima generazione $\Xi_1^{(r+1)}, ..., \Xi_{k_{r+1}}^{(r+1)}$ costruendo tutte le possibili catene massimali.

(v) La procedura illustrata al punto precedente viene iterata fino a quella generazione f–esima, in cui ogni catena consta di un singolo rettangolo

$$\Xi_1^{(f)} = \{\bar{R}_1\} \, , ..., \, \Xi_{k_f}^{(f)} = \{\bar{R}_{k_f}\} \ ;$$

tali rettangoli sono non interagenti per costruzione.

(vi) L'applicazione S associa ad ogni configurazione $\sigma \in \Omega^*$ 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

$$\begin{cases} \quad \sigma \prec \hat{\sigma} \ \ \forall \sigma \in \Omega^* \\ H(\sigma) \geq H(\hat{\sigma}) \ \ \forall \sigma \in \Omega^* \\ \quad \sigma \prec \eta \implies \hat{\sigma} \prec \hat{\eta} \ \ \forall \sigma, \eta \in \Omega^* \end{cases} , \tag{2.41}$$

l'ultima delle tre proprietà si può esprimere dicendo che l'applicazione S è crescente nel senso della relazione d'ordine parziale definita su Ω^*. La prima e la terza delle (2.41) 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.

Si definisce il bacino d'attrazione $\mathcal{A}$ della configurazione $-\underline{1}$:

$$\mathcal{A} := \{\sigma \in \Omega^* \ : \ \bar{R}_1, ..., \bar{R}_{k_f} \text{ sono sottocritici}\} \ , \tag{2.42}$$

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, infine, 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 $+\underline{1}$.

2.7 Uscita del sistema dalla fase metastabile.

Si vuole ora illustrare come il sistema esca dalla fase metastabile, per fare ciò verrano discusse cinque proprietà fondamentali dell'insieme $\mathcal{A}$.

Si dimostra che comunque si prenda $\sigma \in \mathcal{A}$, con grande probabilità il sistema, partendo da σ, giunge prima in $-\underline{1}$ che in $+\underline{1}$; cioè

$$\lim_{\beta \to \infty} P_\sigma(\tau_{-\underline{1}} < \tau_{+\underline{1}}) = 1 \ \ \forall \sigma \in \mathcal{A} \ ; \tag{2.43}$$

si tratta di una caratterizzazione dinamica del bacino di attrazione. Inoltre si può anche stimare dall'alto il tempo necessario al sistema per giungere in $-\underline{1}$, infatti preso $\varepsilon > 0$ si ha

$$\lim_{\beta \to \infty} P_\sigma(\tau_{-\underline{1}} < e^{\beta(l^*-2)h+\beta\varepsilon}) = 1 \ \ \forall \sigma \in \mathcal{A} \ . \tag{2.44}$$

Considerato un generico insieme di configurazioni $\omega \subset \Omega$, si definisce la sua frontiera nel modo seguente:

$$\partial\omega := \{\sigma \in \Omega \ : \ \sigma \notin \omega \text{ e } \exists x \in \Lambda_N \ : \ \sigma^x \in \omega\} \ , \tag{2.45}$$

cioè la frontiera di ω è costituita da tutte le configurazioni che non appartengono ad ω, ma che per inversione di un singolo spin vengono trasformate in suoi elementi. Se si tiene presente che l'evoluzione del sistema avviene per inversione di uno spin alla

volta, risulta evidente che per uscire dall'insieme $\mathcal{A}$ il sistema deve necessariamente attraversarne la frontiera. Questa è la seconda importante proprietà del bacino di attrazione di $-\underline{1}$.

È ovvio chiedersi quale sia il minimo dell'energia su $\partial\mathcal{A}$, infatti c'è da aspettarsi che dovendo il sistema attraversare $\partial\mathcal{A}$ per giungere nella fase stabile, lo faccia sfruttando il valico alla quota più bassa. Allora si introduce la configurazione *protocritica* $\mathcal{P}$, in cui gli $(l^*-1)l^*+1$ spin positivi si trovano all'interno del rettangolo di lati l^*-1 ed l^* con una protuberanza su uno dei due lati più lunghi.

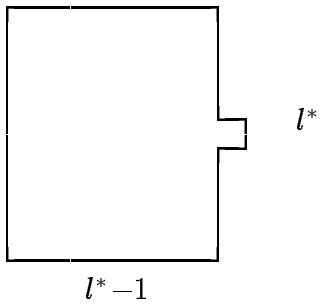


Fig.2.12 Configurazione protocritica.

$\mathcal{P}$ è un elemento di $\partial\mathcal{A}$, infatti invertendo lo spin $+1$ esterno al rettangolo $(l^*-1)\times l*$, cioè eliminando la protuberanza, si ottiene una configurazione di $\mathcal{A}$; inoltre si osserva che $\mathcal{P}$ non è un elemento di $\mathcal{A}$, infatti $S\mathcal{P}$ è una configurazione supercritica. si dimostra che

$$\begin{array}{c} \min_{\sigma\in\partial\mathcal{A}} H(\sigma) = H(\mathcal{P}) \\ \min_{\sigma\in\partial\mathcal{A}\setminus\{\mathcal{P}\}} [H(\sigma)-H(\mathcal{P})] \geq h > 0 \end{array} , \tag{2.46}$$

ovvero $\mathcal{P}$ è un punto di minimo stretto per l'energia sulla frontiera di $\mathcal{A}$. Questo risultato è di grande importanza perchè permette di stimare dal basso il tempo di uscita del sistema da $\mathcal{A}$, facendo uso della reversibilità della catena di Markov rispetto alla misura di Gibbs. Si può infatti dimostrare che il tempo che il sistema

impiega, partendo da σ, per giungere in una configurazione η tale che $H(\eta) > H(\sigma)$ è senz'altro maggiore di $e^{\beta[H(\eta)-H(\sigma)]}$; è questo il contenuto del lemma di reversibilità

Lemma 2.2
Considerate $\eta, \sigma \in \Omega$ tali che $H(\eta) > H(\sigma)$ e preso $\delta > 0$, si ha

$$\lim_{\beta \to \infty} P_\sigma(\tau_\eta > e^{\beta[H(\eta)-H(\sigma)]-\beta\delta}) = 1 \ ; \qquad (2.47)$$

per la dimostrazione si rimanda all'appendice A.

Come conseguenza del lemma 2.2 si ha che, fissata la condizione iniziale $\sigma_0 = -\underline{1}$, il sistema giunge sulla frontiera di $\mathcal{A}$ in un tempo "non troppo piccolo", cioè preso $\varepsilon > 0$

$$\lim_{\beta \to \infty} P_{-\underline{1}}(\tau_{\partial\mathcal{A}} > e^{\beta(\Gamma-\varepsilon)}) = 1 \ , \qquad (2.48)$$

avendo posto

$$\Gamma = H(\mathcal{P}) - H(-\underline{1}) = 4l^*J - h[(l^*-1)l^*+1] \ . \qquad (2.49)$$

La (2.48), del tutto ovvia da un punto di vista intuitivo, viene provata nel modo seguente: si supponga che la prima volta che il sistema giunge in $\partial\mathcal{A}$ vi giunga nella configurazione σ, allora $\tau_\sigma = \tau_{\partial\mathcal{A}}$. Dal lemma di reversibilità si ha che per ogni $\varepsilon > 0 \quad P_{-\underline{1}}(\tau_{\partial\mathcal{A}} > \exp\{\beta[H(\sigma) - H(-\underline{1})] - \beta\varepsilon\}) \longrightarrow 1$ nel limite $\beta \to \infty$; l'evento $(\tau_{\partial\mathcal{A}} > \exp\{\beta[\Gamma - \varepsilon]\})$ contiene l'evento $(\tau_{\partial\mathcal{A}} > \exp\{\beta[H(\sigma) - H(-\underline{1})] - \beta\varepsilon\})$ perchè $H(\sigma) - H(-\underline{1}) \geq \Gamma \ \ \forall\sigma \in \partial\mathcal{A}$, allora

$$P_{-\underline{1}}(\tau_{\partial\mathcal{A}} > e^{\{\beta[\Gamma-\varepsilon]\}}) \geq P_{-\underline{1}}(\tau_{\partial\mathcal{A}} > e^{\{\beta[H(\sigma)-H(-\underline{1})]-\beta\varepsilon\}}) \stackrel{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 1 \ ;$$

da cui si ha immediatamente la tesi.

La quarta proprietà dell'insieme $\mathcal{A}$ consiste in una stima dall'alto del tempo di primo arrivo sulla frontiera del bacino di attrazione di $-\underline{1}$, cioè preso $\varepsilon > 0$ si ha

$$P_{-\underline{1}}(\tau_{\partial\mathcal{A}} < e^{\beta(\Gamma+\varepsilon)}) = 1 \ ; \tag{2.50}$$

la precedente, assieme alla (2.48), permette di concludere che il tempo impiegato dal sistema per giungere in $\partial\mathcal{A}$ può essere stimato con $e^{\beta\Gamma}$.

Per provare la (2.50) è sufficiente esibire un evento $\mathcal{E}_\sigma$ con $\sigma \in \mathcal{A}$, che goda delle seguenti proprietà:

(i) avvenga nel tempo $T_1(\varepsilon) < T_2(\varepsilon) = e^{\beta(\Gamma+\varepsilon)}$ con $\varepsilon > 0$;

(ii) se si realizza, il sistema parte da σ e giunge in $\partial\mathcal{A}$ in un tempo inferiore a T_1;

(iii) deve avere una probabilità non troppo piccola, cioè deve valere una stima dal basso del tipo

$$\inf_{\sigma\in\mathcal{A}} P(\mathcal{E}_\sigma) \geq \alpha(T_1) \ ; \tag{2.51}$$

con $\alpha(T_1)$:

$$\lim_{\beta\to\infty} (1-\alpha(T_1))^{\frac{T_2}{T_1}} = 0 \ . \tag{2.52}$$

Viene ora descritta l'idea intuitiva alla base della dimostrazione della (2.50): esiste un particolare evento, chiamato $\mathcal{E}_\sigma$, che in un tempo inferiore a T_1 conduce il sistema su $\partial\mathcal{A}$, allora la probabilità che il sistema non giunga sulla frontiera di $\mathcal{A}$ nel tempo T_1 è minore di $(1-\alpha(T_1))$; se il sistema all'istante T_1 non è giunto in $\partial\mathcal{A}$, allora è ancora in $\mathcal{A}$ e può ripartire con un altro tentativo di uscita nell'intervallo $[T_1, 2T_1]$. Questo argomento può essere ripetuto $\frac{T_2}{T_1}$ volte, in modo da considerare l'intervallo di tempo complessivo $[0, T_2]$; applicando la proprietà di Markov si ha

che la probabilità che per $\frac{T_2}{T_1}$ volte il sistema non sia riuscito a raggiungere la frontiera $\partial\mathcal{A}$ è minore di $(1-\alpha(T_1))^{\frac{T_2}{T_1}}$, che per ipotesi si annulla nel limite $\beta \to \infty$. In sostanza per provare la validità della (2.50) si sfrutta la ricorrenza, la proprietà di Markov forte e l'aver determinato un evento di uscita la cui probabilità va a zero non troppo rapidamente nel limite $\beta \to \infty$.

Si tralascia la definizione rigorosa dell'evento $\mathcal{E}_\sigma$, ma se ne illustrano gli aspetti peculiari, fisicamente interessanti, con riferimento alla Fig.2.13; in quest'ultima viene rappresentato in modo schematico il bacino d'attrazione di $-\underline{1}$: si tratta di una buca di potenziale con pareti decorate per la presenza dei minimi locali; ognuna delle buche tracciate in Fig.2.13 rappresenta il bacino di attrazione di un minimo locale.

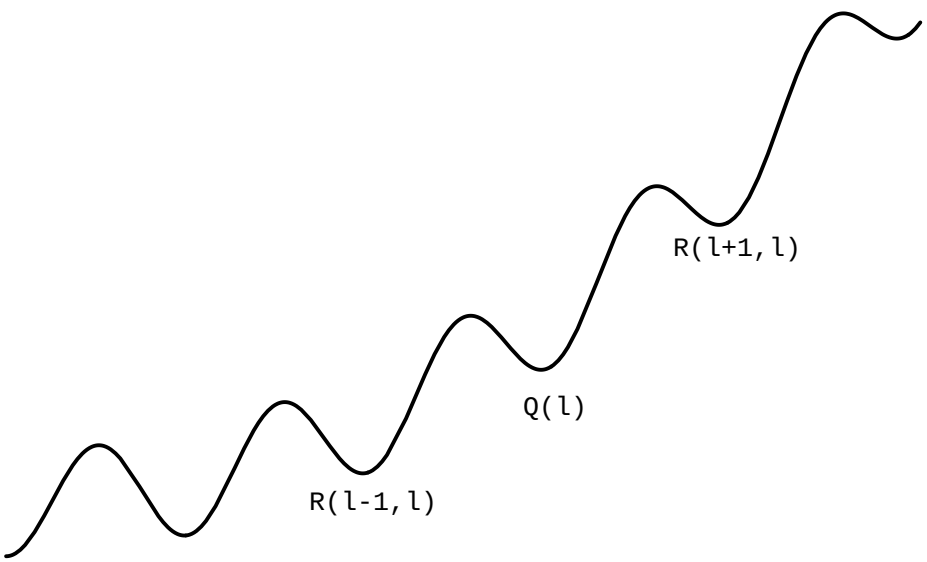


Fig.2.13 Rappresentazione schematica dell'insieme $\mathcal{A}$.

L'evento $\mathcal{E}_\sigma$ viene costruito supponendo che il sistema nella sua escursione da

$-\underline{1}$ alla frontiera $\partial\mathcal{A}$, passi per i minimi locali di seguito elencati

$$-\underline{1} \to Q(2) \to R(2,3) \to Q(3) \to ... \to R(l-1,l) \to Q(l) \to ... \to R(l^*-1,l^*) \to \mathcal{P}$$

cioè la crescita della goccia di spin $+1$ avviene attraverso una successione di rettangoli, tali che la differenza tra due lati non paralleli di ognuno di essi valga al più uno. Inoltre l'evento $\mathcal{E}_\sigma$ viene costruito considerando tutte quelle traiettorie che prevedano, per il sistema, una sorta di "periodo di riposo" all'interno dei bacini di attrazione dei minimi locali visitati durante l'escursione. Concedere queste "pause" al sistema è necessario per costruire un evento, la cui probabilità possa essere stimata dal basso con una quantità che non vada a zero troppo rapidamente e che quindi soddisfi la (2.52); questa incertezza sull'istante in cui il sistema riprende la sua corsa verso la frontiera, dopo aver trascorso un certo tempo nel bacino d'attrazione di un minimo locale, è collegata ad una sorta di entropia temporale.

L'insieme $\mathcal{A}$ gode di una ulteriore importante proprietà: supposto che il sistema sia giunto in $\mathcal{P}$, se β è sufficientemente grande vi è una probabilità finita che il sistema giunga in $+\underline{1}$ prima che in $-\underline{1}$; cioè $\exists\beta_0$ tale che se $\beta > \beta_0$ allora

$$P_{\mathcal{P}}(\tau_{+\underline{1}} < \tau_{-\underline{1}}) > \frac{1}{2|\Lambda_N|} \quad . \tag{2.53}$$

Inoltre se si suppone che $\tau_{+\underline{1}} < \tau_{-\underline{1}}$, allora è possibile stimare dall'alto il tempo necessario perchè il sistema giunga in $+\underline{1}$; infatti preso $\varepsilon > 0$ si ha

$$\lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{P}}(\tau_{+\underline{1}} < e^{\beta(2J-h)+\beta\varepsilon} | \tau_{+\underline{1}} < \tau_{-\underline{1}}) = 1 \quad . \tag{2.54}$$

La (2.53) permette di descrivere in modo completo l'uscita dallo stato metastabile: già in precedenza si era concluso che in un tempo dell'ordine di $e^{\beta\Gamma}$ il

sistema raggiunge la frontiera $\partial\mathcal{A}$, a questo punto vi è una probabilità non nulla che termini in $+\underline{1}$; ma se ciò non avviene rientra in $\mathcal{A}$ e riparte. Sfruttando la ricorrenza, come in precedenza, e tenendo presente che $e^{\beta\Gamma} > e^{\beta(2J-h)}$ si dimostra che il sistema giunge in $+\underline{1}$ nel tempo $e^{\beta\Gamma}$, questo tempo è la vita media dello stato metastabile.

Vengono ora riassunte le cinque proprietà dell'insieme $\mathcal{A}$ illustrate in precedenza:

(i) presa $\sigma \in \mathcal{A}$:

$$\lim_{\beta\to\infty} P_\sigma(\tau_{-\underline{1}} < \tau_{+\underline{1}}) = 1 \ ;$$

(ii) per uscire da $\mathcal{A}$ il sistema deve necessariamente attraversarne la frontiera $\partial\mathcal{A}$;

(iii) $H(\mathcal{P})$ è il minimo valore che l'energia assume su $\partial\mathcal{A}$:

$$\min_{\sigma\in\partial\mathcal{A}} H(\sigma) = H(\mathcal{P}) \ ;$$

(iv) il sistema esce da $\mathcal{A}$ in un tempo non "troppo lungo", cioè preso $\varepsilon > 0$ si ha:

$$P_{-\underline{1}}(\tau_{\partial\mathcal{A}} < e^{\beta(\Gamma+\varepsilon)}) = 1 \ ;$$

(v) a partire da $\mathcal{P}$ vi è una probabilità finita che il sistema visiti $+\underline{1}$ prima di $-\underline{1}$:

$$P_{\mathcal{P}}(\tau_{+\underline{1}} < \tau_{-\underline{1}}) > \frac{1}{2|\Lambda_N|} \ .$$

Da un punto di vista rigoroso, gli aspetti salienti dell'uscita del sistema dalla fase metastabile, sono condensati nel seguente teorema

Teorema 2.1
Preso $\varepsilon > 0$ si ha

$$\begin{array}{ll} (i) & \lim_{\beta\to\infty} P_{-\underline{1}}(e^{\beta(\Gamma-\varepsilon)} < \tau_{+\underline{1}} < e^{\beta(\Gamma+\varepsilon)}) = 1 \\ (ii) & \lim_{\beta\to\infty} P_{-\underline{1}}(\bar{\tau}_{\mathcal{P}} < \tau_{+\underline{1}}) = 1 \end{array} \quad ; \tag{2.55}$$

ove $\bar{\tau}_{\mathcal{P}}$ è il tempo di primo arrivo in $\mathcal{P}$ dopo che il sistema ha visitato $-\underline{1}$ per l'ultima volta prima di toccare $+\underline{1}$, cioè

$$\begin{array}{l} \bar{\tau}_{-\underline{1}} = \sup\{t > 0 : \ \sigma_t^{-1} = -\underline{1} \ e \ t < \tau_{+\underline{1}}\} \\ \bar{\tau}_{\mathcal{P}} = \inf\{t > 0 : \ \sigma_t^{-1} = \mathcal{P} \ e \ t > \bar{\tau}_{-\underline{1}}\} \end{array} \quad . \tag{2.56}$$

In questo paragrafo è stato illustrato il modo in cui il sistema abbandona la fase metastabile e raggiunge quella stabile; lo scopo era quello di mostrare come, nell'ambito di un modello di Ising stocastico, si possano stabilire dei risultati rigorosi. Ma è interessante chiudere il capitolo con alcune osservazioni di tipo fisico: dallo studio precedente sono emersi tre tempi tipici

$e^{\beta(l^*-2)h}$ tempo massimo di rilassamento del sistema da $\sigma \in \mathcal{A}$ in $-\underline{1}$;

$e^{\beta\Gamma}$ tempo necessario per giungere sulla frontiera;

$e^{\beta(2J-h)}$ tempo che il sistema impiega per arrivare in $+\underline{1}$ partendo dalla frontiera di $\mathcal{A}$.

È facile verificare la validità delle seguenti disuguaglianze

$$\begin{array}{l} e^{\beta\Gamma} > e^{\beta(l^*-2)h} \\ e^{\beta\Gamma} > e^{\beta(2J-h)} \end{array} \quad , \tag{2.57}$$

da cui si deduce la seguente descrizione intuitiva del comportamento del sistema: supposto che all'istante iniziale il sistema sia in $\mathcal{A}$, per effetto delle fluttuazioni termiche si muoverà all'interno di $\mathcal{A}$; potrà capitargli di avvicinarsi alla frontiera $\partial\mathcal{A}$,

ma se non la raggiungerà vi sarà un rapido rilassamento di durata $e^{\beta(l^*-2)h}$. Solo nel tempo $e^{\beta\Gamma}$, molto maggiore del precedente, il sistema riuscirà a raggiungere $\partial\mathcal{A}$; pertanto in questo tempo lo stato $-\underline{1}$ verrà visitato un elevatissimo numero di volte ed il sistema presenterà magnetizzazione negativa. Raggiunta, però, la frontiera dell'insieme $\mathcal{A}$ il sistema nucleerà nel breve tempo $e^{\beta(2J-h)}$ la fase stabile; pertanto ci si aspetta che l'andamento della magnetizzazione in funzione del tempo sia a gradino.

Risultati in accordo con queste previsioni vengono trovati sia con simulazioni su *macchine dedicate* [TM], infatti il valore elevatissimo della vita media degli stati metastabili rende inutili gli usuali calcolatori, sia con misure sperimentali [GR]; in quest'ultimo caso l'uscita dalla fase metastabile viene forzata con perturbazioni esterne, perchè tipicamente la vita media di uno stato metastabile è così grande da precludere la nucleazione spontanea all'osservazione sperimentale.

Capitolo 3.

Studio dinamico del modello di Blume–Capel.

3.1 Diagramma di fase del modello di Blume–Capel a bassa temperatura.

Il modello di Blume–Capel nasce dall'idea di costruire un sistema di spin su reticolo contemplando la possibilità che alcuni siti reticolari siano vacanti, ovvero non occupati da particelle [C]. Si tratta quindi di un modello di materiale ferromagnetico più complesso del modello di Ising; ma questa non è l'unica ragione di interesse, infatti il modello permette anche di studiare il comportamento di una miscela He^3–He^4 a bassa temperatura [BEG].

Il modello di Blume–Capel viene definito sul reticolo bidimensionale Λ_N già introdotto nel caso del modello di Ising; ad ogni sito reticolare $x \in \Lambda_N$ viene, però, associata una variabile di spin σ_x che può assumere i tre valori -1, 0 e $+1$; il valore $\sigma_x = 0$ viene interpretato come assenza di particelle sul sito x. Pertanto lo spazio delle configurazioni è

$$\Omega = \{-1, 0, +1\}^{\Lambda_N} \tag{3.1}$$

e consta di $3^{|\Lambda_N|}$ elementi; vengono, inoltre, imposte condizioni al contorno periodiche sulle configurazioni, per cui il modello risulta definito su un toro. Infine si introduce l'hamiltoniana del sistema

$$H(\sigma) = J \sum_{<x,y>} (\sigma_x - \sigma_y)^2 - \lambda \sum_{x \in \Lambda_N} \sigma_x^2 - h \sum_{x \in \Lambda_N} \sigma_x \quad \forall \sigma \in \Omega \ , \qquad (3.2)$$

ove λ ed h sono due parametri reali, mentre J è una costante reale e positiva.

Pensando al sistema come ad un modello di materiale ferromagnetico, i tre termini che costituiscono l'hamiltoniana possono essere interpretati nel modo seguente:

$-h \sum_{x \in \Lambda_N} \sigma_x$ descrive l'interazione tra gli spin delle particelle ed il campo magnetico esterno h;

$-\lambda \sum_{x \in \Lambda_N} \sigma_x^2$ è il contributo all'energia del sistema fornito dal *potenziale chimico* λ; infatti $\sum_{x \in \Lambda_N} \sigma_x^2$ è il numero di particelle che occupano il reticolo quando il sistema si trova nello stato σ, allora se $\lambda > 0$ viene favorito l'aumento del numero di particelle, viceversa se $\lambda < 0$ l'energia decresce al diminuire del numero di particelle.

$J \sum_{<x,y>} (\sigma_x - \sigma_y)^2$ è il contributo all'energia dovuto all'interazione di scambio tra spin primi vicini, infatti sviluppando il quadrato si ottiene il termine $-2J\sigma_x\sigma_y$; pertanto l'aver scelto $J > 0$ assicura che l' accoppiamento è di tipo ferromagnetico.

La maggiore complessità di questo modello rispetto a quello di Ising emerge già dall'analisi dello stato fondamentale al variare dei parametri λ ed h; non è

difficile dimostrare che

$\lambda = h = 0$ lo stato fondamentale è tre volte degenere, le configurazioni che minimizzano l'energia sono $-\underline{1}$, $\underline{0}$ e $+\underline{1}$;

$h > 0 \; e \; h > -\lambda$ lo stato fondamentale è $+\underline{1}$;

$h < 0 \; e \; h < \lambda$ lo stato fondamentale è $-\underline{1}$;

$\lambda > 0 \; e \; \lambda < h < -\lambda$ lo stato fondamentale è $\underline{0}$;

questi risultati sono riassunti in Fig.3.1.

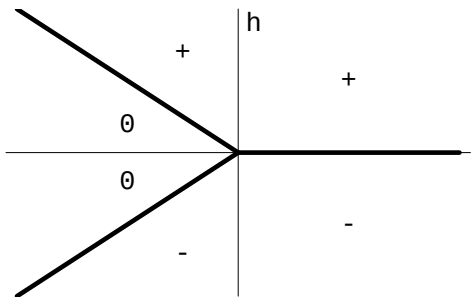


Fig.3.1 Stato fondamentale nel modello di Blume–Capel.

Il problema assolutamente non banale è capire cosa accade a temperatura strettamente positiva, o meglio capire come è fatto il diagramma di fase del sistema quando $T > 0$; ovviamente ci si aspetta che a bassa temperatura il diagramma di fase sia simile a quello a temperatura zero. La teoria di Pirogov–Sinai permette di dimostrare che a bassa temperatura esistono tre fasi distinte, che si differenziano per il valore della magnetizzazione, ed inoltre permette di calcolare l'andamento asintotico del diagramma nel limite $T \to 0$; tale andamento è riportato in Fig.3.2, si sottolinea che il punto triplo si sposta nella regione $\lambda > 0$ [SL].

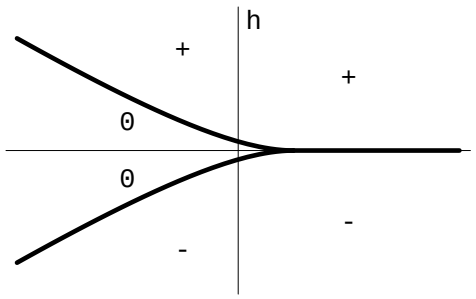


Fig.3.2 Diagramma di fase del modello di Blume–Capel a bassa temperatura.

Ogni linea del diagramma di fase separa due fasi distinte del sistema, su di essa vi è coesistenza tra le due fasi; il sistema passa da una fase all' altra tramite una transizione del primo ordine. È interessante osservare che per $\lambda > \lambda_t(T)$, ove $\lambda_t(T)$ è il potenziale chimico del punto triplo alla temperatura T, la transizione dalla fase a magnetizzazione negativa a quella a magnetizzazione positiva è diretta; viceversa per $\lambda < \lambda_t(T)$ il sistema per invertire il segno della magnetizzazione deve passare attraverso la fase con prevalenza di 0. Questo risultato è fisicamente sensato, infatti al crescere di λ risulta favorita la presenza di particelle.

Ogniqualvolta un sistema presenta transizioni di fase del primo ordine, è lecito chiedersi se esistono stati metastabili; nel caso del modello di Blume–Capel il problema è analogo a quello affrontato nel caso del modello di Ising. Si supponga, infatti, di preparare il sistema nella fase con magnetizzazione negativa e di sottoporlo all'azione di un campo magnetico esterno $h > 0$; evidentemente il sistema non si trova all'equilibrio stabile, che è caratterizzato da magnetizzazione nulla o positiva a seconda del valore del potenziale chimico λ. È lecito chiedersi, però, se la fase a magnetizzazione negativa presenta le caratteristiche di una fase metastabile.

Il problema è analogo a quello studiato nel caso del modello di Ising, ma ci si aspetta che il comportamento del sistema presenti delle peculiarità del tutto nuove; a livello microscopico non è sufficiente porsi il problema di come una goccia di spin $+1$ cresca all'interno di un mare di spin -1, ci si aspetta, invece, che anche il comportamento delle interfacce $0-$ e $0+$ rivesta un ruolo importante.

Nel caso $\lambda < 0$, la Fig.3.1 suggerisce che nel limite $T \to 0$ il sistema effettui l'escursione $-\underline{1} \to +\underline{1}$ attraversando lo stato $\underline{0}$; inoltre c'è da aspettarsi che il tutto avvenga con meccanismi analoghi a quelli visti per il modello di Ising: dapprima una goccia di 0 cresce all'interno del mare di -1, poi con lo stesso meccanismo una goccia di $+1$ cresce nel mare di 0. Il modello di Blume–Capel presenta in questa regione dello spazio dei parametri la novità dell'attraversamento di una terza fase durante la nucleazione della fase stabile; ma dal un punto di vista dei meccanismi elementari non emerge nulla di nuovo, infatti la crescita di una goccia di 0 nel mare di -1 e di una goccia di $+1$ nel mare di 0 viene descritta come la crescita di una goccia di $+1$ nel mare di -1 nel caso del modello di Ising. Anche nella regione $\lambda \gg J$ non ci si aspettano comportamenti non previsti: a grandi valori del potenziale chimico la presenza di lacune risulta fortemente inibita, pertanto ci si aspetta che il comportamento del sistema sia del tutto analogo a quello del modello di Ising.

Da quanto detto risulta che la regione dello spazio dei parametri che presenta delle novità è quella in cui λ è maggiore di 0, è piccolo ed è minore di h; è proprio in questa regione intermedia che bisogna capire in che modo si comportano le tre possibili interfacce $0+$, $0-$ e $+-$. In conclusione nel seguito si cercherà di chiarire l'evoluzione del modello di Blume–Capel, supponendo che all'istante iniziale si

trovi nello stato microscopico $-\underline{1}$ e che i parametri soddisfino alla condizione

$$0 < \lambda < h \ll J \ ; \tag{3.3}$$

si può assumere che J valga uno.

3.2 Dinamica di Metropolis per il modello di Blume–Capel.

Per studiare il problema posto nel paragrafo precedente è necessario definire una dinamica per il modello di Blume–Capel, la cosa viene fatta generalizzando la definizione di dinamica di Metropolis data nel caso del modello di Ising.

Considerate $\sigma, \eta \in \Omega$ si dice che si tratta di due configurazioni prime vicine se e solo se

$$\exists x \in \Lambda_N : \sigma(x) \neq \eta(x) \text{ ed inoltre } \sigma(y) = \eta(y) \ \forall y \in \Lambda_N \setminus \{x\} \ ; \tag{3.4}$$

il modo di scrivere la definizione differisce da quello usato nel caso del modello di Ising, perchè uno spin può essere modificato in due modi differenti. L'algoritmo di Metropolis viene definito nel modo seguente

(i) ad istanti discreti $t = 1, 2, 3, ...$ viene scelto a caso, con probabilità uniforme $\frac{1}{|\Lambda_N|}$, un sito $x \in \Omega$;

(ii) dette $\sigma^{(1)}$ e $\sigma^{(2)}$ le configurazioni prime vicine della configurazione attuale σ, che vengono ottenute modificando lo spin $\sigma(x)$, se ne sceglie una a caso, con probabilità uniforme $\frac{1}{2}$;

(iii) indicata con $\widetilde{\sigma}$ la configurazione scelta al punto precedente e posto $\Delta H(\sigma) = H(\widetilde{\sigma}) - H(\sigma)$, si prescrive che il sistema salta da σ a $\widetilde{\sigma}$ con probabilità

$$e^{-\beta[\Delta H(\sigma)]^+} \ ;$$

in definitiva si sta supponendo che l'evoluzione del sistema venga descritta da una catena di Markov con funzione di transizione

$$P(\sigma,\eta) = \begin{cases} \frac{1}{2|\Lambda_N|} e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]^+} & \sigma,\eta \text{ prime vicine} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} . \qquad (3.5)$$

Si prova che la dinamica appena definita è reversibile rispetto alla misura di Gibbs, pertanto si tratta di una dinamica di Glauber; la dimostrazione è analoga a quella vista nel caso del modello di Ising.

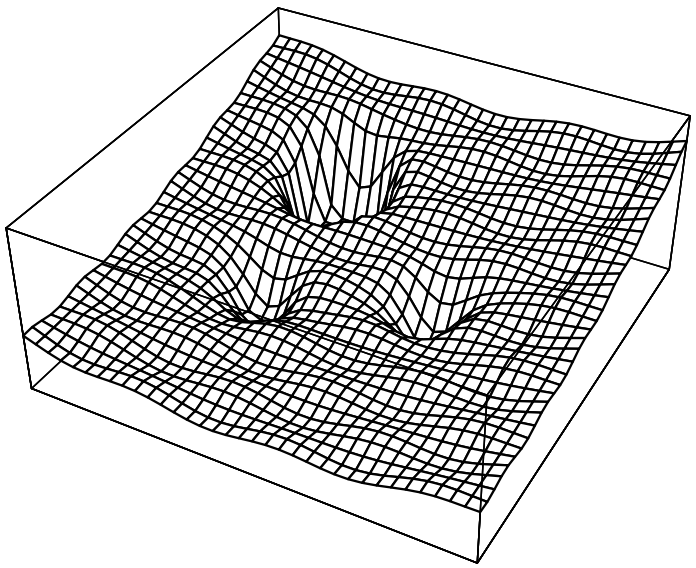


Fig.3.3 Panorama delle energie del modello di Blume–Capel.

Il moto del punto rappresentativo del sistema nello spazio delle configurazioni Ω, può essere descritto in modo intuitivo così come è stato fatto per il modello di Ising; ma in questo caso cambia la struttura del panorama delle energie: è presente una terza buca, si veda la Fig.3.3, che è centrata sulla configurazione $\underline{0}$. Chiarirne il ruolo, sarà uno dei problemi da affrontare per fare luce sul comportamento metastabile del modello di Blume–Capel.

3.3 Minimi locali dell'hamiltoniana $H(\sigma)$.

Si vogliono caratterizzare i minimi locali dell'hamiltoniana del modello di Blume–Capel, la ricerca verrà effettuata tra le configurazioni in cui gli spin 0 e gli spin $+1$ sono immersi in un mare di spin -1; queste configurazioni vengono dette ammissibili e costituiscono l'insieme $\Omega^* \subset \Omega$.

Presa $\sigma \in \Omega$, vengono definiti gli oggetti $c^+(\sigma)$, $c^-(\sigma)$ e $c^0(\sigma)$ come l'unione di tutti i quadrati unitari tracciati sul reticolo duale $\mathcal{Z}^2 + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ e centrati sui siti $x \in \Lambda_N$ tali che $\sigma(x)$ valga rispettivamente $+1$, -1 e 0. In analogia con quanto fatto per il modello di Ising si introducono gli $\star$–cluster $c_j^{\pm,o} \quad j = 1,2,...,k^{\pm,0}$ definiti come le componenti massimali rispettivamente di $c^+(\sigma)$, $c^-(\sigma)$ e $c^0(\sigma)$.

Indicati con $R(c_j^{\pm,o})$ gli inviluppi rettangolari degli $\star$–cluster $c_j^{\pm,o}$ e con $l_{j,i}^{\pm,o} \quad j = 1,2...,k^{\pm,0}$ *e* $i = 1,2$ le lunghezze dei loro lati, si dice che la configurazione σ è *ammissibile* se e solo se sono verificate le due seguenti condizioni

$$\begin{cases} 1) \max\limits_{i \in \{1,2\}} l_{j,i}^{+,o} \leq N-1 \ \ \forall j \in \{1,...,k^{+,0}\} \\ 2) \exists j' \in \{1,...,k_-\} : \ R(c_{j'}^-) = \Lambda_N \end{cases} . \tag{3.6}$$

Si osserva che se σ è ammissibile, allora il cluster di spin -1, il cui inviluppo rettangolare ricopre tutto il reticolo, è unico.

Detto Ω^* il sottoinsieme dello spazio Ω costituito da tutte le configurazioni ammissibili, considerata $\sigma \in \Omega^*$, considerati gli $\star$–cluster $c_j^{+,0}$, si denota con $\gamma_j^{+,0} \quad \forall j \in \{1,...,k^{+,0}\}$ la loro frontiera e si definisce la sua componente *interna* $\check{\gamma}_j^{+,0}$ nel modo seguente: sia s un segmento unitario del reticolo duale e sia $s \in \gamma_j^{+,0}$ (i contorni, come del resto tutte le curve tracciate sul reticolo duale, possono essere viste come insiemi di segmenti unitari), si dice che $s \in \check{\gamma}_j^{+,0}$ se e solo se tutti i cammini, che uniscono siti primi vicini di Λ_N e che partono dal sito adiacente ad s e non appartenente a $c_j^{+,0}$, giungono necessariamente su un sito di $c_j^{+,0}$ prima di

toccare un sito di $c_{j'}^{-}$. Si può, poi, definire il contorno esterno $\hat{\gamma}_j^{+,0}$ di $c_j^{+,0}$ come $\gamma_j^{+,0} \setminus \check{\gamma}_j^{+,0}$ e quindi scrivere

$$\gamma_j^{+,0} = \hat{\gamma}_j^{+,0} \cup \check{\gamma}_j^{+,0} \quad ; \tag{3.7}$$

si osserva che $\check{\gamma}_j^{+,0}$ può essere costituita da più di una componente connessa.

A questo punto si può procedere nel tentativo di individuare i minimi locali del'hamiltoniana fra le configurazioni amissibili; in primo luogo si può osservare che nei minimi locali non possono esservi interfacce $+-$. Per vederlo basta osservare che comunque vengano scelti gli altri tre spin primi vicini dello spin -1, è possibile costruire una configurazione con energia più bassa cambiando questo spin.

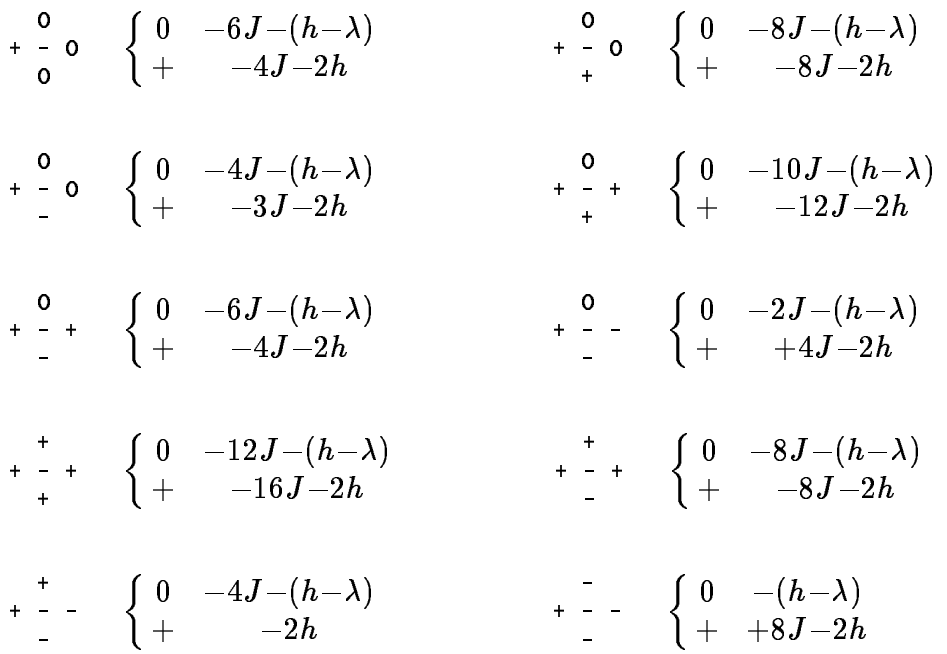


Fig.3.4 Modifica dello spin -1 in una interfaccia $+-$.

In Fig.3.4 viene esaminata la casistica completa, ma è chiaro che i casi dubbi sono quelli in cui lo spin -1 dell'interfaccia ha altri spin -1 come primi vicini. Infatti

calcolare la variazione di energia dovuta alla modifica di un solo spin, vuol dire tener presente due contributi: quello di volume, frutto dei termini dell'hamiltoniana in cui sono presenti il potenziale chimico ed il campo magnetico esterno, e quello dovuto alla variazione delle interfacce. Nel caso in esame il contributo di volume è sempre negativo, infatti

$$\begin{array}{ll} -1 \to 0 & -(h-\lambda) < 0 \\ -1 \to +1 & -2h < 0 \end{array} \quad ,$$

invece il contributo della modifica delle interfacce, per effetto del cambiamento dello spin -1, è positivo solo quando viene rotto un legame $--$

$$-- \to \begin{cases} -0 & +J \\ -+ & +4J \end{cases} \quad -+ \to \begin{cases} ++ & -4J \\ 0+ & -3J \end{cases} \quad -0 \to \begin{cases} +0 & 0 \\ 00 & -J \end{cases} \quad ;$$

è chiaro, quindi, che nel caso in esame l'energia può aumentare solo se ci sono legami $--$ che vengono rotti.

Si consideri una configurazione $\sigma \in \Omega^*$ in cui esiste un unico $\star$–cluster di spin 0 immerso in un mare di -1, cioè

$$\begin{cases} 1)\ \forall x \in \Lambda_N \ \ \sigma(x) \neq +1 \\ 2)\ \exists \text{ un cluster } c^0 \text{ di spin } 0 \\ 3)\ \forall x \in \Lambda_N : \ \sigma(x) = 0 \Rightarrow \ x \in c^0 \end{cases} ; \qquad (3.8)$$

l'ultima delle tre condizioni assicura l'unicità del cluster di 0. Indicato, secondo l'usuale notazione, con γ^0 la frontiera del cluster c^0, si ha

$$\sigma \text{ minimo locale di } H(\sigma) \iff \begin{cases} \gamma^0 = \hat{\gamma}^0 \text{ è un rettangolo i cui} \\ \\ \text{lati misurano almeno due} \end{cases} , \qquad (3.9)$$

cioè il cluster c^0 ha forma rettangolare ed è "pieno", ovvero al suo interno non vi sono spin diversi da 0.

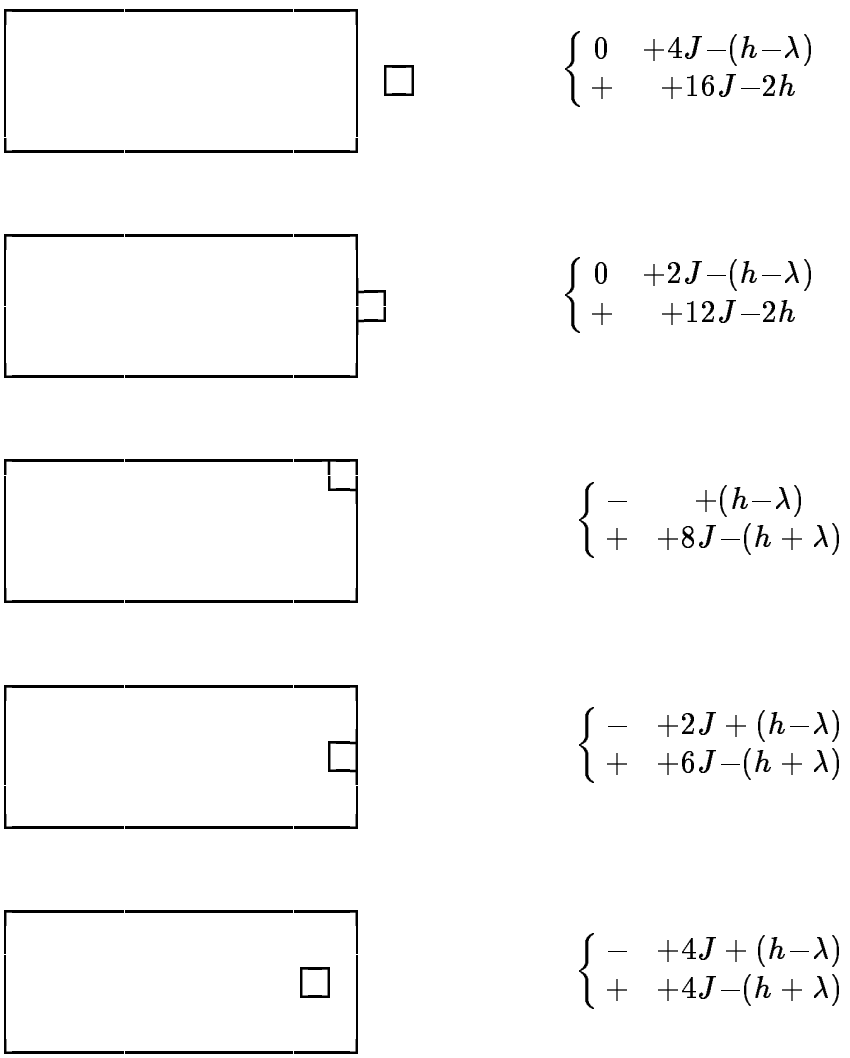
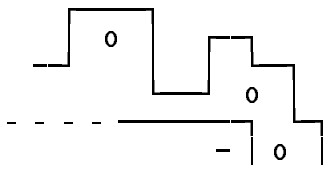


Fig.3.5 Un cluster rettangolare di spin 0 è minimo locale di $H(\sigma)$.

La prova dell'implicazione $\Leftarrow$ è in Fig.3.5, ove si esaminano tutte le configurazioni prime vicine di σ e si mostra che hanno tutte energia più elevata; in figura viene indicato con un quadrato unitario lo spin che viene modificato ed accanto viene riportata la relativa variazione di energia; si osserva che se uno dei due lati di c^0 fosse uguale ad uno, allora σ non sarebbe un minimo locale, infatti

$$\begin{cases} - & -2J+(h-\lambda) < 0 \\ + & 10J-(h+\lambda) \end{cases}$$

Si prova, ora, la validità dell'implicazione $\Rightarrow$: in primo luogo si osserva che $\check{\gamma}^0 = \{\emptyset\}$, cioè all'interno del cluster c^0 non vi possono essere spin -1; infatti se per assurdo quest'ultima condizione non fosse vera, allora esisterebbe almeno uno spin -1 con due spin 0 primi vicini. Infatti si consideri $\check{\gamma}^0$, se ne individui un tratto rettilineo e lo si percorra lungo un verso prefissato; il fatto che c^0 non possa avvolgersi attorno al toro Λ_N, permette di asserire che ad un certo punto $\check{\gamma}^0$ presenterà un angolo retto. I due segmenti unitari, costituenti questo angolo retto, separano uno stesso spin -1 da due diversi spin 0 di c^0;



modificando lo spin -1 appena determinato si può ottenere una configurazione ad energia più bassa, infatti si prova che l'energia può essere diminuita cambiando in modo opportuno il valore di uno spin -1 che abbia almeno due spin 0 primi vicini. Ciò consegue dalle prime tre situazioni analizzate in Fig.3.4 e dagli ulteriori due casi illustrati di seguito;

si deve quindi concludere che $\check{\gamma}^0 = \{\emptyset\}$.

Si prova, ora, che il contorno esterno $\hat{\gamma}^0$ del cluster c^0 è un rettangolo: infatti se per assurdo non lo fosse si potrebbe determinare, ragionando in modo analogo a prima, uno spin -1 con due spin 0 primi vicini, e pertanto la configurazione non sarebbe un minimo locale.

Da quanto detto in precedenza è evidente che all'interno del cluster di 0 non

vi possano essere spin -1, ma nulla vieta che vi siano spin $+1$. Si consideri $\sigma \in \Omega^*$ tale che: in σ vi è un unico cluster c^0 di spin 0 ed il suo contorno esterno è rettangolare, tutti gli spin $+1$ formano un unico cluster c^+ e questo è "contenuto" in c^0, cioè $\hat{\gamma}^+ = \check{\gamma}^0$; il significato di quanto appena detto è illustrato nella figura seguente.

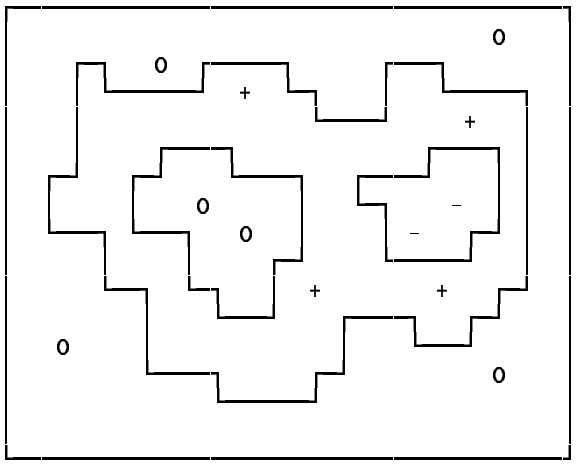


Fig.3.6

Si dimostra che

$$\sigma \text{ minimo locale di } H(\sigma) \iff \begin{cases} \gamma^+ = \hat{\gamma}^+ \text{ è un rettangolo i cui} \\ \\ \text{lati misurano almeno due} \end{cases} , \qquad (3.10)$$

cioè il cluster c^+ ha forma rettangolare ed è "pieno". Infatti all'interno del cluster c^+ non vi possono essere spin -1, perchè le interfacce $+-$ sono proibite in un minimo locale; non vi possone essere cluster di spin 0, perchè si può ottenere una configurazione ad energia più bassa trasformando in $+1$ uno spin 0 che tra i suoi primi vicini abbia almeno due spin $+1$ e nessuno spin -1 (si veda Fig.3.7). Si dimostra, poi, con ragionamenti analoghi a i precedenti che $\hat{\gamma}^+$ deve essere un rettangolo.

$$\begin{array}{ccc} & + & \\ 0 & 0 & + \\ & 0 & \end{array} \quad \begin{cases} - & 8J + (h - \lambda) \\ + & -(h + \lambda) \end{cases} \qquad \begin{array}{ccc} & + & \\ 0 & 0 & + \\ & + & \end{array} \quad \begin{cases} - & 10J + (h - \lambda) \\ + & -2J - (h + \lambda) \end{cases}$$

$$\begin{array}{ccc} & + & \\ + & 0 & + \\ & + & \end{array} \quad \begin{cases} - & 12J + (h - \lambda) \\ + & -4J - (h + \lambda) \end{cases}$$

Fig.3.7 Modifica di uno spin 0 con almeno due spin $+1$ primi vicini.

Si introduce, allora, l'insieme dei *birettangoli* $\Re$, costituito da tutte quelle configurazioni

$$R(L_1, L_2; M_1, M_2) \in \Omega^* \quad \text{con} \quad \begin{cases} M_1 \geq L_1 + 2, M_2 \geq L_2 + 2 & \text{se } L_1, L_2 \geq 2 \\ M_1, M_2 \geq 2 & \text{se } L_1 = L_2 = 0 \end{cases} ; \tag{3.11}$$

da quanto detto risulta che tutti i birettangoli sono minimi locali dell' hamiltoniana $H(\sigma)$.

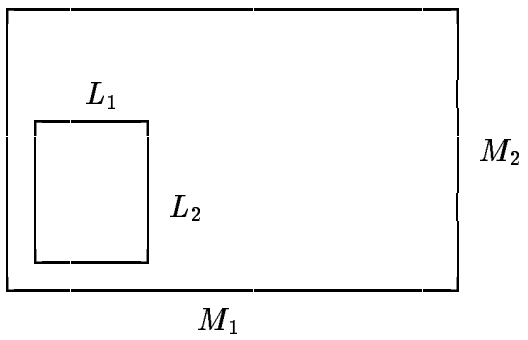


Fig.3.8 Esempio di birettangolo.

Ma i birettangoli non esauriscono tutti i possibili minimi locali, bisogna contemplare, infatti, la possibilità che nel mare di spin -1 vi siano più cluster di spin 0 e che all'interno di questi vi possa essere più di un cluster di spin $+1$. Non è difficile dimostare che il più generale minimo locale di $H(\sigma)$ è una configurazione

$\sigma \in \Omega^*$, in cui sono presenti k^0 cluster di spin 0, $c_1^0, ..., c_{k^0}^0$, tali che i relativi contorni esterni $\hat{\gamma}_1^0, ..., \hat{\gamma}_{k^0}^0$ sono rettangoli con lati maggiori o uguali a due, le curve $\hat{\gamma}_1^0, ..., \hat{\gamma}_{k^0}^0$ non hanno punti di intersezione e non esiste uno spin -1 il cui quadrato circoscritto abbia due lati in comune con due dei contorni $\hat{\gamma}_j^0$; tale condizione è analoga a quella usata nel caso del modello di Ising per definire i rettangoli non interagenti. Inoltre all'interno di ogni c_j^0 vi possono essere cluster di spin $+1$, che hanno le stesse caratteristiche dei cluster c_j^0. Il più generale dei minimi locali di $H(\sigma)$ con $\sigma \in \Omega^*$ è rappresentato in Fig.3.9.

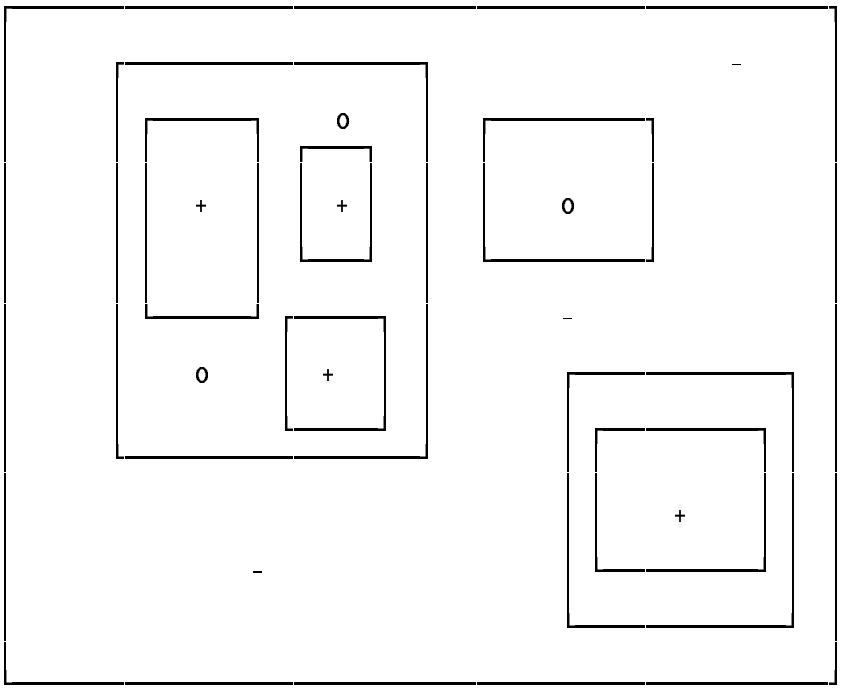


Fig.3.9 Il più generale minimo locale di $H(\sigma)$.

3.4 Energia dei minimi locali dell'hamiltoniana $H(\sigma)$.

Si vuole calcolare l'energia del generico birettangolo $R(L_1, L_2; M_1, M_2)$

rispetto alla configurazione $-\underline{1}$; per fare ciò si osserva che

$$H(R(0,0;M_1,M_2)) - H(-\underline{1}) = (2M_1 + 2M_2)J - M_1 M_2(h-\lambda) \ ; \qquad (3.12)$$

allora si può scrivere

$$H(R(L_1,L_2;M_1,M_2)) =$$

$$= [H(R(L_1,L_2;M_1,M_2)) - H(R(0,0;M_1,M_2))] + [H(R(0,0;M_1,M_2)) - H(-\underline{1})] =$$

$$= [(2L_1 + 2L_2)J - L_1 L_2(h+\lambda)] + [(2M_1 + 2M_2)J - M_1 M_2(h-\lambda)] \ ,$$

da cui

$$H(R(L_1,L_2;M_1,M_2)) - H(-\underline{1}) =$$

$$= (2M_1 + 2M_2)J + (2L_1 + 2L_2)J - M_1 M_2(h-\lambda) - L_1 L_2(h+\lambda) \ . \qquad (3.13)$$

La formula precedente può essere generalizzata per un generico minimo locale σ, in cui sono presenti i rettangoli di spin 0, $c_j^0 \ \ \forall j \in \{1,...,k^0\}$, ed all'interno di ognuno di questi vi sono i rettangoli di spin $+1$, $c_{j,i}^+ \ \ \forall j \in \{1,...,k^0\}$ e $\forall i \in \{1,...,k_j^+\}$; si ha

$$H(\sigma) - H(-\underline{1}) = \sum_{j=1}^{k^0} \Big\{ (2M_{1,j} + 2M_{2,j})J - M_{1,j}M_{2,j}(h-\lambda) + \\ + \sum_{i=1}^{k_j^+} [(2L_{1,j,i} + 2L_{2,j,i})J - L_{1,j,i}L_{2,j,i}(h+\lambda)] \Big\} \ , \qquad (3.14)$$

con ovvio significato dei simboli $M_{1,j}, M_{2,j}, L_{1,j,i}$ e $L_{2,j,i} \ \ \forall j \in \{1,...,k^0\}$ e $\forall i \in \{1,...,k_j^+\}$.

Un birettangolo di forma quadrata $Q(L,M) = R(L,L;M,M)$ con $M \geq L+2$ ha energia

$$e(L,M) := H(Q(L,M)) - H(-\underline{1}) = 4MJ + 4LJ - M^2(h-\lambda) - L^2(h+\lambda) \ ; \ (3.15)$$

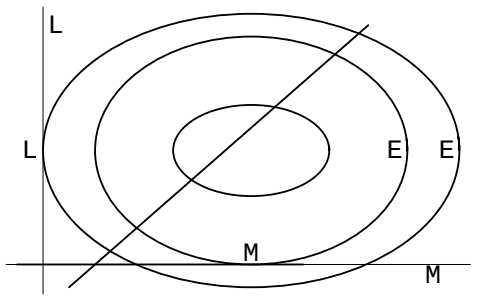


Fig.3.10 Curve di livello per il grafico dell'energia di un birettangolo.

il grafico di questa funzione è un paraboloide con concavità verso il basso. Il punto di massimo ha coordinate

$$\widetilde{L} = \frac{2J}{h+\lambda} \qquad \widetilde{M} = \frac{2J}{h-\lambda} \tag{3.16}$$

e il massimo valore dell'energia è

$$\widetilde{E} = \frac{8hJ^2}{(h-\lambda)(h+\lambda)} \ ; \tag{3.17}$$

si nota, infine, che $\widetilde{L} < \widetilde{M}$.

Il paraboloide è a sezione ellittica, fissato il valore $E < \widetilde{E}$ dell' energia, l'ellisse corrispondente ha semiassi

$$S_L(E) = \sqrt{\frac{\widetilde{E}-E}{h+\lambda}} \qquad S_M(E) = \sqrt{\frac{\widetilde{E}-E}{h-\lambda}} \ ; \tag{3.18}$$

i valori dell'energia, in corrispondenza dei quali l'ellisse è tangente ai piani $L = 0$ ed $M = 0$, sono rispettivamente

$$\bar{\bar{E}} = \frac{4J^2}{h-\lambda} \qquad \bar{E} = \frac{4J^2}{h+\lambda} \ , \tag{3.19}$$

la Fig.3.10 chiarisce la notazione. Si nota, infine che $\bar{E} < \bar{\bar{E}}$, ciò vuol dire che partendo dal picco $\widetilde{E}$ e scendendo in energia, si incontra prima l'ellisse tangente al piano $L = 0$ e poi quella tangente al piano $M = 0$.

Si supponga che il sistema sia in una configurazione $Q(L,M)$ con $L < \widetilde{L}$ e $M < \widetilde{M}$, è lecito ritenere che la goccia tenda a scomparire, infatti l'energia cresce sia all'aumentare di L che all'aumentare di M. Perchè sia energeticamente favorita la crescita del cluster di spin 0, deve accadere $M > \widetilde{M}$; ruolo analogo viene giocato da $\widetilde{L}$ per il cluster interno di spin $+1$. Supposto che $\frac{2J}{h+\lambda}$ e $\frac{2J}{h-\lambda}$ non sono numeri interi, si pone

$$\begin{aligned} L^* &= [\widetilde{L}] + 1 = \left[\frac{2J}{h+\lambda}\right] + 1 \\ M^* &= [\widetilde{M}] + 1 = \left[\frac{2J}{h-\lambda}\right] + 1 \end{aligned} \quad ; \tag{3.20}$$

si deve ritenere che tali oggetti siano le *dimensioni critiche* per la configurazione $Q(L,M)$. Se $M > M^*$ nel sistema verrà nucleata la fase a spin 0, avvenuto ciò se $L > L^*$ verrà nucleata la fase a spin $+1$; è evidente che i due processi non possono avvenire in ordine inverso, infatti le gocce di spin $+1$ possono "vivere" soltanto all'interno di gocce di spin 0.

Ma nulla vieta che la fase con maggioranza di spin $+1$ venga nucleata direttamente, ciò avviene se la goccia $Q(L,M)$ cresce muovendosi lungo la retta $M = L + 2$; in questo caso la fase stabile viene raggiunta attraverso una successione di *cornici* $\mathcal{C}(l,l) = R(l,l;l+2,l+2)$. Per cornice va inteso un particolare esempio di birettangolo, in cui il cluster interno di spin $+1$ è separato dal mare di meno da uno strato di spin 0 di larghezza unitaria,

$$\mathcal{C}(l_1,l_2) = R(l_1,l_2;l_1+2,l_2+2) \ . \tag{3.21}$$

Si considera la restrizione della funzione $e(L,M)$ alla retta $M = L + 2$, cioè si calcola l'energia delle cornici $\mathcal{C}(l,l)$

$$e_{\mathcal{C}}(l) := e(l,l+2) = -2hl^2 + l[8J - 4(h-\lambda)] + [8J - 4(h-\lambda)] \ ; \tag{3.22}$$

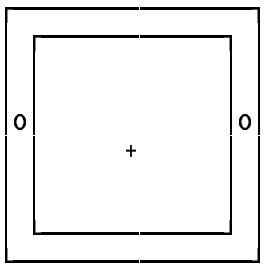


Fig.3.11 Esempio di cornice.

il grafico della funzione $e_{\mathcal{C}}(l)$ è una parabola con concavità rivolta verso il basso e coordinata del vertice data da

$$\widetilde{l} = \frac{2J - (h - \lambda)}{h} \quad . \tag{3.23}$$

Sembra, quindi, che una cornice $\mathcal{C}(l, l)$ tenda a crescere quando $l > l^*$, ove

$$l^* = [\widetilde{l}] + 1 = \left[\frac{2J - (h - \lambda)}{h}\right] + 1 \quad ; \tag{3.24}$$

pertanto l^* è la dimensione critica delle cornici.

Il sistema ha due strade per raggiungere la fase stabile, una delle quali prevede il passaggio attraverso la fase a spin 0; per stabilire quale sarà la via seguita dal sistema bisogna confrontare i picchi energetici che incontra lungo i due cammini; cioè si deve studiare la disequazione $e_{\mathcal{C}}(\widetilde{l}) \leq \bar{\bar{E}}$. Con un po' di algebra la precedente viene ridotta alla disequazione di terzo grado

$$-h^3 + \lambda h^2 + [(\lambda + 2J)^2 - 2J^2]h - \lambda(\lambda + 2J)^2 \leq 0 \quad , \tag{3.25}$$

che a meno di correzioni del secondo ordine in λ è soddisfatta quando $h \leq 2\lambda$. Allora per piccoli valori di h e λ si conclude

$h < 2\lambda$: $e_{\mathcal{C}}(\widetilde{l}) < \bar{\bar{E}}$, l'uscita del sistema dalla fase metastabile avviene mediante il meccanismo delle cornici;

$h > 2\lambda$: $e_{\mathcal{C}}(\widetilde{l}) > \bar{\bar{E}}$, durante la nucleazione della fase stabile il sistema passa per la fase con prevalenza di spin 0.

In conclusione dallo studio dell'energia dei minimi locali è emerso un fenomeno interessante: la retta $h = 2\lambda$, per piccoli valori di h e λ, separa due regioni dello spazio dei parametri in cui il comportamento del sistema è diverso. Il ruolo giocato da tale retta è assolutamente non prevedibile da un punto di vista statico, si tratta di un fenomeno essenzialmente dinamico; ciò può essere capito anche a livello intuitivo: nel panorama dell'energia è presente la buca centrata sulla configurazione $\underline{0}$, che staticamente non è rilevante, infatti nella distribuzione di Gibbs gli stati che hanno un peso maggiore sono quelli che si trovano nella buca centrata su $+\underline{1}$. Ben diversa è la situazione quando si studia dinamicamente la metastabilità dello stato $-\underline{1}$: nella migrazione da $-\underline{1}$ a $+\underline{1}$ il sistema può attraversare la buca centrata su $\underline{0}$, e trascorrere un certo tempo in essa, oppure giungere direttamente nel bacino d'attrazione di $+\underline{1}$. Dallo studio dell'energia dei minimi locali si può dedurre che ciò che discrimina tra questi due comportamenti è il rapporto $\frac{h}{\lambda}$, la prova rigorosa di ciò è uno dei problemi connessi con lo studio della metastabilità del modello di Blume–Capel.

3.5 Meccanismi di crescita e di contrazione.

Nel modello di Blume–Capel i meccanismi di crescita e di contrazione di un minimo locale sono, cosí come nel caso del modello di Ising, la formazione di una protuberanza e l'erosione d'angolo; ma in questo caso la casistica dei fenomeni che possono accadere è molto più ricca. Questi meccanismi sono illustrati per un birettangolo $R(L_1, L_2; M_1, M_2)$ in Fig.3.12 e, con riferimento ad essa, vengono di

seguito riportati i loro tempi tipici:

$$\begin{array}{ll} t_1 = e^{\beta[2J-(h+\lambda)]} & t_2 = e^{\beta[2J-(h-\lambda)]} \\ t_3 = e^{\beta(h+\lambda)(L-1)} & t_4 = e^{\beta(h-\lambda)(M-1)} \end{array} \quad , \tag{3.26}$$

ove L ed M sono le minime lunghezze dei lati rispettivamente del rettangolo interno e di quello esterno, cioè

$$L := \min\{L_1, L_2\} \qquad M := \min\{M_1, M_2\} \ . \tag{3.27}$$

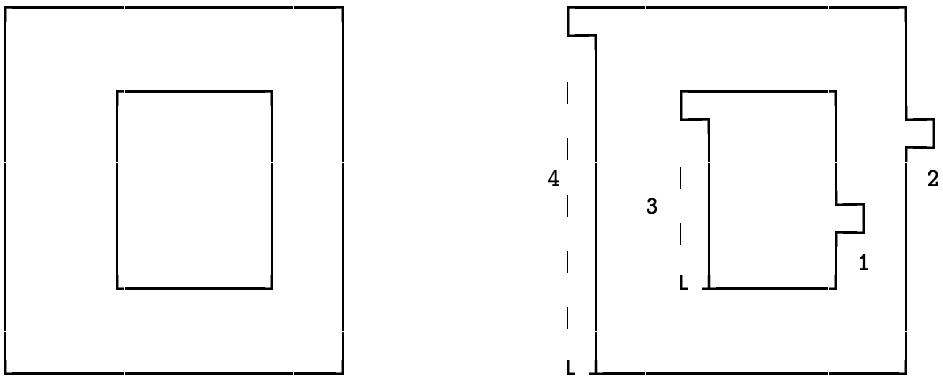


Fig.3.12 Erosione d'angolo e crescita di una protuberanza.

È importante confrontare i quattro tempi tipici precedentemente elencati: in primo luogo si osserva che la crescita di una protuberanza per un rettangolo interno è più rapida della crescita di una protuberanza all'esterno, infatti

$$2J - (h + \lambda) < 2J - (h - \lambda) \ \Rightarrow \ t_1 < t_2 \ ; \tag{3.28}$$

mentre nulla si può dire a priori per quel che riguarda i tempi di contrazione del rettangolo interno e di quello esterno, infatti può capitare $(h + \lambda)(L - 1) \gtrless (h - \lambda)(M - 1)$ a seconda dei valori di L ed M. Il confronto tra i tempi tipici di crescita

e di contrazione permette di introdurre in modo del tutto naturale le seguenti quattro dimensioni critiche

$$\begin{array}{ll} L^* = \left[\frac{2J}{h+\lambda}\right] + 1 & \widetilde{L}^* = \left[\frac{2J+2\lambda}{h+\lambda}\right] + 1 \\ M^* = \left[\frac{2J}{h-\lambda}\right] + 1 & \widetilde{M}^* = \left[\frac{2J-2\lambda}{h-\lambda}\right] + 1 \end{array} \quad ; \tag{3.29}$$

il cui significato è di seguito illustrato:

$L < L^* \Leftrightarrow (h+\lambda)(L-1) < 2J - (h+\lambda)$: la contrazione dell'interno è più rapida della sua crescita, cioè l' interno è sottocritico;

$L < \widetilde{L}^* \Leftrightarrow (h+\lambda)(L-1) < 2J - (h-\lambda)$: la contrazione dell'interno è più rapida della crescita dell'esterno;

$M < \widetilde{M}^* \Leftrightarrow (h-\lambda)(M-1) < 2J - (h+\lambda)$: la contrazione dell'esterno è più rapida della crescita dell'interno;

$M < M^* \Leftrightarrow (h-\lambda)(M-1) < 2J - (h-\lambda)$: la contrazione dell'esterno è più rapida della sua crescita, cioè l'esterno è sottocritico.

Si suppone di scegliere i parametri in modo tale che $\frac{2J}{h+\lambda}$, $\frac{2J+2\lambda}{h+\lambda}$, $\frac{2J}{h-\lambda}$, $\frac{2J-2\lambda}{h-\lambda}$ e $\frac{2J-(h-\lambda)}{h}$ non sono numeri interi, altrimenti non sarebbe possibile stabilire la sorte di alcuni minimi locali; ad esempio se $\frac{2J}{h+\lambda}$ fosse un numero intero, non si potrebbe dire se l'interno di un birettangolo con $L = \frac{2J}{h+\lambda}$ è sottocritico o supercritico. Si osserva, inoltre, che nella regione dello spazio dei parametri in cui si sta studiando il modello, L^* ed $\widetilde{L}^*$ possono differire al più di una unità.

È evidente che il comportamento di un generico birettangolo dipende dalla relazione che esiste tra le sue dimensioni e le lunghezze critiche appena introdotte; infatti sono queste relazioni che permetteranno di stabilire quali dei meccanismi è il più rapido e quindi qual è quello che prevale. Ma la situazione è decisamente

più complicata di quella che si incontra nel caso del modello di Ising; infatti in certe circostanze la tendenza del rettangolo esterno può essere in contrasto con quella dell'interno, ad esempio l' interno può crescere mentre l'esterno si contrae. Delle dimensioni critiche introdotte in precedenza quella poco utile è $\widetilde{L}^*$, infatti la crescita dell'esterno e la contrazione dell'interno possono avvenire indipendentemente, stabilire quale delle due sia più rapida è decisamente poco interessante.

Si analizzano, ora, tutti i possibili casi che si possono presentare e, per ognuno di essi, si cerca di stabilire in modo intuitivo qual è la sorte del birettangolo:

$L < L^*$ e $M < M^*$: sia l'interno che l'esterno sono sottocritici, il birettangolo non può far altro che scomparire;

$L < L^*$ e $M > M^*$: l'interno è sottocritico, mentre l' esterno è supercritico, il birettangolo è supercritico e tende alla configurazione $\underline{0}$;

$L > L^*$ e $M > M^*$: l'interno e l'esterno sono supercritici, ma l'interno cresce più in fretta dell'esterno, allora dopo che l'interno avrà raggiunto l'esterno, la cornice così ottenuta invaderà tutto il reticolo: il birettangolo è supercritico;

$L > L^*$ e $M < M^*$: l'interno tende a crescere, l' esterno a contrarsi, il comportamento del birettangolo dipenderà fortemente dalla condizione $M \gtrless \widetilde{M}^*$ che permette di stabilire quale delle due tendenze prevale; ma in entrambi i casi si raggiungerà una cornice caratterizzata da un cluster interno supercritico ed uno esterno sottocritico, quale sia la sorte di una tale configurazione potrà essere stabilito confrontando la dimensione del rettangolo interno con l^*.

La casistica è decisamente ricca, però l'unico caso che sembra difficile da analizzare è il quarto, per fare luce su questo è necessario stabilire dei risultati rigorosi sulla

criticità delle cornici; questo problema verrà affrontato nel prossimo capitolo.

È utile stabilire come siano ordinate le dimensioni critiche, precedentemente introdotte, nella regione dei parametri in cui si sta studiando il comportamento del modello. In modo del tutto banale si verifica che

$$L^* \leq \widetilde{L}^* \leq L^* + 1 \ ; \tag{3.30}$$

altre relazioni non possono essere stabilite senza precisare ulteriormente la regione dei parametri in cui si opera. Si dimostra che, fissato il rapporto $a = \frac{h}{\lambda} > 1$, se si suppone $\lambda \leq \frac{2J}{a^2+2a-1}$, allora si ha $\widetilde{L}^* \leq l^*$ e $l^* + 2 \leq \widetilde{M}^*$.

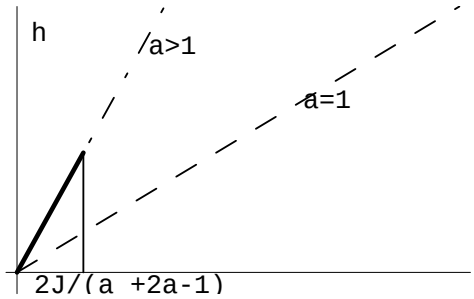


Fig.3.13 Regione dello spazio dei parametri in cui si studia il modello di Blume–Capel.

In conclusione si può definire la regione dello spazio dei parametri in cui si vuole studiare il comportamento del modello di Blume–Capel, richiedendo $\lambda \leq \frac{2J}{a^2+2a-1}$, ove $a = \frac{h}{\lambda} > 1$; con questa condizione ci si assicura

$$L^* \leq \widetilde{L}^* \leq l^* < l^* + 2 \leq \widetilde{M}^* \leq M^* \ ; \tag{3.31}$$

ciò permette maggiore chiarezza nell'esposizione dei risultati, senza uscire dalla regione dello spazio dei parametri interessante, cioè quella in cui λ ed h sono molto piccoli rispetto a J.

3.6 Crescita e contrazione delle cornici.

La crescita e la contrazione di una cornice si basa sui due meccanismi elementari di crescita di una protuberanza e di erosione di un angolo, ma descriverle in dettaglio non è immediato: bisogna capire come il rettangolo esterno ostacola la crescita di quello interno e come quello interno ostacola la contrazione di quello esterno.

Si consideri la cornice quadrata $\mathcal{C}(l,l)$, perchè la cornice possa contrarsi è evidente che il rettangolo interno deve ridursi; il meccanismo più conveniente è l'erosione d'angolo. Dapprima il sistema raggiunge la configurazione $S_{l,l}$, cioè perde $l-1$ spin 0 di uno dei quattro lati del rettangolo interno, incrementando l'energia della quantità $H(S_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) = (h+\lambda)(l-1)$; poi viene perso anche l'ultimo spin, il sistema giunge nella configurazione $R^s_{l,l}$ e l'energia diminuisce della quantità $H(R^s_{l,l}) - H(S_{l,l}) = -[2J-(h+\lambda)]$; il tutto è illustrato in Fig.3.14.

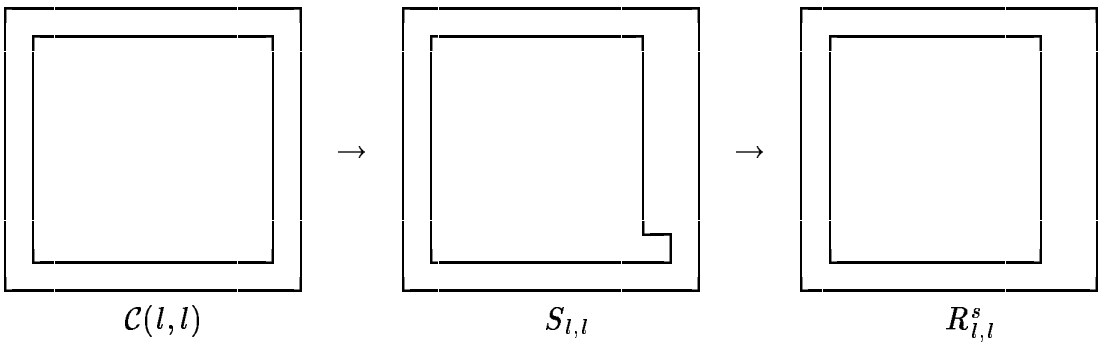


Fig.3.14 Prima fase della contrazione di una cornice.

Non è facile capire come si comporterà il sistema a partire da $R^s_{l,l}$, infatti potrà continuare a contrarsi il rettangolo interno, oppure potrà iniziare la contrazione dell'esterno, in quest'ultimo caso il sitema giungerebbe in una nuova cornice; in ogni caso è chiaro che perchè la contrazione abbia inizio il sistema deve superare

una barriera energetica di altezza $(h+\lambda)(l-1)$.

La crescita della cornice ha inizio con la crescita di una protuberanza su uno dei quattro lati del rettangolo esterno, il sistema giunge nella configurazione $G_{l,l}$ superando la barriera $H(G_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) = 2J - (h-\lambda)$; poi giunge nel nuovo minimo locale $R^g_{l,l} = R(l, l+1; l+3, l+2)$ e l'energia diminuisce della quantità $H(R^g_{l,l}) - H(G_{l,l}) = -(h-\lambda)(l+1)$; nella definizione di $R^g_{l,l}$ si è supposto che la crescita avvenga in direzione orizzontale, si tratta di un'assunzione che non limita la generalità della discussione.

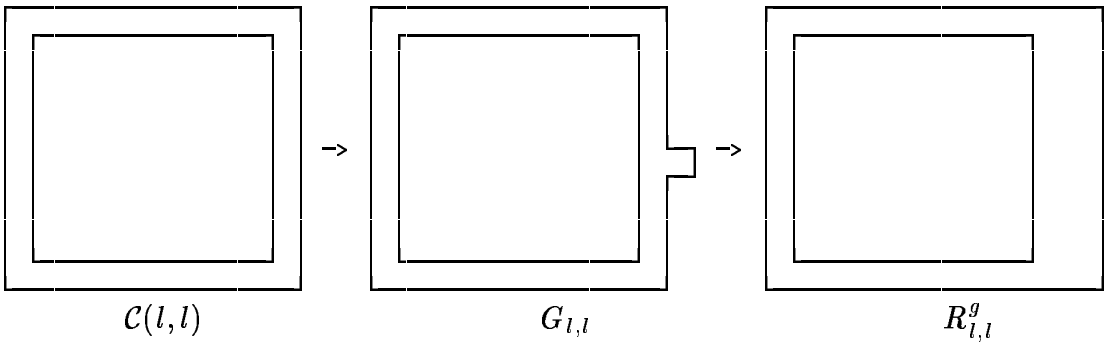


Fig.3.15 Prima fase della crescita di una cornice.

La crescita della cornice continuerà con la crescita del rettangolo interno, è stato già osservato, infatti, che la velocità di crescita dell'interno è maggiore di quella dell'esterno. La crescità di una protuberanza sul lato libero del rettangolo interno condurrà il sistema nella configurazione $S_{l+1,l}$ ed il costo energetico sarà $H(S_{l+1,l}) - H(R^g_{l,l}) = 2J - (h+\lambda)$; poi il sistema giungerà nella cornice $\mathcal{C}(l+1,l)$ con un guadagno energetico pari a $H(\mathcal{C}(l+1,l)) - H(S_{l+1,l}) = -(h+\lambda)(l-1)$.

Il panorama delle energie nei pressi di una cornice $\mathcal{C}(l,l)$ può essere schematicamente rappresentato come in Fig.3.16; per stabilire la sorte della cornice è importante capire come variano le altezze relative dei vari picchi al variare della

dimensione della cornice stessa. In Fig.3.16 non vengono riportate ulteriori selle a sinistra di $S_{l,l}$, perchè nel caso $l < l^*$ queste sono ad energia più bassa rispetto ad $S_{l,l}$.

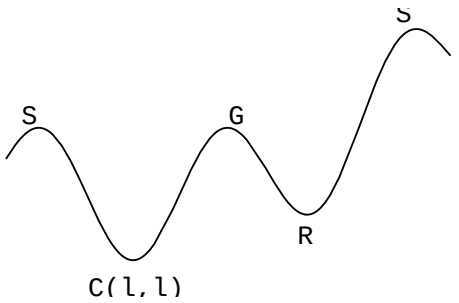


Fig.3.16 Panorama delle energie nei pressi di una cornice.

Si possono realizzare quattro casi a seconda del valore della lunghezza l del lato del quadrato interno,

$$
\begin{aligned}
l < \widetilde{L}^* &\Rightarrow H(S_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) < H(G_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) \\
\widetilde{L}^* < l < l^* &\Rightarrow \begin{cases} H(G_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) < H(S_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) \\ \\ H(S_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) < H(S_{l+1,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) \end{cases} \\
l^* < l,\ l+2 < \widetilde{M}^* &\Rightarrow \begin{cases} H(G_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) < H(S_{l+1,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) \\ \\ H(S_{l+1,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) < H(S_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) \end{cases} \\
l^* < l,\ \widetilde{M}^* < l+2 &\Rightarrow \begin{cases} H(G_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) < H(S_{l,l}) - H(\mathcal{C}(l,l)) \\ \\ H(S_{l+1,l}) - H(R^g_{l,l}) < H(G_{l,l}) - H(R^g_{l,l}) \end{cases}
\end{aligned}
\qquad (3.32)
$$

questi quattro casi sono illustrati in Fig.3.17.

L'analisi dei meccanismi di crescita e di contrazione di una cornice conduce a ritenere l^* la dimensione critica per le cornici, la stessa conclusione era stata raggiunta analizzando l'andamento della loro energia; a questo punto il problema

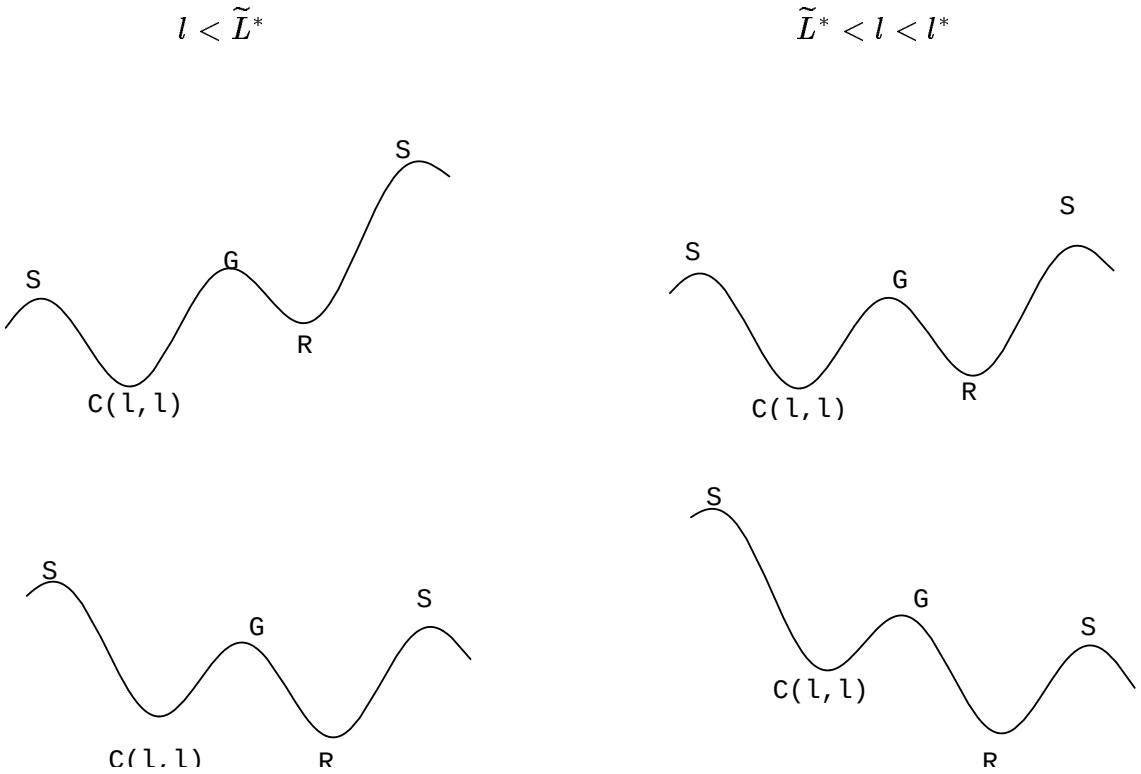


Fig.3.17 Panorama delle energie al variare delle dimensioni della cornice.

consiste nello stabilire risultati rigorosi sulla criticità delle cornici e dei minimi locali in generale.

Capitolo 4.

Risultati rigorosi sulla criticità delle cornici.

4.1 Teorema sulla criticità delle cornici.

Si consideri un minimo locale η dell'hamiltoniana $H(\sigma)$ con $\sigma \in \Omega^*$ e la catena di Markov σ_t, con t numero naturale, che descrive l'evoluzione del sistema con condizione iniziale $\sigma_0 = \eta$; ci si chiede se la configurazione $-\underline{1}$ viene visitata dal sistema prima o dopo la configurazione $+\underline{1}$; in altri termini bisogna valutare la probabilità $P_\eta(\tau_{-\underline{1}} < \tau_{+\underline{1}})$, ove con $\tau_{-\underline{1}}$ e $\tau_{+\underline{1}}$ sono stati indicati i tempi di primo arrivo rispettivamente in $-\underline{1}$ ed in $+\underline{1}$. Se si prova che a partire da η il sistema visita $-\underline{1}$ prima di $+\underline{1}$ con probabilità uno, allora si dice che η è un minimo locale *sottocritico*, altrimenti si dice che è *supercritico*.

Viene di seguito enunciato un teorema che chiarisce il problema della criticità per quei particolari minimi locali che sono stati chiamati *cornici*:

Teorema 4.1
Si consideri la configurazione $\mathcal{C}(l_1,l_2)$, si ponga $l=\min\{l_1,l_2\}$ e $m=\max\{l_1,l_2\}$, allora preso $\varepsilon>0$ si ha

$$l<l^* \text{ e } m<m^*(l) \Rightarrow \begin{cases} \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}(l_1,l_2)}(\tau_{-\underline{1}}<\tau_{+\underline{1}})=1 \\ \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}(l_1,l_2)}(T_-^s(\varepsilon)<\tau_{-\underline{1}}<T_+^s(\varepsilon))=1 \end{cases} ,$$

avendo posto

$$T_\pm^s(\varepsilon)=\begin{cases} e^{\beta(h-\lambda)(l+1)\pm\beta\varepsilon} & l<[\frac{h}{\lambda}]+1 \\ e^{\beta(h+\lambda)(l-1)\pm\beta\varepsilon} & l\geq[\frac{h}{\lambda}]+1 \end{cases}$$

e

$$m^*(l)=\left[\frac{2h}{h-\lambda}\frac{2J-(h-\lambda)}{h}-\frac{h+\lambda}{h-\lambda}l\right]+1 \ .$$

Inoltre

$$l<l^* \text{ e } \widetilde{M}^*-2>m\geq m^*(l) \Rightarrow \begin{cases} \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}(l_1,l_2)}(\tau_{+\underline{1}}<\tau_{-\underline{1}})=1 \\ \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}(l_1,l_2)}(T_-^{g,1}(\varepsilon)<\tau_{+\underline{1}}<T_+^{g,1}(\varepsilon))=1 \end{cases}$$

avendo posto

$$T_\pm^{g,1}(\varepsilon)=e^{\beta\{[2J-(h-\lambda)]-(h-\lambda)(m+1)+[2J-(h+\lambda)]\}\pm\beta\varepsilon\}} \ .$$

Infine

$$l\geq l^* \Rightarrow \begin{cases} \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}(l_1,l_2)}(\tau_{+\underline{1}}<\tau_{-\underline{1}})=1 \\ \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}(l_1,l_2)}(T_-^{g,2}(\varepsilon)<\tau_{-\underline{1}}<T_+^{g,2}(\varepsilon))=1 \end{cases} ,$$

avendo posto

$$T_\pm^{g,2}(\varepsilon)=\begin{cases} e^{\beta\{[2J-(h-\lambda)]-(h-\lambda)(m+1)+[2J-(h+\lambda)]\}\pm\beta\varepsilon\}} & l+2<\widetilde{M}^* \\ e^{\beta[2J-(h-\lambda)]\pm\beta\varepsilon} & l+2\geq\widetilde{M}^* \end{cases}$$

In sostanza il teorema permette di stabilire in modo rigoroso che l^* gioca il ruolo di dimensione critica per le cornici nel limite $\beta\to\infty$. In altri termini considerata la configurazione $\mathcal{C}(l_1,l_2)$ con $l=\min\{l_1,l_2\}$ e $m=\max\{l_1,l_2\}$, il teorema assicura che nel limite $\beta\to\infty$ tale cornice è sottocritica quando $m<l^*$,

viceversa è supercritica se $l \geq l^*$. Emerge un fatto nuovo: per stabilire se una cornice è sottocritica non è sufficiente guardare il più piccolo dei suoi lati; perchè una cornice sia sottocritica entrambi i lati devono essere sufficientemente corti.

Il primo passo nella dimostrazione del teorema consiste nella definizione del *bacino d'attrazione* di un generico minimo locale η: si vogliono individuare tutte quelle configurazioni a partire dalle quali, scendendo in energia ad ogni singolo cambiamento di spin, si può giungere nel solo minimo locale η. Si definisce *sequenza standard* una sequenza di configurazioni di Ω

$$S = \{\sigma_0 \sigma_1 \sigma_2 .....\sigma_T\} \text{ con } T \text{ numero naturale}$$

tale che siano soddisfatte le tre seguenti proprietà

$$\begin{cases} H(\sigma_i) > H(\sigma_{i+1}) & \forall i \in \{0,1,...,T-1\} \\ \sigma_i \text{ prima vicina di } \sigma_{i+1} & \forall i \in \{0,1,...,T-1\} \\ \sigma_T \text{ minimo locale} \end{cases} ; \tag{4.1}$$

si pone, inoltre,

$$S\sigma_0 = \sigma_T \ . \tag{4.2}$$

Si osserva che una sequenza standard converge necessariamente in un minimo locale in un tempo minore o al più uguale a

$$\mathcal{T} = \frac{\max_{\sigma \in \Omega} H(\sigma) - \min_{\sigma \in \Omega} H(\sigma)}{h - \lambda} \ ; \tag{4.3}$$

infatti $h - \lambda$ rappresenta il "quanto di energia", cioè è la minima variazione di energia che si può realizzare cambiando il valore di un solo spin.

Si può quindi definire il *bacino d'attrazione stretto* del minimo locale η

$$B(\eta) := \{\sigma \in \Omega : \ \forall \text{sequenza standard } S \ S\sigma = \eta\} \ , \tag{4.4}$$

inoltre si definisce il bacino d'attrazione *largo* di η

$$\hat{B}(\eta) := \{\sigma \in \Omega : \ \exists \text{una sequenza standard } S : \ S\sigma = \eta\} \ ; \tag{4.5}$$

nel seguito con la locuzione bacino d'attrazione di un minimo locale si farà riferimento a quello stretto. Si introduce la frontiera del bacino d'attrazione di η

$$\partial B(\eta) := \{\sigma \in \Omega : \ \sigma \notin B(\eta) \text{ e } \exists \text{ una sua prima vicina } \sigma' \in B(\eta)\} \ , \qquad (4.6)$$

e si prova la validità delle seguenti tre proprietà

$$\begin{aligned} &1) B(\eta) \cap B(\eta') = \{\emptyset\} \\ &2) B(\eta) \subset \hat{B}(\eta) \qquad\qquad , \\ &3) \partial B(\eta) \subset \hat{B}(\eta) \end{aligned} \qquad (4.7)$$

ove η ed η' sono generici minimi locali di $H(\sigma)$.

Le prime due delle (4.7) sono del tutto ovvie, segue la prova della terza: sia η un minimo locale e sia $\sigma \in \partial B(\eta)$, esiste ξ prima vicina di σ tale che $\xi \in B(\eta)$. Si ha $H(\xi) < H(\sigma)$, infatti se per assurdo fosse vero il contrario si potrebbe costruire, sfruttando il fatto che $\sigma \notin B(\eta)$, una sequenza standard che ha configurzione iniziale ξ e configurazione finale un minimo locale diverso da η. Allora ξ non appartiene a $B(\eta)$ e ciò è assurdo. Poichè $H(\xi) < H(\sigma)$ è possibile costruire una sequenza standard che parte da σ e giunge in η, pertanto $\sigma \in \hat{B}(\eta)$.

Si osserva che nella dimostrazione precedente si è implicitamente supposto che due configurazioni prime vicine non possano avere la stessa energia, questo è vero nella regione dello spazio dei parametri in cui si sta studiando il comportamento del modello di Blume–Capel. Infatti cambiando il valore di un solo spin la variazione di energia dovuta al termine di interazione può anche essere zero; ma il contributo dovuto ai termini di volume può valere $\pm(h + \lambda)$, $\pm(h - \lambda)$ oppure $\pm 2h$; nessuno di questi si annulla nella regione dello spazio dei parametri definita dalla (3.3).

4.2 Minimo dell'energia sulla frontiera del bacino d'attrazione di una cornice nel caso $l < \widetilde{L}^*$.

Si consideri una cornice $\mathcal{C} = \mathcal{C}(l_1, l_2)$ con $l = \min\{l_1, l_2\} < \widetilde{L}^*$, si indichi con $B = B(\mathcal{C}(l_1, l_2))$ il suo bacino d'attrazione stretto e con ∂B la sua frontiera. Supposto che all'istante iniziale il sistema sia nella configurazione $\mathcal{C}(l_1, l_2)$, perchè questa cornice possa crescere o contrarsi, il sistema deve uscire dal bacino B attraversandone la frontiera ∂B; è quindi evidente che il primo problema da affrontare è il calcolo del minimo di $H(\sigma)$ sulla frontiera ∂B, in modo da individuare la strada più conveniente, a disposizione del sistema, per fuoriuscire dal bacino B.

Si considera la configurazione $\mathcal{P}_1$, che si ottiene a partire da $\mathcal{C}(l_1, l_2)$ trasformando $l - 1$ spin $+1$ di uno dei due lati più piccoli del rettangolo interno in 0, si veda la Fig.4.1; si prova che questa configurazione rappresenta il punto di minimo dell'hamiltoniana sulla frontiera del bacino d'attrazione B, cioè

$$\min_{\sigma \in \partial B} H(\sigma) = H(\mathcal{P}_1) \ . \tag{4.8}$$

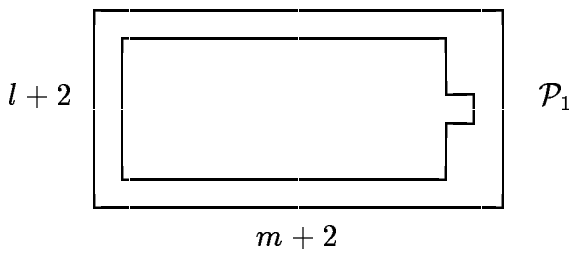


Fig.4.1 Minimo dell'energia su ∂B.

Per provare la precedente affermazione sembrerebbe necessario caratterizzare in modo dettagliato le configurazioni che appartengono a ∂B, in modo da poter poi determinare qual è quella ad energia minima; in realtà ciò non è vero. Si consideri

infatti una generica $\sigma \in \partial B$, a partire da essa è possibile costruire una sequenza standard che giunge in $\mathcal{C}$, allora esaminando tutti i cammini che partono dal fondo del bacino d'attrazione, cioè da $\mathcal{C}$, e che sono crescenti in energia vengono passate in rassegna tutte le configurazioni della frontiera di B; per *cammino* si intende una sequenza di configurazioni di Ω tali che due configurazioni successive siano prime vicine.

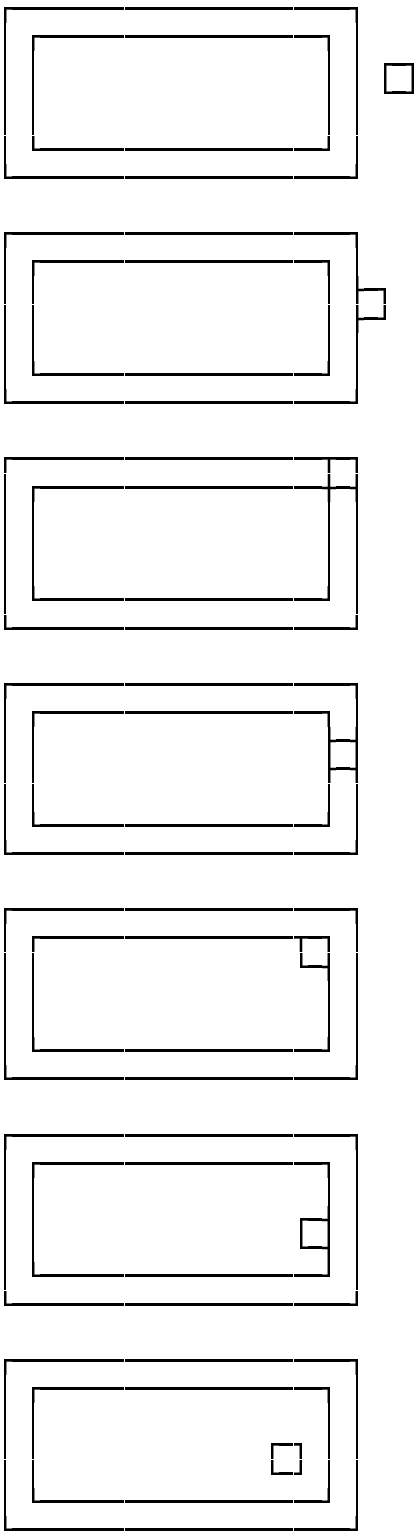
Nella Fig.4.2 vengono analizzati tutti i possibili primi passi dei cammini suddetti; ognuno di questi viene individuato con una coppia di numeri naturali, il generico passo è (i,j), in figura viene indicato con un quadrato unitario lo spin modificato e al lato vengono riportate le relative variazioni di energia.

Si indicano con $\mathcal{C}_{ij}^1$ le configurazioni che vengono raggiunte dopo il primo passo (i,j), è ovvio che si tratta di elementi dell'insieme $B \cup \partial B$. Si osserva che $\mathcal{C}_{22}^1 \in \partial B$, infatti esiste una sua configurazione prima vicina, $\mathcal{C}$, che appartiene al bacino B, inoltre esiste una sequenza standard S tale che $S\mathcal{C}_{22}^1 = B(l_1, l_2; l_1+3, l_2+2)$, avendo supposto, senza perdita di generalità, che $l = l_1$; allora a partire dal fondo del bacino la frontiera può essere raggiunta superando la barriera energetica ΔH_{22}. Si osserva ora che

$$\Delta H_{ij} > \Delta H_{22} \quad \forall (i,j) \notin \{(5,1),(3,2),(2,2)\} \quad , \tag{4.9}$$

pertanto nella ricerca del minimo su ∂B vanno analizzati tutti i cammini che hanno come primo passo $(5,1)$ oppure $(3,2)$, tutti gli altri, infatti, condurranno ad una configurazione di frontiera la cui energia è strettamente maggiore di quella di $\mathcal{C}_{22}^1$.

A partire dalle configurazioni $\mathcal{C}_{32}^1$ e $\mathcal{C}_{51}^1$ i cammini possono proseguire seguendo una delle strade illustrate in Fig.4.2, ma si può anche verificare la nuova situazione illustrata in Fig.4.3; ragionando come in precedenza si deduce che anche questo caso è non interessante, infatti se il secondo passo di uno dei cammini considerati



$$\begin{cases} + & \Delta H_{11} = 16J - 2h \\ 0 & \Delta H_{12} = 4J - (h - \lambda) \end{cases}$$

$$\begin{cases} + & \Delta H_{21} = 12J - 2h \\ 0 & \Delta H_{22} = 2J - (h - \lambda) \end{cases}$$

$$\begin{cases} + & \Delta H_{31} = 8J - (h + \lambda) \\ - & \Delta H_{32} = (h - \lambda) \end{cases}$$

$$\begin{cases} + & \Delta H_{41} = 4J - (h + \lambda) \\ - & \Delta H_{42} = 4J + (h - \lambda) \end{cases}$$

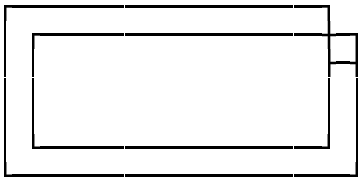
$$\begin{cases} 0 & \Delta H_{51} = +(h + \lambda) \\ - & \Delta H_{52} = 8J + 2h \end{cases}$$

$$\begin{cases} 0 & \Delta H_{61} = 2J + (h + \lambda) \\ - & \Delta H_{62} = 12J + 2h \end{cases}$$

$$\begin{cases} 0 & \Delta H_{71} = 4J + (h + \lambda) \\ - & \Delta H_{72} = 16J + 2h \end{cases}$$

Fig.4.2 Primo passo dei cammini (i, j).

fosse $(8,j)$ con $j = 1,2$, allora lo stesso cammino condurrebbe ad una configurazione di frontiera ad energia più elevata di quella di $\mathcal{C}_{22}^1$. In conclusione i cammini da analizzare sono quelli in cui i singoli passi sone di tipo $(3,2)$ oppure di tipo $(5,1)$.



$$\begin{cases} + & \Delta H_{81} = 6J - (h+\lambda) \\ - & \Delta H_{82} = 2J + (h - \lambda) \end{cases}$$

Fig.4.3 Nuove situazioni che si possono presentare dopo il primo passo.

Si consideri $\sigma \in \Omega^*$ in cui vi è il solo cluster c^0 di spin 0 ed al suo interno vi è l'unico cluster c^+ di spin $+1$ presente in σ; con la solita notazione si può scrivere $\check{\gamma}^0 = \hat{\gamma}^+$. Condizione necessaria perchè una siffatta configurazione appartenga a B è che siano soddisfatte le seguenti quattro condizioni:

1) il rettangolo R^0 circoscritto al cluster c^0 deve coincidere con il rettangolo $(l_1+2) \times (l_2+2)$ in cui sono racchiusi gli spin 0 della cornice $\mathcal{C}$;
2) l'intersezione tra il contorno del cluster c^0 ed ognuno dei quattro lati del rettangolo ad esso circoscritto deve misurare almeno due unità;
3) il rettangolo R^+ circoscritto al cluster c^+ deve coincidere con il rettangolo $l_1 \times l_2$ in cui sono racchiusi gli spin $+1$ della cornice $\mathcal{C}$;
4) l'intersezione tra il contorno del cluster c^+ ed ognuno dei quattro lati del rettangolo ad esso circoscritto deve misurare almeno due unità.

In primo luogo si prova la necessità della condizione (1) affinchè $\sigma \in B$: sia R^0 diverso dal rettangolo $(l_1+2)\times(l_2+2)$ e il cluster c^+ sia un rettangolo, allora è

possibile determinare una sequenza standard che conduce alla configurazione in cui tutti gli spin associati ai siti interni a R^0 valgono 0. Infatti se c^0 non ha contorno rettangolare esiste almeno uno spin -1 interno ad R^0 con due spin 0 primi vicini; trasformando questo spin -1 in 0 l'energia diminuisce. Questo argomento può essere iterato fino a quando tutti gli spin -1 interni al rettangolo R^0 vengono trasformati in 0; pertanto scendendo in energia, cambiando uno spin alla volta, viene raggiunto un minimo locale diverso da $\mathcal{C}$; ciò implica che σ non appartiene al bacino d'attrazione B.

Per provare la necessità della condizione (2) si suppone che la (1) sia soddisfatta e che l'intersezione tra il contorno di c^0 ed un lato di R^0 misuri una unità (Fig.4.4); allora esiste uno spin 0 del cluster c^0 con tre spin -1 primi vicini e tale che trasformandolo in -1 il rettangolo circoscritto al nuovo cluster di spin 0 non coincide con il rettangolo $(l_1+2)\times(l_2+2)$. Trasformando in -1 lo spin 0 individuato in precedenza l'energia diminuisce e si ottiene una configurazione che non è in B; allora è possibile determinare una sequenza standard con punto iniziale σ e punto finale un minimo locale diverso da $\mathcal{C}$; si può pertanto concludere che se la (2) non è soddisfatta, allora σ non appartiene al bacino B.

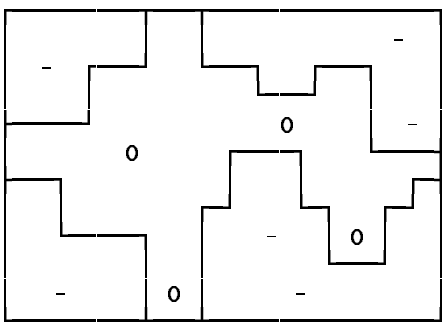


Fig.4.4 Necessità della condizione (2) perchè $\sigma \in B$.

Tenendo presente le condizioni necessarie per l'appartenenza di una configurazione al bacino d'attrazione dell cornice $\mathcal{C}$, risulta evidente che il cammino più rapido, cioè che si svolge nel minor numero di passi, per giungere sulla frontiera ∂B, partendo da $\mathcal{C}$ e sfruttando solo il meccanismo $(5,1)$, consiste nel trasformare $l-1$ spin $+1$ di uno dei due lati più piccoli del rettangolo interno in 0. Pertanto l'elemento di ∂B a più bassa energia che può essere raggiunto con il solo meccanismo $(5,1)$ è la configurazione $\mathcal{P}_1$.

Il meccanismo $(3,2)$ non permette, da solo, di giungere sulla frontiera ∂B, infatti dopo aver trasformato in -1 i quattro spin 0 che si trovano agli angoli del rettangolo $(l_1+2)\times(l_2+2)$, il cammino può proseguire solo sfruttando meccanismi alternativi.

Un cammino costituito da passi di tipo $(3,2)$ misti a passi di tipo $(5,1)$ non può condurre ad una configurazione di frontiera che abbia energia più bassa di $\mathcal{P}_1$, infatti un cammino siffatto deve preveder almeno l passi di tipo $(5,1)$; pertanto l'energia della configurazione di frontiera raggiunta è maggiore dell'energia di $\mathcal{P}_1$, che viene raggiunta con un cammino costituito da $l-1$ passi di tipo $(5,1)$.

In conclusione per determinare la configurazione appartenente alla frontiera del bacino d'attrazione di $\mathcal{C}$ che ha energia minima, bisogna confrontare $H(\mathcal{P}_1)$ con $H(\mathcal{C}_{22}^1)$; tenendo presente che $l < \widetilde{L}^*$, $H(\mathcal{P}_1) - H(\mathcal{C}) = (h+\lambda)(l-1)$ e $H(\mathcal{C}_{22}^1) = 2J-(h-\lambda)$ si ha la (4.8).

Nel caso del modello di Ising è stato enunciato e dimostrato il lemma di reversibilità, esso resta valido anche nel caso del modello di Blume–Capel, perchè si sta facendo uso di una dinamica di Glauber, cioè di una dinamica reversibile rispetto alla misura di Gibbs. Questo lemma può essere sfruttato, assieme alla (4.8), per stimare dal basso il tempo di primo arrivo sulla frontiera di B; con

ragionamenti analoghi a quelli illustrati nel caso del modello di Ising si prova che per ogni $\varepsilon > 0$

$$\lim_{\beta \to \infty} P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial B} > e^{\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\varepsilon}) = 1 \quad , \tag{4.10}$$

ove $\tau_{\partial B}$ è il tempo di primo arrivo in ∂B.

4.3 Stima dall'alto sul tempo $\tau_{\partial B}$.

Nel paragrafo precedente si è sfruttatta la reversibilità dell'algoritmo di Metropolis per mostrare che il sistema, partendo da $\mathcal{C}$, giunge sulla sua frontiera in un tempo stimato dal basso da $e^{(h+\lambda)(l-1)}$; ora si vuole sfruttare la ricorrenza per stimare dall'alto, con la stessa quantità, il tempo $\tau_{\partial B}$; cioè si vuole provare che preso $\varepsilon > 0$ si ha

$$\lim_{\beta \to \infty} P_{\sigma}(\tau_{\partial B} < e^{\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon}) = 1 \quad , \tag{4.11}$$

ove σ è una qualsiasi configurazione di B.

In primo luogo si determina un evento d'uscita $\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}$, con $\sigma \in B$ e $\mathcal{T}$ definito dalla (4.3), che soddisfa alle due seguenti proprietà:

1) se si verifica l'evento $\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}$, allora esiste $T_0 \leq 2\mathcal{T}$ tale che

$$\sigma_{T_0} \in \partial B \quad ,$$

avendo supposto $\sigma_0 = \sigma$, e l'evento viene considerato concluso in T_0;

2) vale la seguente stima dal basso sulla probabilità dell'evento $\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}$, preso $\varepsilon > 0$ se β è sufficientemente grande si ha:

$$\inf_{\sigma \in B} P(\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}) \geq e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\varepsilon} \quad . \tag{4.12}$$

Per costruire l'evento $\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}$ si considera una qualsiasi configurazione $\sigma \in B$ e si osserva che esiste una sequenza strettamente decrescente in energia

$$\eta_0 \ \eta_1 \ \ldots \ \eta_{T_1}$$

tale che $\eta_0 = \sigma$, $\eta_{T_1} = \mathcal{C}$ e T_1 è un numero naturale minore di $\mathcal{T}$ indipendente da β, ma dipendente dalla configurazione iniziale σ. Per quanto detto nel paragrafo pecedente si può determinare una sequenza strettamente crescente in energia

$$\eta'_0 \ \eta'_1 \ \ldots \ \eta'_{T_2}$$

tale che $\eta'_0 = \mathcal{C}$, $\eta'_{T_2} = \mathcal{P}_1$ e T_2 è un numero naturale minore di $\mathcal{T}$ ed indipendente sia da β che dalla configurazione iniziale σ.

Si definisce, quindi, l'evento $\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}$ come la singola traiettoria

$$\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}} := \{\sigma \ \eta_1 \ \ldots \ \eta_{T_1} \ \eta'_1 \ \ldots \ \eta'_{T_2}\} \ ; \tag{4.13}$$

la condizione (1) è soddisfatta in modo ovvio, infatti $T_1 + T_2 \leq 2\mathcal{T}$. Si calcola poi la probabilità associata a tale evento:

$$\begin{aligned} P(\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}) &= \left(\frac{1}{2|\Lambda_N|}\frac{1}{2|\Lambda_N|}\cdots\frac{1}{2|\Lambda_N|}\right)\times \\ &\times\left(\frac{1}{2|\Lambda_N|}e^{-\beta[H(\eta'_1)-H(\eta_{T_1})]}\cdots\frac{1}{2|\Lambda_N|}e^{-\beta[H(\eta'_{T_2})-H(\eta_{T_2-1})]}\right) = \\ &= \left(\frac{1}{2|\Lambda_N|}\right)^{T_1+T_2} e^{-\beta[H(\eta'_{T_2})-H(\eta_{T_1})]} \ \Rightarrow \\ &\Rightarrow P(\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}) = \left(\frac{1}{2|\Lambda_N|}\right)^{T_1+T_2} e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)} \ ; \end{aligned}$$

preso $\varepsilon > 0$ se si prende β sufficientemente grande si ha

$$P(\mathcal{E}_{\sigma,\mathcal{T}}) = \left(\frac{1}{2|\Lambda_N|}\right)^{T_1+T_2} e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)} \geq e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\varepsilon} \ ; \tag{4.14}$$

da questa si ha immediatamente che la (4.12) è verificata.

Si considera l'intervallo $[0,T(\varepsilon)]$ con $T(\varepsilon) = e^{\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon}$, avendo fissato $\varepsilon > 0$; si suddivide $[0,T(\varepsilon)]$ negli M intervalli $[t_i, t_{i+1}]$ di ampiezza finita $\frac{T(\varepsilon)}{M}$ con $i = 0,1,...,M-1$, $t_0 = 0$ e $t_M = T(\varepsilon)$. La probabilità che il sistema giunga su ∂B in un tempo maggiore di $T(\varepsilon)$ partendo da un generica configurazione $\sigma \in B$, può essere stimata nel modo seguente:

$$P_\sigma(\tau_{\partial B} > T(\varepsilon)) = \sum_{\bar\sigma_1 ... \bar\sigma_{M-1} \in B} P_\sigma(\tau_{\partial B} > T(\varepsilon), \sigma_{t_1} = \bar\sigma_1, ..., \sigma_{t_{M-1}} = \bar\sigma_{M-1}) =$$

$$= \sum_{\bar\sigma_1 ... \bar\sigma_{M-1} \in B} P_\sigma(\forall t \in [0, t_{M-1}]\ \sigma_t \in B, \sigma_{t_1} = \bar\sigma_1, ..., \sigma_{t_{M-1}} = \bar\sigma_{M-1}) \times$$

$$\times P_\sigma(\forall t \in [t_{M-1}, T(\varepsilon)]\ \sigma_t \in B | \sigma_{t_{M-1}} = \bar\sigma_{M-1}) \ ,$$

avendo fatto uso della proprietà di Markov e della legge delle probabilità condizionali.

Il termine $P_\sigma(\forall t \in [t_{M-1}, T(\varepsilon)]\ \sigma_t \in B | \sigma_{t_{M-1}} = \bar\sigma_{M-1})$ è la probabilità che si verifichi l'evento

$$\mathcal{F}_{\bar\sigma_{M-1}, \frac{T(\varepsilon)}{M}} = \left\{ \begin{array}{c} \text{partendo dalla configurazione } \bar\sigma_{M-1} \in B \text{ il} \\ \\ \text{sistema rimane in } B \text{ per il tempo } \dfrac{T(\varepsilon)}{M} \end{array} \right\} \ ; \qquad (4.15)$$

se si prende $\frac{T(\varepsilon)}{M} = 2\mathcal{T}$ allora si ha che $\mathcal{E}_{\bar\sigma_{M-1}, \mathcal{T}}$ è contenuto nel complementare di $\mathcal{F}_{\bar\sigma_{M-1}, \frac{T(\varepsilon)}{M}}$, infatti $\mathcal{E}_{\bar\sigma_{M-1}, \mathcal{T}}$ è un particolare meccanismo d'uscita da B. Allora

$$P(\mathcal{F}_{\bar\sigma_{M-1}, \frac{T(\varepsilon)}{M}}) \leq 1 - P(\mathcal{E}_{\bar\sigma_{M-1}, \mathcal{T}}) \leq 1 - \inf_{\eta \in B} P(\mathcal{E}_{\bar\sigma_{M-1}, \mathcal{T}}) \ ;$$

pertanto preso $\delta > 0$ si ha che per β sufficientemente grande

$$P(\mathcal{F}_{\bar\sigma_{M-1}, \frac{T(\varepsilon)}{M}}) \leq 1 - e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\delta} \ . \qquad (4.16)$$

Iterando il ragionamento precedente si ha che fissato $\varepsilon > 0$ e per ogni $\delta > 0$

$$P_\sigma(\tau_{\partial B} > T(\varepsilon)) \leq [1 - e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\delta}]^M \ ,$$

cioè

$$P_\sigma(\tau_{\partial B} > T(\varepsilon)) \leq [1 - e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\delta}]^{\frac{e^{+\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon}}{2T}} \quad ; \tag{4.17}$$

dalla (4.17) si deduce facilmente la validità della (4.11), purchè si scelga $\delta < \varepsilon$.

La (4.10) e la (4.11) permettono di asserire che il tempo $e^{\beta(h+\lambda)(l-1)}$ costituisce una stima del tempo necessario al sistema per giungere su ∂B supposto che all'istante iniziale si trovi in $\mathcal{C}$; si può scrivere

$$\lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}}(e^{\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\varepsilon} < \tau_{\partial B} < e^{\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon}) = 1 \quad , \tag{4.18}$$

con $\varepsilon > 0$ arbitrario. Ma la (4.11) ed il lemma di reversibilità permettono anche di dimostarare che quando il sistema attraversa ∂B per la prima volta, vi giunge con grande probabilità nella configurazione $\mathcal{P}_1$, cioè

$$\lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}}(\sigma_{\tau_{\partial B}} \in \mathcal{S}) = 1 \quad , \tag{4.19}$$

avendo introdotto l'insieme dei minimi sulla frontiera

$$\mathcal{S} := \{\eta \in \partial B : \ H(\eta) = H(\mathcal{P}_1)\} \quad ; \tag{4.20}$$

gli elementi di $\mathcal{S}$ sono tutte quelle configurazioni che possono essere trasformate in $\mathcal{P}_1$ effettuando una traslazione della cornice, una rotazione, oppure spostando la protuberanza lungo il lato minimo del rettangolo interno.

Si supponga che $\sigma_0 = \mathcal{C}$ e che per assurdo $\sigma_{\tau_{\partial B}} = \sigma^* \in \partial B \setminus \mathcal{S}$, allora $\tau_{\partial B} = \tau_{\sigma^*}$; in virtù del lemma di reversibilità si ha

$$\forall \delta > 0 \qquad P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial B} > e^{\beta[H(\sigma^*)-H(\mathcal{C})]-\beta\delta}) = 1 \quad ; \tag{4.21}$$

inoltre la (4.11) permette di scrivere

$$\forall \varepsilon > 0 \qquad P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial B} < e^{\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\varepsilon}) = 1 \quad . \tag{4.22}$$

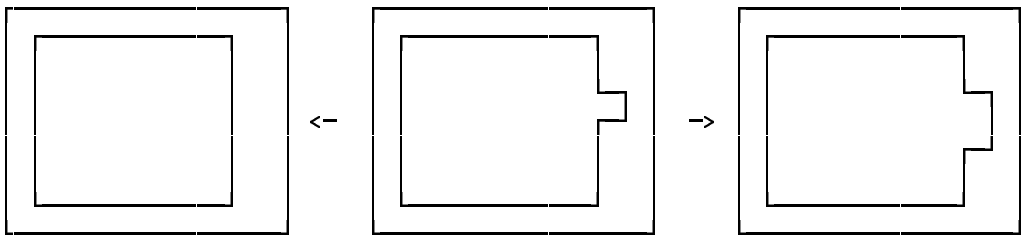


Fig.4.5 Comportamento del sistema a partire dalla configurazione $\mathcal{P}_1$.

Si possono scegliere ε e δ in modo tale che

$$e^{\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon} < e^{\beta[H(\sigma^*)-H(\mathcal{C})]-\beta\delta} \quad ,$$

infatti è sufficiente richiedere che $\varepsilon < H(\sigma^*) - H(\mathcal{P}_1) - \delta$; ciò è possibile perchè $H(\sigma^*) > H(\mathcal{P}_1)$. Con questa scelta di ε e di δ le (4.21) e (4.22) risultano in contraddizione, l'assurdo deriva dall'aver supposto $\sigma^* \in \partial B \setminus \mathcal{S}$, pertanto la (4.19) risulta dimostrata.

È stato provato che la prima volta che il sistema giunge sulla frontiera ∂B, vi giunge in $\mathcal{P}_1$; il problema è stabilire qual è la sorte del sistema a partire da tale configurazione. Indicato con R_1 il minimo locale che si ottiene togliendo la protuberanza al rettangolo interno, si ha

$$P_{\mathcal{P}_1}(\tau_{R_1} < \tau_{\mathcal{C}}) \geq \frac{1}{2|\Lambda_N|} \qquad P_{\mathcal{P}_1}(\tau_{\mathcal{C}} < \tau_{R_1}) \geq \frac{1}{2|\Lambda_N|} \quad ; \tag{4.23}$$

quindi vi è una probabilità finita che il sistema, a partire da $\mathcal{P}_1$ giunga in R_1 prima che il $\mathcal{C}$, ma vi è anche una probabilità finita che avvenga il viceversa. Queste due situazioni si spiegano con la possibilità che il sistema perda la protuberanza presente su un lato del rettangolo interno, oppure muti in $+1$ un spin 0 adiacente a tale protuberanza; il tutto è illustrato in Fig.4.5. In realtà il sistema può seguire anche altre strade, ma eventi diversi da quelli appena illustrati hanno probabilità esponenzialmente piccola di verificarsi.

Le (4.23) possono essere sfruttate per provare che il sistema a partire da $\mathcal{C}$ giunge in R_1 prima che in $+\underline{1}$ e per ottenere una stima dall'alto del tempo necessario perchè ciò avvenga:

$$\begin{array}{l} \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}}(\tau_{R_1} < \tau_{+\underline{1}}) = 1 \\ \lim_{\beta\to\infty} P_{\mathcal{C}}(\tau_{R_1} < e^{\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon}) = 1 \end{array} \quad , \tag{4.24}$$

con $\varepsilon > 0$ arbitrario; la dimostrazione delle precedenti, pur presentando notevoli difficoltà tecniche, risulta chiarissima a livello intuitivo: ogniqualvolta il sistema giunge in $\mathcal{P}_1$ ha una probabilità finita di perdere la protuberanza, se ciò non avviene allora rientra in B, infatti ogni altro evento ha probabilità esponzialmente piccola. Dopo un tempo stimato da $e^{\beta(h+\lambda)(l-1)}$ il sistema tornerà in $\mathcal{P}_1$ e si ripresenteranno le alternative analizzate in precedenza; prima o poi dovrà verificarsi l'evento che permette al sistema di giungere in R_1.

4.4 Scomparsa della cornice nel caso $l < \widetilde{L}^*$.

In precedenza è stato descritto come il sistema migri dalla cornice $\mathcal{C}$ al bi-rettangolo R_1, inoltre è stato stimato il tempo necessario perchè ciò avvenga. La descrizione dell'evoluzione successiva del sistema procede in modo del tutto analogo, infatti si può sfruttare la proprietà di Markov e considerare una nuova catena che abbia R_1 come condizione iniziale. L'unico problema da affrontare è determinare il minimo dell'energia sulla frontiera $\partial B(R_1)$ del bacino d'attrazione $B(R_1)$; per semplificare la notazione il bacino d'attrazione viene indicato con B_1 e la sua frontiera con ∂B_1.

Si suppone che il minimo tra le lunghezze dei lati del rettangolo interno sia l, cioè si suppone che $\mathcal{C}$ non sia quadrata. Si indica con $\mathcal{P}_2$ la configurazione che si

ottiene trasformando $l+1$ degli spin 0 del lato libero del rettangolo esterno in -1, mentre con $\mathcal{P}_3$ si indica la configurazione che si ottiene trasformando $l-1$ degli spin $+1$ di uno dei due lati più piccoli del rettangolo interno in 0 ; si prova che

$$\min_{\sigma\in\partial B_1} H(\sigma) = \begin{cases} H(\mathcal{P}_3) \ \text{ se } l < \left[\frac{h}{\lambda}\right] + 1 \\ H(\mathcal{P}_2) \ \text{ se } l \geq \left[\frac{h}{\lambda}\right] + 1 \end{cases} . \tag{4.25}$$

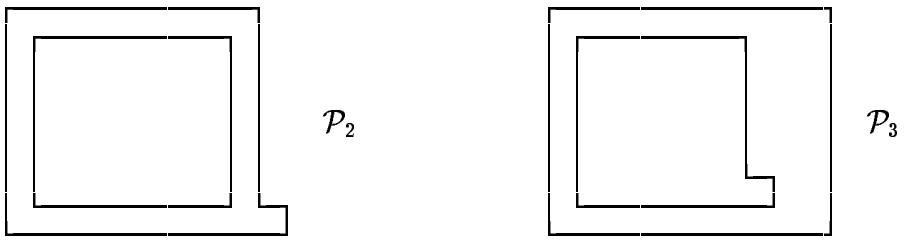


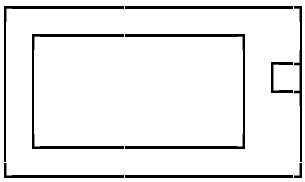
Fig.4.6 Possibili minimi dell'energia su $\partial B(R_1)$.

Per provare la (4.25) si può adottare la stessa strategia dimostrativa usata in precedenza: si cerca di analizzare tutti i cammini crescenti in energia che partono dal fondo del bacino. I possibili primi passi da aggiungere a quelli già elencati sono illustrati in Fig.4.7; si osserva che il meccanismo $(10,1)$ conduce già al primo passo su ∂B_1 e la variazione di energia è $\Delta H_{10\,1} = 2J - (h+\lambda)$. Ragionando come in precedenza si scopre che gli unici cammini da tener presente sono quelli in cui i vari passi sono di tipo $(3,2)$ oppure di tipo $(5,1)$; i cammini che fanno uso del solo meccanismo $(3,2)$ conducono alla configurazione di frontiera $\mathcal{P}_2$, mentre quelli che fanno uso del solo meccanismo $(5,1)$ conducono alla in $\mathcal{P}_3$. Pertanto per determinare il minimo dell'energia su ∂B_1 bisogna confrontare tra loro $H(\mathcal{P}_1) - H(R_1) = \Delta H_{10\,1} = 2J - (h+\lambda)$, $H(\mathcal{P}_2) - H(R_1) = (h-\lambda)(l+1)$ e $H(\mathcal{P}_3) - H(R_1) = (h+\lambda)(l-1)$; in primo luogo si osserva che $l+2 < \widetilde{M}^*$ implica che

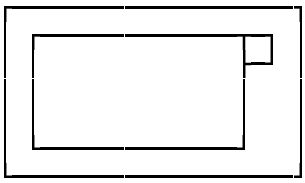
$H(\mathcal{P}_2) - H(R_1) < H(\mathcal{P}_1) - H(R_1)$. Confrontando l'energia di $\mathcal{P}_2$ con quella di $\mathcal{P}_3$ si ha

$$H(\mathcal{P}_2) - H(R_1) < H(\mathcal{P}_3) - H(R_1) \Leftrightarrow l > \frac{h}{\lambda} \quad ,$$

da cui si ha la (4.25).



$$\begin{cases} + & \Delta H_{91} = 6J - (h + \lambda) \\ - & \Delta H_{82} = 2J + (h - \lambda) \end{cases}$$



$$\begin{cases} + & \Delta H_{10\ 1} = 2J - (h + \lambda) \\ - & \Delta H_{10\ 2} = 6J + (h - \lambda) \end{cases}$$

Fig.4.7 Possibili meccanismi per la costruzione dei cammini che partono da R_1.

Determinato il minimo dell'energia su ∂B_1 la descrizione del comportamento del sistema procede come nei paragrafi precedenti: il sistema raggiunge la frontiera in un punto di minimo in un tempo che è stimato da $e^{\beta[\min_{\sigma \in \partial B_1} H(\sigma) - H(R_1)]}$; ciò che è importante osservare, aldilà della descrizione dettagliata del meccanismo, è che la cornice continua a contrarsi. Il sistema giungerà in un nuovo minimo locale R_2 contenuto strettamente in R_1, cioè

$$R_2 \prec R_1 \prec \mathcal{C} \quad ; \tag{4.26}$$

avendo introdotto su Ω la relazione d'ordine parziale

$$\sigma \prec \eta \Leftrightarrow \sigma(x) \leq \eta(x) \; \forall x \in \Lambda_N \quad , \tag{4.27}$$

ove σ ed η sono due elementi di Ω. Il tempo che il sistema impiega per giungere in R_2 è stimato dall'alto da $e^{\beta[\min_{\sigma \in \partial B_1} H(\sigma) - H(R_1)] + \beta\varepsilon}$ con $\varepsilon > 0$.

Il sistema continuerà a contrarsi visitando minimi locali sempre più piccoli, fino a quando verrà raggiunta la configurazione $-\underline{1}$; pertanto resta provato che nel caso $l < \widetilde{L}^*$ la configurazione $-\underline{1}$ viene raggiunta, con probabilità tendente ad uno nel limite $\beta \to \infty$, prima di $+\underline{1}$. Il tempo che il sistema impiega per uscire dal bacino d'attrazione di ognuno di questi minimi locali viene stimato come in precedenza. Si tratta di tempi sempre più piccoli, perchè vi è dipendenza dalle dimensioni della goccia; tenendo presente la proprietà di Markov si può asserire che il tempo che domina è quello più lungo; allora in virtù della (4.25) si può ritenere completa la dimostrazione del teorema 4.1 nel caso $l < \widetilde{L}^*$.

Nulla cambia se si suppone che $\mathcal{C}$ sia quadrata, infatti il punto di frontiera $\mathcal{P}_3$ sarà tale che $H(\mathcal{P}_3) - H(R_1) = (h + \lambda)(l - 2)$; la condizione perchè il minimo su ∂B sia $\mathcal{P}_3$ diventa $l < [\frac{3\frac{h}{\lambda}+1}{2}] + 1$. Ma dal punto di vista della stima sul tempo di scomparsa della cornice $\mathcal{C}$ non cambia nulla, infatti per effettuarla bisogna confrontare $(h - \lambda)(l + 1)$ con $(h + \lambda)(l - 1)$; il fatto che la perdita di una striscia del rettangolo esterno sia il secondo passo del cammino di contrazione, oppure avvenga dopo la scomparsa del rettangolo interno non è rilevante.

4.5 Scomparsa della cornice nel caso $\widetilde{L}^* < l < l^*$ e $m < m^*(l)$.

Si vuole studiare il comportamento del sistema supponendo che all'istante iniziale sia $\sigma_0 = \mathcal{C}(l_1, l_2)$ con $\widetilde{L}^* < l = \min\{l_1, l_2\} < l^*$ e $m = \max\{l_1, l_2\} < m^*(l)$; si indica con $\mathcal{C}$ la cornice, con B_0 il suo bacino d'attrazione stretto e con ∂B_0 la relativa frontiera. Il primo problema da affrontare è il calcolo del minimo

dell'energia su ∂B_0, ragionando come nel caso precedente si prova che

$$\min_{\sigma \in \partial B_0} H(\sigma) = H(\mathcal{P}_4) \ , \tag{4.28}$$

avendo indicato con $\mathcal{P}_4$ quella configurazione che si ottiene aggiungendo una protuberanza al rettangolo esterno di $\mathcal{C}$; si trova $H(\mathcal{P}_4) - H(\mathcal{C}) = 2J - (h - \lambda)$.

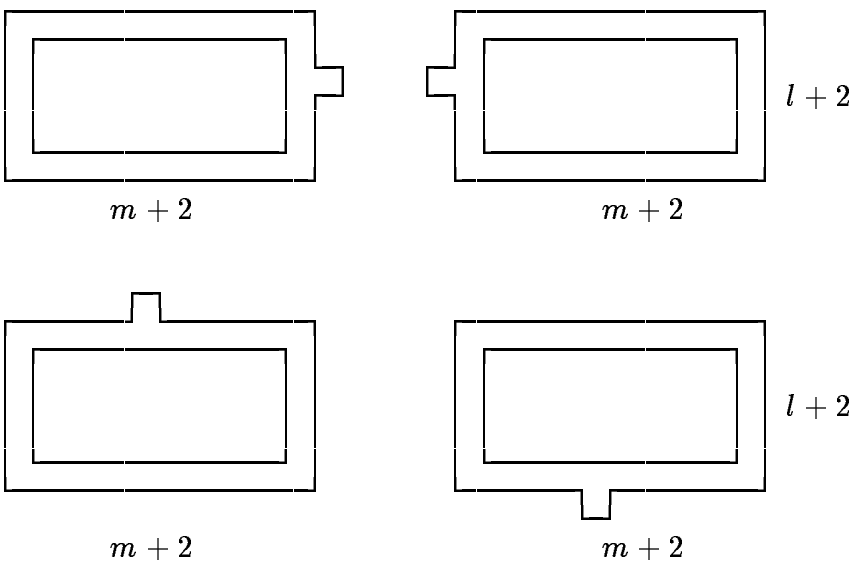


Fig.4.8 Configurazioni $\mathcal{P}_4$.

Senza perdita di generalità si può supporre che il lato più lungo della cornice sia orizzontale, cioè $l_1 = m$ e $l_2 = l$; allora nel tempo $T_0 = e^{\beta[2J-(h-\lambda)]}$ il sistema giunge nella configurazione $R_{2,\perp}$ oppure in $R_{2,\parallel}$, avendo posto $R_{2,\perp} = R(l_1, l_2; l_1 + 3, l_2 + 2)$ e $R_{2,\parallel} = R(l_1, l_2; l_1 + 2, l_2 + 3)$ (Fig.4.9); il pedice $\perp$ indica che la crescita avviene in direzione ortogonale al lato più corto.

Indicati con $B_{2,\perp}$ e $B_{2,\parallel}$ i bacini d'attrazione stretti rispettivamente di $R_{2,\perp}$ e di $R_{2,\parallel}$ e con con $\partial B_{2,\perp}$ e $\partial B_{2,\parallel}$ le loro frontiere si ha

$$\begin{aligned} \min_{\sigma \in \partial B_{2,\perp}} H(\sigma) &= H(\mathcal{P}_4) \\ \min_{\sigma \in \partial B_{2,\parallel}} H(\sigma) &= H(\mathcal{P}_4) \end{aligned} \ , \tag{4.29}$$

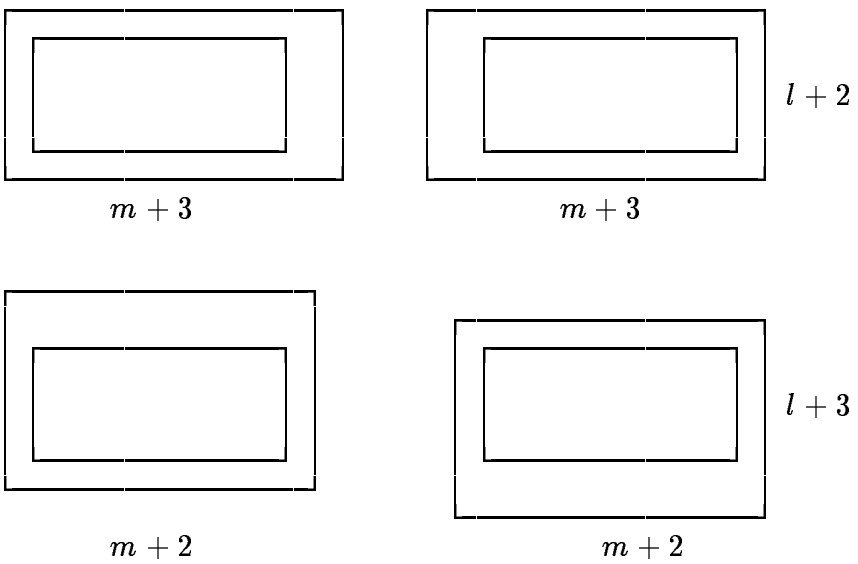


Fig.4.9 Configurazioni $R_{2,\perp}$ in alto ed $R_{2,\parallel}$ in basso.

osservato che $H(\mathcal{P}_4) - H(R_{2,\perp}) = (h-\lambda)(l+1)$, la prima vale perchè

$$\begin{array}{c} l \geq \widetilde{L}^* \Rightarrow (h+\lambda)(l-1) > 2J - (h-\lambda) \\ l+2 < \widetilde{M}^* \Rightarrow 2J - (h+\lambda) > (h-\lambda)(l+1) \end{array} ,$$

pertanto

$$(h+\lambda)(l-1) > 2J - (h-\lambda) > 2J - (h+\lambda) > (h-\lambda)(l+1) \ . \qquad (4.30)$$

Osservato che $H(\mathcal{P}_4) - H(R_{2,\parallel}) = (h-\lambda)(m+1)$, la validità della seconda delle (4.29) è assicurata dal fatto che:

$$l \geq \widetilde{L}^* \Rightarrow m^*(l) + 2 \leq \widetilde{M}^*$$

per cui

$$m < m^*(l) \Rightarrow m+2 < \widetilde{M}^* \Rightarrow (h-\lambda)(m+1) < 2J - (h+\lambda) \ ;$$

tenendo presente che $l \geq \widetilde{L}^*$ si ha

$$(h+\lambda)(l-1) > 2J - (h-\lambda) > 2J - (h+\lambda) > (h-\lambda)(m+1) \ . \qquad (4.31)$$

A partire da $R_{2,\perp}$ il sistema tornerà in $\mathcal{C}$ nel tempo $e^{\beta(h-\lambda)(l+1)}$, mentre a partire da $R_{2,\parallel}$ il ritorno in $\mathcal{C}$ durerà $e^{\beta(h-\lambda)(m+1)}$.

Sembra, quindi, che il sistema oscilli tra i bacini d'attrazione di $\mathcal{C}$, di $R_{2,\perp}$ e di di $R_{2,\parallel}$; per capire se la cornice tenda a contrarsi o a crescere bisogna guardare il comportamento del sistema in un bacino più largo che comprenda B_0, $B_{2,\perp}$ e $B_{2,\parallel}$. Si definisce

$$\mathcal{D} := \left\{ \begin{array}{l} \sigma \in \Omega : \ \forall \text{sequenza } S \ S\sigma = \mathcal{C}; \text{oppure} \\ \\ S\sigma \text{ è uno dei quattro birettangoli } R_{2,\perp} \ R_{2,\parallel} \end{array} \right\} \ , \qquad (4.32)$$

si tratta di una sorta di bacino d'attrazione allargato della cornice $\mathcal{C}$. Non è difficile dimostrare che $\mathcal{D}$ contiene strettamente i bacini d'attrazione stretti di $\mathcal{C}$ e dei quattro birettangoli $R_{2,\square}$; intuitivamente ciò vuol dire che in $\mathcal{D}$ sono contenute anche le "selle" tra questi bacini.

Analizzando, come al solito, tutti i cammini strettamente crescenti in energia che partono dai cinque minimi locali $\mathcal{C}$, $R_{2,\perp}$ ed $R_{2,\parallel}$, si passano in rassegna tutte le configurazioni della frontiera $\partial\mathcal{D}$ e si può quindi stabilire quale sia quella in cui l'energia $H(\sigma)$ assume il valore minimo. Le disuguagliaze di importanza chiave sono le seguenti

$$l < l^* \Rightarrow (h+\lambda)(l-1) < [2J-(h-\lambda)] - (h-\lambda)(l+1) + [2J-(h+\lambda)] \ , \ (4.33)$$

che assicura che la configurazione di frontiera $\mathcal{P}_{5,\perp}$, riportata in Fig.4.10, ha energia maggiore di quella di $\mathcal{P}_1$;

$$m < m^*(l) \Rightarrow (h+\lambda)(l-1) < [2J-(h-\lambda)] - (h-\lambda)(m+1) + [2J-(h+\lambda)] \ , \ (4.34)$$

che assicura che anche $\mathcal{P}_{5,\parallel}$ ha energia maggiore di $\mathcal{P}_1$; pertanto si conclude che

$$\min_{\sigma \in \partial\mathcal{D}} H(\sigma) = H(\mathcal{P}_1) \ . \qquad (4.35)$$

Applicando il lemma di reversibilità si può effettuare una stima dal basso sul tempo di primo arrivo sulla frontiera di $\mathcal{D}$, supposto che all'istante iniziale il sistema sia in $\mathcal{C}$; preso $\varepsilon > 0$ si ha

$$\lim_{\beta \to \infty} P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial \mathcal{D}} > e^{\beta(h+\lambda)(l-1)-\beta\varepsilon}) = 1 \quad . \tag{4.36}$$

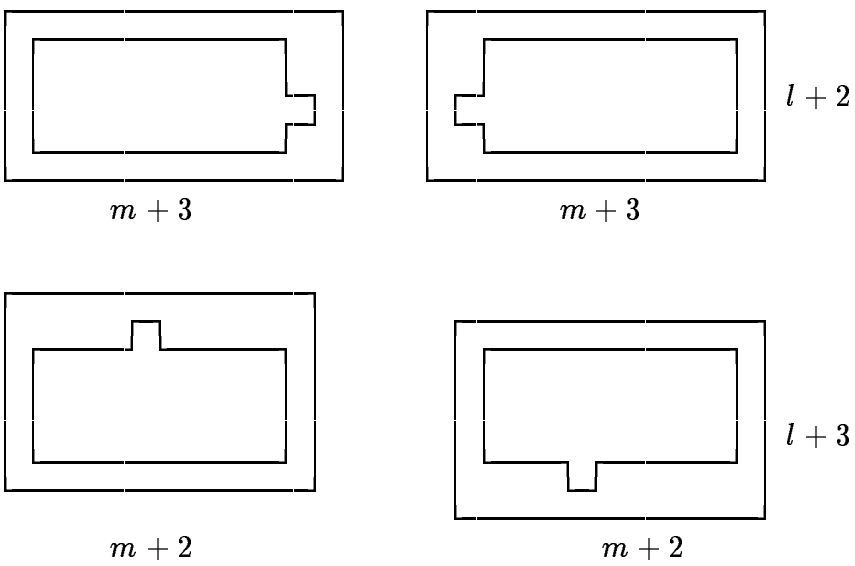


Fig.4.10 Configurazioni $\mathcal{P}_{5,\perp}$ in alto e $\mathcal{P}_{5,\parallel}$ in basso.

Per completare la descrizione dell'uscita del sistema da $\mathcal{D}$ è necessario stimare dall'alto il tempo di primo arrivo sulla sua frontiera; si dimostra che per ogni $\varepsilon > 0$

$$\lim_{\beta \to \infty} P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial \mathcal{D}} < e^{\beta(h+\lambda)(l-1)+\beta\varepsilon}) = 1 \quad ; \tag{4.37}$$

da questa si deduce, come nel caso $l < \widetilde{L}^*$, che la prima volta che il sistema giunge su $\partial\mathcal{D}$, con grande probabilità vi giunge in $\mathcal{P}_1$. Quanto detto completa la descrizione del primo passo della contrazione della cornice nel caso in esame; la successiva evoluzione del sistema la si discute come nel caso analizzato in precedenza, pertanto si può concludere che il teorema 4.1 resta dimostrato anche quando $l \geq \widetilde{L}^*$ e $m < m^*(l)$.

Per dimostrare la (4.37) si ragiona come nel caso precedente, ma vi è una difficoltà: presa $\sigma \in \mathcal{D}$ non è detto che esista un cammino strettamente decrescente in energia che conduca il sistema da σ a $\mathcal{C}$; infatti se σ appartiene al bacino d'attrazione stretto di uno dei birettangoli $R_{2,\perp}$ o $R_{2,\parallel}$, allora per giungere in $\mathcal{C}$ il sistema deve superare una barriera energetica, cioè deve raggiungere la frontiera del bacino stretto in questione. Allora l'evento d'uscita da $\mathcal{D}$, la cui probabilità andrà stimata dal basso, non deve essere definito su un tempo "finito", bensì su un tempo esponenzialmente lungo, in modo da permettere al sistema di compiere le oscillazioni che precedono il raggiungimento di $\partial\mathcal{D}$.

Bisogna quindi definire un evento $\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}$ con $\sigma \in \mathcal{D}$ e $T_1(\varepsilon_1) = e^{\beta[2J-(h-\lambda)]+\beta\varepsilon_1}$, ove $\varepsilon_1 > 0$ arbitrario, tale che siano soddisfatte le due seguenti proprietà

1) se si verifica l'evento $\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}$, allora esiste $T_0 \leq T_1(\varepsilon_1)$ tale che

$$\sigma_{T_0} \in \partial\mathcal{D} \ ,$$

avendo supposto $\sigma_0 = \sigma$, e l'evento viene considerato concluso in T_0;

2) vale la seguente stima dal basso sulla probabilità dell'evento $\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}$, preso $\delta > 0$ se β è sufficientemente grande si ha:

$$\inf_{\sigma\in\mathcal{D}} P(\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}) \geq e^{-\beta[(h+\lambda)(l-1)-(2J-(h-\lambda))]-\beta\delta} \ . \tag{4.38}$$

L'evento $\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}$ deve essere definito sul tempo $T_1(\varepsilon_1)$, perchè le disuguaglianze

$$(h-\lambda)(m+1) < 2J-(h+\lambda) < 2J-(h-\lambda)$$

$$(h-\lambda)(l+1) < 2J-(h+\lambda) < 2J-(h-\lambda)$$

assicurano che nel tempo $T_1(\varepsilon_1)$ il sistema a partire da una qualsiasi configurazione di $\mathcal{D}$ giunge in $\mathcal{C}$. Presa $\sigma \in \mathcal{D}$, l'evento $\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}$ viene definito nel modo seguente:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)} := \{&\text{traiettorie tali che } \sigma_0 = \sigma, \text{ in un tempo minore} \\ &\text{di } \frac{T_1(\varepsilon_1)}{2} \text{ il sistema giunge in } \mathcal{C}; \\ &\text{poi nel tempo } \frac{T_1(\varepsilon_1)}{2} \text{ giunge su } \partial\mathcal{D} \text{ in } \mathcal{P}_1\}\end{aligned} \quad , \quad (4.39)$$

la condizione (1) è soddisfatta in modo ovvio, per quanto riguarda la (2) è chiaro che con grande probabilità in un tempo $\frac{T_1(\varepsilon_1)}{2}$ il sistema giunge in $\mathcal{C}$ a partire da una qualsiasi configurazione di $\mathcal{D}$; a partire da alcune configurazioni di $\mathcal{D}$ il sistema deve superare una barriera energetica, ma il tempo $\frac{T_1(\varepsilon_1)}{2}$ è ampiamente sufficiente. Il problema è far vedere che partendo da $\mathcal{C}$ il sistema giunge in $\mathcal{P}_1$ nel tempo $\frac{T_1(\varepsilon_1)}{2}$ con probabilità non troppo piccola; la novità sta nel fatto che il sistema deve raggiungere la frontiera del bacino d'attrazione stretto di $\mathcal{C}$ in una configurazione che non fa parte dell'insieme dei minimi dell'energia sulla frontiera; si prova che preso $\delta > 0$ se β è sufficientemente grande si ha

$$P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial B(\mathcal{C})} < \frac{T_1(\varepsilon_1)}{2},\ \sigma_{\tau_{\partial B(\mathcal{C})}} = \mathcal{P}_1) \geq e^{-\beta[(h+\lambda)(l-1)-(2J-(h-\lambda))]-\beta\delta} \quad , \quad (4.40)$$

da cui si deduce in modo immediato che $\mathcal{E}_{\sigma,T_1(\varepsilon_1)}$ soddisfa la condizione (2).

Per dimostrare la (4.40) si affianca alla catena di Markov σ_t con condizione iniziale $\sigma_0 = \mathcal{C}$, che descrive l'evoluzione del sistema, una seconda catena di Markov ξ_n con n numero naturale, che si ottiene considerando solo gli istanti in cui il sistema si trova in $\mathcal{C}$ oppure in $\partial B(\mathcal{C})$. Per definirla in modo rigoroso, si considerano i tempi

$$0 = v_0 < u_0 \leq v_1 < \ \ldots\ < u_n \leq v_{n+1} < \ \ldots$$

definiti come segue

$$\begin{cases} v_0 = 0 \\ u_n = \inf\{t > v_n : \sigma_t \neq \sigma_{t-1}\} \\ v_n = \inf\{t \geq u_{n-1} : \sigma_t \in X\} \end{cases} , \tag{4.41}$$

avendo posto

$$X = \{\mathcal{C}\} \cup \partial B(\mathcal{C}) \ . \tag{4.42}$$

A questo punto si definisce la catena

$$\xi_n = \sigma_{v_n} \ \forall n \geq 1 \text{ e } \xi_0 = \sigma_0 = \mathcal{C} \ , \tag{4.43}$$

si osserva che $n \leq v_n \ \forall n \geq 0$.

Si indica con ν l'istante in cui questa seconda catena di Markov giunge per la prima volta su $\partial B(\mathcal{C})$:

$$\nu := \inf\{n \text{ naturali} : \xi_n \in \partial B(\mathcal{C})\} \ ; \tag{4.44}$$

e si definiscono gli eventi

$$\begin{aligned} \mathcal{E} :=& \{\xi_\nu = \mathcal{P}_1\} \\ \mathcal{G} :=& \{\tau_{\partial B\mathcal{C}} < T_1(\varepsilon_1)\} \ ; \\ \mathcal{F} :=& \mathcal{E} \cap \mathcal{G} \end{aligned} \tag{4.45}$$

la tesi consiste nel provare la stima di probabilità (4.40) per l'evento $\mathcal{F}$. Si definiscono le quantità

$$\begin{aligned} P(\mathcal{C} \to \mathcal{P}_1) &= P(\xi_1 = \mathcal{P}_1 | \xi_0 = \mathcal{C}) \\ P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})) &= P(\xi_1 \in \partial B(\mathcal{C}) | \xi_0 = \mathcal{C}) \end{aligned} , \tag{4.46}$$

il cui significato fisico è più che trasparente. Valgono le seguenti stime

$$\begin{aligned} P(\mathcal{C} \to \mathcal{P}_1) &\geq \left(\frac{1}{2|\Lambda_N|}\right)^{l-1} e^{-\beta(h+\lambda)(l-1)} \\ P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})) &\leq e^{-\beta[2J-(h-\lambda)]+\beta\delta} \end{aligned} , \tag{4.47}$$

ove $\delta > 0$ è arbitrario, mentre β va scelto sufficientemente grande. La prima è immediata, la seconda viene provata di seguito:

$$P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})) = \sum_{\eta \in \partial B(\mathcal{C})} P(\xi_1 = \eta | \xi_0 = \mathcal{C})$$

$$= \sum_{\eta \in \partial B(\mathcal{C})} \sum_{s_0=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{\bar{\sigma}_1, \ldots, \bar{\sigma}_{s-1} \in B(\mathcal{C}) \{\mathcal{C}\}} P(\sigma_0 = \mathcal{C}, \sigma_1 = \mathcal{C}, \ldots$$

$$\ldots, \sigma_{s_0} = \mathcal{C}, \sigma_{s_0+1} = \bar{\sigma}_1, \ldots, \sigma_{s_0+(s-1)} = \bar{\sigma}_{s-1}, \sigma_{s_0+s} = \eta)$$

sfruttando la reversibilità della catena di Markov rispetto alla misura di Gibbs si ha

$$P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})) = \sum_{\eta \in \partial B(\mathcal{C})} \sum_{s_0=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{\bar{\sigma}_1, \ldots, \bar{\sigma}_{s-1} \in B(\mathcal{C}) \{\mathcal{C}\}} e^{-\beta[H(\eta) - H(\mathcal{C})} \times$$

$$\times P(\sigma_0 = \eta, \sigma_1 = \bar{\sigma}_{s-1}, \ldots\ldots, \sigma_{s-1} = \bar{\sigma}_1, \sigma_s = \mathcal{C}, \ldots., \sigma_{s+s_0} = \mathcal{C}) \quad .$$

Si osserva, ora, che $\mathcal{P}_4$ è un punto di minimo per l'energia sulla frontiera di $B(\mathcal{C})$, allora

$$P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})) \leq e^{-\beta[2J-(h-\lambda)]} \sum_{\eta \in \partial B(\mathcal{C})} \times$$

$$\times \sum_{s_0=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} P_\eta(\sigma_t \in B(\mathcal{C}) \setminus \{\mathcal{C}\} \; \forall t < s, \sigma_t = \mathcal{C} \; \forall t \in [s, s+s_0]) \quad ;$$

$$= e^{-\beta[2J-(h-\lambda)]} \sum_{\eta \in \partial B(\mathcal{C})} P_\eta(\tau_{\mathcal{C}} \geq 1)$$

da cui si ha

$$P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})) \leq e^{-\beta[2J-(h-\lambda)]} |\partial B(\mathcal{C})| \max_{\eta \in \partial B(\mathcal{C})} P_\eta(\tau_{\mathcal{C}} \geq 1) \quad .$$

Da cui si ottiene banalmente la seconda delle (4.47).

Facendo uso delle (4.47) e sfruttando la seguente espressione della probabilità dell'evento $\mathcal{E}$

$$P(\mathcal{E}) = \sum_{n=0}^{\infty} [1 - P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C})]^n P(\mathcal{C} \to \mathcal{P}_1) = \frac{P(\mathcal{C} \to \mathcal{P}_1)}{P(\mathcal{C} \to \partial B(\mathcal{C}))} \quad ,$$

si ha che preso $\delta > 0$ se β è sufficientemente grande, allora

$$P(\mathcal{E}) \geq e^{-\beta[(h+\lambda)(l-1)-(2J-(h-\lambda))]-\beta\delta} \quad . \tag{4.48}$$

D'altro canto presi $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$ e tali che $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ si ha

$$P_{\mathcal{C}}(\tau_{\partial B(\mathcal{C})} > e^{\beta[2J-(h-\lambda)]+\beta\varepsilon_1}) \leq \left(1 - e^{-\beta[2J-(h-\lambda)]-\beta\varepsilon_2}\right)^{e^{\beta[2J-(h-\lambda)]+\beta\varepsilon_1}} \quad ,$$

osservato che $\mathcal{G}^c = (\tau^{\mathcal{C}}_{\partial B(\mathcal{C})} > e^{\beta[2J-(h-\lambda)]+\beta\varepsilon_1})$, si può concludere che la probabilità del complementare di $\mathcal{G}$ si annulla in modo superesponenziale; pertanto si può determinare β sufficientemente grande tale che $P(\mathcal{G}^c) < \frac{1}{2}P(\mathcal{E})$.

In modo del tutto generale si dimostra che presi gli eventi A, B e C di un generico spazio di probabilità, tali che $A = B \cap C$, si ha $P(A) \geq P(B) - P(C^c)$; allora si può scrivere

$$P(\mathcal{F}) \geq P(\mathcal{E}) - P(\mathcal{G}^c) \quad ,$$

allora per β sufficientemente grande si ha

$$P(\mathcal{F}) \geq \frac{1}{2}P(\mathcal{E}) \quad ,$$

in definitiva preso $\varepsilon > 0$ $\exists\beta_0 > 0$ tale che se $\beta > \beta_0$, allora

$$P(\mathcal{F}) \geq e^{-\beta[(h+\lambda)(l-1)-(2J-(h-\lambda))]-\beta\varepsilon} \quad , \tag{4.49}$$

ciò completa la dimostrazione della (4.40).

4.6 Crescita della cornice.

Si considera la solita cornice $\mathcal{C}$ e si suppone $\widetilde{L}^* < l < l^*$, $m^*(l) \leq m$ e $m+2 < \widetilde{M}^*$, la sua criticità viene analizzata con argomenti perfettamente analoghi

a quelli illustrati nel paragrafo precedente. La differenza fondamentale sta nel fatto che il minimo dell'energia sulla frontiera $\partial\mathcal{D}$, non è costituito dalla configurazione $\mathcal{P}_1$, bensì da $\mathcal{P}_{5,\|}$; pertanto la cornice tende a crescere. Con i soliti argomenti si dimostra che il tempo necessario al sistema perchè raggiunga la configurazione $+\underline{1}$ è dell'ordine di

$$e^{\beta\{[2J-(h-\lambda)]-(h-\lambda)(m+1)+[2J-(h+\lambda)]\}} .$$

Nel caso $l \geq l^*$ e $m+2 < \widetilde{M}^*$ la disuguaglianza di importanza chiave è la seguente

$$\begin{aligned}(h+\lambda)(l-1) >& [2J-(h-\lambda)]-(h-\lambda)(l+1)+[2J-(h+\lambda)] > \\ >& [2J-(h-\lambda)]-(h-\lambda)(m+1)+[2J-(h+\lambda)]\end{aligned} \quad ; \qquad (4.50)$$

pertanto anche in questo caso il minimo dell'energia sulla frontiera $\partial\mathcal{D}$ è costituito dalla configurazione $\mathcal{P}_{5,\|}$, quindi la goccia cresce in direzione parallela al suo lato più corto, il sistema cerca di riportarsi nella situazione in cui la goccia è quadrata.

È interessante osservare che nei due casi appena esaminati esiste una direzione preferenziale per la crescita della goccia, si tratta della direzione ortogonale al lato più lungo della cornice; in altri termini il fenomeno di crescita non è simmetrico rispetto allo scambio dei due assi del reticolo. Si tratta di un fenomeno allo stesso tempo interessante e sorprendente: lo studio dinamico del sistema, mette in luce un fenomeno che non soddisfa ad una proprietà di simmetria dell'hamiltoniana del sistema stesso.

La simmetria nella crescita viene ripristinata quando si considerano cornici sufficientemente grandi, cioè quando $l+2 \geq \widetilde{M}^*$; in questo caso, infatti, il comportamento del sistema può essere studiato considerando il bacino d'attrazione stretto di $\mathcal{C}$. Il minimo dell'energia sulla sua frontiera è costituito dalla configurazione $\mathcal{P}_4$, in un tempo dell'ordine di $e^{\beta[2J-(h-\lambda)]}$ il sistema giunge in $R_{2,\perp}$ oppure in $R_{2\|}$;

ma a questo punto non torna indietro, perchè il minimo dell'energia sulle frontiere di questi bacini è costituito rispettivamente da $\mathcal{P}_{5,\perp}$ e $\mathcal{P}_{5,\parallel}$, pertanto la crescita continua ed il sistema raggiunge una nuova cornice, più grande della precedente.

Capitolo 5.

Criticità di un generico minimo locale e bacino d'attrazione di -$\underline{1}$.

5.1 Teorema sulla criticità di un generico birettangolo.

Nel capitolo precedente è stata studiata l'evoluzione del modello di Blume–Capel a partire da una generica cornice, il risultato è costituito dal teorema 4.1 che chiarisce quali debbano essere le dimensioni di una cornice perchè questa sia sottocritica o supercritica; è necessario stabilire risultati analoghi per un generico minimo locale, cioè bisogna analizzare il comportamento del sistema a partire da un generico plurirettangolo.

Si considera il birettangolo $R := R(L_1, L_2; M_1, M_2)$, individuato a meno di una traslazione, e si pone $L := \min\{L_1, L_2\}$ e $M := \min\{M_1, M_2\}$; per stabilire quando questa configurazione è sottocritica bisogna tener presente anche il lato più lungo del rettangolo interno, pertanto si pone $\hat{L} := \max\{L_1, L_2\}$.

Il risultato che emerge può essere illustrato a livello intuitivo come segue: la sottocriticità del birettangolo è assicurata se sia il rettangolo interno che quello

esterno sono sottocritici, cioè se $L < L^*$ ed $M < M^*$; ma se l'interno è supercritico non è detto che anche il birettangolo lo sia, infatti se l'esterno è sufficientemente piccolo, $M < \widetilde{M}^*$, la configurazione può risultare sottocritica nel suo complesso.

Teorema 5.1
Si consideri il birettangolo $R := R(L_1, L_2; M_1, M_2)$ e si definiscano come in precedenza le dimensioni L, $\hat{L}$ ed M; se è verificata una delle seguenti cinque condizioni

$1) L < L^*,\ M < M^*$
$2) L \geq L^*,\ M < \widetilde{M}^*,\ \hat{L} + 2 < \widetilde{M}^*,\ L < \widetilde{L}^*$
$3) L \geq L^*,\ M < \widetilde{M}^*,\ \hat{L} + 2 < \widetilde{M}^*,\ \widetilde{L}^* \leq L < l^*,\ \hat{L} < m^*(L)$
$4) L \geq L^*,\ M < \widetilde{M}^*,\ \hat{L} + 2 \geq \widetilde{M}^*,\ M - 2 < \widetilde{L}^*$
$5) L \geq L^*,\ M < \widetilde{M}^*,\ \hat{L} + 2 \geq \widetilde{M}^*,\ \widetilde{L}^* \leq M - 2 < l^*,\ \hat{L} < m^*(L)$

allora si ha

$$\lim_{\beta \to \infty} P_R(\tau_{-\underline{1}} < \tau_{+\underline{1}}) = 1 \quad .$$

Il significato delle quattro possibili situazioni, in cui il birettangolo è sottocritico pur essendo $L \geq L^*$, verrà chiarito nell'ambito della dimostrazione del teorema.

Come nel caso delle cornici per capire quale sia la sorte di un birettangolo è necessario calcolare il minimo dell'energia sulla frontiera ∂B del suo bacino d'attrazione stretto $B := B(R)$. Per fare ciò si ragiona come al solito considerando tutti i cammini strettamente crescenti in energia che partono dal fondo della buca, ma da quanto detto in precedenza è chiaro che i soli casi rilevanti sono i cammini costituiti da passi di tipo $(2,2)$, $(3,2)$, $(5,2)$ e $(10,1)$; si vedano le figure 4.2 e 4.7.

Considerato, allora, un lato del rettangolo esterno che disti almeno due unità dal corrispondente lato del rettangolo interno, le quattro configurazioni di frontiera da tener presente sono quelle in Fig.5.1; in tale figura viene anche riportata la

differenza di energia $\Delta H_i \quad i = 1, ..., 4$ fra ognuna di queste configurazioni ed il birettangolo. Va osservato che la definizione delle configurazioni $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \mathcal{P}_3$ e $\mathcal{P}_4$ non è univoca; vi è libertà nella scelta del lato libero del rettangolo esterno e nella posizione delle protuberanze.

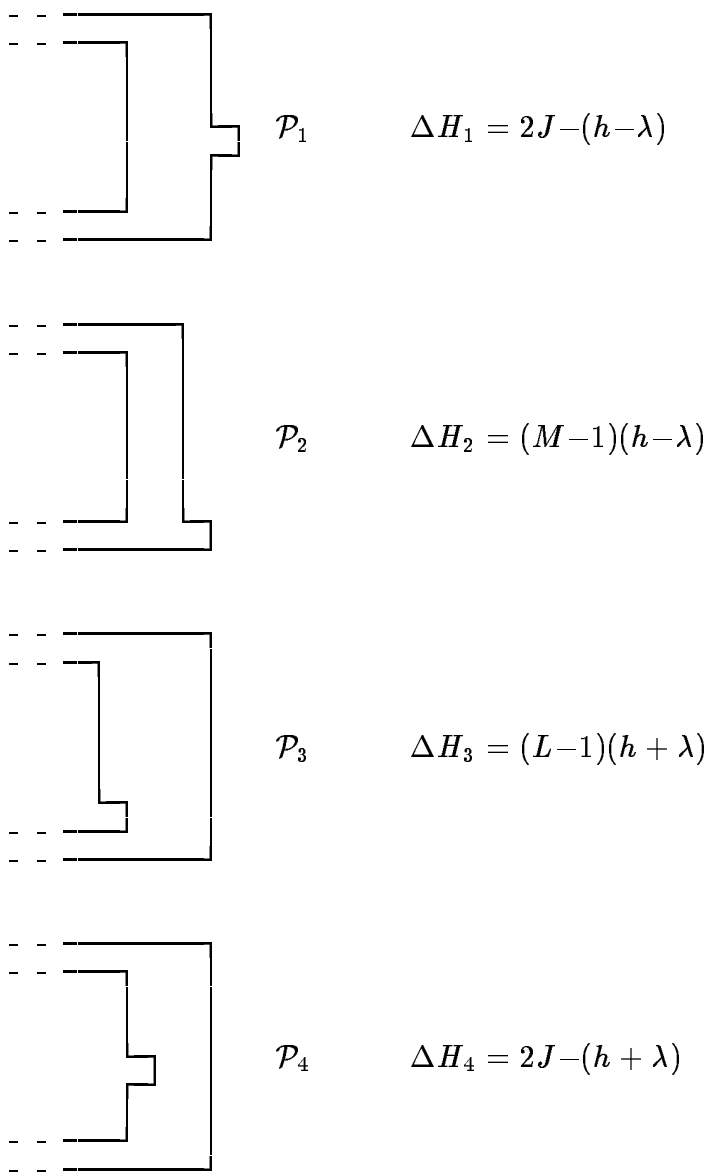


Fig.5.1 Configurazioni rilevanti della frontiera del bacino d'attrazione di R.

Il caso più semplice da analizzare è quello in cui $L < L^*$ e $M < M^*$: la

sottocriticità dell'interno assicura che

$$(L-1)(h+\lambda) < 2J - (h+\lambda) < 2J - (h-\lambda) \quad , \tag{5.1}$$

mentre dalla sottocriticità dell'esterno consegue

$$(M-1)(h-\lambda) < 2J - (h-\lambda) \quad ; \tag{5.2}$$

ma nulla si può dire, senza specificare ulteriori condizioni sulle dimensioni del birettangolo, sulla disuguaglianza $(L-1)(h+\lambda) \gtrless (M-1)(h-\lambda)$. Pertanto il minimo dell'energia su ∂B è costituito da $\mathcal{P}_2$ oppure da $\mathcal{P}_3$ a seconda del valore di L e di M; ma ciò non è un problema perchè in ogni caso la goccia tende a contrarsi, quindi il birettangolo è sottocritico. Con i soliti argomenti si può dimostrare che il tempo impiegato dal sistema per giungere nella configurazione $-\underline{1}$ è dell'ordine di $\max\{e^{\beta(L-1)(h+\lambda)}, e^{\beta(M-1)(h-\lambda)}\}$.

Un altro caso abbastanza semplice è quello in cui l'esterno è supercritico: la condizione $M \geq M^*$ assicura che $2J - (h-\lambda) < (M-1)(h-\lambda)$. Se l'interno è sottocritico si ha

$$(L-1)(h+\lambda) < 2J - (h+\lambda) < 2J - (h-\lambda) < (M-1)(h-\lambda) \quad ; \tag{5.3}$$

dapprima scompare l'interno, ma poi l'esterno invade tutto il reticolo ed il sistema giunge nella configurazione $\underline{0}$. Se l'interno è supercritico, allora viene raggiunta la cornice $\mathcal{C}(M_1-2, M_2-2)$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta[2J-(h+\lambda)]}$; tale cornice ha $l = M-2 \geq l^*$, pertanto è supercritica e tenendo presente che $l+2 \geq \widetilde{M}^*$ si ha che il sistema giunge in $-\underline{1}$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta[2J-(h-\lambda)]}$. In conclusione se $M \geq M^*$ allora il birettangolo è sicuramente supercritico.

Un birettangolo cha abbia l'esterno supercritico e l'interno sottocritico giunge nella configurazione $\underline{0}$ con probabilità uno nel limite $\beta \to \infty$, inoltre ciò avviene

in un tempo dell'ordine di $e^{\beta[2J-(h-\lambda)]}$; si è detto che tale configurazione è supercritica, infatti a partire da $\underline{0}$ il sistema giunge in $+\underline{1}$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta\{4L^*J-[L^*(L^*-1)+1](h+\lambda)\}}$.

Per provare quest'ultimo risultato si osserva che il modello di Blume–Capel può essere ricondotto al modello di Ising se si suppone che gli spin possano assumere soltanto i valori $+1$ e 0; infatti se si introducono le variabili

$$\zeta(x) = 2\left(\sigma(x) - \frac{1}{2}\right) \ \forall x \in \Lambda_N \ , \tag{5.4}$$

che assumono i valori -1 e $+1$, l'hamiltoniana diventa quella del modello di Ising con costante di accoppiamento $-\frac{J}{2}$ e campo magnetico esterno $\frac{h+\lambda}{2}$. Allora il comportamento dinamico del sistema può essere descritto come nel capitolo 2 e si ottengono i risultati annunciati in precedenza.

5.2 Birettangolo con interno supercritico ed esterno sottocritico.

Si vuole studiare il comportamento del birettangolo R, introdotto nel paragrafo precedente, nel caso in cui l'interno è supercritico e l'esterno sottocritico; ci si aspetta che questo sia il caso più complicato da analizzare perchè il moto dell'interno si oppone a quello dell'esterno e viceversa.

Si considera il caso in cui $L \geq L^*$ e $\widetilde{M}^* \leq M < M^*$: la sottocriticità dell'esterno e la supercriticità dell'interno permettono di scrivere le seguenti disuguaglianze

$$\begin{array}{c} (M-1)(h-\lambda) < 2J - (h-\lambda) \\ 2J-(h+\lambda) < (L-1)(h+\lambda) \end{array} \ . \tag{5.5}$$

Inoltre la condizione $\widetilde{M}^* \leq M$ implica che

$$2J - (h+\lambda) < (M-1)(h-\lambda) \ , \tag{5.6}$$

cioè la crescita del rettangolo interno è più rapida della contrazione di quello esterno. Dalle disuguaglianze precedenti si ha che il minimo sulla frontiera del bacino d'attrazione di R è costituito dalla configurazione $\mathcal{P}_4$, pertanto il sistema giunge nella cornice $\mathcal{C}(M_1 - 2, M_2 - 2)$ che è supercritica. La supercriticità di tale cornice è assicurata dal fatto che $\min\{M_1 - 2, M_2 - 2\} \geq l^*$. Si può quindi concludere che il birettangolo è supercritico e che il tempo necessario al sistema per giungere in $-\underline{1}$ è dell'ordine di $e^{\beta[2J-(h-\lambda)]}$.

In precedenza si è tacitamente supposto che il lato libero del rettangolo esterno sia quello più corto, non cambia nulla se il lato libero è quello più lungo; infatti posto $\hat{M} = \max\{M_1, M_2\}$ si ha $(\hat{M} - 1)(h - \lambda) > (M - 1)(h - \lambda)$, pertanto il minimo su ∂B è $\mathcal{P}_4$ anche in questo caso.

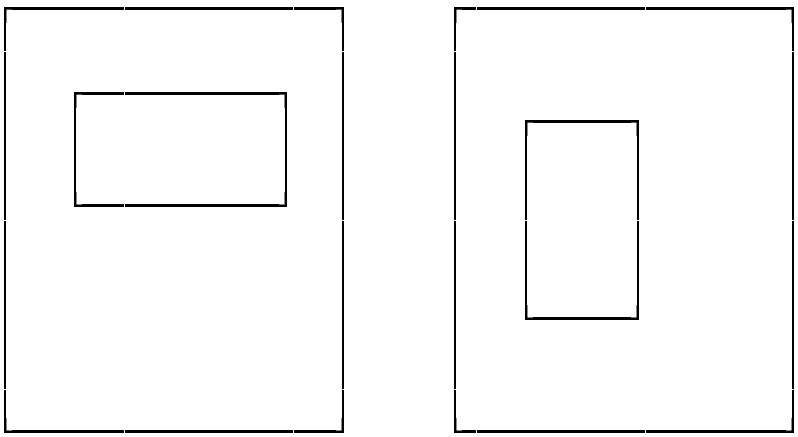


Fig.5.2

La situazione si complica se l'esterno è tanto piccolo che la crescita dell'interno è più lenta della contrazione dell'esterno, cioè se si suppone che $M < \widetilde{M}^*$; in questo caso

$$(M - 1)(h - \lambda) < 2J - (h + \lambda) \ . \tag{5.7}$$

Per capire l'evoluzione del sistema bisogna distinguere due casi: $\hat{L} \leq M - 2$ e

$\hat{L} > M - 2$. Nel primo caso, illustrato in Fig.5.2, il rettangolo esterno si contrae lungo la direzione ortogonale al suo lato più corto fino a raggiungere la forma quadrata; a questo punto la contrazione procede in entrambe le direzioni fino al raggiungimento della cornice $\mathcal{C}(L_1, L_2)$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta(M-1)(h-\lambda)}$.

Nel secondo caso il lato più lungo del rettangolo interno e quello più lungo dell'esterno sono necessariamente paralleli, si veda la Fig.5.3; l'esterno si contrae in direzione ortogonale al suo lato più corto, fino a quando è costretto ad arrestarsi per aver raggiunto l'interno, questa contrazione avviene nel tempo $e^{\beta(M-1)(h-\lambda)}$.

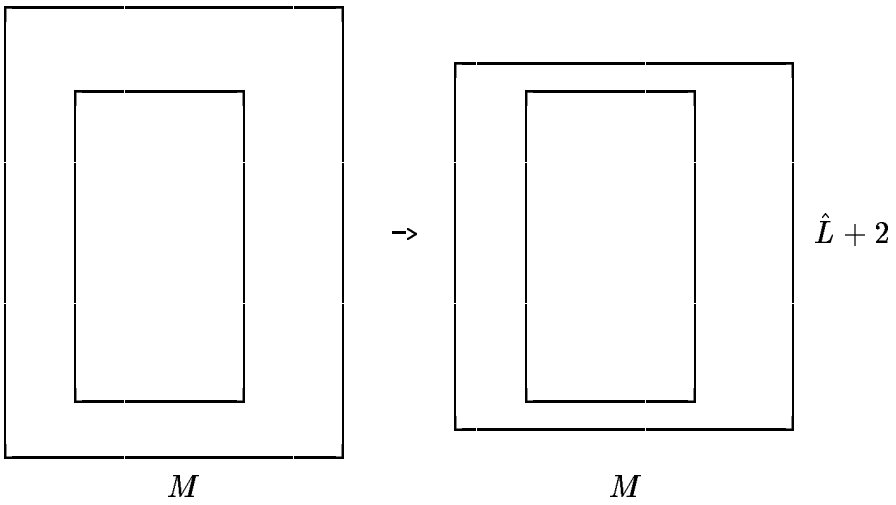


Fig.5.3

Se l'esterno ha ancora un lato libero, questo misurerà $\hat{L} + 2$; allora si distinguono i due casi seguenti

$\hat{L} + 2 < \widetilde{M}^*$: la contrazione dell'esterno è più rapida della crescita dell'interno, pertanto il sistema giunge nella cornice $\mathcal{C}(L_1, L_2)$ nel tempo $e^{\beta(\hat{L}+1)(h-\lambda)}$, che è maggiore di $e^{\beta(M-1)(h-\lambda)}$ perchè $\hat{L} + 2 > M$;

$\hat{L} + 2 \geq \widetilde{M}^*$: la crescita dell'interno è più rapida della contrazione del-

l'esterno, pertanto il sistema raggiunge la configurazione $\mathcal{C}(M-2,\hat{L})$ oppure $\mathcal{C}(\hat{L},M-2)$ nel tempo $e^{\beta[2J-(h+\lambda)]}$.

Si può quindi concludere che nel caso in esame il destino del sistema è quello di giungere su una cornice, quale sia questa cornice dipende dalle dimensioni del birettangolo iniziale; i risultati possono essere così riassunti:

$\hat{L}+2 \leq M < \widetilde{M}^*$: il sistema raggiunge la cornice $\mathcal{C}(L_1,L_2)$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta(M-1)(h-\lambda)}$;

$M < \hat{L}+2 < \widetilde{M}^*$: il sistema raggiunge la cornice $\mathcal{C}(L_1,L_2)$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta(\hat{L}+1)(h-\lambda)}$;

$\widetilde{M}^* \leq \hat{L}+2$: il sistema raggiunge la cornice $\mathcal{C}(M-2,\hat{L})$ oppure $\mathcal{C}(\hat{L},M-2)$ in un tempo dell'ordine di $e^{\beta[2J-(h+\lambda)]}$.

A questo punto ci si è ricondotti a studiare il comportamento di una cornice, il teorema 4.1 permette di concludere la dimostrazione del 5.1.

Si osserva l'emergere di un fenomeno del tutto nuovo rispetto al modello di Ising ed alle sue generalizzazioni non simmetriche: vi sono casi in cui una goccia supercritica, prima di invadere tutto il reticolo, si contrae. Il sistema nel cammino che lo conduce dalla goccia supercritica alla configurazione $+\underline{1}$ passa per minimi locali dell'energia più piccoli della goccia di partenza, nel senso della relazione d'ordine parziale (4.27). Questa vera e propria "pulsazione" del sistema avviene, ad esempio, nel caso di un birettangolo tale che $L \geq L^*$, $M < \widetilde{M}^*$, $\hat{L}+2 < \widetilde{M}^*$ e $L \geq l^*$; il sistema si contrae fino a raggiungere la cornice supercritica $\mathcal{C}(L,\hat{L})$, poi tale cornice cresce fino ad invadere tutto lo spazio.

5.3 Criticità di un plurirettangolo.

Per completare l'analisi della criticità di tutti i minimi locali dell'energia bisogna studiare il comportamento del sistema a partire da un birettangolo, cioè da una configurazione definita come segue: tutti gli spin 0 sono contenuti all'interno di un rettangolo di lati M_1 ed M_2, nel suo interno vi sono k^+ rettangoli di spin $+1$ di lati $L_{1,i}$ e $L_{2,i}$ $\forall i \in \{1,2,...,k^+\}$, questi rettangoli devono soddisfare alle due seguenti proprietà

comunque si prendano due di essi, le loro frontiere devono avere intersezione vuota;

non esiste un sito $x \in \Lambda_N$ tale che $\sigma(x) = 0$ e tale che due dei lati del quadrato unitario centrato su di esso appartengano a due dei k^+ rettangoli di spin $+1$.

Si definisce $M := \min\{M_1, M_2\}$ e $L_i := \min\{L_{1,i}, L_{2,i}\}$ $\forall i \in \{1,2,...,k^+\}$; il problema consiste nello stabilire quali condizioni queste dimensioni devono soddisfare per assicurare la sottocriticità del plurirettangolo.

Nel caso in cui sia il rettangolo esterno sia tutti i rettangoli interni sono sottocritici è facile intuire che la configurazione è sottocritica; se, invece, almeno uno dei rettangoli interni è supercritico, allora per stabilire dei risultati sul comportamento del sistema è necessario introdurre il rettangolo R, definito come l'inviluppo rettangolare dell'unione di tutti i rettangoli supercritici interni. Dette $L_{R,1}$ ed $L_{R,2}$ le lunghezze dei lati di R, si pone $L_R := \min\{L_{R,1}, L_{R,2}\}$ e $\hat{L}_R := \max\{L_{R,1}, L_{R,2}\}$; si può quindi enunciare il seguente teorema.

Teorema 5.2
Il plurirettangolo introdotto in precedenza è sottocritico nei due casi seguenti:

1) $L_i < L^* \ \forall i \in \{1,2,...,k^+\}$ e $M < M^*$;
2) $\exists$ almeno un $i \in \{1,2,...,k^+\}$ tale che $L_i \geq L^*$ e il birettangolo che si ottiene sostituendo i rettangoli interni con R è sottocritico.

In primo luogo si mostra che il plurirettangolo è sottocritico se è soddisfatta la condizione (1), il risultato è molto intuitivo, ma l'argomento viene illustrato in dettaglio perchè nel seguito verrà sfruttato in un caso ben più complicato. La scomparsa della goccia viene suddivisa in varie fasi successive: la prima fase è costituita dalla scomparsa di tutti i rettangoli interni che soddisfano la disuguaglianza seguente

$$(L_i - 1)(h + \lambda) < (M - 1)(h - \lambda) \ . \tag{5.8}$$

Si denota con $R^{(1)}$ l'inviluppo rettangolare dell'unione dei rettangoli interni che non soddisfano la (5.8), cioè dell'unione dei rettangoli interni tanto grandi da sopravvivere alla prima fase della contrazione; inoltre viene indicato con $I^{(1)} \subset \{1,2,...,k^+\}$ l'insieme di tutti gli indici che individuano uno di questi rettangoli.

A questo punto ha inizio la seconda fase della scomparsa della goccia con la contrazione del rettangolo esterno: si considerano i due casi $\hat{L}^{(1)} \leq M - 2$ e $\hat{L}^{(1)} > M - 2$, avendo indicato con $\hat{L}^{(1)}$ la lunghezza del più lungo dei lati di $R^{(1)}$. Nel primo caso la contrazione procede fino a quando il rettangolo esterno si addossa su $R^{(1)}$ ed il sistema giunge in una configurazione il cui prototipo è illustrato in Fig.5.4.

Fra tutti i rettangoli interni si individua quello cha ha il lato minimo più corto, cioè si calcola $L_{\min} := \min_{i \in I^{(1)}}\{L_i\}$; trasformando in 0 $(L_{\min} - 1)$ spin

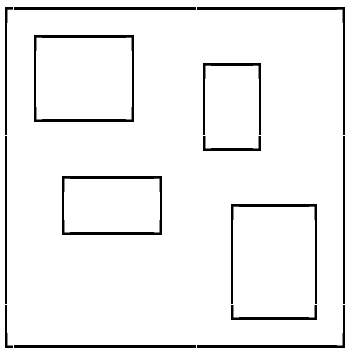


Fig.5.4

+1 di uno dei lati più corti del rettangolo appena determinato, si ottiene un minimo dell'energia sulla frontiera del bacino d'attrazione stretto della configurazione raggiunta dal sistema dopo la seconda fase della contrazione. Tipicamente si possono realizzare i due casi illustrati in Fig.5.5: dopo questa ulteriore contrazione il rettangolo esterno ha nuovamente un lato libero, oppure il rettangolo interno coinvolto nella contrazione è lontano dal bordo.

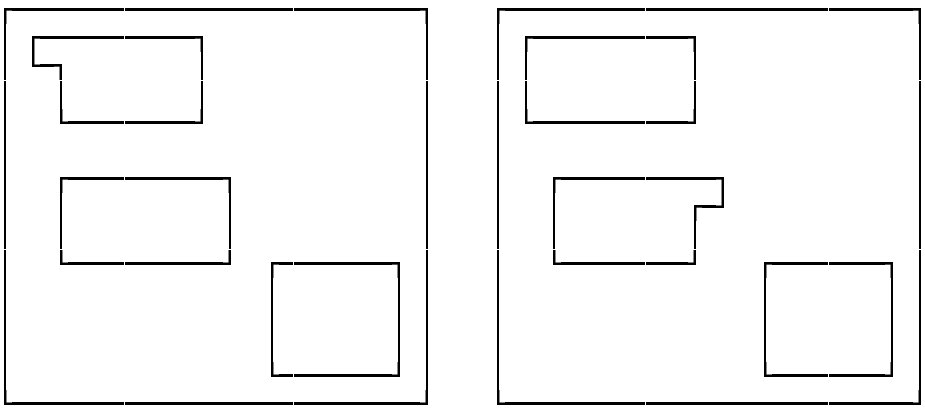


Fig.5.5

Nel primo caso l'evoluzione del sistema continua con la scomparsa di una striscia del rettangolo esterno ed il raggiungimento di una configurazione che è

ancora del tipo illustrato in Fig.5.4; mentre nel secondo caso il rettangolo esterno non ha lati liberi, quindi il processo di scomparsa continua con la contrazione di uno dei rettangoli interni. La goccia continuerà a contrarsi con il meccanismo descritto in precedenza fino alla sua totale scomparsa, pertanto il plurirettangolo è sottocritico.

Nel caso $\hat{L}^{(1)} > M - 2$ durante la seconda fase della scomparsa della goccia il sistema giunge in una configurazione caratterizzata da un rettangolo esterno di dimensioni M ed $\hat{L}^{(1)}+2$; l'eventuale lato libero di tale rettangolo misura $\hat{L}^{(1)}+2$. Se $\forall i \in I^{(1)}$ si ha $(\hat{L}^{(1)}+1)(h-\lambda) < (L_i - 1)(h+\lambda)$, allora il rettangolo esterno continua a contrarsi in direzione ortogonale al lato libero, fino ad addossarsi al rettangolo $R^{(1)}$; poi la contrazione della goccia continua come nel caso precedente.

Se, invece, esiste almeno un rettangolo interno la cui velocità di contrazione è più rapida di quella del rettangolo esterno, sarà questo a contrarsi perdendo una striscia di spin $+1$. Se per effetto di ciò uno dei due lati corti del rettangolo esterno risulta libero, allora riprende la contrazione del rettangolo esterno; in caso contrario continua la contrazione dell'interno. È evidente che i fenomeni appena descritti continuano fino alla scomparsa totale della goccia, pertanto anche in questo caso il plurirettangolo è sottocritico.

Si dimostra facilmente che il plurirettangolo è supercritico se $M \geq M^*$ oppure se $\widetilde{M}^* \leq M < M^*$ e vi è almeno un rettangolo interno supercritico; si considera, ora, il caso in cui $M < \widetilde{M}^*$ ed almeno uno dei rettangoli interni è supercritico.

In primo luogo si considerano tutti i rettangoli interni le cui dimensioni sono tali che la (5.8) è soddisfatta; questi scompaiono prima che avvenga qualsiasi altra cosa. Si salvano i rettangoli interni supercritici e quelli sottocritici che non soddisfano alla (5.8); si indica con $R^{(1)}$ l'inviluppo rettangolare all'unione di tutti

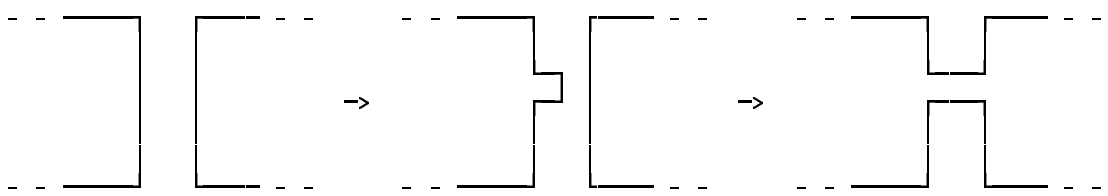


Fig.5.6 Coalescenza tra i rettangoli interni.

questi rettangoli di spin $+1$.

A questo punto ha inizio la contrazione del rettangolo esterno: si denota con $\hat{L}^{(1)}$ il più lungo dei lati di $R^{(1)}$, ragionando come nel caso in cui tutti i rettangoli interni sono sottocritici, si prova che se $\hat{L}^{(1)} \leq M-2$ il sistema raggiunge l'inviluppo rettangolare R dell'unione di tutti i rettangoli interni supercritici. Poi avviene la scomparsa di tutti i rettangoli interni sottocritici ancora presenti e quindi ha inizio la crescita dei rettangoli interni supercritici: questa avviene con il solito meccanismo di comparsa di una protuberanza, affiancato dal fenomeno della coalescenza. Infatti quando la comparsa di una protuberanza fa sì che due cluster di spin $+1$ si trovano a distanza unitaria, questi coalescono in un tempo dell'ordine dell'unità; si veda la Fig.5.6. Pertanto il sistema giunge nella cornice $\mathcal{C}(L_{R,1}, L_{R,2})$.

Nel caso in cui $\hat{L}^{(1)} > M-2$ la descrizione del comportamento del sistema è più complicata, ma con i soliti argomenti si dimostra che

$$\hat{L}_R + 2 < \widetilde{M}^* \Rightarrow \text{il sistema giunge in } \mathcal{C}(L_{R,1}, L_{R,2});$$
$$\hat{L}_R + 2 \geq \widetilde{M}^* \Rightarrow \text{il sistema giunge in } \mathcal{C}(M-2, \hat{L}_R).$$

Si osserva che nel caso in cui $M < \widetilde{M}^*$ ed almeno uno dei rettangoli interni è supercritico, il sistema si comporta esattamente come se la configurazione di partenza fosse quel birettangolo che si ottiene sostituendo i rettangoli di spin $+1$

con R; pertanto la dimostrazione del teorema 5.2 può ritenersi completa.

5.4 Definizione del bacino d'attrazione di -$\underline{1}$.

Lo studio rigoroso di sistemi stocastici, come le dinamiche di Glauber, ha il pregio di dare un'idea intuitiva molto chiara del comportamento di un sistema in una fase metastabile: nel caso di sistemi di spin viene individuato un sottospazio dello spazio delle configurazioni, i cui stati sono caratterizzati da un valore negativo della magnetizzazione ed in cui il sistema rimane confinato per un tempo molto lungo, anche in presenza di un campo magnetico esterno positivo.

Il problema è definire questo sottospazio per il modello di Blume–Capel, cioè definire il bacino d'attrazione allargato della configurazione $-\underline{1}$; a tal proposito risulta di importanza chiave aver stabilito quali siano i requisiti che un minimo locale deve soddisfare per essere sottocritico. Le idee guida nella definizione di tale bacino, che viene denotato con $\mathcal{A}$, sono quelle illustrate nel caso del modello di Ising: a partire da una qualsiasi configurazione $\sigma \in \mathcal{A}$ il sistema deve giungere con grande probabilità in $-\underline{1}$ prima che in $+\underline{1}$; cioè se $\sigma \in \mathcal{A}$, allora deve accadere $P_\sigma(\tau_{-\underline{1}} < \tau_{+\underline{1}}) \longrightarrow 1$ nel limite $\beta \to \infty$.

Per caratterizzare le configurazioni che godono di questa proprietà si costruisce un'applicazione $S : \sigma \to \hat{\sigma}$ che ad ogni $\sigma \in \Omega^*$ associa un minimo locale $\hat{\sigma}$ tale che:

$$\begin{array}{c} H(\hat{\sigma}) \leq H(\sigma) \\ \\ \sigma \prec \hat{\sigma} \end{array} , \tag{5.9}$$

cioè $\hat{\sigma}$ deve avere energia più bassa di σ e deve essere più grande di questa; in sostanza $\hat{\sigma}$ è il minimo locale più grande, quindi potenzialmente "più supercritico", che il sistema può raggiungere diminuedo la sua energia. La condizione di

appartenenza di σ al bacino $\mathcal{A}$ viene data su $\hat{\sigma}$, cioè $\mathcal{A}$ è costituito da tutte quelle configurazioni σ tali che $\hat{\sigma}$ è sottocritico.

Si consideri una configurazione $\sigma \in \Omega^*$: si denota con c^- il cluster di spin -1 tale che il suo inviluppo rettangolare $R(c^-)$ coincide con l'intero reticolo Λ_N, con $c_i^{+,0}$ $\forall i \in \{1,2,...,k^{+,0}\}$ i cluster di spin $+1$ e 0 e con c_i^- $\forall i \in \{1,2,...,k^-\}$ i cluster di spin -1 che non invadono tutto il reticolo; vengono, quindi, definite una serie di operazioni che permettono di costruire il minimo locale $\hat{\sigma}$ a partire dalla configurazione σ.

In primo luogo si considerano tutti gli spin -1 che hanno tra i loro primi vicini almeno uno spin $+1$ e si indica con σ_1 quella configurazione che si ottiene trasformando in 0 tutti gli spin -1 appena determinati. In precedenza si è dimostrato che trasformando in 0 lo spin -1 di una interfaccia $-+$ l'energia del sistema diminuisce, si veda la Fig.3.4, pertanto $H(\sigma_1) \leq H(\sigma)$; è, inoltre, ovvio che $\sigma \prec \sigma_1$, infatti l'unica operazione che è stata effettuata è la trasformazione in 0 di spin -1.

Si osserva che nulla assicura $\sigma_1 \in \Omega^*$, infatti trasformando spin -1 in 0, può accadere che la nuova configurazione non abbia un cluster di -1 che invade tutto lo spazio, cioè non sia definito il "mare" di -1. Allora si definisce l'insieme $\Omega^{**} \subset \Omega^*$ come l'insieme di tutte quelle configurazioni σ tali che σ_1 è un elemento di Ω^*; la definizione dell'applicazione $S : \sigma \to \hat{\sigma}$ viene data a partire da una configurazione $\sigma \in \Omega^{**}$.

La configurazione σ_1 è caratterizzata da un cluster c_1^- di spin -1 che invade tutto il reticolo; l'assenza di interfacce $-+$ assicura che ulteriori spin -1 formano cluster che si trovano all'interno di cluster di spin 0, si veda la Fig.5.7. Si costruisce la configurazione σ_2 trasformando in 0 tutti gli spin -1 che non fanno parte del cluster c_1^-; ovviamente si ha $\sigma_1 \prec \sigma_2$. Inoltre $H(\sigma_2) \leq H(\sigma_1)$, infatti σ_2 può essere

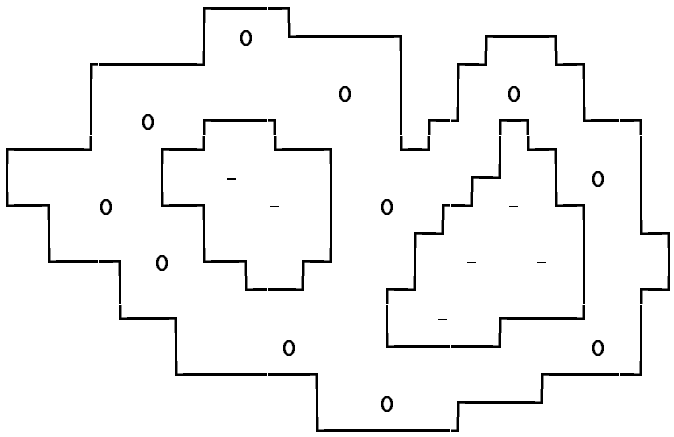


Fig.5.7 Cluster di spin -1 nella configurazione σ_1.

costruita a partire da σ_1 nel modo seguente: si individua un cluster di spin -1 che sia contenuto all'interno di un cluster di spin 0, almeno uno dei suoi spin -1 ha due o più spin 0 primi vicini, l'energia diminuisce se questo spin -1 viene trasformato in 0; l'argomento può essere iterato fino ad eliminare dall'interno del cluster di spin 0 in questione tutti gli spin -1. Ripetendo il ragionamento precedente per tutti i cluster di spin -1 diversi da c_1^-, si costruisce σ_2 a partire da σ_1 tramite una successione di singoli cambiamenti di spin, ognuno dei quali comporta una diminuzione dell'energia.

Tutti gli spin $+1$ della configurazione σ_2 si trovano in cluster contenuti all'interno di cluster di spin 0, questo è ovvio perchè non vi sono interfacce $-+$; ma all'interno dei cluster di spin $+1$ vi possono essere cluster di 0 (si veda la Fig.5.8): si denota con σ_3 la configurazione che si ottiene trasformando in $+1$ tutti gli spin 0 di σ_2 che si trovano all'interno di cluster di spin $+1$. Ragionando come in precedenza si dimostra che $H(\sigma_3) \leq H(\sigma_2)$ e che $\sigma_2 \prec \sigma_3$.

Tutti gli spin -1 della configurazione σ_3 sono quelli appartenenti al cluster c_1^- che invade tutto il reticolo. I cluster di spin 0 vengono indicati con $c^0_{3,i}$ $\forall i \in$

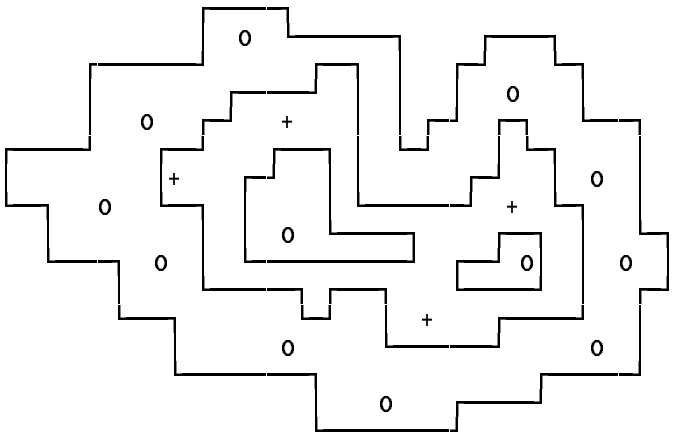


Fig.5.8 Cluster di spin 0 nella configurazione σ_2.

$\{1,2,...,k_3^0\}$, all'interno di ognuno di questi vi possono essere cluster di spin $+1$, che vengono denotati con $c^+_{3,i,j}$ $\forall i \in \{1,2,...,k_3^0\}$ e $\forall j \in \{1,2,...,k^+_{3,i}\}$. Si considerano gli inviluppi rettangolari ai cluster di spin 0

$$R^0_{3,i} = R(c^0_{3,i}) \; \forall i \in \{1,2,...,k_3^0\} \;\; , \tag{5.10}$$

si tratta di rettangoli di spin 0 immersi in un mare di spin -1; come nel caso del modello di Ising si introduce la nozione di rettangoli non interagenti e si costruiscono le catene massimali di prima generazione. Con l'usuale procedimento si costruiscono le catene massimali di f–esima generazione, ognuna delle quali è costituita da un solo rettangolo

$$\Xi^{0,(f)}_1 = \{\bar{R}^0_1\} \; ,..., \; \Xi^{0,(f)}_{k^0_f} = \{\bar{R}^0_{k^0_f}\} \;\; ; \tag{5.11}$$

si osserva che i rettangoli $\bar{R}^0_i$ $\forall i \in \{1,2,...,k^0_f\}$ sono a due a due non interagenti. Si denota con σ_4 la configurazione in cui tutti e soli gli spin $+1$ sono nei cluster $c^+_{3,i,j}$ $\forall i \in \{1,2,...,k_3^0\}$ e $\forall j \in \{1,2,...,k^+_{3,i}\}$, gli spin 0 occupano i siti che appartengono ai rettangoli $\bar{R}^0_i$ $\forall i \in \{1,2,...,k^0_f\}$ e che non sono occupati da spin $+1$,

tutti i siti restanti sono occupati da spin -1. Potrebbe accadere che σ_4 non sia un elemento di Ω^*, pertanto l'applicazione $S : \sigma \to \hat{\sigma}$ viene definita per quelle configurazioni che appartengono all'insieme $\Omega^{***} := \{\sigma \in \Omega^* : \sigma_1, \sigma_4 \in \Omega^*\}$.

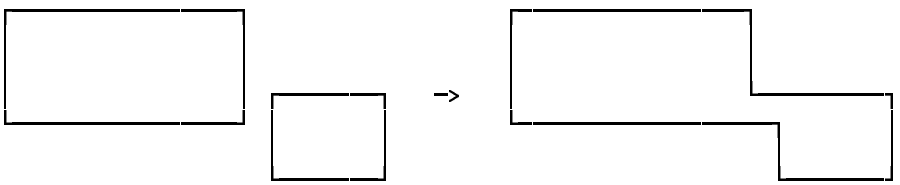


Fig.5.9 Coalescenza di due cluster di spin 0 interagenti e con intersezione vuota.

In modo del tutto banale si ha $\sigma_3 \prec \sigma_4$; si dimostra, ora, che $H(\sigma_4) \leq H(\sigma_3)$. Per costruire σ_4 vengono effettuate due operazioni: "riempimento" del rettangolo circoscritto ad un cluster di spin 0 immerso in un mare di -1, e "riempimento" dell'inviluppo rettangolare dell'unione di due rettangoli interagenti. La prima operazione può essere effettuata abbassando l'energia, infatti preso un cluster di spin 0 immerso nel mare di -1 e supposto che non sia rettangolare, si può determinare uno spin -1 che ha almeno due spin 0 primi vicini. Trasformando tale spin -1 in 0 l'energia diminuisce, questo procedimento può essere ripetuto fino a trasformare in 0 tutti gli spin -1 che si trovano all'interno dell'inviluppo rettangolare. La seconda operazione coincide con la prima nel caso in cui le frontiere dei due rettangoli interagenti si intersecano, in caso contrario esiste uno spin -1 con due spin 0 primi vicini (Fig.5.9), trasformandolo in 0 l'energia diminuisce e si ottiene un unico cluster di 0 il cui inviluppo rettangolare può essere riempito con diminuzione dell'energia.

Nella configurazione σ_4 sono presenti tutti i cluster di spin $+1$ che erano presenti anche in σ_3, questi vengono ora classificati tenendo presente il rettangolo

$\bar{R}_i^0$ con $i \in \{1,2,...,k_f^0\}$ all'interno del quale si trovano; cioè tutti i cluster di spin $+1$ che si trovano all'interno di $\bar{R}_i^0$ vengono denotati con il simbolo $c_{4,i,j}^+$ con $i \in \{1,2,...,k_f^0\}$ e $\forall j \in \{1,2,...,k_{4,i}^+\}$.

I cluster di spin $+1$ che si trovano all'interno di ognuno dei rettangoli $\bar{R}_i^0$ possono essere sottoposti alla stessa sequenza di trasformazioni cui sono stati sottoposti i cluster di 0, formando catene di rettangoli di spin $+1$ immersi in un "mare" di spin 0. All'interno di ognuno dei rettangoli $\bar{R}_i^0$ si ottengono $k_{f,i}^+$ rettangoli di spin $+1$, che vengono denotati con $\bar{R}_{i,j}^+$ con $i \in \{1,2,...,k_f^0\}$ e $\forall j \in \{1,2,...,k_{f,i}^+\}$; tali rettangoli sono a due a due non interagenti per costruzione. La configurazione così ottenuta viene denotata con $\hat{\sigma}$, come al solito si prova che $\sigma_4 \prec \hat{\sigma}$ e che $H(\hat{\sigma}) \leq H(\sigma_4)$.

Si osserva che $\hat{\sigma}$ è un minimo locale, ciò è assicurato dal fatto che i rettangoli di spin 0 sono a due a due non interagenti, e dal fatto che i rettangoli di spin $+1$ che si trovano all'interno di ognuno di essi sono anche loro a due a due non interagenti. L'applicazione $S : \sigma \to \hat{\sigma}$ gode delle due proprietà (5.9) ed inoltre è "monotona", nel senso che

$$\sigma \prec \eta \;\Rightarrow\; \hat{\sigma} \prec \hat{\eta} \;\; . \tag{5.12}$$

L'applicazione S e i teoremi sulla criticità dei minimi locali possono essere sfruttati per definire l'insieme $\mathcal{A}$

$$\mathcal{A} := \{\sigma \in \Omega^{***} : \; \hat{\sigma} \text{ è sottocritico}\} \;\; . \tag{5.13}$$

Sono state quindi caratterizzate le configurazioni del bacino d'attrazione allargato di $-\underline{1}$: quando il sistema è nella fase metastabile il moto del suo punto rappresentativo nello spazio delle configurazioni è confinato in $\mathcal{A}$. Di tanto in tanto si formano delle gocce di spin 0 ed all'interno di queste gocce di spin $+1$,

ma si tratta di configurazioni sottocritche che scompaiono presto, nel senso che il sistema torna nella configurazione $-\underline{1}$ in un tempo molto più breve di quello che trascorre in $\mathcal{A}$.

Per stimare quest'ultimo, cioè per ottenere una stima della vita media dello stato metastabile, bisogna calcolare il minimo dell'energia sulla frontiera di $\mathcal{A}$; infatti l'uscita dal bacino avverrà con il verificarsi dell'evento raro costituito dal formarsi della goccia protocritica $\mathcal{P}$, ove con $\mathcal{P}$ si indica il minimo dell'energia sulla frontiera di $\mathcal{A}$. Pertanto il passo successivo nello studio del comportamento metastabile del modello di Blume–Capel consisterà nella determinazione della configurazione protocritica.

Appendice A.

Si dimostra il lemma 2.2, ovvero il lemma di reversibilità: sia $\varepsilon > 0$ e $\sigma, \eta \in \Omega$, si pone

$$\tau(\varepsilon) = e^{\beta[H(\eta)-H(\sigma)]-\beta\varepsilon} \quad .$$

Bisogna calcolare

$$P_\sigma(\tau_\eta < \tau(\varepsilon)) = \sum_{t=1}^{\tau(\varepsilon)} P_\sigma(\sigma_t = \eta,\ \sigma_{t'} \neq \eta\ \forall t' < t) \leq \sum_{t=1}^{\tau(\varepsilon)} P_\sigma(\sigma_t = \eta) \quad ,$$

tenendo presente la definizione di funzione di transizione dopo t passi si può scrivere

$$P_\sigma(\sigma_t = \eta) = P^t(\sigma, \eta) = \sum_{\bar\sigma_1, \ldots, \bar\sigma_{t-1} \in \Omega} P(\sigma, \bar\sigma_1) \ldots P(\bar\sigma_{t-1}, \eta) \quad .$$

Applicando la reversibilità della dinamica di Metropolis rispetto alla misura di Gibbs, si ha

$$P_\sigma(\sigma_t = \eta) =$$

$$= \sum_{\bar\sigma_1, \ldots, \bar\sigma_{t-1} \in \Omega} P(\bar\sigma_1, \sigma) e^{-\beta[H(\bar\sigma_1)-H(\sigma)]} \ldots P(\eta, \bar\sigma_{t-1}) e^{-\beta[H(\eta)-H(\bar\sigma_{t-1})]} \quad ,$$

e quindi

$$P_\sigma(\sigma_t = \eta) = e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]} P^t(\eta, \sigma) = e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]} P_\eta(\sigma_t = \sigma) \quad .$$

Si può quindi concludere

$$P_\sigma(\tau_\eta < \tau(\varepsilon)) \leq \sum_{t=1}^{\tau(\varepsilon)} e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]} P_\eta(\sigma_t = \sigma) \leq \sum_{t=1}^{\tau(\varepsilon)} e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]} \quad ,$$

in virtù del fatto che

$$P_\eta(\sigma_t = \sigma) \leq 1 \quad .$$

Ricordando l'espressione di $\tau(\varepsilon)$

$$P_\sigma(\tau_\eta < \tau(\varepsilon)) \leq e^{\beta[H(\eta)-H(\sigma)]-\beta\varepsilon}\ e^{-\beta[H(\eta)-H(\sigma)]} =$$

$$= e^{-\beta\varepsilon} \overset{\beta\to\infty}{\longrightarrow} 0 \ ;$$

questo completa la prova del lemma di reversibilità.

Bibliografia.

[B] Binder,K.: Theory of first–order phase transitions. Rep. Prog. Phys. 50, 783-859, 1987.

[BD] Becker,R. Döring,W.: Ann. der Phys. 24, 719-752, 1935.

[BEG] Blume,M. Emery,J. Griffiths,R.B.: Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He^3–He^4 Mixtures. Phys. Rev. A vol.4, num.3, 1971.

[C] Capel,H.W.: On the possibility of first–order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero–field splitting. Physica 32, 966-988, 1966.

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

[G] Griffiths,R.B.: Peierls proof of spontaneous magnetization in a two–dimensional Ising ferromagnet. Phys. Rev. 136A, 437, 1964.

[GR] Gregg,J.F. ed altri : Relaxation dynamics of metastable antiferromagnetic states. J. Appl. Phys. 67 (9), 1 May 1990.

[H] Huang,K.: Statistical Mechanics. Wiley, New York 1963.

[HE] Hemmer,P.C. Kac,M. Uhlenbeck,G.E.: On the van der Waals theory of the vapour–liquid equilibrium III: Discussion of a one–dimensional model. J. Math. Phys. 5, 60, 1964.

[I] Isakov,S.N.: Nonanalytic Features of the First Order Phase Transition in the Ising Model. Comm. Math. Phys. 95, 427-443, 1984.

[K] Kac,M. Uhlenbeck,G.E. Hemmer,P.C.: On the van der Waals theory of the vapour–liquid equilibrium I: Discussion of a one–dimensional model. J. Math. Phys. 4, 216, 1963.

[KO1] Kotecky,R. Olivieri,E.: Droplet Dynamics for Asymmetric Ising Model. J. Stat. Phys. 70, 1121-1148, 1993.

[KO2] Kotecky,R. Olivieri,E.: Shapes of Growing Droplets - A Model of Escape from a Metastable Phase. Carr Reports in Mathematical Physics. June 1993.

[LP] Lebowitz,J.L. Penrose,O.: Rigorous treatment of the Van der Waals–Maxwell theory of the liquid–vapour transition. J. Stat. Phys. 7, 98, 1966.

[LR] Lanford,O.E. Ruelle,D.: Observables at Infinity and States with Short Range Correlations in Statistical Mechanics. Comm. Math. Phys. 13, 194-215, 1969.

[M] Maxwell, J.C., 1965, Scientific Papers (ed. W.D. Niven) (Dover, New York), p. 425.

[NS] Neves,E.J. Schonmann,R.H.: Critical droplets and metastability for a Glauber dynamics at very low temperature. Comm. Math. Phys. 137, 209-230, 1991.

[PL1] Penrose,O. Lebowitz,J.L.: 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). Montroll,E.W., Lebowitz,J.L. (eds.) Amsterdam: North–Holland Physics Publishing 1987.

[PL2] Penrose,O. Lebowitz,J.L.: Rigorous treatment of metastable states in the Van der Waals–Maxwell theory. J. Stat. Phys. 3, 211, 1971.

[R] Ruelle,D.: Statistical mechanics: rigorous results. W.A. Benjamin, New York 1969.

[S] Schonmann,R.H.: The pattern of escape from metastability of a stochastic Ising model. Comm. Math. Phys. 147, 231-240, 1992.

[SL] Slawny,J.: Low–temperature Properties of Classical Lattice Systems : Phase Transitions and Phase Diagrams. in Domb–Lebowitz, vol.

[T] Thompson,C.J.: Classical equilibrium statistical mechanics. (Clarendon press-Oxford), 1988.

[TM] Tomita,H. Miyashita,S.: Statistical properties of the relaxation processes of metastable states in the kinetic Ising model. Phys. Rev. B 46, 14, 1992.

[U] Uhlenbeck,G.E. Kac,M. Hemmer,P.C.: On the van der Waals theory of the vapour–liquid equilibrium II: Discussion of a one–dimensional model. J. Math. Phys. 4, 229, 1963.

[Y] Yang,C.N.: The spontaneous magnetization of a two–dimensional Ising model. Phys. Rev. 85, 809, 1952.

Indice

Introduzione i

Capitolo 1: La metastabilità.

1.1 Teoria di van der Waals–Maxwell 1

1.2 Stati metastabili nella teoria di van der Waals–Maxwell 4

1.3 Derivazione dell'equazione di van der Waals in Meccanica Statistica 6

1.4 Stati metastabili nel modello di Ising 9

1.5 Teoria classica della nucleazione 15

1.6 Metodo degli ensemble statistici ristretti 20

Capitolo 2: Metastabilità nel modello di Ising stocastico.

2.1 Dinamiche di Glauber 25

2.2 Dinamica di Metropolis 29

2.3 Dinamica di Metropolis in tempo continuo 32

2.4 Il pathwise approach 34

2.5 Minimi locali e loro dimensioni critiche 38

2.6 Bacino di attrazione allargato della configurazione $-\underline{1}$ 45

2.7 Uscita del sistema dalla fase metastabile 50

Capitolo 3: Studio dinamico del modello di Blume–Capel.

3.1 Diagramma di fase del modello di Blume–Capel

a bassa temperatura 59

3.2 Dinamica di Metropolis per il modello di Blume–Capel 64

3.3 Minimi locali dell'hamiltoniana $H(\sigma)$ 66

3.4 Energia dei minimi locali dell'hamiltoniana $H(\sigma)$ 73

3.5 Meccanismi di crescita e di contrazione 78

3.6 Crescita e contrazione delle cornici 82

Capitolo 4: Risultati rigorosi sulla criticità delle cornici

4.1 Teorema sulla criticità delle cornici 87

4.2 Minimo dell'energia sulla frontiera del bacino d'attrazione

di una cornice nel caso $l < \widetilde{L}^*$ 91

4.3 Stima dall'alto sul tempo $\tau_{\partial B}$ 97

4.4 Scomparsa della cornice nel caso $l < \widetilde{L}^*$ 102

4.5 Scomparsa della cornice nel caso $\widetilde{L}^* < l < l^*$ e $m < m^*(l)$ 105

4.6 Crescita della cornice 114

Capitolo 5: Criticità di un generico minimo locale

e bacino d'attrazione di $-\underline{1}$.

5.1 Teorema sulla criticità di un generico birettangolo.....117

5.2 Birettangolo con interno supercritico ed esterno sottocritico 121

5.3 Criticità di un plurirettangolo 125

5.4 Definizione del bacino d'attrazione di $-\underline{1}$.....130

Appendice A 137

Bibliografia 139

Indice 142