

Riassunto della tesi di Massimo Alacevich

Appello di Laurea Aprile 2015

Candidato : Massimo Alacevich (alacevich@gmail.com)

Titolo tesi (italiano) : Simulazione numerica del modello di Ising bidimensionale

Titolo tesi (inglese) : Numerical simulation of the two-dimensional Ising model

Relatore : Lapo Casetti (lapo.casetti@unifi.it)

La fisica teorica si propone di modellizzare la realtà per fornire una spiegazione e una previsione dei fenomeni naturali: uno spazio importante in questa branca della fisica se lo è ritagliato la meccanica statistica che, studiando il comportamento macroscopico di un sistema a partire dall'interazione microscopica tra i suoi costituenti elementari, ha fornito dei risultati molto importanti come la spiegazione delle transizioni di fase.

Il modello di Ising bidimensionale è il modello più semplice capace di evidenziare la presenza di una transizione di fase in una sostanza ferromagnetica nel limite termodinamico. Queste sostanze infatti presentano una magnetizzazione spontanea non nulla solo al di sotto della temperatura critica, detta anche temperatura di Curie, oltre la quale invece hanno un comportamento paramagnetico: la natura di questo effetto è dovuta all'interazione di scambio tra i momenti magnetici, interazione che solo al di sotto della temperatura critica riesce a contrastare la tendenza dell'agitazione termica a disordinare il sistema.

In questa tesi vogliamo descrivere il comportamento del modello di Ising bidimensionale utilizzando una simulazione numerica basata sul metodo Monte Carlo. Non sarà possibile ovviamente raggiungere la condizione di limite termodinamico, che nel nostro modello coincide con il considerare un reticolo infinito, ma cercheremo comunque di evidenziare la presenza della transizione di fase e verificheremo come i dati ottenuti dalla simulazione si discostino dall'andamento teorico in misura sempre minore al crescere della taglia del reticolo.

Nel primo capitolo si presenta il modello di Ising, descrivendo inoltre l'assenza della transizione di fase nel modello monodimensionale e la presenza invece in quello bidimensionale, giustificandone così il suo utilizzo.

Nel secondo capitolo si descrive brevemente il metodo Monte Carlo, spiegando i metodi di campionamento e di integrazione utilizzati nella simulazione: infatti si descrivono il Markov-chain sampling e l'Importance sampling, oltre al problema dell'autocorrelazione, caratteristico del tipo di campionamento utilizzato. L'idea di base del metodo è quella di utilizzare l'Algoritmo di Metropolis: esso consente di creare un set di configurazioni generato secondo la distribuzione di Boltzmann, set sul quale si stimano le grandezze termodinamiche in modo semplice. Il set di configurazioni viene costruito scegliendo la prima in modo arbitrario, e andando a modificare ogni volta quella precedente, confrontando la probabilità di transizione ad una nuova configurazione con un numero casuale.

Nel terzo capitolo ed ultimo capitolo si presentano invece i risultati della soluzione esatta di Onsager del modello di Ising bidimensionale, la struttura del programma di simulazione utilizzato, il confronto dei dati simulati con le funzioni termodinamiche esatte e la stima della temperatura critica. Si osserva come l'andamento esatto delle funzioni termodinamiche si può ottenere solo nel limite termodinamico, verificando che al crescere della dimensione del reticolo l'andamento si discosta sempre meno da quello atteso. Per effettuare una stima della temperatura critica si utilizzano due metodi: la stima del massimo del calore specifico e il cumulante di Binder.