

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI CATANIA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA SPECIALISTICA IN FISICA
TRANSIZIONI DI FASE NEI MATERIALI

TRANSIZIONI DI FASE NEL MODELLO XY

dott. Emanuele Francesco Pecora
matricola n.

Docente:

Indice

1	Introduzione	2
2	Rassegna sperimentale: fluidi e sistemi magnetici	4
3	Proprietà generali	7
3.1	Esponenti di punto critico	8
3.2	Funzione di correlazione	11
4	Modelli teorici per le transizioni di fase	13
4.1	La transizione Berezinskii-Kosterlitz-Thouless	14
4.2	Il modello XY	18
	Riferimenti bibliografici	23
	Elenco delle figure	24

In copertina: esempio di vortici ed antivortici nel modello XY. Ulteriori informazioni a pag. 15, fig. 8.

1 Introduzione

Le transizioni di fase sono tra i fenomeni più importanti e trasversali in natura. Consistono in cambiamenti improvvisi di quantità misurabili a livello macroscopico al variare di parametri come pressione o temperatura; questi cambiamenti riflettono delle modifiche a livello microscopico che matematicamente sono descritte dal comportamento non analitico di opportune funzioni termodinamiche (vd. fig. 1). Tipicamente, ma non necessariamente, avvengono in condizioni alle quali il sistema non è in equilibrio termodinamico [1].

Figura 1: Calore specifico di un sistema di ${}^4\text{He}$ in prossimità del punto critico della transizione alla fase superfluida. Si nota immediatamente l'andamento della curva, che ricorda la lettera greca λ (da cui il nome transizione λ , parametro che in questo caso assume un valore molto piccolo, prossimo allo zero). La forma è dovuta ad una discontinuità della derivata prima dell'energia libera del sistema. Si noti inoltre che nei tre grafici la scala delle temperature è ingrandita progressivamente di un fattore 1000, cosa da ricollegare alle proprietà di *scaling* tipiche delle transizioni.

Esempi familiari di questo tipo di trasformazioni sono la transizione acqua/ghiaccio, la demagnetizzazione di certi materiali ad alte temperature, lo studio dei solidi sottoposti ad alte pressioni, la transizione ad uno stato superconduttore. Ma in realtà i fenomeni interpretati come transizioni di fase sono molto vari, e sono alla base della scienza dei materiali, della cosmologia, della fisica delle particelle, di chimica, biologia, sociologia etc. Ma non solo: questi modelli sono utilizzati anche per interpretare alcuni fenomeni estranei alla fisica, come il traffico, in particolare nel passaggio dallo stato di libera circolazione allo stato di imbottigliamento, oppure i fenomeni di crescita o di accumulazione di peso.

L'importanza dello studio delle transizioni di fase è legato alla comprensione del sistema in cui queste avvengono; potremmo dire che la fisica di un sistema si ottiene studiando le sue fasi e le transizioni da una fase all'altra. Una caratteristica propria delle transizioni di fase è l'esistenza di un parametro d'ordine, cioè di una variabile che assume valori non nulli in una fase, e vale zero dopo la transizione. Si vede che questa è legato non al singolo sistema fisico, ma alla transizione nella sua essenza, ovvero è un parametro universale che ci permette di studiare proprietà globali dei sistemi fisici. Ed è per questo che ad esempio Wilson ha dimostrato che esiste un parallelismo impressionante tra la fisica dei superconduttori e la fisica delle particelle elementari [2].

Ma la fisica delle transizioni di fase è legata anche ad un'altro aspetto che caratterizza in modo sostanziale un sistema fisico: le simmetrie di cui esso gode. Infatti ad una transizione di fase è legata spesso la rottura di una simmetria che il sistema possiede in un suo determinato stato. Ad esempio oggi si pensa che lo stato primordiale dell'universo fosse fortemente simmetrico e che la sua evoluzione sia stata contraddistinta da una serie di transizioni di fase attraverso le quali si sono formate le particelle di materia oggi note (elettroni, protoni, bosoni...). Inoltre durante

la transizione il sistema assume la notevole proprietà di scala, per cui ci appare lo stesso qualunque scala adoperiamo per osservarlo.

In questa tesina, dopo una rassegna in cui sono evidenziate le proprietà delle transizioni di fase prendendo in esame due sistemi particolari (i fluidi e i sistemi magnetici), si discuterà delle principali proprietà matematiche utilizzate per descrivere questi fenomeni. Quindi si entrerà nel dettaglio di una particolare transizione - transizione di Berezinskii-Kosterlitz-Thouless - e di un modello, il modello XY in cui si verifica questa transizione.

2 **Rassegna sperimentale: fluidi e sistemi magnetici**

Come detto una grande varietà di sistemi fisici mostrano delle transizioni di fase, che sono caratterizzate da proprietà del tutto generali. Per illustrarle ci riferiremo per semplicità alle transizioni liquido/gas e magnetiche. Già a partire da questi due esempi, che coinvolgono sistemi totalmente diversi, si possono apprezzare molte proprietà generali [3].

E' noto studiando il diagramma di fase di un fluido reale (ovvero rappresentando il sistema al variare dei parametri pressione e temperatura, cfr. fig. 2) che questo divide il piano in diverse regioni: in ognuna si ha la stabilità per una sola fase (liquida, solida o gassosa); le diverse regioni sono delimitate da curve che segnano il passaggio del sistema da una fase all'altra. Il luogo dei punti appartenente a queste curve rappresenta una condizione di equilibrio tra due fasi. Spesso si osserva pure l'esistenza di un punto del diagramma, che prende il nome di punto triplo, in cui si ha l'equilibrio tra le tre fasi. Per descrivere questi comportamenti è utile introdurre un parametro d'ordine

$$\rho_L - \rho_G$$

Figura 2: A sinistra, proiezione nel piano PT del diagramma di fase PVT di un fluido reale. Si notano le tre diverse regioni, corrispondenti alla stabilità delle tre fasi della materia, separate dalle curve di equilibrio tra due fasi. Da osservare che la curva di evaporazione non si estende all'infinito, ma si interrompe nel punto triplo. Il percorso tratteggiato indica la possibilità di effettuare una transizione da liquido a gas senza attraversare l'equilibrio tra le due fasi. A destra, proiezione dello stesso diagramma sul piano ρT al variare della temperatura. In questo grafico si mette in luce l'esistenza del parametro d'ordine $\rho_L - \rho_G$. Si osservi che ad alte temperature le isoterme tendono ad una retta, che rappresenta il limite per un sistema non interagente.

dove ρ indica la densità di materia, e con i pedici L e G si indica la fase liquida e gassosa rispettivamente. Si vede che questa quantità è non nulla sotto la temperatura del punto critico T_c , e vale zero al di sopra.

Consideriamo ora invece un sistema ferromagnetico e lo studiamo rappresentando in un diagramma il suo stato al variare del campo magnetico applicato H e della sua magnetizzazione M (vd. fig. 2). Ritroviamo una analogia sorprendente tra questo sistema e il fluido discusso prima, non solo a livello qualitativo guardando i due diagrammi, ma anche a livello quantitativo: si ritrova una analogia formale tra i parametri utilizzati per descrivere i due sistemi, come ad esempio suscettività magnetica e coefficiente di compressibilità. Anche in questo caso è possibile definire un parametro d'ordine che ha le stesse caratteristiche dette prima, ma che ora è rappresentato dalla magnetizzazione M_0 presente in assenza di

Figura 3: A sinistra proiezione nel piano HM al variare della temperatura del diagramma di fase HMT per un sistema magnetico. Si osservi che ad alte temperature le isoterme tendono ad una retta, che rappresenta ancora una volta il limite per un sistema non interagente. A destra proiezione dello stesso nel piano HT .

Figura 4: A sinistra, proiezione del diagramma di fase di un fluido nel piano $T\rho$: si osservi l'andamento del parametro d'ordine $\rho_L - \rho_G \sim |\epsilon|^\lambda$. A destra, proiezione del diagramma di un sistema magnetico sul piano MT . Dal confronto di questi due grafici è evidente il comportamento simile dei due sistemi, e il fatto che le grandezze M_0 e $\rho_L - \rho_G$ svolgono lo stesso ruolo.

campo magnetico esterno (vd. fig. 2).

In particolare è di rilevante interesse il comportamento dei due sistemi in prossimità dei punti critici in cui si ha l'equilibrio tra due stati diversi del

sistema. E' stato sviluppato a tal proposito un modello microscopico che descrive in modo simile i due sistemi: si consideri un volume V costituito da celle microscopiche di fluido, ovvero dalle celle elementari contenenti il momento magnetico. La situazione in cui $T > T_c$ corrisponde ad una rapida e casuale orientazione del momento magnetico di ogni cella, ovvero del moto del fluido. Non appena ci si avvicina alla temperatura critica si osserva una interazione tra le varie celle, per cui si formano dei piccoli agglomerati in cui tutte le celle hanno lo stesso momento magnetico, ovvero si ha la nucleazione della nuova fase. Questo fenomeno, che prende il nome di opalescenza critica, è stato osservato sperimentalmente: infatti non appena agglomerati assumono dimensioni laterali paragonabili alla lunghezza d'onda della luce, questa viene scatterata con un effetto osservabile. Raggiunta poi la temperatura critica, l'ordine che si stava formando negli agglomerati si estende a lungo range in tutto il sistema (cfr. fig. 2).

3 Proprietà generali

Entrando più nel dettaglio della trattazione matematica [4], la fisica delle transizioni di fase si basa sulle seguenti premesse: la probabilità di trovare un sistema in un certo stato S con energia E e alla temperatura T è

$$P(S) = \frac{e^{-\beta E(S)}}{Z_L(\beta)}$$

essendo $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e Z_L un fattore di normalizzazione noto come funzione di partizione nell'approssimazione lineare:

$$Z_L(t) = \sum_S e^{-\beta E(S)}.$$

Altro parametro importante è l'energia libera

$$f_L(\beta) = \frac{1}{L^d} \ln Z_L(\beta)$$

Figura 5: Rappresentazione pittorica del modello microscopico di un sistema durante una transizione di fase. Un quadrato colorato indica una cella occupata, ovvero uno spin up. Si nota al tendere di $T \rightarrow T_c$ la formazione di aggregati ordinati di celle, fino al raggiungimento di un ordine a lungo range. Con ξ viene indicata la lunghezza di correlazione del sistema.

dove d è la dimensionalità del sistema in considerazione. Una transizione di fase può avvenire solo se il sistema sotto determinate condizioni può esistere in un infinito numero di stati (nel limite termodinamico $L \rightarrow \infty$). Vediamo ora più in dettaglio due grandezze importanti per il nostro studio: gli esponenti di punto critico e la funzione di correlazione.

3.1 Esponenti di punto critico

In tutti i sistemi in cui si presentano transizioni di fase sono stati ritrovati elementi comuni come un diagramma di fase, un punto critico, un parametro d'ordine. E' chiaro allora che sono stati fatti molti sforzi per

trovare un modello teorico unitario che potesse descrivere questi fenomeni. L'attenzione è stata puntata in modo particolare sul poter esprimere i parametri d'ordine in funzione di una grandezza tipica del sistema elevata ad un esponente, che prende il nome di esponente di punto critico λ , con la speranza che questo possa assumere lo stesso valore per tutti i sistemi. Ad esempio nel caso della magnetizzazione residua di un materiale ferromagnetico, questa si può esprimere come [5]:

$$M \propto \left(-\frac{T - T_c}{T_c} \right)^\lambda = (-\epsilon)^\lambda$$

Il fatto che sia stata riposta maggiore attenzione non sul trovare una teoria per fittare l'intero range di dati sperimentali, ma per spiegare il comportamento solo in prossimità del punto critico, si spiega con l'osservazione che solo in questa regione si ha un comportamento indipendente dal particolare sistema fisico, e che può essere spiegato ricorrendo a considerazioni di base di meccanica statistica e termodinamica.

Diamo allora una definizione rigorosa e generale dell'esponente di punto critico [3]: si consideri una generica funzione positiva e continua $f(\epsilon)$, funzione della variabile

$$\epsilon = \frac{T - T_C}{T_C}$$

ed esista il limite

$$\lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\epsilon)}{\ln \epsilon}$$

Si definisce esponente di punto critico da associare alla funzione $f(\epsilon)$ la quantità λ . Questo concetto si indica con la scrittura

$$f(\epsilon) \sim \epsilon^\lambda$$

Da questa definizione segue che valori negativi di λ corrispondono a funzioni che divergono in prossimità del punto critico, mentre esponenti positivi sono da associare a funzioni che ivi tendono a zero. Per $\lambda = 0$ il

Figura 6: Esempi di varie tipologie di comportamento per $\epsilon = 0$. In a) si ha il caso $\lambda < 0$; in b) si ha $\lambda > 0$; in c) $\lambda = 0$, ma si ha una divergenza logaritmica ($f(\epsilon) \sim |\ln f(\epsilon)|$); in d) si ha ancora $\lambda = 0$, ma stavolta $\lambda_s = \frac{1}{2}$, e dunque $f(\epsilon) \sim \text{const}$.

comportamento della $f(0)$ può essere una divergenza logaritmica, o una singolarità di cuspidi, o una discontinuità eliminabile (vd. fig. 3.1). Per distinguere tra queste tre possibilità si introduce un secondo parametro che separa le singolarità logaritmiche da quelle di cuspidi; per far questo è necessario trovare la prima derivata che diverge ad $\epsilon \rightarrow 0$: si definisce allora:

$$\lambda_s = j + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln |f^{(j)}(\epsilon)|}{\ln \epsilon}$$

Queste definizioni del tutto generali andranno poi applicate al singolo sistema fisico e alle grandezze termodinamiche rilevanti per la transizione di fase, per cui si definiscono nei vari casi opportuni parametri.

In generale diremo che una transizione è del primo ordine se si ha un comportamento non analitico della derivata prima di una opportuna funzione termodinamica; si parla di transizioni di ordine superiore o continue se in prossimità del punto critico tale derivata prima risulta continua, mentre la derivata seconda è o discontinua o divergente.

Come detto la cosa più interessante è che nonostante ogni sistema fisico abbia le sue peculiarità, per cui ad esempio nel caso dei fluidi la temperatura critica vari di molto da caso a caso, ciò che si trova sperimentalmente è che il rispettivo esponente assume in tutti i casi sostanzialmente lo stesso valore. Un tempo si pensava che esistesse addirittura un solo esponente universale, per tutti i materiali; questa speranza non è stata supportata dai dati sperimentali, ma non modifica l'essenza del discorso, e cioè che il valore dell'esponente è legato alla transizione in quanto tale e non al sistema particolare.

3.2 Funzione di correlazione

Un'altra grandezza che svolge un ruolo molto importante nella trattazione matematica dei sistemi fisici è la funzione di correlazione [6], definita, nel caso di un sistema spazialmente uniforme, ovvero invariante per traslazione, con la seguente equazione:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \langle n(\vec{r})n(\vec{r}') \rangle - n^2$$

essendo $n(\vec{r})$ la densità di particelle nella posizione indicata dal vettore \vec{r} . Questa funzione è una misura delle correlazioni delle fluttuazioni della densità rispetto al valore medio, e fisicamente indica una misura di

probabilità condizionata, ovvero la probabilità di trovare una particella nella posizione \vec{r} se è presente una particella nella posizione \vec{r}' (infatti per $|\vec{r} - \vec{r}'| \rightarrow \infty$ si ha $G \rightarrow 0$). Ovviamente la dipendenza esplicita della funzione di correlazione dipende direttamente dal potenziale che agisce tra le particelle del particolare sistema in considerazione.

La cosa interessante è che a partire da questa funzione così definita possono essere ricavate molte grandezze fisiche di rilevanza anche sperimentale. Ad esempio si può vedere [3] che per un fluido, in cui agisce un potenziale tra le particelle del tipo di Lennard-Jones (potenziale 6:12), a partire dalla $G(\vec{r} - \vec{r}')$ si può ricavare il parametro di compressibilità isoterma:

$$\frac{K_T}{K_T^0} = n^{-1} \int G(\vec{r}) d\vec{r}$$

Una relazione analoga si ricava per la suscettività di un sistema di spin. In entrambi i casi si vede che in prossimità del punto critico si ha un aumento del valore della funzione di correlazione.

Altro significato molto importante della funzione di correlazione è che la sua trasformata di Fourier spaziale è definita come il fattore di struttura tipico di un sistema. Questo fattore entra in gioco ad esempio nel calcolo della distribuzione di intensità di una radiazione e.m. scatterata elettronicamente $I(\vec{q})$, essendo \vec{q} il vettore d'onda della radiazione incidente. Si prova ad esempio che il rapporto tra la $I(\vec{q})$ e la distribuzione $I^0(\vec{q})$ relativa ad un sistema non interagente vale

$$\frac{I(\vec{q})}{I^0(\vec{q})} = n^{-1} \int G(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{r} = n^{-1} S(\vec{q}).$$

Si vede che in vicinanza del punto critico si osserva $S(\vec{q} \rightarrow 0) \rightarrow \infty$, ovvero abbiamo ritrovato analiticamente il fenomeno dell'opalescenza critica di cui avevamo già discusso qualitativamente (cfr. fig. 2).

4 Modelli teorici per le transizioni di fase

Nel corso degli anni sono state presentate molte teorie e modelli aventi lo scopo di bene interpretare i dati sperimentali relativi alle varie transizioni di fase, tentando di dare ad esse una chiara interpretazione a livello microscopico [3]. La prima teoria risale alla tesi di dottorato di van der Waals, che segue di tre anni i primi risultati sperimentali sul punto critico dell'anidride carbonica (Andrews, 1869), e in cui si tenta di dare una descrizione di questi dati. La teoria parte dall'equazione di stato dei gas reali per ottenere utili equazioni verificate sperimentalmente. Circa invece il magnetismo, la prima teoria, ancora oggi valida, è risalente al 1907, dovuta a Weiss, ed è la nota teoria del campo molecolare [5]. Questa consiste essenzialmente nella (brutale) assunzione che in un materiale ferromagnetico gli spin interagiscano l'uno con l'altro attraverso un campo magnetico molecolare che è proporzionale alla magnetizzazione residua misurata sperimentalmente. Una terza teoria classica è la teoria di Ornstein-Zernike, in cui si ha la novità dell'introduzione della funzione di correlazione.

Si tratta in tutti i casi comunque di teorie fenomenologiche che partendo dai dati sperimentali trovano delle equazioni in grado di spiegarli. Nel seguito degli anni sono stati sviluppati dei modelli che a partire da principi primi tentano una spiegazione più generale. Si tratta del modello di Ising, del modello di Vaks-Larkin, del modello di Heisenberg classico e del modello sferico. Tutti descrivono il generico sistema fisico con una hamiltoniana modello che si scrive nella forma

$$\mathcal{H}^D = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^D S_j^D$$

dove S_i^D è il vettore D -dim degli spin, $-J$ è l'energia tra la coppia di spin $\langle ij \rangle$ paralleli e vicini. Questa hamiltoniana è stata risolta in vari

casi, ma poche volte in maniera analitica; la maggior parte delle volte è necessario ricorrere a delle approssimazioni numeriche per poter avere dei risultati. Il modello attualmente più completo è certamente il modello di Ising, che è risolvibile analiticamente nel caso 1D (e già questo è un buon risultato), mentre nel caso 3D alcuni pensano sia proprio impossibile da risolvere esattamente.

In questa tesina riporto alcuni risultati relativi al modello XY, un modello 2D che rappresenta un tipico esempio di transizione di fase di ordine infinito mediata tramite difetti topologici (vortici) del reticolo in cui sono inseriti gli spin e che avviene in un sistema che rimane in equilibrio termodinamico. Una transizione di questo tipo prende il nome di transizione di Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. Questo tipo di transizioni non sono esclusive di questo modello, ma si ritrovano ad esempio in sistemi antiferromagnetici, modelli *ice-type F*, nella teoria delle stringhe e in generale nei modelli in cui si ha interazione a lungo range.

4.1 La transizione Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

Per la prima volta nel 1971 Berezinskii [7] e poi nel dettaglio Kosterlitz e Thouless nel 1973 [8], identificarono, proprio nel modello XY di cui parlerò in questa tesina, l'esistenza di configurazioni vorticosi in cui il campo dovuto agli spin risulta ovunque *smooth*, eccetto che in piccole regioni. La situazione è molto simile alla struttura del campo di velocità che si crea in un fluido turbolento (vd. fig. 4.1, [9]), quando, anche nella trattazione matematica, il vortice viene sovrapposto ad un fondo continuo e morbido. Considerando un percorso chiuso che racchiuda al suo interno questa regione, poichè tutte le grandezze fisiche sono funzioni di periodo 2π , si ricava che la carica topologica contenuta in queste regioni non può che essere un valore intero (cfr. fig. 8). Questi difetti topologici hanno la proprietà che una volta formati nel sistema, immediatamente

Figura 7: Esempi di vortici: a sinistra vortici creati dalla turbolenza di un jet; a destra il Big Red Spot su Giove, un vortice gigante, più grande dell'intero pianeta terra e che permane per secoli.

Figura 8: Configurazione di vortici, caratterizzati da una carica topologica di $n = +1$ (quello a sinistra, vortice propriamente detto) e $n = -1$ (a destra, antivortice). In entrambi i casi gli spin ruotano di 2π e 4π attorno ai due punti evidenziati.

eliminano la correlazione tra la fase degli spin; dunque un numero elevato di vortici disposti casualmente nel reticolo hanno l'effetto di disordinare

il sistema, costringendolo ad un ordine a corto range. Il loro effetto si annulla solo se si dispongono in coppie di vortici ed antivortici.

Per poter fare delle valutazioni qualitative, è necessario poter calcolare il numero di vortici presenti in un reticolo ad una data temperatura; per far questo bisogna confrontare l'energia per creare un vortice con il guadagno di entropia associato al numero di configurazioni in cui questo può disporsi, il che vuol dire calcolare l'energia libera necessaria per creare un vortice. La trattazione è simile a quella che si adotta per descrivere i vortici nei fluidi: in tal caso il campo di velocità associato al sistema si scompone nella forma

$$v(x) = E(x) + \nabla\theta_v(x)$$

essendo il primo termine il potenziale di fondo, che non gioca nessun ruolo nella creazione dei vortici e che dunque trascureremo subito, mentre il secondo termine descrive la configurazione vorticoso. Questo termine, come tutti i termini che rappresentano sorgenti in un campo vettoriale, si può scrivere nella forma

$$\nabla\theta_v(x) = \nabla \times A(x)$$

La funzione $A(x)$ formalmente è soluzione del problema

$$A(x) = \int G(x - x')J(x')d^2x$$

essendo $J(x)$ la sorgente del campo, collegata alla posizione dei vortici. Ricordando la condizione per cui effettuando un giro attorno ad un vortice la variazione di fase deve essere una quantità intera, si impone la condizione

$$\sum_{i=1}^N 2\pi n_i = - \int_C \nabla^2 A(x) dS$$

da cui segue che

$$A(x) = - \sum_{i=1}^N n_i \ln |x - x_i|$$

A questo punto calcolare l'energia del singolo vortice è semplice:

$$\beta E_{vort} = \frac{1}{2g} \int (\nabla_v(x))^2 dx$$

e da questa è possibile calcolare l'energia libera del vortice, che si dimostra vale

$$E_n = E_n^0 + \frac{n^2 \pi}{g} \ln \frac{L}{a} - 2 \ln \frac{L}{a}$$

essendo n il valore di carica del vortice, E_n^0 una costante che tiene conto dell'energia della carica del difetto che rompe la continuità del reticolo, g una costante di accoppiamento tra i vortici. Chiaramente i vortici con $n = \pm 1$ sono quelli che hanno un minor costo energetico e dunque sono i più numerosi. Il primo termine di questa espressione è un valore finito, mentre gli altri due divergono come il logaritmo nel limite termodinamico ($L \rightarrow \infty$, reticolo di dimensioni infinite). Il termine entropico prevarrà, e dunque si avrà comunque un numero finito di vortici, quando

$$g > g_c = \frac{\pi}{2}$$

Invece il numero di vortici invece diverge, con la conseguente distruzione totale dell'ordine del sistema, se la temperatura del sistema è tale che

$$T_{BKT} \sim g_c. \tag{1}$$

Peraltro a temperature inferiori a queste si prova che la coppia vortice-antivortice tende a legarsi, annullando come sappiamo ogni suo effetto. In conclusione, le transizioni Berezinskii-Kosterlitz-Thouless sono transizioni mediate da difetti topologici, la loro peculiarità sta nel termine logaritmico che compare nel calcolo dell'energia del sistema, e sono state

osservate in molti sistemi. Il più importante di questi è senz'altro il modello XY, e nella prossima sezione specificheremo la trattazione di questa transizione per questo modello.

4.2 Il modello XY

Il modello XY [4] viene adottato per studiare sistemi come film di He superfluido, materiali superconduttori, superfici fluttuanti e particolari sistemi magnetici, gassosi o liquido-cristallini; una delle migliori applicazioni di questo modello, e che ha ricevuto una notevole spinta nella ricerca sia teorica che sperimentale, è un sistema 2D di giunzioni Josephson. Questo sistema si realizza sperimentalmente a partire dalla condensazione di atomi bosonici in un reticolo ottico bidimensionale, e studiandone le loro oscillazioni. In questo sistema è stata osservata una transizione di fase mediata da vortici, che però scompare sotto certe condizioni, riconducibili probabilmente alle fluttuazioni quantistiche del sistema (cfr. per es. [10, 11]).

Nel corso degli anni sono stati sviluppati molti metodi analitici e numerici nel tentativo di capire la natura delle transizioni in questo sistema. I successi furono pochi fin quando non si compresero gli effetti di correzioni logaritmiche che modificano la trattazione matematica del modello.

Il modello è definito in un reticolo regolare 2D di spin, in cui con l'indice i si indica il singolo sito, che è occupato dallo spin \vec{s}_i . L'energia del sistema è data dunque da

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \vec{s}_j$$

con la sommatoria su tutti i siti primi vicini. La caratteristica di questo sistema è che sono presenti vortici e antivortici che sopra la temperatura critica sono slegati e disordinati; sotto la temperatura critica si legano insieme e sono importanti come gradi di libertà dinamici per il sistema.

Questi vortici consistono in rotazioni coordinate degli spin di un angolo pari a 2π o 4π attorno ad un punto. L'esistenza di questi vortici implica l'esistenza di correlazioni a lungo-range tra i due spin generici che occupano le posizioni i e j e si trovano a distanza r . Queste correlazioni sono descritte da una funzione che nel limite termodinamico di un volume infinito si esprime come

$$G_\infty(r) \sim r^{-\eta(\beta)}$$

In questo regime la lunghezza di correlazione caratteristica nel punto critico risulta essere divergente. Invece al di sopra di questo punto decade esponenzialmente con un andamento del tipo

$$G_\infty(r) \sim r^{-\frac{r}{\xi_\infty(\epsilon)}}$$

essendo $\xi_\infty(\epsilon)$ la lunghezza di correlazione per $\epsilon > 0$.

Non appena si raggiunge il punto critico, il comportamento della lunghezza di correlazione¹, del calore specifico e della suscettività del sistema diventano

$$\xi_\infty(\epsilon) \sim e^{b\epsilon^{-\nu}} \quad (2)$$

$$C_\infty(\epsilon) \sim \xi_\infty^{-2} \quad (3)$$

$$\chi_\infty(\epsilon) \sim \xi_\infty^{2-\eta_c} \quad (4)$$

essendo b una costante universale di scala.

Per lungo tempo il modello è stato trattato numericamente fissando $\nu = \frac{1}{2}$ (condizione questa che si può ricavare in modo analitico a partire dall'eq. 1) e poi determinando il valore di β_c . Ma i valori ricavati con questi parametri per la η_c erano incompatibili con i dati sperimentali, al punto da supporre che il modello non fosse del tutto corretto.

¹La lunghezza di correlazione, così come indicato in fig. 2, è una misura della distanza alla quale due spin posti in siti differenti sono in grado di interagire.

Il problema fu risolto quando si capì che le eqq. 2, 3, 4 risultavano inconsistenti in questa forma, e che dovevano essere modificate introducendo delle correzioni logaritmiche in modo che

$$C_\infty(\epsilon) \sim \xi_\infty^{-2} (\ln \xi_\infty)^{\tilde{q}} \quad (5)$$

$$\chi_\infty(\epsilon) \sim \xi_\infty^{2-\eta_c} (\ln \xi_\infty)^{-2r} \quad (6)$$

con $\tilde{q} = 6$ e $r = -0.0625$. In particolare l'eq. 5 è imposta, mentre l'eq. 6 è una predizione analitica basata sulla teoria perturbativa e che deve essere confermata tramite approcci non perturbativi. Per far questo è stata fatta una simulazione numerica su un sistema di dimensioni finite L (predizione FSS - *finite-size scaling*) e si è trovato

$$\chi_L(0) \sim L^{2-\eta_c} (\ln L)^{-2r} \quad (7)$$

Simulazioni numeriche sono state svolte per confermare le due predizioni, ed è stato trovato $r = -0.02$, in contrasto con la previsione teorica. Dunque l'introduzione di correzioni logaritmiche ha portato a questi problemi. Si pensò dunque che così come le correzioni logaritmiche hanno generato il corretto comportamento di scala, una attendibile misura di r potesse venire da correzioni del secondo ordine. In particolare è stata scelta l'espressione

$$\chi_L(0) \sim L^{2-\eta_c} (\ln L)^{-2r} \left\{ 1 + \mathcal{O} \left(\frac{\ln \ln L}{\ln L} \right) \right\} \quad (8)$$

Questa equazione è stata risolta numericamente su un reticolo finito ($L = 256$) utilizzando l'ansatz

$$\chi_L(0) \sim L^{2-\eta_c} (C + \ln L)^{-2r} \quad (9)$$

trovando il valore di $r = -0.056$, compatibile con la predizione analitica. Ma il passaggio cruciale nella transizione di fase del tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless è la correlazione tra i vortici. Una conseguenza del

termine logaritmico nella funzione di correlazione è che l'energia del singolo vortice cresce con la dimensione del sistema, e dunque a bassa temperatura, per sistemi molto grandi, possono solo crearsi delle coppie vortice-antivortice. Ma in questa coppia si ha chiaramente la mutua cancellazione dell'effetto di ordine del singolo vortice, per cui questa coppia non ha la capacità di disordinare il sistema. Dunque a bassa temperatura esiste un ordine topologico a lungo range. Al contrario, ad alta temperatura il numero dei vortici aumenta e la distanza tra una coppia diventa così grande che questi si possono considerare liberi, al punto da essere in grado di disordinare il sistema.

A lungo si è creduto che modificando l'hamiltoniana del sistema si dovesse ottenere una transizione non del tipo di Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. In particolare a partire dal modello XY si ottiene il modello a step adottando l'hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \text{sgn}(\vec{s}_i \vec{s}_j)$$

in cui l'energia associata al singolo vortice è indipendente dalla dimensione del reticolo, e dunque i vortici possono esistere a tutte le temperature: non ci dovrebbe essere una transizione mediata dai vortici. Sorprendentemente con analisi numeriche si è visto che anche in questo sistema si ha una transizione mediata dai vortici, proprio del tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. In questo caso probabilmente mentre in effetti l'energia associata al singolo vortice rimane finita, l'energia libera del sistema cresce comunque come $\ln L$, cosa che inibisce la proliferazione di vortici liberi nella fase a bassa temperatura.

In conclusione, di seguito sono presentate alcune delle possibili linee di ricerca da seguire per migliorare, estendere, chiarire questo modello.

Il modello XY di cui abbiamo discusso gode di una simmetria di gruppo $O(2)$. Da considerazioni teoriche si vede che modelli che godono di

simmetrie del tipo $O(N)$, con $N > 2$ non dovrebbero supportare l'esistenza di difetti topologici come i vortici, e dunque in questi sistemi non si dovrebbe avere alcuna transizione di fase. E invece sembrano esserci delle evidenze per cui in questi sistemi si ha una transizione del tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. La questione è ancora aperta. Un altro argomento interessante di ricerca è il ruolo delle impurezze nel modello XY, ovvero l'introduzione nel reticolo bidimensionale in modo casuale di difetti che rendano il modello più realistico. L'introduzione di impurezze dovrebbe diminuire il valore della temperatura critica. Si vede infatti che i vortici sono attratti, e in un certo senso ancorati alle impurezze, al punto che l'energia del vortice si riduce a quella tipica di una vacanza: all'aumentare delle impurezze, è possibile formare un maggior numero di vortici, cosa che aumenta il disordine del sistema e dunque abbassa la temperatura critica. Il limite di impurezze è stabilito dal fatto che oltre una certa densità viene inibita la percolazione degli spin attraverso il reticolo (che ormai appare rotto in una serie di siti interconnessi) e dunque non ha senso più parlare di transizione di fase. E' ancora da capire però il ruolo delle impurezze sul valore delle grandezze di scala, come l'esponente critico delle transizioni. Infine un'altra linea di ricerca riguarda le correzioni logaritmiche e sub-logaritmiche che sono necessarie nel modello XY, ma che si ritrovano anche in altri modelli: va capito perché è necessario introdurre queste variazioni e il ruolo di queste correzioni nei vari modelli.

Riferimenti bibliografici

- [1] R. Pucci, appunti del corso *Transizioni di fase nei materiali*, A. A. 2005/2006.
- [2] R. Pucci, *Le simmetrie e la Fisica*, inaugurazione A. A. 2002/2003 dell'Università degli Studi di Catania.
- [3] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1971).
- [4] R. Kenna, cond-mat/0512356.
- [5] C. Kittel, *Introduzione alla fisica dello stato solido* (Bollati Boringhieri, Torino, 2001).
- [6] R. Pucci, appunti del corso *Struttura della materia II*, A. A. 2004/2005.
- [7] V. Berezinskii, *Soviet Phys.* **32**, 493 (1971).
- [8] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys.* **C6**, 1181 (1973).
- [9] V. Dobrosavljevic, lectures on *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Florida State University.
- [10] L. Capriotti, A. Cuccoli, A. Fubini, V. Tognetti, and R. Vaia, cond-mat/0401030.
- [11] A. Trombettoni, A. Smerzi, and P. Sodano, *New J. Phys.* **7**, 57 (2005).

Elenco delle figure

- 1 Calore specifico di un sistema di ${}^4\text{He}$ in prossimità del punto critico della transizione alla fase superfluida. Si nota immediatamente l'andamento della curva, che ricorda la lettera greca λ (da cui il nome transizione λ , parametro che in questo caso assume un valore molto piccolo, prossimo allo zero). La forma è dovuta ad una discontinuità della derivata prima dell'energia libera del sistema. Si noti inoltre che nei tre grafici la scala delle temperature è ingrandita progressivamente di un fattore 1000, cosa da ricollegare alle proprietà di *scaling* tipiche delle transizioni. 2
- 2 A sinistra, proiezione nel piano PT del diagramma di fase PVT di un fluido reale. Si notano le tre diverse regioni, corrispondenti alla stabilità delle tre fasi della materia, separate dalle curve di equilibrio tra due fasi. Da osservare che la curva di evaporazione non si estende all'infinito, ma si interrompe nel punto triplo. Il percorso tratteggiato indica la possibilità di effettuare una transizione da liquido a gas senza attraversare l'equilibrio tra le due fasi. A destra, proiezione dello stesso diagramma sul piano ρT al variare della temperatura. In questo grafico si mette in luce l'esistenza del parametro d'ordine $\rho_L - \rho_G$. Si osservi che ad alte temperature le isoterme tendono ad una retta, che rappresenta il limite per un sistema non interagente. 5

3	A sinistra proiezione nel piano HM al variare della temperatura del diagramma di fase HMT per un sistema magnetico. Si osservi che ad alte temperature le isoterme tendono ad una retta, che rappresenta ancora una volta il limite per un sistema non interagente. A destra proiezione dello stesso nel piano HT	6
4	A sinistra, proiezione del diagramma di fase di un fluido nel piano $T\rho$: si osservi l'andamento del parametro d'ordine $\rho_L - \rho_G \sim \epsilon ^\lambda$. A destra, proiezione del diagramma di un sistema magnetico sul piano MT . Dal confronto di questi due grafici è evidente il comportamento simile dei due sistemi, e il fatto che le grandezze M_0 e $\rho_L - \rho_G$ svolgono lo stesso ruolo.	6
5	Rappresentazione pittorica del modello microscopico di un sistema durante una transizione di fase. Una quadrato colorato indica una cella occupata, ovvero uno spin up. Si nota al tendere di $T \rightarrow T_c$ la formazione di aggregati ordinati di celle, fino al raggiungimento di un ordine a lungo range. Con ξ viene indicata la lunghezza di correlazione del sistema.	8
6	Esempi di varie tipologie di comportamento per $\epsilon = 0$. In a) si ha il caso $\lambda < 0$; in b) si ha $\lambda > 0$; in c) $\lambda = 0$, ma si ha una divergenza logaritmica ($f(\epsilon) \sim \ln f(\epsilon) $); in d) si ha ancora $\lambda = 0$, ma stavolta $\lambda_s = \frac{1}{2}$, e dunque $f(\epsilon) \sim \text{const}$.	10
7	Esempi di vortici: a sinistra vortici creati dalla turbolenza di un jet; a destra il Big Red Spot su Giove, un vortice gigante, più grande dell'intero pianeta terra e che permane per secoli.	15

- 8 Configurazione di vortici, caratterizzati da una carica topologica di $n = +1$ (quello a sinistra, vortice propriamente detto) e $n = -1$ (a destra, antivortice). In entrambi i casi gli spin ruotano di 2π e 4π attorno ai due punti evidenziati. 15