Prof. Jan Kierfeld
jan.kierfeld@tu-dortmund.de

Sommersemester 2016
Technische Universität Dortmund

Computational Physics
Übungsblatt 11

Ausgabe: 01.07.2016

Abgabe: 08./15.07.2016

Die erste Aufgabe ist bis zum 08.07.2016 abzugeben, während Sie für die zweite Aufgabe bis zum 15.07.2016 Zeit haben.

Aufgabe 1. Monte-Carlo-Simulation eines einzelnen Spins (10 P.)

Simulieren Sie mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus einen einzelnen Spin $s = \pm 1$ mit der Energie

$$\mathcal{H} = -sH \tag{1}$$

im äußeren Magnetfeld H. Bieten Sie im Metropolis-Algorithmus Spin-Flips $s \to -s$ an.

a) Berechnen Sie den analytischen Wert der Magnetisierung

$$m = \langle s \rangle \tag{2}$$

als Funktion des Magnetfeldes H.

Abgabe: Rechnung

b) Berechnen Sie numerisch die Magnetisierung m bei $k_{\mathrm{B}}T = 1$, d.h. führen Sie Monte-Carlo-Simulationen für mindestens 10^4 Werte von $H \in [-5, 5]$ mit jeweils 10^5 Schritten durch.

Abgabe: Plot von $m(H)$ zusammen mit dem analytischen Ergebnis aus dem vorigen Aufgabenteil

Aufgabe 2. MC-Simulation des zweidimensionalen Ising-Modells (40 P.)

Simulieren Sie mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus das zweidimensionale Ising-Modell ohne Magnetfeld mit der Energie

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j \text{ n.N.}} s_i s_j \,, \tag{3}$$

bei der nur über nächste Nachbarn („n.N.“) summiert wird, wobei nur $J = 1$ betrachtet werden soll. Verwenden Sie außerdem ein Quadratgitter der Größe 100×100 mit periodischen Randbedingungen. Bieten Sie im Metropolis-Algorithmus Spin-Flips zufällig ausgewählter Spins an. Wählen Sie als Anfangsbedingung zufällig orientierte Spins oder völlig geordnete Spins. Führen Sie nach einer hinreichend langen Aufwärmphase 10^5 Sweeps durch, in denen im Mittel jedem Spin einmal ein Flip angeboten wird.

a) Generieren Sie graphische Momentaufnahmen des Systems für $k_{\mathrm{B}}T = 1$ und $k_{\mathrm{B}}T = 3$.

Abgabe: Momentaufnahmen

Betrachten Sie für die folgende Aufgabenteile **immer** jeweils verschiedene Temperaturen $k_\mathrm{B}T \in [1,3]$. Der Bereich um die kritische Temperatur (im thermodynamischen Limes)

$$k_\mathrm{B}T_\mathrm{c} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.27 \tag{4}$$

ist dabei besonders interessant, so dass es sich anbietet, in diesem Bereich die Temperatur genauer aufzulösen. Bei Aufgabenteilen, in denen Plots in Abhängigkeit von der Zeit erstellt werden sollen, ist es ausreichend, Plots für die beiden Randwerte des Temperaturbereichs und für einen mittleren Wert zu erstellen.

b) Untersuchen Sie zuerst die Äquilibrierungsphase, indem Sie die mittlere Energie

$$E(t) = \langle \mathcal{H}(t) \rangle \tag{5}$$

als Funktion der Simulationszeit t messen. Wie lange müssen Sie warten, bis das Ergebnis unabhängig von den Anfangsbedingungen wird?

Abgabe: Plots von $E(t)$ jeweils für die Temperaturen und **beide** Anfangsbedingungen

c) Im Folgenden soll nun die Zeit nach der Äquilibrierung betrachtet werden. Berechnen Sie die Mittelwerte der Energie (5) und der Magnetisierung

$$M = \left\langle \sum_i s_i \right\rangle . \tag{6}$$

Wie unterscheidet sich das Verhalten des Systems oberhalb und unterhalb von T_c? Wie verhält sich die Magnetisierung $M = M(t)$ als Funktion der Simulationszeit bei den verschiedenen Temperaturen?

Abgabe: Plots der Energie und Magnetisierung für die verschiedenen Temperaturen und einen Plot $M = M(T)$ zu einem festen, hinreichend großen Simulationszeitpunkt

d) Berechnen Sie aus den Energiefluktuationen die spezifische Wärme C.

Abgabe: Plot der spezifischen Wärme $C = C(T)$

e) **Zusatzaufgabe:** (+ 10 P.)

Bestimmen Sie die Binder-Kumulante

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle m \rangle^4}{3\langle m^2 \rangle^2} \tag{7}$$

im Temperaturbereich $k_\mathrm{B}T \in [1,5]$ für verschiedene Systemgrößen $L \times L$ (z.B. 10×10, 50×50 und 100×100). Die Kurven $U_L(T)$ sollten sich alle bei der kritischen Temperatur T_c schneiden.

Abgabe: Plots der Binder-Kumulanten $U_L(T)$, erhaltener Wert für T_c und Vergleich mit dem extakten Wert