

GRADO EN FÍSICA, CURSO 2023-2024
FÍSICA COMPUTACIONAL

Práctica de Ordenador - Bloque II - 6

Metropolis Monte Carlo

Esta práctica consiste en la implementación del método de Metropolis Monte Carlo para un sistema sencillo: gas ideal de masa m en una caja cúbica de longitud L con energía dada por tres números cuánticos: n_x, n_y, n_z :

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (1)$$

El objetivo es obtener el valor de la energía del sistema en equilibrio para distintas temperaturas.

Para N partículas no interactuantes, la energía total será la suma de la energía de cada una de las partículas:

$$E = \sum_{i=1}^N E(n_x^i, n_y^i, n_z^i) \quad (2)$$

Para realizar el cambio del estado i al j elegiremos una partícula aleatoriamente y cambiaremos una de las componentes n_x, n_y o n_z también de forma aleatoria cambiando su valor en $+1$ o -1 , teniendo en cuenta que el valor no puede ser menor de 1.

Al realizar este cambio, solo varia un término en la energía total, el de la partícula i que cambia de estado. Por tanto, el cambio en la energía es, por ejemplo si se modifica el valor de n_x :

1. Si aumenta: $n_x + 1$:

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2n_x + 1) \quad (3)$$

2. Si disminuye: $n_x - 1$:

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (-2n_x + 1) \quad (4)$$

Vamos a considerar todas las constantes igual a 1 y la longitud de la caja también 1, y comenzamos con todas las partículas en el valor mínimo de la energía: $n_x = n_y = n_z = 1$.

Escribir un programa con los siguientes datos de entrada:

1. Número de partículas
2. Valor de KT
3. El número total de pasos de Monte Carlo

El programa debe elegir una partícula de forma aleatoria así como la dirección (x,y,z) y el cambio de $+1$ o -1 . Se realiza el cambio y se acepta o rechaza considerando el algoritmo de Metropolis. Se repite el proceso.

Los datos de salida del programa serán la energía total del sistema en función de los pasos de simulación.

Comparar distintos valores de KT , distintos tamaños del sistema y distinto número de pasos de Monte Carlo.