Mecánica Estadística. Curso 2020/21

Práctica 2 Método de Montecarlo.

Parte 1: Sistema de dos niveles

Se tiene un sistema de dos niveles de energía. El estado fundamental (*n*=0) tiene una energía $E=0$ y el otro estado (*n*=1) tiene energía $E=\varepsilon$. El código python twolevel.py estudia este sistema con el método Metrópolis MonteCarlo en el ensemble canónico. Los datos de entrada son el número de pasos de Montecarlo N y la energía de del nivel superior ε en unidades de kT . La salida es el valor medio de la ocupación de los estados $\bar{n}$ en función de la temperatura.

1) Para un sistema de dos niveles con $\varepsilon=5$ (unidades arbitrarias) grafica el valor de $\bar{n}$ que calcula la simulación en función de la temperatura (desde T=0 hasta 20) variando el número de pasos de Montecarlo N=20,50,100,500,1000. Incluye el valor de $\bar{n}$ teórico. Comprueba como el valor simulado tiende al teórico para N grandes.
Fig1a,Fig1b,Fig1c,Fig1d,Fig1e

2) Representa $\bar{n}$ simulado y teórico en función de la temperatura (desde T=0 a 200) para N=1000 y $\varepsilon=1,5,10,30$. Incluye una línea horizontal rayada correspondiente a $\bar{n}=\frac{1}{2}$ y comprueba que a altas temperaturas se tiende a este valor.

Fig2a,Fig2b,Fig2c,Fig2d

3) Modifica el código para que calcule $\Delta\bar{n}^2$ Representa $\Delta\bar{n}^2$ simulado y teórico en función de la temperatura (desde T=0 a 200) para N=1000 y $\varepsilon=1,10,30,50$. Incluye una línea horizontal rayada correspondiente a $\Delta\bar{n}^2=\frac{1}{4}$ y comprueba que a altas temperaturas se tiende a este valor.

Fig3a,Fig3b,Fig3c,Fig3d

Parte 2: Modelo de Ising

Se tiene una red cuadrada de L x *L* espines en ausencia de campo magnético externo, interaccionando cada uno de ellos con los primeros vecinos (con condiciones de contorno periódicas) de acuerdo al modelo de Ising. El programa ising2d.py estudia este problema con el método Metrópolis Montecarlo. Los datos de entrada son la longitud L de la red cuadrada, la temperatura *T* y el número de pasos de Montecarlo N. El programa parte de una distribución aleatoria de espines y estudia la evolución del sistema mediante Montecarlo. La salida es la gráfica de Magnetización *M* del sistema y la energía del sistema *E* para cada paso de Montecarlo, así como una gráfica de la red en colores con la situación inicial y final luego de la simulación.

4) Representa la situación inicial de la red (L=8) y a continuación la situación final luego de N=10000 pasos de Montecarlo para T=0, 2 y 5.
¿Para qué temperaturas se observa una alineación completa?

Fig4a (situación inicial),Fig4b,Fig4c,Fig4d

5) Representa la situación inicial de la red para L=20 y T=0 y a continuación la situación final luego de N=10000, 20000 y 50000 pasos de Montecarlo.
¿Cuántos pasos de Montecarlo consideras que serán necesarios para este tamaño de red?

Fig5a (situación inicial),Fig5b,Fig5c,Fig5d

6) Para L=8 y T=2 representa la magnetización M y la energía E del sistema en función del número de pasos de Montecarlo.

Fig6a, Fig6b

7) Modifica el código python para que calcule el valor medio de la magnetización y de la energía en los últimos 1000 pasos de Montecarlo (de 10000). Para L=8 representa $\bar{M}$ y $\bar{E}$ en función de la temperatura (para un rango entre 0 y 5). Se observa una transición de fase? ¿Cuál sería la temperatura crítica aproximada? ¿Qué valores toman $\bar{M}$ y $\bar{E}$ para temperaturas muy bajas?

Fig7a, Fig7b

8) Calcula el calor específico a volumen constante C_v y represéntalo en función de la temperatura para la misma situación del punto 7. ¿A qué temperatura aproximada observas un pico en C_v ?

Nota: Podéis obtener C_v como $C_v = \frac{\bar{E^2} - \bar{E}^2}{(kT)^2}$

Fig8

9) Introduce al problema un campo magnético H=1 que apunta en dirección hacia arriba (la dirección del spin up). Realiza la simulación para una red de longitud L=8 durante 10000 pasos de Montecarlo y promediando los últimos 1000 pasos, grafica $\bar{M}$, $\bar{E}$ y C_v en función de la temperatura T (para un rango entre 0 y 10)
¿Qué diferencias observas respecto lo que obtuviste en los puntos 7 y 8?

Fig9a, Fig9b, Fig9c

Evaluación:

- Entrega de las gráficas pedidas (formato PNG y con los nombres indicados) junto al código python funcional todo comprimido en un fichero ZIP (plazo de entrega lunes 14 de diciembre 23:59). En las figuras debe estar indicado claramente qué es cada curva y los datos de la situación representada. Asimismo habría poner texto en las gráficas que conteste a las preguntas planteadas en el guión.

La entrega en ambos casos será a través de evaluación de UAcloud en el plazo establecido. **Los alumnos que hayan cursado la asignatura y tengan las práctica de ordenador aprobadas no necesitarán volver a hacerlas ya que se les guardará la nota.**