

Computational Physics

Übungsblatt 9.1

Miriam Simm

miriam.simm@tu-dortmund.de

Katrin Bolsmann

katrin.bolsmann@tu-dortmund.de

Mario Alex Hollberg

mario-alex.hollberg@tu-dortmund.de

Abgabe: 26. Juni 2020

Monte-Carlo-Simulation eines einzelnen Spins

Bei dieser Aufgabe wird eine MC-Simulation mittels des Metropolis-Algorithmus eines einzelnen Spins $\sigma = \pm 1$ mit der Energie

$$\mathcal{H} = -\sigma H$$

im äußeren Magnetfeld H implementiert.

Folgende Schritte werden dabei gemacht:

1. Der Spin σ wird auf $+1$ gesetzt. Alternativ könnte man hier auch den Anfangsspin zufällig wählen.
2. Die Energiedifferenz $\Delta E = \Delta\sigma H$ mit $\Delta\sigma = \pm 2$ und die Übergangswahrscheinlichkeit $p = \exp(-\beta\Delta E)$ werden bestimmt.
 - Falls $\Delta E \leq 0$, dann wird der Spin-Flip akzeptiert, da dieser Zustand energetisch günstiger ist.
 - Falls $\Delta E > 0$, dann wird die Übergangswahrscheinlichkeit p mit einer gleichverteilten Vorschlagswahrscheinlichkeit $V \in [0, 1]$ verglichen. Ist $V \leq p$, so wird der Spin-Flip akzeptiert. Ansonsten wird der Zustand beibehalten.
3. Die Magnetisierung m wird aktualisiert.
4. Wiederholung der Schritte (2) bis (3).

Die numerisch bestimmte Magnetisierung m wird zuletzt auf die betragsmäßig größten Magnetisierung m_{\max} normiert. In Abbildung 1 wird das numerische und das analytische Ergebnis: $m = \tanh(\beta H)$ mit $\beta = \frac{1}{k_{\text{B}}T} = 1$ dargestellt.

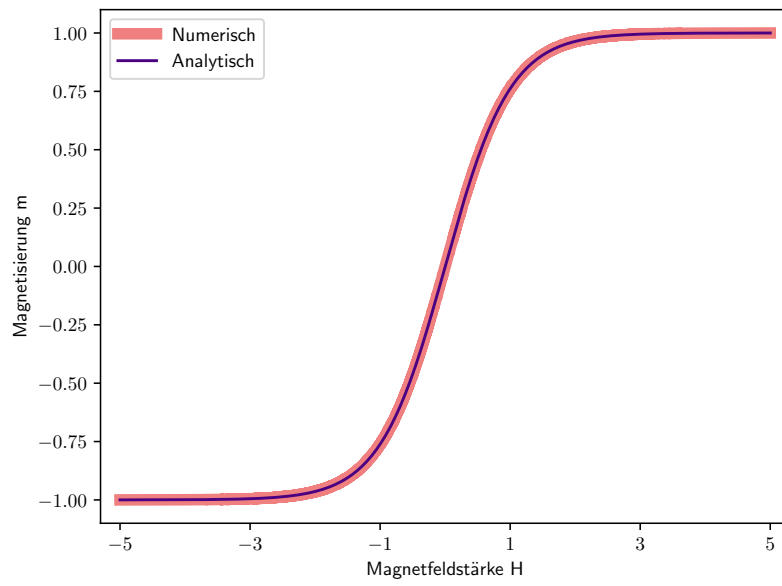


Abbildung 1: Vergleich zwischen dem analytischen und dem numerischen Ergebnis für die Magnetisierung m eines einzelnen Spins. Der Metropolis-Algorithmus wird mit 10^4 Werten für das äußere Magnetfeld H , mit jeweils 10^6 Schritten durchgeführt.