FISICA COMPUTACIONAL

PRÁCTICA 4 - 2025

Entregar problema 1, hasta el 21/05/2025

1. Modelo de Ising entregar

   Implementar una simulación Monte Carlo para el modelo de Ising ferromagnético en 2-D con campo externo nulo y condiciones periódicas de contorno. Se analizarán al menos sistemas de tamaño 10x10, 20x20, 40x40.

   a) Calcular la energía y magnetización en función de los pasos de MC (10000 pasos de MC) para $T^* \equiv= k_B T_c/J = 2.0$, $T^* = 3.3$ y para un valor próximo a T_c, $T^* = 2.2676$. Hacer un gráfico para cada temperatura, comparando la evolución de sistemas con condiciones iniciales $T_0 \to 0$ (todos los spins *up* y $T_0 \to \infty$ (spins aleatorios). Use un sistema de 40x40.

   b) Calcular, en función de la temperatura, la magnetización, la susceptibilidad, el valor medio de la energía, y el calor específico. Obtener resultados para distintos tamaños. Incluir puntos en el intervalo $[0, 3.3]$. Considere poner más puntos cerca de T_c (preste atención a la equilibración del sistema).

   c) Encontrar el histograma de magnetización a temperaturas un poco por debajo y un poco por encima de T_c.

   d) Estimar la temperatura crítica mediante los cumulantes de Binder calculados para distintos tamaños. Estimar los exponentes críticos de la magnetización. Comparar con la solución exacta.

   e) Calcular la función de autocorrelación de la energía y del módulo de la magnetización para las temperaturas $T^* = 2.0, 2.22, 2.2676, 2.5$ y 3.3. Estimar, partir de éstas, los *tiempos* de correlación. Se equilibraron bien los sistemas del los items anteriores?

   Datos de la solución exacta de Onsager para el modelo de Ising en dos dimensiones: $k_B T_c/J = \frac{2}{\ln(\sqrt{2}+1)} = 2.2692$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$. $[M \sim (T_c - T)^{\beta}$, $\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma}]$.

2. Fluido de Lennard-Jones.

   Escribir un programa que realice una simulación de Monte Carlo (NVT) para un sistema de partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones:

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^1 2 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \ .$$

Recuerde adimensionalizar el potencial y escribir el código en las variables reducidas. Utilice el truncado simple del potencial (con $r_{cut} = 2.5\sigma$), e implemente las correcciones respectivas.

a) Para una termperatura reducida, $T^* = 0.9$, y densidad reducida, $\rho^* = 0.8$, calcule la función correlación de pares, $g(r)$, y el valor de la presión y energía del sistema. Utilice al menos 2000 ciclos para promediar (no olvide descartar ciclos de equilibracíonm y no calcule $g(r)$ para todos los ciclos). Compare resultados para distintos números de partículas, $N = 125, 216, 512$. Inicialice el sistema colocando las partículas en una red SC (cúbica simple).

b) Obtenga las isotermas de Presión versus Densidad, a $T^* = 2.0$ y $T^* = 0.9$ (reproduzca la figura 3.5 de Frenkel & Smit). Utilice un sistema con $N = 512$ partículas, y promedie al menos 1000 ciclos. Considere al menos 9 densidades reducidas, entre 0.1 y 0.9.