Georg-August-Universität Göttingen
Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. M. Müller
Priv.-Doz. Dr. S.R. Manmana
SoSe 2018

Übungen zur Vorlesung
Computergestütztes Wissenschaftliches Rechnen

Blatt 11

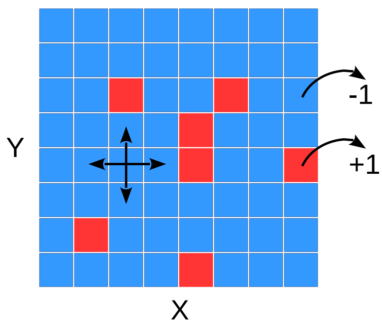
Lernziele dieses Übungsblattes

- Monte-Carlo-Verfahren für Probleme der Statistischen Mechanik.
- Metropolis-Algorithmus.
- Ising-Modell und seine Grundeigenschaften.

Aufgabe 1 *Das 2D Ising-Modell*

Das *Ising-Modell* zählt zu den bekanntesten Modellen der statistischen Physik. Insbesondere kann es zur Untersuchung der magnetischen Eigenschaften von Festkörpern genutzt werden. Bestimmte Materialien, wie z.B. Eisen weisen bei hinreichend niedriger Temperatur ein spontanes magnetisches Moment auf. Bei einer kritischen Temperatur T_c (Curie-Temperatur) findet ein Phasenübergang statt und die spontane Magnetisierung *M(T)* verschwindet.

Wir betrachten ein zweidimensionales quadratisches Gitter mit $N \times N$ Plätzen und periodischen Randbedingungen, dessen magnetische Momente (Spins) sich entweder parallel ($s_i = 1$) oder antiparallel ($s_i = -1$) zu einer ausgezeichneten Achse (z-Richtung) einstellen können. Die quantenmechanisch begründete Austauschkopplung zwischen den Spins an den Plätzen i und j wird phänomenologisch durch eine Kopplungskonstante J_{ij} beschrieben, die die Stärke der magnetischen Wechselwirkung kennzeichnet.



Im einfachsten Fall ist J uniform und nur auf die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn beschränkt. Der Energieausdruck für das Gitter ist dann gegeben durch:

$$E = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - H_z \sum_i s_i \tag{1}$$

mit $J_{ij} = J$ für nächste Nachbarn ($j = i \pm 1$), und $J = 0$ für weiter entfernte Nachbarn ($j > i+1$ oder $j < i-1$). H_z ist ein kleines äußeres Magnetfeld, das zur Stabilisierung des Systems angelegt werden kann. Zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften des Systems könnte man nun die kanonische Zustandssumme aller $2^{N\times N}$ Konfigurationen bilden, wobei viele Beiträge in der Zustandssumme durch die Exponentialfunktion stark unterdrückt sind. Dieses Vorgehen ist jedoch bereits für kleine N nicht mehr praktikabel. Daher bietet es sich stattdessen an, eine Monte-Carlo Methode mit Importance-Sampling einzusetzen. Das zugehörige Verfahren ist unter dem Namen Metropolis-Algorithmus bekannt:

a) Wähle einen Anfangszustand und berechne dessen Energie E_{alt}.

b) Erzeuge einen neuen, zufälligen Mikrozustand und berechne dessen Energie E_{neu}. Für das Ising-Modell bedeutet das, dass zufällig ein Platz i ausgewählt wird, an dem der Spin s_i probeweise umgeklappt wird.

c) Berechne die Energiedifferenz $\triangle E = E_{neu} - E_{alt}$.

d) Ist $\triangle E \leq 0$, so behalte den probeweise erzeugten Zustand bei und fahre bei Schritt (g) fort.

e) Ist $\triangle E > 0$, so berechne das zugehörige Wahrscheinlichkeitsverhältnis gemäß der Boltzmann-Verteilung

$$\omega = e^{-\frac{\triangle E}{k_B T}} \tag{2}$$

f) Erzeuge eine Zufallszahl r, die im Intervall [0,1] gleichverteilt ist. Falls $r \leq \omega$ ist, akzeptiere den neuen Zustand. Andernfalls wird die Ausgangskonfiguration wieder hergestellt, d.h. s_i wird auf den ursprünglichen Wert zurückgesetzt.

g) Berechne die gewünschten Messgrößen.

h) Wiederhole die Prozedur ab Schritt (b) solange, bis eine hinreichend große Zahl von Mikrozuständen erzeugt worden ist.

Ermitteln Sie mit Hilfe des oben beschriebenen Algorithmus die temperaturabhängige Magnetisierung $M(T)$ für eine Gitter der Länge $N = 100$. Wählen Sie geeignete Parameter bzw. Startbedingungen und achten Sie darauf, das System vor der Durchführung der Messungen ausreichend zu equilibrieren (thermalisieren). Wiederholen Sie die Bestimmung der Magnetisierung mehrfach für jede Temperatur, um den Einfluss der statistischen Schwankungen zu reduzieren. Für das zweidimensionale Ising-Modell existiert eine analytische Lösung, mit der Sie ihre Ergebnisse vergleichen können:

$$M(T) = \frac{(1+z^2)^{1/4}(1-6z^2+z^4)^{1/8}}{\sqrt{1-z^2}} \text{ für } T \leq T_c, \tag{3}$$

wobei $z = e^{-\frac{2J}{k_B T}}$. Für $T > T_c$ ist $M(T) = 0$. Die kritische Temperatur ist $T_c \approx \frac{2.269 J}{k_B}$.

Selbsttest

- Wann empfiehlt es sich, Monte-Carlo-Verfahren einzusetzen?
- Was versteht man unter ‘Importance-Sampling’?
- Was ist die Grundidee des Metropolis-Algorithmus?