

Simulaciones de Monte Carlo para un sistema de niveles discretos con interacciones competitivas

Corte I.R.¹, Gutiérrez L.E.¹, Noacco Rosende S.J.¹, Gómez Albarracín F.A.²

¹Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

²Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP.

Resumen

En el presente trabajo se utilizó la técnica de *Monte Carlo Metropolis* para abordar sistemas estadísticos, considerando diferentes interacciones y observando su efecto en el comportamiento del sistema en función de la temperatura T . Para ello, tomamos primero un sistema de partículas no interactuantes con dos niveles de energía y comparamos la solución analítica con simulaciones. Luego, estudiamos diferentes variantes del problema: introducimos más niveles de energía, y exploramos el efecto de diversas interacciones entre partículas.

Solución analítica

El sistema considerado es una cadena de N partículas que poseen dos configuraciones posibles α y β , con energías ϵ_α y ϵ_β y longitudes a y b respectivamente. Para el ensamble canónico se obtiene la función de partición

$$Q_N = \sum_{\text{estados}} e^{-\beta E} = \sum_{n_\alpha=0}^N \binom{N}{n_\alpha} (e^{-\beta\epsilon_\alpha})^{n_\alpha} (e^{-\beta\epsilon_\beta})^{N-n_\alpha} = (e^{-\beta\epsilon_\alpha} + e^{-\beta\epsilon_\beta})^N \quad (1)$$

donde n_α y n_β , números de ocupación de cada estado, cumplen $n_\alpha + n_\beta = N$ y $\beta = \frac{1}{kT}$, siendo k la constante de Boltzmann.

De la manera análoga, para un sistema de tres niveles con estados α , β y γ se obtiene

$$Q_N = (Q_1)^N = (e^{-\beta\epsilon_\alpha} + e^{-\beta\epsilon_\beta} + e^{-\beta\epsilon_\gamma})^N.$$

De la ecuación 1 se puede obtener la energía media como

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial(\log Q_N)}{\partial\beta} = \frac{N\epsilon_\beta + N\epsilon_\alpha e^{-\frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}{kT}}}{e^{-\frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}{kT}} + 1}, \quad (2)$$

de la cual puede obtenerse el calor específico C_V como su derivada respecto de T . El sistema, al ser clásico, obedece la estadística de Maxwell-Boltzmann, por lo que $\langle n_i \rangle = e^{-\beta\epsilon_i}$ [1]. A partir del valor medio de los números de ocupación podemos obtener la longitud media como $\langle L \rangle = a \langle n_\alpha \rangle + b \langle n_\beta \rangle$. Expresiones similares pueden obtenerse para un sistema de tres estados, tanto para la energía como para la longitud y el calor específico.

Monte Carlo Metropolis (MCM)

El programa crea un array de N elementos, cada elemento representando el estado de una partícula de la cadena, y cambia el estado de un elemento elegido al azar. Si la variación de energía al realizar el cambio es negativa se acepta el cambio. Por otro lado, si el sistema evoluciona a un estado de mayor energía se acepta el cambio si $r < e^{-\frac{\Delta}{kT}}$, siendo Δ la variación energética y r un número aleatorio entre 0 y 1.[3]

Un paso de Montecarlo (MCS) consiste en realizar este proceso N veces. Inicialmente se deja evolucionar el sistema realizando $100N$ MCS's para que termalice. Luego, se realizan 1000 MCS's donde por cada uno se realiza una medición de la longitud y la energía, que luego se promedian y grafican como función de kT .

Agradecimientos

El presente trabajo ha sido realizado en el marco de la beca otorgada por la FUNDACIÓN YPF.

Referencias

- [1] K. Huang. *Introduction to statistical physics*. Chapman and Hall/CRC, 2009.
- [2] Ruelle. *Statistical Mechanics: Rigorous Results*. New York: W.A. Benjamin Inc., 1969.
- [3] J. Thijssen. *Computational physics*. Cambridge university press, 2007.

Cadena con dos estados

Además del caso de partículas no interactuantes se consideraron también variantes al sistema, agregando interacciones de la forma $E_{int} = -\sum_{i,j} J_{ij} E_i E_j$, con $J = 1$ a primeros vecinos, y $J_{ij} = \frac{1}{d}$ y $J_{ij} = \frac{1}{d^3}$ entre todos los sitios, siendo d la distancia entre sitios. Vemos que para valores grandes de kT todos los sistemas interactuantes se comportan de manera similar, pero guardando diferencias con el caso no interactuante.

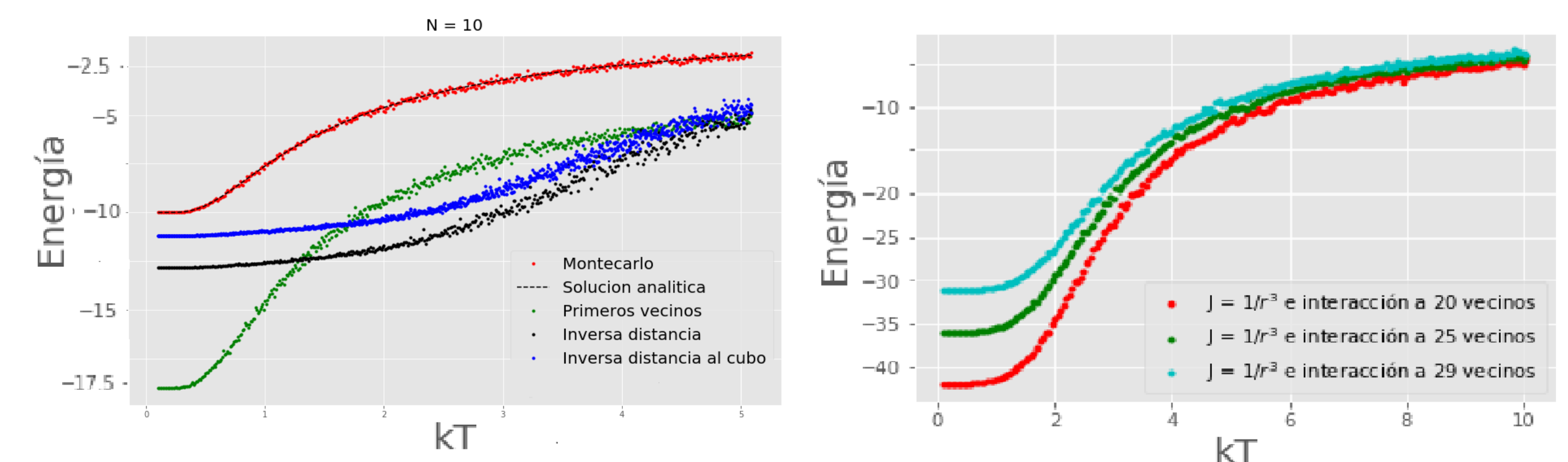


Figura 1: A la derecha, energía vs kT para una cadena de dos estados donde se contrastan los efectos de distintas interacciones. A la izquierda energía vs kT para una cadena de dos estados donde se estudia el efecto de interactuar con distinta cantidad de vecinos.

No se observaron transiciones de fase con ninguna de las interacciones utilizadas, que es consistente con la bibliografía consultada.[2]

Cadena con tres estados

Puede verse que los valores simulados convergen a la solución analítica en todos los casos, al igual que en el caso de dos estados.

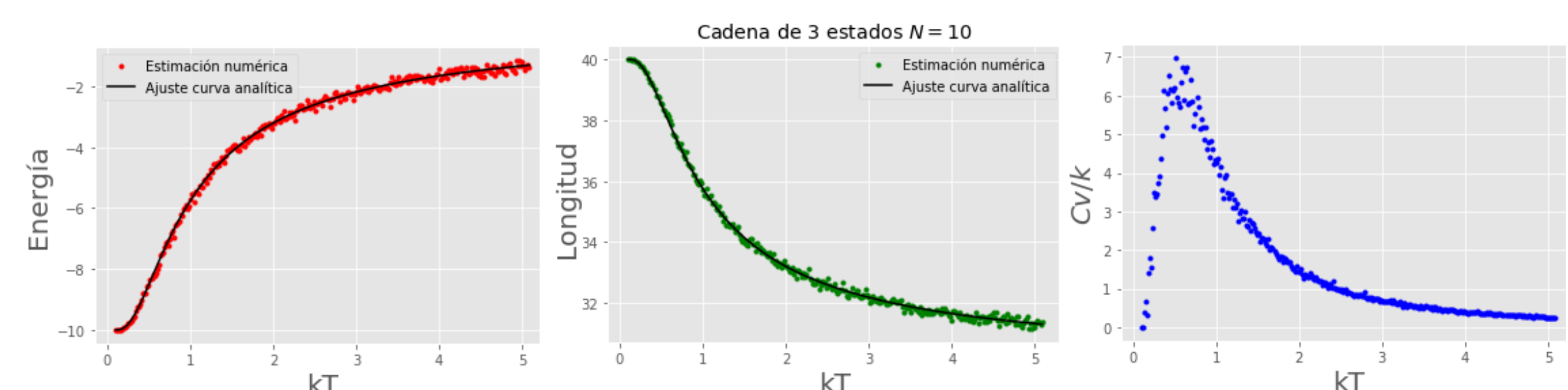
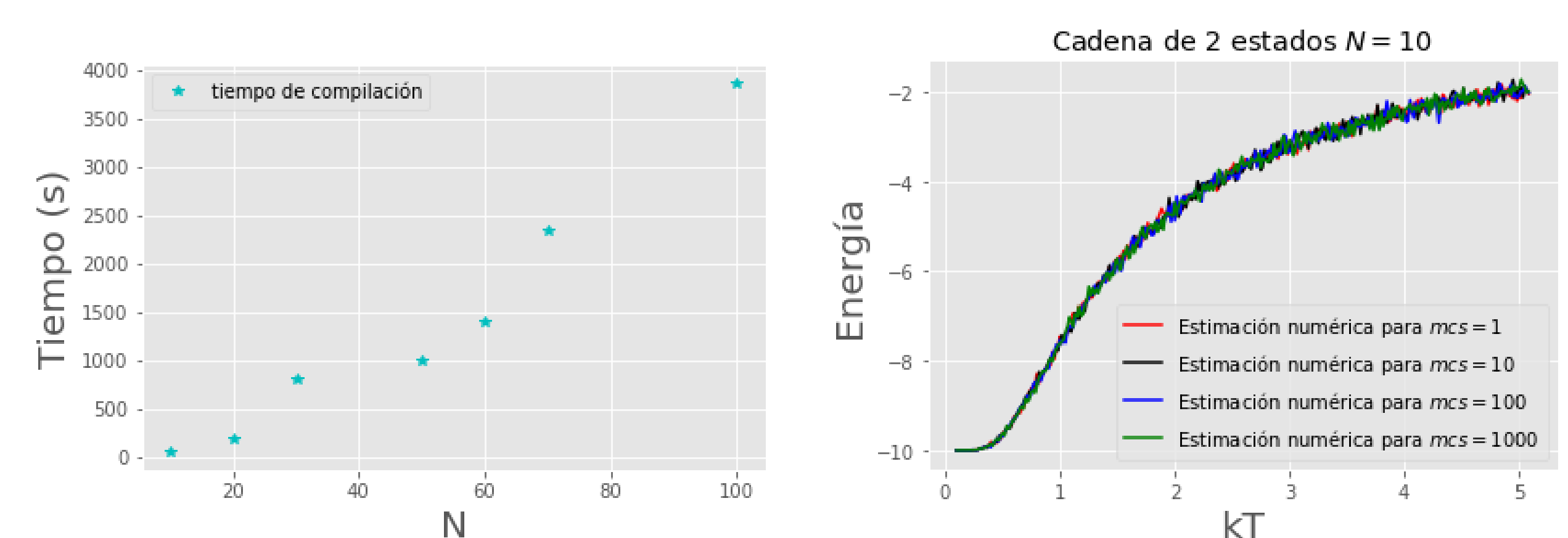


Figura 2: Variables termodinámicas obtenidas variando kT en MCM para el sistema de tres estados sin interacciones.

Convergencia del algoritmo



(a) Tiempo de compilación como función del tamaño de la cadena. Permite visualizar el escalo del programa con la dimensión, expresando la dificultad para estudiar el límite termodinámico bajo estas condiciones.

(b) Contraste de convergencia de la curva de energía para una cadena de $N = 10$ elementos variando la cantidad de MCS de termalización. Se puede observar que dicha longitud la termalización se alcanza rápidamente, y luego el efecto de aumentar la cantidad de MCS se torna irrelevante.