

# FISICA COMPUTACIONAL

## PRÁCTICA 4 - 2022

**Entregar problema 1, hasta el 25/05/2022**

### 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.

- 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  $T_0 \rightarrow 0$  (todos los spins *up* y  $T_0 \rightarrow \infty$  (spins aleatorios). Use un sistema de 40x40.
- 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).
- Encontrar el histograma de magnetización a temperaturas un poco por debajo y un poco por encima de  $T_c$ .
- 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.
- 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:

$$u(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] .$$

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 temperatura 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 equilibración 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 isothermas 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.