Elementos de la Teoría de los Fenómenos Críticos

Septiembre de 2019

Guía N° 4 - Simulaciones de Monte Carlo

Problema 1: ***Susceptibilidad y fluctuaciones***

Considere un sistema de spines discretos S_i definidos en una red de N sitios en presencia de un campo B, descripto por un Hamiltoniano H. Sea

$$m \equiv \frac{1}{N} \sum_i S_i$$

Muestre las siguientes relaciones

$$\chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial B} = \beta N \left[\left\langle m^2 \right\rangle - \langle m \rangle^2 \right]$$

$$C = -T \frac{\partial^2 f(T,B)}{\partial T^2} = \frac{\beta^2}{N} \left[\left\langle H^2 \right\rangle - \langle H \rangle^2 \right]$$

Problema 2: ***Modelo de Ising en*** $d = 2$ Considere el modelo de Ising en la red cuadrada de $L \times L$ sitios (parámetro de red unitario) con interacciones entre primeros vecinos:

$$H = -J \sum_{<i,j>} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

Usando condiciones de contorno periódicas y tomando la energía en unidades de k_B (esto es, tomando $k_B = 1$) implemente un programa para simular las propiedades termodinámicas del modelo usando el algoritmo de Metropolis. Mediante este programa realice los siguientes cálculos:

(a) A campo nulo calcule las curvas de magnetización ($\langle |m| \rangle_L$), susceptibilidad y calor específico en función de T/J, para tamaños $L = 16, 32, 64, 128$ y 200. Para cada magnitud grafique simultaneamente las curvas correspondientes a los diferentes tamaños. En el caso de la magnetización y el calor específico grafique también la solución exacta para la red infinita. Calcule en las mismas simulaciones las cantidades $\langle m^2 \rangle_L$ y $\langle m^4 \rangle_L$. Recuerde que cerca de la temperatura crítica los tiempos de relajación al equilibrio aumentan. Realice algunos test preliminares.

(b) Obervará que las curvas de magnetización, en lugar de anularse en la temperatura crítica presentan un punto de inflexión para saturar a altas temperaturas en un valor constante que decae como $1/\sqrt{N}$ (verifiquelo!). A medida que aumenta el tamaño el punto de inflexión converge a la temperatura crítica. Extrapolando entonces a $1/L \to 0$ el punto de inflexión estimado para cada tamaño L estime la temperatura crítica de la red infinita y compare con el resultado exacto.

(c) Usando las relaciones de escala con el tamaño finito

$$\left\langle m^2 \right\rangle_L \sim L^{-2\beta/\nu} F_2(Lt^\nu)$$

$$\left\langle m^4 \right\rangle_L \sim L^{-4\beta/\nu} F_4(Lt^\nu)$$

estime la temperatura crítica a través del cumulante de Binder

$$U_L = \frac{\langle m^4 \rangle_L}{\langle M^2 \rangle_L^2}$$

y compare con la estimación anterior.

(d) Es posible ver que el máximo de la susceptibilidad ocurre en una temperatura pseudo-crítica $T^*(L) = T_c + A\,L^{1/\nu}$, donde A es una constante. Ademas, el valor del máximo crece con el tamaño como $L^{\gamma/\nu}$. Usando estos resultados estime γ/ν. Tambien estime la temperatura crítica y compare el resutlado con los valores obtenidos anteriormente.

(e) Usando leyes de escala estime todos los exponentes críticos apra el modelo de Ising en 2D y compare con los resultados exactos.

(f) Calcule la curva de magnetización en función del campo B/J para distintas temperaturas por encima y por debajo de T_c, así como para el valor de T_c estimado anteriormente. Estime a partir de estos resultados el exponente δ. Grafique simultaneamente $m/|t|^\beta$ *vs* $B/|t|^\Delta$, con $\Delta = \beta\delta$ y t la temperatura reducida, usando los exponentes críticos exactos y los estimados.

(g) Analice como crece el máximo del calor específico con L. Asumiendo que el mismo crece con una ley de potencia $\max C \sim L^{\alpha/\nu}$ estime el exponente α/ν.