

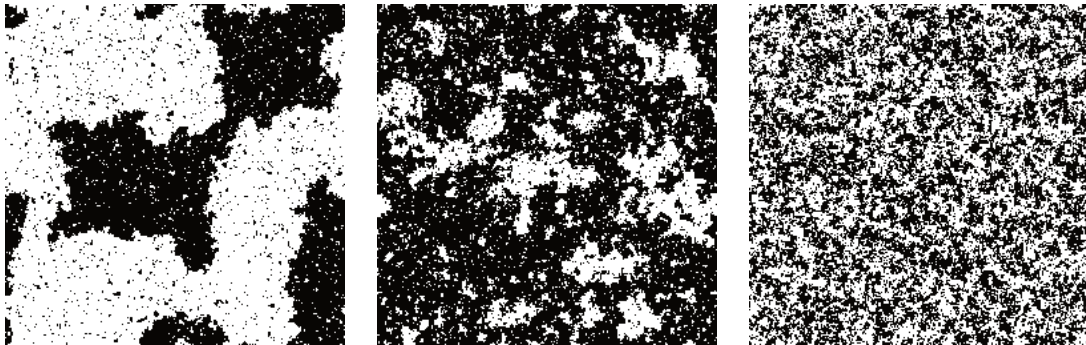
8. naloga – Metropolisov algoritem

1. **Molekularna verižnica:** 17 členov dolga nitkasta molekula je obešena za oba konca. Vsak členek se lahko povesi od ničelne lege na poljubnega od 19 nivojev in si s tem zmanjša potencialno energijo za eno enoto na nivo. Če pa s tem prenategne vezi do sosedov, plača s prožnostno energijo, ki je za vsakega sosedu enaka kvadratu razlike v nivojskem številu. Določi ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature. Za poteze lahko uporabiš spremembo za en nivo na izbranem slučajnem mestu.
2. **Isingov model:** feromagnetne in antiferomagnetne snovi v dveh dimenzijah v približku dveh stanj opišemo s Hamiltonovim operatorjem

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad J = \pm 1$$

kjer je $s_i = \pm 1$ in vsota teče le po vezeh $\langle ij \rangle$ med najbližjimi sosedi. Če ni zunanega polja ($H = 0$), temperatura T_c faznega prehoda pri feromagnetu zadošča enačbi

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_c} = 1 \quad \Rightarrow \quad T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k_B}.$$



$T < T_c$

$T = T_c$

$T > T_c$

Obnašanje spinske mreže pri različnih temperaturah

Določi povprečno energijo $\langle E \rangle$ in lastno magnetizacijo $\langle S \rangle$ v odvisnosti od temperature. $S = \sum_i^N s_i$ je celotna magnetizacija sistema. Oglej si tudi spinsko susceptibilnost in specifično toploto pri različnih jakostih magnetnega polja.

$$\chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{N k_B T} \quad c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N k_B T^2}$$

- * (neobvezno) Analiziraj zanesljivost Metropolisovega algoritma na **modelu trgovskega potnika**, tako da rezultate primerjaš s točnimi rezultati pri majhnem številu mest. Tablico razdalj lahko kar izžrebaš.