



Univerza v Ljubljani
*Fakulteta za **matematiko in fiziko***

Oddelek za fiziko

10. naloga: - Metropolisov algoritem

POROČILO PRI PREDMETU MODELSKA ANALIZA 1

2015/2016

Avtor:

Klemen RAHNE
28152028

29. november 2016

1 Uvod

Tokrat bomo uporabljali Metropolisov algoritem. Metropolisov algoritem se uporablja za iskanje stacionarnega stanja sistema, oz. v našem primeru minimalno energijo sistema. Algoritem s pomočjo

2 Molekularna verižnica

V modelu molekularne verižice imamo molekulo sestavljeno iz 17 členov. Na posamezni člen molekule deluje gravitacijska sila ter med sosednjima členoma prožnostna energija. Za celoten sistem sledi sledi:

$$\tilde{E} = \sum_{i=1}^{16} mgh_i + \frac{\tilde{K}}{2}(h_{i-1} - h_i)^2 \quad (2.1)$$

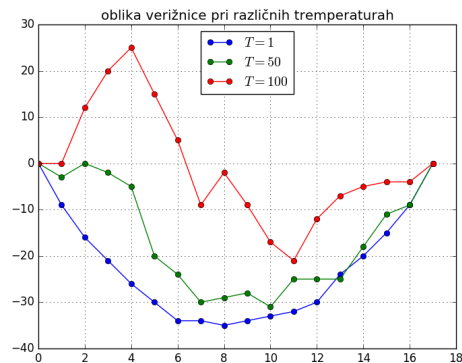
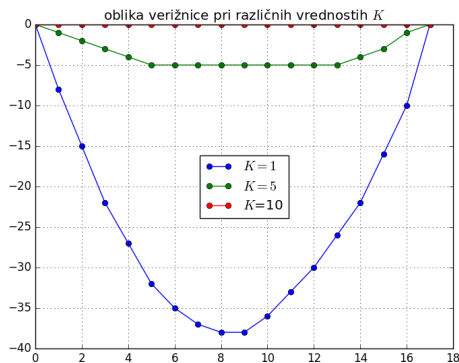
kjer je m masa posameznega člena, g gravitacijski pospešek, \tilde{K} prožnostna konstanta ter h_i višina i -tega člena. Zgornjo enačbo prepišemo v brezdimenzijski obliki:

$$E = \sum_{i=1}^{16} h_i + K(h_{i-1} - h_i)^2 \quad (2.2)$$

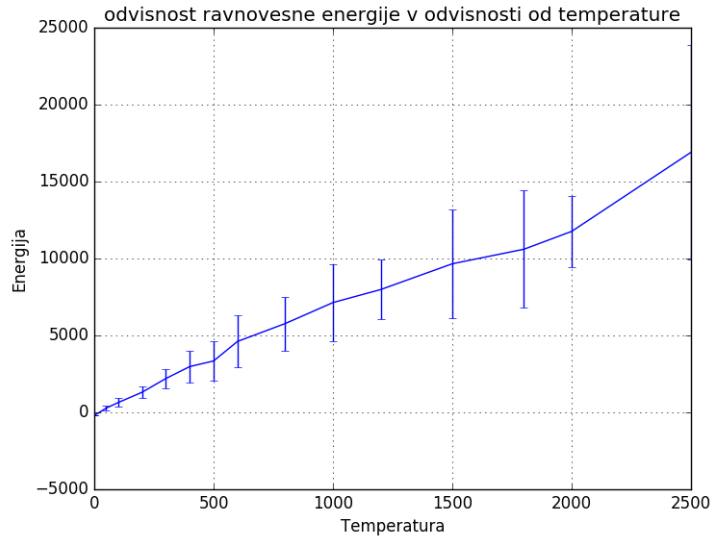
kjer imamo sedaj edini parameter K , ki nam pove ali prevladuje prožnostna ali potencialna energija (pri majhnih K ima potencialna energija večji vpliv.) Za iskanje minimalne energije oz. ravnovesno stanje v odvisnosti od temperature uporabimo Metropolisov algoritem.

Dedaj uporabimo Metropolisov algoritem:

1. najprej predpostavimo začetno stanje, npr. vsi členi na konstantni višini (naprimer 0),
2. nato naključno izberemo en člen v verigi,
3. izračunamo spremembo energije (ΔE), ki je potrebna za spremembo višine za eno enoto za člen izbran v prejšnji točki
4. sedaj izberemo naključno številko (ρ) med 0 in 1
5. v primeru, ko je $\rho > e^{\frac{\Delta E}{k_b T}}$ (termodinamska porazdelitev), izbranemu členu spremenim višino za eno enoto, v nasprotnem primeru ne spremenim višine,
6. postopek od druge točke izvajamo dokler skupna energija ne konvergira h končni točki.



Slika 2.1: Nekaj primerov obliki verižnic. Na desnem grafu so različne rešitve pri konstantni temperaturi. Vidimo, da večji K , bolj poravna verižnico, saj prispevek prožnostne energije prevladuje in želi čim manjšo razdaljo med posameznimi členi. Na desnem grafu imamo verižnice pri konstantni vrednosti K in pri različnih temperaturah. Opazimo, da ima verižnica bolj zapleteno obliko z večanjem temperature.



Slika 2.2: Odvisnost energije končnega stanja verižnice v odvisnosti od temperature. Opazimo približno linearno naraščanje energije, ki je verjetno posledica temperature, ki vzbudi sistem v višja stanja. Opazi se pa tudi večja fluktuacija energija z večjo temperaturo.

3 Isingov model

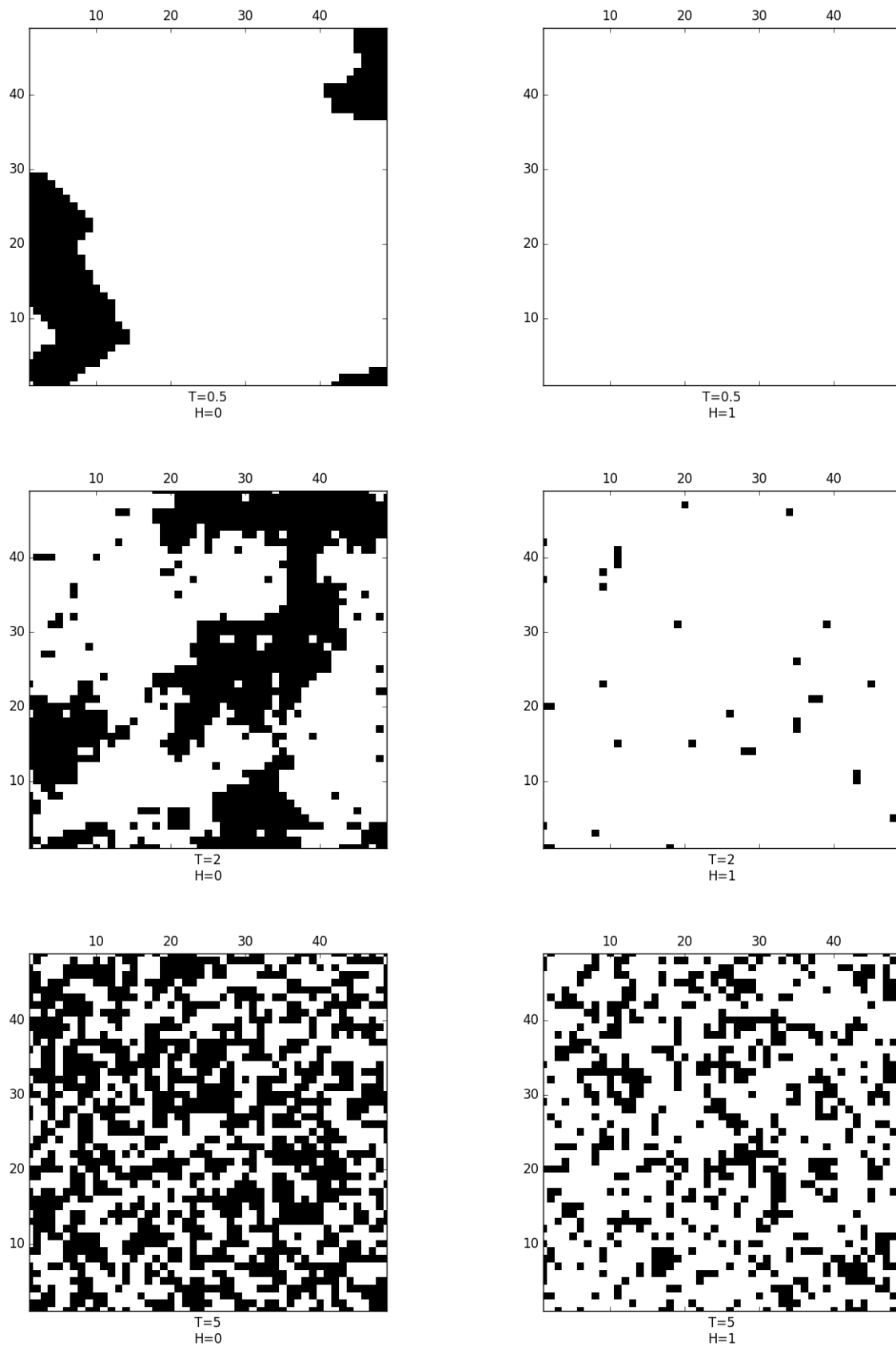
Isingov model opisuje feromagnetne in antiferomagnetne snovi. Z njim lahko določimo temperaturo prehoda med feromagnetnim/antiferomagnetnim stanjem in normalnim stanje. Interakcija, ki je potrebna za ta model sestoji iz dveh členov:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (3.1)$$

kje so s_i spini atomov ter zavzemajo vrednost ± 1 in vsota $\langle ij \rangle$ teče po vezeh med naj bližnjimi sosedi. H predstavlja zunanje magnetno polje, ki ga bomo v prvem delu zanemarili. Tokrat bomo obravnavali 2D model. Za iskanje termodinamskega ravnovesja postopamo podobno kot v prejšnji točki:

1. Izberemo začetno postavitev spinov, npr. naključno porazdeljeno z vrlostima ± 1 ,
2. izberemo naključni spin v mreži,
3. izračunamo potrebno energijo (ΔE) za spremembo spina,
4. izberemo naključno številko ρ na intervalu med 0 in 1,
5. v primeru, ko je $\rho > e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}$ (termodinamska porazdelitev), izbranemu spinu spremenim vrednost, v nasprotnem primeru ne spremenim vrednosti spina,
6. postopek od druge točke izvajamo dokler skupna energija ne konvergira h končni točki.

V nadaljevanju bom obravnaval le feromagnetno stanje, ker je struktura bolj zanimiva. Prav tako bomo predpostavili vrednost J in k_B enako 1.

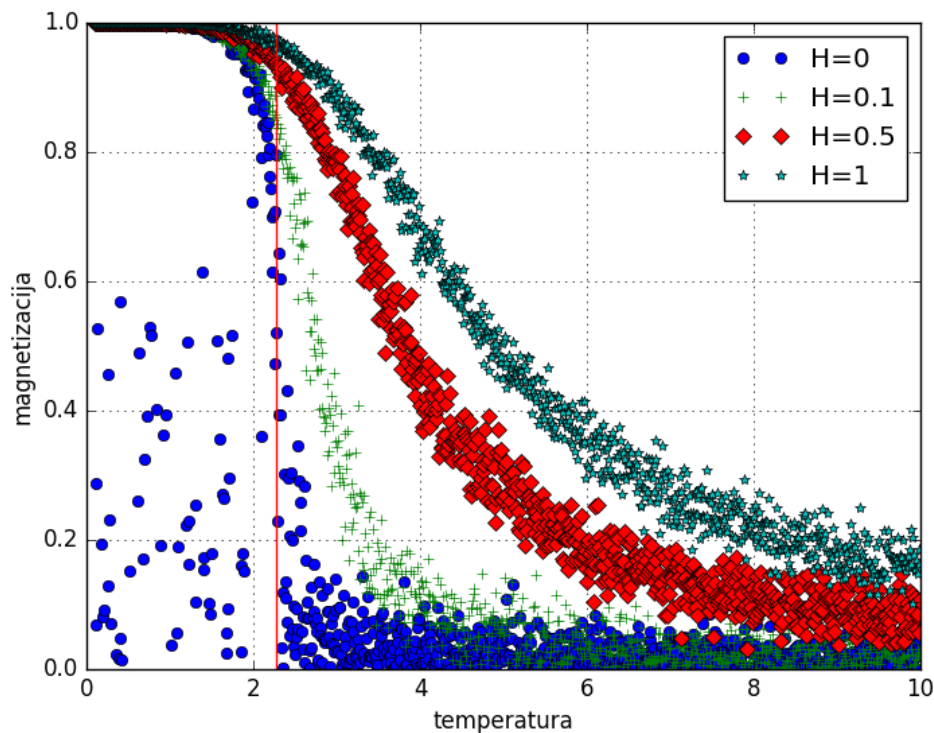


Slika 3.1: Grafični prikaz obrnjenosti spinov za Isingov model pri različnih temperaturah in vklopljenem zunanjem polju. Bela polja predstavljajo spine 1 ter črna polja spine -1 . Pri nižjih temperaturah in brez zunanjega polja opazimo vzorec. Ustvariyo se domene, območja, kjer je energijsko bolj ugodno imeti spine obrnjene v enake smeri.

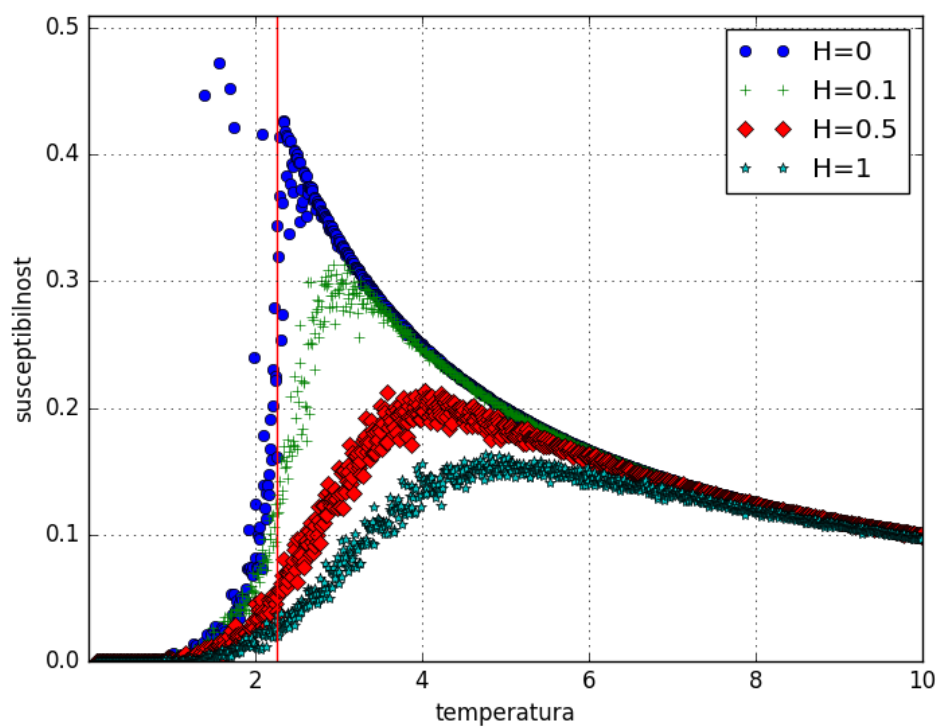
Bolj zanimivo je ko pogledamo odvisnosti magnetizacije, susceptibilnost ter specifične toplote v odvisnosti od temperature in zunanega magnetnega polja. Susceptibilnost in specifično toploto izračunamo po enačbi:

$$\begin{aligned} x\chi &= \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{k_B T} \\ c &= \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} \end{aligned} \quad (3.2)$$

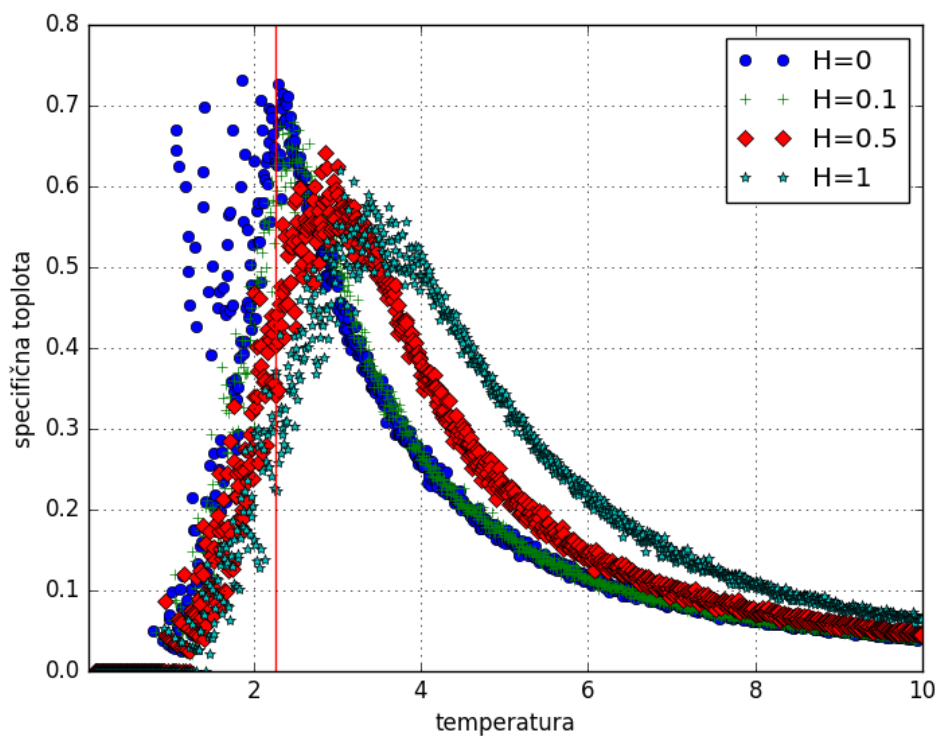
Pričakovani vrednosti povprečne energije in spina izračunamo: $S = \frac{1}{N} \sum_1^N s_i$. V primeru ko ni zunanega magnetnega polja, se lahko izračuna kritično temperaturo T_c , pri kateri pride do faznega prehoda. Ta vrednost je: $T_c \approx 2.2691 \frac{J}{k_B}$.



Slika 3.2: Magnetizacija v odvisnosti od temperature. Opazimo fazni prehod pri kritični temperaturi (rdeča navpična črta), ko je zunanje polje enako 0. Pri vklopu zunanega polja je prehod med fazama bolj položen (manj izrazit) in pri višji temperaturi.



Slika 3.3: Odvisnost susceptibilnosti od temperature. Opazimo da se maksimum susceptibilnosti z zunanjem poljem premika v desno, kar potrjuje hipotezo, da z večjim zunanjim poljem temperatura faznega prehoda večja.



Slika 3.4: Graf specifične toplote v odvisnosti od temperature. Opazimo, da imajo ti grafi najbolj izrazit vrh in lahko iz njih najlažje določimo temperaturo faznega prehoda.