

# Übungen zur Einführung in die Computerphysik

Klassen / Spurzem

Sommersemester 2008

Blatt 11 (Abgabe bis spätestens 4. Juli 2008, ggf. nach Rücksprache mit Übungsleitern auch später)

## Präsenzübung

### Programmierung des Metropolis-Algorithmus für das Ising-Modell

Das Ising Modell ist ein einfaches Modell für ein ferromagnetisches Material in 2 Raumdimensionen. Wir nehmen dazu ein quadratisches Gitter mit jeweils  $n$  Gitterplätzen in  $x$  und  $y$  Richtung an. Auf jedem dieser Gitterplätze  $\alpha$  befindet sich ein Spin  $s_\alpha$  (ein magnetisches Moment), der sich entweder parallel  $s_\alpha = 1$  oder antiparallel zur  $z$ -Achse  $s_\alpha = -1$  orientieren kann. Die Energie einer solchen Konfiguration (eines Spinzustandes  $S$ ) schreibt man dann in der Form

$$H(S) = -B \sum_{\alpha} s_{\alpha} - J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} s_{\alpha} s_{\beta} \quad (1)$$

Der Summationsindex  $\langle \alpha \beta \rangle$  bezeichnet die Summation über alle Paare von Gitterplätzen, die direkt benachbart sind (nicht diagonal). Man beachte, daß  $M = \sum_{\alpha} s_{\alpha}$  gerade das magnetische Moment des Spingitters in einem festgelegten Zustand  $S$  ist,  $m = M/n$  das magnetische Moment pro Spinplatz (um die Ergebnisse für verschieden große Spingitter vergleichen zu können, ist es sinnvoll, die Meßgrößen auf die Zahl der Spins  $n$  zu normieren). Wir nehmen periodische Randbedingungen an: ein Spin am unteren Rand des Gitters besitzt einen direkten Nachbarn am entsprechenden Gitterplatz des oberen Randes. Das gleiche gilt für den linken und den rechten Rand. Man kann nun bei vorgegebenen Werten für Temperatur  $T$ , Spin-Wechselwirkung  $J$  und Magnetfeld  $B$  (in  $z$ -Richtung) den Erwartungswert  $\langle m \rangle$  der Magnetisierung dieses Spingitters (pro Spin) approximieren durch ein Monte Carlo-Integral nach

$$\langle m \rangle = \frac{1}{n} \sum_i w(S_i) M_i = \frac{1}{nN} \sum_i M_i = \frac{1}{nN} \sum_i \left( \sum_{\alpha} s_{\alpha} \right)_i \quad (2)$$

Dabei geht die  $i$ -Summe über  $N$  erlaubte Spinzustände (Anzahl der Sweeps im Experiment) des Gesamtsystems, die der kanonischen oder Gibbs-Boltzmann Verteilung genügen sollen (Wahrscheinlichkeit eines Zustandes  $i$  ist  $w(S_i)$ ). Die  $\alpha$ -Summe berechnet bei vorgegebenem Spinzustand  $S_i$  die gesamte Spinprojektion in  $z$ -Richtung (das magnetische Moment  $m_i$ ). Die Gewichtsfunktion ergibt sich aus den Regeln der Thermodynamik als

$$w(S_i) = \frac{\exp(-\beta H(S_i))}{\mathcal{Z}} ; \quad \mathcal{Z} = \sum_i \exp(-\beta H(S_i)) \quad (3)$$

mit  $\beta = 1/kT$  und der Zustandssumme  $\mathcal{Z}$ . Wir können die Zustandssumme (und damit die Gewichtsfunktion) nicht direkt berechnen, stattdessen erzeugen wir eine Verteilung von Zuständen mit dem Metropolis-Verfahren, welche der Wahrscheinlichkeits-Verteilung  $w(S_i)$  genügen. Entsprechend kann man auch die mittlere Energie des Systems (Energie pro Gitterplatz) ausrechnen als

$$\langle e \rangle = \frac{1}{n} \sum_i w(S_i) H(S_i) = \frac{1}{nN} \sum_i H(S_i). \quad (4)$$

Nun führen Sie die folgenden Schritte aus:

1. Generieren Sie eine Zufallskonfiguration, indem Sie für jeden Gitterplatz eine Spinorientierung auswürfeln. Wählen Sie  $b = \beta B$ , und  $j = \beta J$  als dimensionslose Variable, und testen Sie den Algorithmus anhand der Werte von z.B.  $b = 0.2$ ,  $j = 0.25, 0.6$ .
2. Für jeden der Gitterplätze führen Sie dann die folgende Prozedur aus:
  - Würfeln Sie einen neuen Spin für den Gitterplatz aus.
  - Ist der neue Spin gleich dem alten, gehen Sie zum nächsten Gitterplatz.
  - Hat der neue Spin das umgekehrte Vorzeichen, so berechnen Sie die Energiedifferenz  $\Delta E$  zwischen der alten und der neuen Konfiguration. Ist  $\Delta E < 0$ , hat die neue Konfiguration ein größeres Gewicht und der Spinflip wird akzeptiert. Ist  $\Delta E > 0$  wird die neue Konfiguration mit einer Wahrscheinlichkeit  $\exp(-\beta\Delta E)$  akzeptiert. Wählen Sie  $h = \beta H$ ,  $b = \beta B$ , und  $j = \beta J$  als dimensionslose Variable.
3. Ist diese Prozedur für alle Gitterplätze durchgeführt (dies bezeichnet man als einen Sweep), so haben Sie eine neue Gesamtkonfiguration  $S_i$  generiert, die in der Summe (2) oder auch (4) aufgenommen wird
4. Berechnen Sie, nachdem Sie eine hinreichende Zahl von  $S_i$  generiert haben, die Mittelwerte (Erwartungswerte) für die Magnetisierung pro Spin und die Energie pro Spin. Ob die Zahl der Sweeps hinreichend ist können Sie am Schwankungsquadrat der Werte abschätzen (Fehlerabschätzung).
5. Zu Beginn sollten erst jeweils einige Sweeps durchgeführt werden, damit man mit einer "typischen Konfiguration startet.

## Hausaufgabe 20 Punkte

- Ising-Modell in der “mean-field” Näherung

$$b_{\text{mf}} = b + 4j \left( \frac{e^{b_{\text{mf}}} - e^{-b_{\text{mf}}}}{e^{b_{\text{mf}}} + e^{-b_{\text{mf}}}} \right)$$

Setzen Sie  $j = 0.6$  und berechnen Sie die Magnetisierung  $m$  als Funktion des externen Magnetfeldes (Hysterese, Plot) (6 Punkte)

- das Ising Modell mit dem Metropolis-Algorithmus (auch: MRRTT-Algorithmus). Berechnen Sie dazu die Energie pro Gitterplatz und die Magnetisierung als Funktion des Magnetfeldes (eine sinnvolle Gitterlänge ist 30, d.h.  $n = 900$ ). Überprüfen Sie das Programm zunächst einmal für  $j = 0$ . In diesem Fall liefert die mean-field Näherung das exakte Ergebnis. Lösen Sie dann für wenigstens zwei weitere Werte von  $j$  das Ising-Modell (und zwar einmal für  $j \leq 0.4$  und einmal für  $j \geq 0.5$ ). Plotten Sie wieder die Energie pro Gitterplatz und die Magnetisierung als Funktion des externen Magnetfeldes. Beschreiben Sie Ihre Beobachtungen. (7 Punkte)
- Ising-Modell mit dem MRRTT Algorithmus: die Spin-Spin Korrelationsfunktion. Bilden Sie die Spin-Spin Korrelationsfunktion nach Korrelationsfunktion als Funktion des Abstandes  $R$  der Spins für nächste Nachbarn ( $R = a$ , mit  $a =$  Abstand der Gitterpunkte) und diagonale Nachbarn ( $R = \sqrt{2}a$ ). Die Spin-Spin Korrelationsfunktion können wir z.B. definieren für den Spinzustand  $S_i$  durch

$$k_i(R) = \frac{1}{nN} \sum_{\alpha} \frac{1}{n(R)} \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} S_{\alpha} S_{\beta}$$

Dabei geht der Summationsindex  $\alpha$  über alle  $n$  Spin-Gitterplätze, während die Summe  $\langle \alpha, \beta \rangle$  sich auf die  $n(R)$  Nachbarn beschränkt, die den Abstand  $R$  von  $\alpha$  haben (beachten Sie daß wir hier  $n(R) = 4$  haben sowohl für die nächsten als auch für die diagonalen Nachbarn). Bilden Sie dann den Erwartungswert der Korrelationsfunktion  $\langle K(R) \rangle = \sum_i w(S_i) k_i(R)$  über die Spinzustände im MRRTT-Algorithmus. Plotten Sie das Ergebnis für die drei Werte von  $j$  aus der vorigen Teilaufgabe, als Funktion der externen Magnetisierung. Sie können die dort berechneten Spinzustände verwenden. (7 Punkte).