Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2017

Blatt 12: Abgabetermin: Dienstag, der 25.07.2017, 12:00

Aufgabe 1: Ising-Modell – Magnetisierung

(7 Punkte)

Gesucht ist die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung ($M(T)$) des eindimensionalen Ising-Modells mit der Hamiltonfunktion

$$H(\{s_i\}) = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=1}^{N} s_i \ . \tag{1}$$

Dabei wurde die Hamiltonfunktion um den Term $h \sum_{i=1}^{N} s_i$ erweitert. Dieser Term entspricht einem zusätzlichen Magnetfeld und führt dazu, dass (für $h > 0$) die Ausrichtung der Spins in $+S^z$-Richtung bevorzugt wird.

Berechnen Sie die Magnetisierung durch exakte Summation über alle 2^N Spinkonfigurationen, also

$$M(T) = \sum_{\{s_i\}} w(\{s_i\}) M(\{s_i\}) \ ,$$

mit

$$w(\{s_i\}) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(\{s_i\}))$$

und der Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H(\{s_i\}))$$

für die folgenden Parameter: $J = 1$, $N = 14$, T im Bereich $0.1 < T < 5$ und $h \in \{0.1, 0.2, 0.3, 1.0\}$. ($k_\mathrm{B}$ wird $= 1$ gesetzt.)

Aufgabe 2: Ising-Modell – Metropolis-Algorithmus

(9 Punkte)

Für das Ising-Modell Gl. (1) soll jetzt mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus eine Markov-Kette aus Spin-Konfigurationen $\{s_i\}^l$, $l = 1, \ldots, L$, erzeugt werden. Die einzelnen Schritte des Metropolis-Algorithmus lauten folgendermaßen:

- wähle eine Zufallszahl $k \in \{1, \ldots, N\}$;
- drehe den k-ten Spin um („Spin-Flip"): $\{\bar{s}_i\} = (s_1^l, \ldots, -s_k^l, \ldots, s_N^l)$;
- berechne
$$\alpha = \frac{w(\{\bar{s}_i\})}{w(\{s_i\}^l)}$$
und wähle eine Zufallszahl $\gamma \in [0, 1]$;
- Fallunterscheidung:
  - falls $\alpha \geq \gamma$: Spin-Flip wird akzeptiert, d.h. $\{s_i\}^{l+1} = \{\bar{s}_i\}$;
  - falls $\alpha < \gamma$: Spin-Flip wird abgelehnt, d.h. $\{s_i\}^{l+1} = \{s_i\}^l$.

a) Schreiben Sie ein Programm, welches ausgehend von einer zufällig gewählten Spinkonfiguration $\{s_i\}^1$ eine Markov-Kette entsprechend dieser Regeln erzeugt. (4 Punkte)

Für die Magnetisierung bei einer gegebenen Temperatur T ergibt sich damit:

$$M(T) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} M(\{s_i\}^l) \ .$$

b) Berechnen Sie $M(T)$ für $J = 1$, $h = 0.1$, $N = 14$ und $L = 1000$ und T-Werte im Bereich $0.1 < T < 5$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem aus Aufgabe 1. (3 Punkte)

c) Berechnen Sie $M(T)$ für $J = 1$, $h = 0.1$, $N = 50$, $0.1 < T < 5$ und L im Bereich 10^3 bis 10^5. (2 Punkte)