Übungen zu Moderne Theoretische Physik III SS 13

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler, Dr. A. Poenicke

Blatt 11
Besprechung 05.07.2013

---

1. Wärmekapazität, Suszeptibilität und Korrelatoren (4 Punkte)

Benutzen Sie den allgemeinen Ausdruck $Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-H/(kT)}\right]$ für die Zustandssumme des durch den Hamiltonoperator $H = -J\sum_{\langle ij\rangle} S_{iz}S_{jz} - B\sum_i S_{iz}$ beschriebenen Ising-Modells, um folgende Relationen zu beweisen:

$$C_V = \frac{1}{kT^2}\left(\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2\right) \qquad \chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{1}{kT}\left[\sum_{i,j}\langle S_{iz}S_{jz}\rangle - \Big\langle \sum_i S_{iz}\Big\rangle^2\right].$$

2. Monte–Carlo–Simulation des Ising-Modells (4+4+4+4 = 16 Punke)

Auf `http://www.tfp.kit.edu/studium-lehre_502.php` finden Sie den `C++`-Source `ising_mc.cpp`. Das Programm implementiert eine Monte–Carlo–Simulation für das ferromagnetische Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen in 1D und 2D. Alle Parameter der Simulation können beim Aufruf des Programms durch Kommandozeilen-Optionen verändert werden. Nachdem Sie das Programm kompiliert haben, erhalten Sie eine Übersicht aller Optionen durch den Aufruf mit der Option `--help`. Für die folgenden Untersuchungen können Sie nun das vorgegebene Programm oder (noch besser) eine eigene Implementation des folgenden Algorithmus benutzen.

In einer Dimension wird das System durch

$$\tilde{\mathcal{H}} = -J\sum_{n=1}^{N}\sigma_n\,\sigma_{n+1} - \mu_0 H_z\sum_{n=1}^{N}\sigma_n, \quad (\sigma_n = \pm 1, J > 0) \tag{1}$$

mit den periodischen Randbedingungen ($\sigma_1 := \sigma_{N+1}$) beschrieben.
(In der Numerik werden μ_0 und k_B auf 1 gesetzt.)

Die N Spins werden durch einen N-dimensionalen Vektor (Elemente ± 1) dargestellt, mit z.B. $N = 100$. Nach Wahl einer zufälligen Startkonfiguration werden für feste intensive Variablen T und H folgende MC-Schritte ausgeführt:

1. Ein zufällig gewählter Spin wird umgedreht ($\sigma \to -\sigma$), und die innere Energie dieser Konfiguration ($H(\sigma_{neu})$) berechnet.
2. Die neue Konfiguration wird übernommen, wenn gilt $H(\sigma) - H(\sigma_{\mathrm{neu}}) > 0$. Ist dies nicht der Fall, wird die neue Konfiguration dennoch mit einer Wahrscheinlichkeit $\exp\{\beta[H(\sigma) - H(\sigma_{\mathrm{neu}})]\}$ akzeptiert.
3. Nach $100\cdot N$ MC-Schritten (zum Erreichen des Gleichgewichts) wird alle $5\cdot N$ MC-Schritte eine Berechnung („Messung“) der relevanten Größen (s.u.) durchgeführt.
4. Nach einer Anzahl von S Messungen werden die zu betrachtenden Größen aus den Messwerten berechnet.

Entsprechend der Fragestellung können nun T oder H variiert und die MC-Schritte wiederholt werden.

Erstellen Sie nun aus der Simulation in 1D folgende Graphen:

(a) Magnetisierung als Funktion von H_z/T, für 10 Werte zwischen 0 und $4e^{-2J/T}$ bei festem T und J. Vergleichen Sie Ihr numerisches mit dem exakten Ergebnis im Skript (Kapitel 6.4).

(b) Wärmekapazität c_H als Funktion der Temperatur bei $H_z = 0$, und vergleichen Sie wieder mit dem exakten Ergebnis. Wie Sie in Aufgabe 1) gezeigt haben, lassen sich c_H und χ_T aus den Fluktuationen der „Messungen“ berechnen:

$$c_H = C_H/N = \frac{1}{NkT^2}\left(\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2\right).$$

Hinweis: Beginnen Sie bei der höchsten Temperatur; benutzen Sie deren Endkonfiguration als Anfangskonfiguration für die Rechnung bei der nächstniedrigeren Temperatur. Diese Prozedur heißt *simulated annealing* und vereinfacht das Erreichen von niedrigen Temperaturen. Ein entsprechendes Durchlaufen der Temperaturen ist als Aufrufoption schon vorgesehen.)

(c) Erweitern Sie das Programm um die Berechnung der Suszeptibiliät χ_T.
Hinweis: Benutzen Sie dafür

$$\chi = \frac{\mu_0^2}{kT}\left[\sum_{i,j=1}^{N}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \langle\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\rangle^2\right] = \frac{1}{kT}\left(\langle M^2\rangle - \langle M\rangle^2\right)$$

Berechnen Sie $\chi(T, H = 0)$ und vegleichen Sie auch dieses Resultat mit der exakten Lösung.

Untersuchen Sie nun das 2D-System (indem Sie das Programm z.B. mit `-sy 100` aufrufen), und:

d) Erzeugen Sie auch für den 2D-Fall die folgenden Graphen:
$M(T, H = 0)$, $c_H(T, H = 0)$ und $\chi(T, H = 0)$.
Bei welcher kritischen Temperatur T_C tritt einen spontan geordnete Phase auf?

Bemerkung: Mit der Option `-dump` schreibt das Programm eine Datei `spins.dat` mit der Spinkonfiguration am Ende der Simulation. Es ist so auch moeglich, sich einzelne Spinkonfigurationen anzusehen.