

(Abgabe und Besprechung am 20.12.2018 um 14:00 im CIP-Pool)

1. [10 Punkte] Ising-Modell

Das Ising-Modell wurde ursprünglich von Ernst Ising und Wilhelm Lenz zur Beschreibung vom Ferromagnetismus in Festkörpern (Kristallen) eingeführt und zählt zu den meistuntersuchten Modellen der statistischen Physik. Darüber hinaus findet es Anwendung in anderen Disziplinen, etwa in den Neurowissenschaften um die Aktivität von Neuronen zu simulieren (Hopfield-Netz).

Wir betrachten im Folgenden ein quadratisches Gitter $\Lambda = \mathbb{Z}^2$. Für jeden Gitterplatz $i \in \Lambda$ gibt es eine diskrete Variable $S_i \in \{-1, 1\}$, die einen klassischen Spin repräsentiert. Die Energie des System ist gegeben durch den Hamiltonian

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

wobei $N = |\Lambda|$ die Anzahl der Gitterplätze bezeichnet und die Notation $\langle i, j \rangle$ bedeutet, dass nur Paare von direkt benachbarten Koordinaten i, j zur Summe beitragen sollen. Im Folgenden beschränken wir uns auf ferromagnetische Kopplung ($J > 0$) und vernachlässigen ausserdem ein externes Feld ($h = 0$).

Mittels der Monte Carlo Methode (MC) soll eine Sequenz von Spin-Konfigurationen gemäss der Boltzmann-Verteilung bei einer gegebenen Temperaturen T generiert werden; aus einer repräsentativen Sequenz von Konfigurationen lassen sich thermisches Mittelwerte von Observablen berechnen. Ihre Aufgabe ist es den Metropolis-Algorithmus mit *Single-Spin-Flip*-Dynamik für das zweidimensionale Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen zu implementieren. Die wesentlichen Punkte der Simulation sind: wir beginnen mit einer zufällig Konfiguration von Spins mit Energie E , wählen einen zufälligen Gitterplatz $k \in \Lambda$ und versuchen den Spin S_k zu flippen. Die Konfiguration mit geflipptem Spin $S'_k = -S_k$ habe nun die neue Energie E' . Wir berechnen die Energieänderung

$$\Delta E = E' - E = \dots = 2JS_k \sum_{\substack{i \text{ ist} \\ \text{nächster} \\ \text{Nachbar} \\ \text{von } k}} S_i. \quad (2)$$

Ist $\Delta E \leq 0$, so akzeptieren wir den Flip definitiv und $S_k \rightarrow -S_k$. Ist $\Delta E > 0$, so ziehen wir eine Zufallszahl $r \in [0, 1)$ und akzeptieren den Flip falls $r < \exp(-\beta\Delta E)$, wobei $\beta = 1/k_B T$ die inverse Temperatur ist.

Hinweise zum Ising-MC:

- Die kritische Temperatur für das zweidimensionale Ising-modell ist $T_c = \frac{2J}{k_B \ln(1+\sqrt{2})}$. Setzen Sie $J = 1$ und $k_B = 1$, damit ist T in Einheiten von J/k_B und $T_c \approx 2.269$.
- Die Eingabeparameter der Simulation sind: Temperatur T , die Abmessung des Gitters L (Anzahl der Gitterplätze $N = L^2$), die Anzahl der Equilibrierungsschritte t_{eq} (ein Zeitschritt besteht aus N MC-Schritten) und Anzahl der Zeitschritte nach der Equilibrierung t_{sim} .
- Benutzen Sie periodische Randbedingungen.
- Sie können die Berechnung transzendenter Funktionen vermeiden, da für $\Delta E > 0$ nur $\Delta E = \{4J, 8J\}$ möglich ist und somit $\exp(-\beta\Delta E) \in \{\exp(-\beta 4J), \exp(-\beta 8J)\}$.
- Es ist sinnvoll eine Funktion zur Ausgabe bzw. zum Einlesen einer Spin-Konfiguration in eine bzw. aus einer Datei zu programmieren.

Folgende Observablen sollen gemessen werden:

- Magnetisierung pro Spin: $\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_{i=1}^N S_i \rangle$, sowie $\langle |m| \rangle$, $\langle m^2 \rangle$ und $\langle m^4 \rangle$.
- Energie pro Spin: $\langle e \rangle = \frac{1}{N} \langle H \rangle$, sowie $\langle e^2 \rangle$
- Magnetische Suszeptibilität pro Spin: $\chi = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$ oder $\chi' = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2)$

- Spezifische Wärme pro Spin: $c = \beta^2 N (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2)$
- Binder-Kumulante: $g = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right)$

Simulieren Sie Systeme unterschiedlicher Größe $L = \{8, 16, 32, (64)\}$ für Temperaturen im Intervall $k_B T/J \in [1, 4]$ mit besonderem Augenmerk auf den Bereich um die kritische Temperatur $k_B T_c/J \approx 2.269$.

Eine mögliche Strategie für die Simulationskampagne (im Prinzip *simulierte Abkühlung*): beginnen Sie mit einer Simulation bei der höchsten Temperatur T , erzeugen Sie hierfür eine zufällige Konfiguration (entspricht dem Fall $T = \infty$) als Startkonfiguration, equilibrieren Sie das System (t_{eq} Schritte), berechnen Sie thermisches Mittelwerte von Observablen (t_{sim} Schritte), benutzen Sie die letzte Konfiguration als Startkonfiguration für die nächste Simulation bei $T' < T$.

Offen bleibt wie man t_{eq} wählt. Man kann t_{eq} experimentell bestimmen indem man z.B. zwei Simulationen mit unterschiedlichen Konfiguration und *seeds* für den RNG startet und sich die zeitliche Entwicklung von $m(t)$ und $e(t)$ anschaut. Es ist daher sinnvoll die instantanen Werte von $m(t)$ und $e(t)$ abzuspeichern. Ein Abschätzung der Größenordnung $t_{eq} \propto L^2$ bekommt man mit Hilfe eines Random Walk Arguments.

Wie groß muss t_{sim} sein? Hierfür ist es nötig die Korrelationszeit τ zu bestimmen. Aus der Autokorrelationsfunktion der Magnetisierung

$$\chi_m(t) = \frac{1}{t_{sim} - t} \sum_{t'=0}^{t_{sim}-t} m(t')m(t'+t) - \left(\frac{1}{t_{sim} - t} \sum_{t'=0}^{t_{sim}-t} m(t') \right)^2 \quad (3)$$

kann man τ mittels Fitten oder Integration abschätzen (Annahme $\chi_m \sim e^{-t/\tau}$). Nach t_{sim} Schritten haben wir circa $n = \frac{t_{sim}}{2\tau}$ unabhängige Konfigurationen des Systems, d.h. um Observablen mit einer kleinen Varianz zu erhalten muss $t_{sim} \gg \tau$ gelten. Beachte, daß im thermodynamischen Limes τ bei T_c divergiert.

- Diskutieren Sie den Plot $\langle m \rangle(T)$ und $\langle |m| \rangle(T)$ für unterschiedliche L .
- Diskutieren Sie den Plot $\chi(T)$ und $\chi'(T)$ für unterschiedliche L .
- Plotten Sie $\langle e \rangle(T)$ und $c(T)$ für unterschiedliche L .
- Bestimmen Sie T_c mit Hilfe der Binder-Kumulante g .
- Plotten Sie τ als Funktion von L am kritischen Punkt.
- Versuchen Sie mit Hilfe von Finite-Size-Scaling die unterschiedlichen kritischen Exponenten zu bestimmen.
- Überlegen Sie wie sich der Metropolis-Algorithmus bei $T = 0$ und $T = \infty$ verhält.
- Verifizieren Sie die Gleichung (2).

Infos und aktuelle Übungsblätter finden Sie unter: <http://www.uni-saarland.de/fak7/rieger/homepage/teaching.html>
Bei Fragen E-Mail an: a.wysocki@lusi.uni-sb.de