

FISICA COMPUTACIONAL

PRÁCTICA 4 - 2020

Entregar problema 1, hasta el 22/05/2020

1. Modelo de Ising

entregar

Implementar una simulación Monte Carlo para el modelo de Ising ferromagnético en 2-D con campo externo nulo y condiciones periódicas de contorno. Se analizarán al menos sistemas de tamaño 10x10, 20x20, 40x40.

- a) Calcular la energía y magnetización en función de los pasos de MC, MCS (10000 MCS), MCS, para $T^* \equiv k_B T_c / J = 2.0$, $T^* = 3.3$ y para un valor próximo a T_c , $T^* = 2.2676$. Hacer un gráfico para cada temperatura, comparando la evolución de sistemas con condiciones iniciales $T_0 \rightarrow 0$ (todos los spins *up*) y $T_0 \rightarrow \infty$ (spins aleatorios). Use un sistema de 40x40. *Sugerencia:* para entender la física del sistema entorno a T_c y sus diferencias por debajo y por encima de T_c , ver la evolución de las configuraciones, los estados del sistema, graficándolos primero vs MCS y luego vs T . Usar herramientas de visualización durante las corridas es bueno para intuir/entender. Idem hacer videos. Avanzar en items, y luego volver a hacer videos, de las configuraciones grabadas (un número criterioso, no para todo tiempo). Ver saltos del sistema entre +m y -m para T baja, y crecimientos de los dominios cercanos a T_c .
- b) Calcular, en función de la temperatura, la magnetización, la susceptibilidad, el valor medio de la energía, y el calor específico. Obtener resultados para distintos tamaños. Incluir puntos en el intervalo $T^* = [0, 3.3]$. Considere poner más puntos cerca de T_c (preste atención a la equilibración del sistema vs observable, vs temperatura).
- c) Encontrar el histograma de magnetización a temperaturas un poco por debajo y un poco por encima de T_c . Discutir el tipo de transición del sistema. ¿Qué pasa si se aplica un campo magnético al sistema? Discuta qué espera encontrar en los histogramas del sistema: vs campo aplicado y vs temperatura. Esquematice.
- d) **Estimar la temperatura crítica mediante los cumulantes de Binder** calculados para distintos tamaños. Si tienen capacidad de cálculo ir a sistemas más grandes, como 128x128 (pensar cuántos pasos de T usar, y dónde, para reducir tiempos de CPU). **Estimar los exponentes críticos de la magnetización y de la susceptibilidad** (sea criterioso en el tamaño del sistema elegido para esto y el rango de temperaturas para su fiteo). Comparar con los valores de la solución exacta. Considerando la relación teórica esperada entre ellos estime el exponente del calor específico. Discuta lo que le da analíticamente y lo que ve en sus curvas de calor específico. Discuta cómo crece el máximo

y ancho del mismo con el tamaño de su sistema (piense/pruebe de qué modos puede calcular esta cantidad y qué significa).

- e) **Calcular la función de autocorrelación de la energía y del módulo de la magnetización** para las temperaturas $T^* = 2.0, 2.22, 2.2676, 2.5$ y 3.3 . Estimar, a partir de éstas, los *tiempos* de correlación, τ_c (entregar al menos $L=10$). ¿Se equilibraron bien los sistemas de los items anteriores? Ahora con los tiempos de correlación calculados pueden **calcular las barras de error de sus observables**, sabiendo que crecen como la raíz de dicho tiempo. Probar cuánto disminuye el error, qué factor, si simulan para $T^* = 2.27$, 10^5 MCS ó 10^6 MCS. Usar los tiempos de correlación fiteados cuando la función de autocorrelación, que debe decaer exponencialmente es $C(t=\tau_c)=1/e$. Pensar y discutir cómo podemos subestimar los errores de estas cantidades si no sabemos bien las correlaciones de los observables y sus dependencias con los MCS, con L , cerca y lejos de las transiciones.

Datos de la solución exacta de Onsager para el modelo de Ising en 2D: $k_B T_c/J = 2/\ln(\sqrt{2}+1) = 2.2692$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ [$M \sim (T_c - T)^\beta$ para T_c^- , $\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$]. Refs: 1) [L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 \(1944\)](#). 2) [N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller and E. Teller, J. Chem. Phys., 21, 1087 \(1953\)](#).

2. Fluido de Lennard-Jones. entrega optativa posgrado, martes 26/05

Escribir un programa que realice una simulación de Monte Carlo (NVT) para un sistema de partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones:

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

Recordar adimensionalizar el potencial y escribir el código en las variables reducidas. Utilizar el truncado simple del potencial (con $r_{cut} = 2.5\sigma$), implementando las correcciones respectivas.

- Para una temperatura reducida, $T^* = 0.9$, y densidad reducida, $\rho^* = 0.8$, calcular la presión y energía del sistema. Utilizar al menos 2000 ciclos para promediar (descartar ciclos de equilibración!) Compare resultados para distintos números de partículas, $N = 125, 216, 512$. Inicializar el sistema colocando las partículas en una red SC (cúbica simple).
- Para una temperatura reducida, $T^* = 0.9$, y densidad reducida, $\rho^* = 0.8$, calcular la función correlación de pares, $g(r)$, luego de descartar los pasos de equilibración (no calcular $g(r)$ para todos los ciclos).
- Obtener las isothermas de Presión vs. Densidad, a $T^* = 2.0$ y $T^* = 0.9$ (reproducir la figura 3.5 del libro de Frenkel & Smit). Utilizar un sistema con $N = 512$ partículas, y promediar al menos 1000 ciclos. Considerar al menos 9 densidades reducidas, entre 0.1 y 0.9.