

Universität Osnabrück Fachbereich Physik	Numerische Physik WS 2003/2004	PD Dr. Jürgen Schnack Dipl.-Phys. Matthias Exler
---	-----------------------------------	---

Aufgabenblatt 8

8.1 Zweidimensionales Ising-Modell

Berechnen Sie mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus für ein 10×10 -Ising-Spinnitter die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Temperatur.

Der Hamiltonoperator des Ising-Modells ist durch

$$\tilde{H} = -2 \sum_{i,j} J_{ij} \tilde{s}_z(i) \tilde{s}_z(j) \quad (1)$$

gegeben, wobei $J_{ij} = J > 0$ für die nächsten Nachbarn auf dem Gitter (links, rechts, oben, unten). Der positive Wert bedeutet ferromagnetische Kopplung. Die verwendete Spinquantenzahl ist $s = 1/2$. Dann gibt es an jedem Punkt nur zwei Einstellmöglichkeiten, so daß man das Ising-Modell oft auch wie folgt hinschreibt

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j . \quad (2)$$

Dabei können die $\sigma_k = \pm 1$ sein.

Die Magnetisierung wird dann als

$$\mathcal{M} = -g\mu_B \sum_i \tilde{s}_z(i) \quad (3)$$

definiert, allerdings braucht man zum Verständnis des Modells die Konstanten nicht und berechnet stattdessen

$$\mathcal{M} = \frac{1}{N} \left| \sum_i \sigma_i \right| . \quad (4)$$

Dabei ist N die Zahl der Spins. Der Betrag wird gewählt, weil eine ferromagnetische Ordnung in die eine Richtung und ebensogut in die entgegengesetzte zeigen kann, d.h. eine saubere Definition dessen, was man eigentlich beschreiben will, wäre über Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gegeben.

- Entscheiden Sie sich für ein numerisches Hilfsmittel: mathematica, matlab, C oder FORTRAN.
- Definieren Sie das Spinsystem als 10×10 -Matrix.
- Sie können die Wechselwirkung auch als Matrix definieren oder dies explizit in die folgenden Berechnungen einbauen.
- Berechnen Sie die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Temperatur für $T/J = 0.5 \dots 10.0$ in Schritten von 0.5. Nutzen Sie etwa 100 Sweeps, bei denen Sie jeweils alle Spins durchgehen, d.h. Ihre Mittelung erfolgt über $100N = 10000$ Metropolis-Schritte.

- e. Stellen Sie die Magnetisierung als Funktion der Temperatur dar. Wenn alles gutgegangen ist, können Sie den Phasenübergang ahnen.

Literatur: Sie können sich zu dieser Aufgabe ausgezeichnet in der Bachelor-Arbeit von Stefan Torbrügge informieren:

<http://www.physik.uni-osnabrueck.de/makrosysteme/examen.htm>