

Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)  
Arne Zantop (Sprechstunde: Do 10:00-11:00 in EW 701)

## 10. Übungsblatt – Statistische Physik

**Abgabe/Vorrechnen: Mi. 10.01.2017 im Tutorium (10:15 - 11:45 EW 226)**

### **M** Aufgabe 29: *Phasenübergang im Ising-Modell in Molekularfeldnäherung*

Betrachten Sie das Ising-Modell in 2 Dimensionen: Eine Anzahl  $N$  von Spins  $s_i$  mit je zwei Einstellungsmöglichkeiten  $s_i = \pm 1$  sind auf einem kubischen Gitter angeordnet. Dabei steht jeder Spin in Wechselwirkung mit seinen 4 nächsten Nachbarn. Ohne externe Einflüsse und mit homogener Kopplung ist die Energie dieses Systems gegeben durch

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j,$$

wobei die Summe über alle wechselwirkenden Paare verläuft. Im kanonischen Ensemble betrachtet tritt in diesem System ein Phaseübergang auf, bei dem das zunächst ungeordnete System bei abnehmender Temperatur zu einer global polarisierten/magnetisierten Domäne übergeht.

Leiten Sie diesen Verlauf der Magnetisierung  $m = \frac{1}{N} \sum_i s_i$  als Funktion der Temperatur in Molekularfeldnäherung her.

**Hinweis:** Gehen sie zum Hamiltonian eines einzelnen Spins über und approximieren Sie die Paar-Wechselwirkung als Wechselwirkung mit einem geeigneten mittleren Feld.

Fordern Sie mit der damit erhaltenen Wahrscheinlichkeitsverteilung des Zustands Selbstkonsistenz mit dem mittleren Feld. (Interpretieren Sie im dabei letzten Schritt graphisch die möglichen Lösungen.)

### **S** Aufgabe 30 (10 Punkte): *Monte-Carlo Simulation*

Wir wollen nun das zuvor betrachtete 2D-Ising-Modell in einer numerischen Simulation im kanonischen Ensemble untersuchen. Schreiben sie dafür zunächst ein Programm und gehen Sie dabei wie folgt vor: Initialisieren Sie Ihr System zufällig, und betrachten Sie ein System mit periodischen Randbedingungen. Bei einer Systemgröße von  $100 \times 100$  Spins kommt man mit wenig Rechenzeit (etwa  $2 \cdot 10^7$  Spinflips pro Equilibrierung und Simulation) bereits zu guten Ergebnissen. Die Wahl von  $J$  verschiebt letztlich nur die Temperaturskala, betrachten Sie daher das System bei der dimensionslosen Temperatur  $T^* = k_B T / J$ . Der Phasenübergang tritt dann bei etwa  $T_c^* \simeq 2.5$  auf.

- (a) Zur Monte-Carlo Simulation betrachten Sie einzelne Spinflips: Wie ändert sich dabei die Energie und wie lautet dann die Übergangswahrscheinlich eines Spins

$$s_i = \pm 1 \rightarrow s_i = \mp 1$$

bei gegebenen  $T^*$ ?

- (b) Stellen sie die verschiedenen Phasen in ein paar Momentaufnahmen graphisch dar und interpretieren Sie ihr Ergebnis.
- (c) Simulieren Sie eine Reihe von Temperaturen um  $T_c^*$  und zeigen Sie den Temperaturverlauf des Ordnungsparameters (der Magnetisierung) graphisch.
- (d) Betrachten Sie ferner die spezifische Wärmekapazität  $c_V(T^*)$  mit Ihrer Simulation. Was passiert bei  $T^* = T_c^*$ ?  
(Benutzen Sie zur Berechnung eine Identität aus den letzten Übungen.)

## 10. Übung SP WS17

### **Zum Übungsbetrieb:**

Die Übungsaufgaben teilen sich auf in mündliche **M** und schriftliche **S** Aufgaben. Die Kriterien für die Vergabe eines Übungsscheins gliedert sich daher in zwei Teile:

- Mindestens 50% der schriftlichen Übungspunkte.
- Vorrechnen: Jeder Student kreuzt vor jeder Übung diejenigen Aufgaben auf einer ausliegenden Liste an, die er oder sie bearbeitet hat. Wer eine Aufgabe angekreuzt hat, ist bereit diese Aufgabe an der Tafel vorzurechnen. Für den mündlichen Teil des Scheinkriteriums müssen am Ende des Semesters in Summe 50% der mündlichen Aufgaben angekreuzt sein.