

TÉCNICAS de SIMULACIÓN en TRANSICIONES de FASE

- Una ordenadora puede "seguir" la trayectoria ("física" o de cálculo) hacia el equilibrio de conjuntos de 10^2 , 10^3 , 10^4 ó más partículas.
- Si el sistema se construye "bien" (interacciones y condiciones de contorno) el análisis estadístico de la trayectoria nos provee de predicciones físicas con sentido.

TÉCNICAS de SIMULACIÓN (DM)

1) Dinámica Molecular: se construye un modelo dinámico clásico para los átomos o moléculas del sistema (fuerzas, velocidades, posiciones...). La trayectoria se forma integrando las ECUACIONES DE NEWTON.

LA DINÁMICA MOLECULAR ofrece información sobre:

- la dinámica del problema
- el estado de equilibrio.

→ uso típico: plegamiento de proteínas

TÉCNICAS DE SIMULACION (MC)

2) Método de MONTE CARLO

- Aplicabilidad muy general :
 - Sistemas en RED
 - Sistemas continuos
 - Sistemas clásicos
 - Sistemas cuánticos
- Predicciones del EQUILIBRIO

• No es necesario construir las ecuaciones de movimiento del sistema

• REFLEJO DE LA CONSTRUCCION DE LA FÍSICA COMO CREACIÓN DE MODELOS

• El "tiempo-MC" no es el tiempo físico
⇒ MC no informa de la dinámica

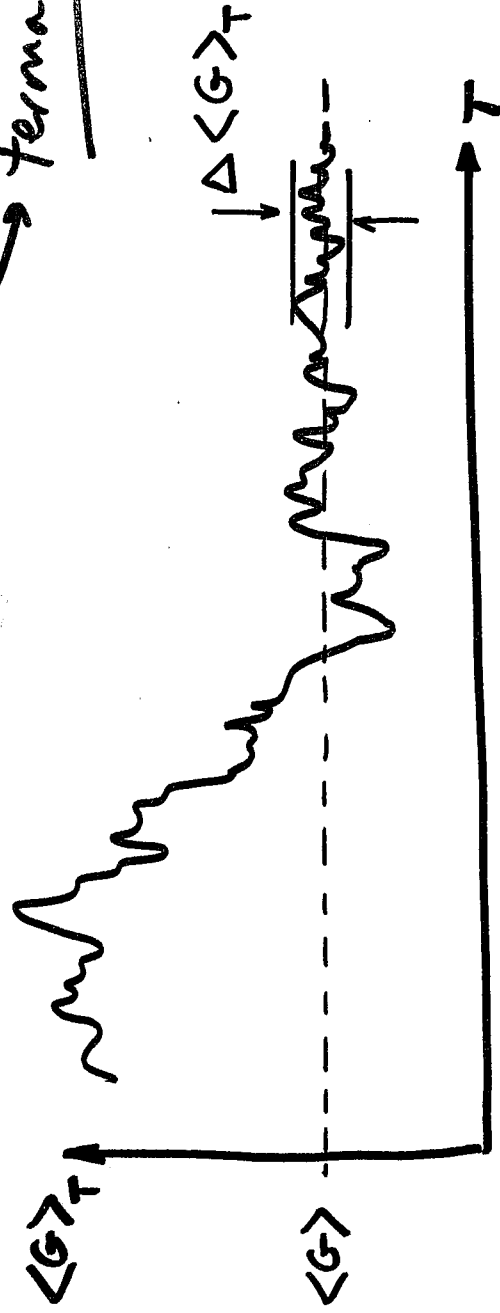
119	0
	2
	0
	1
	0
	2
	0
	2
	0
	2
	0
	2
	0
	2
	0

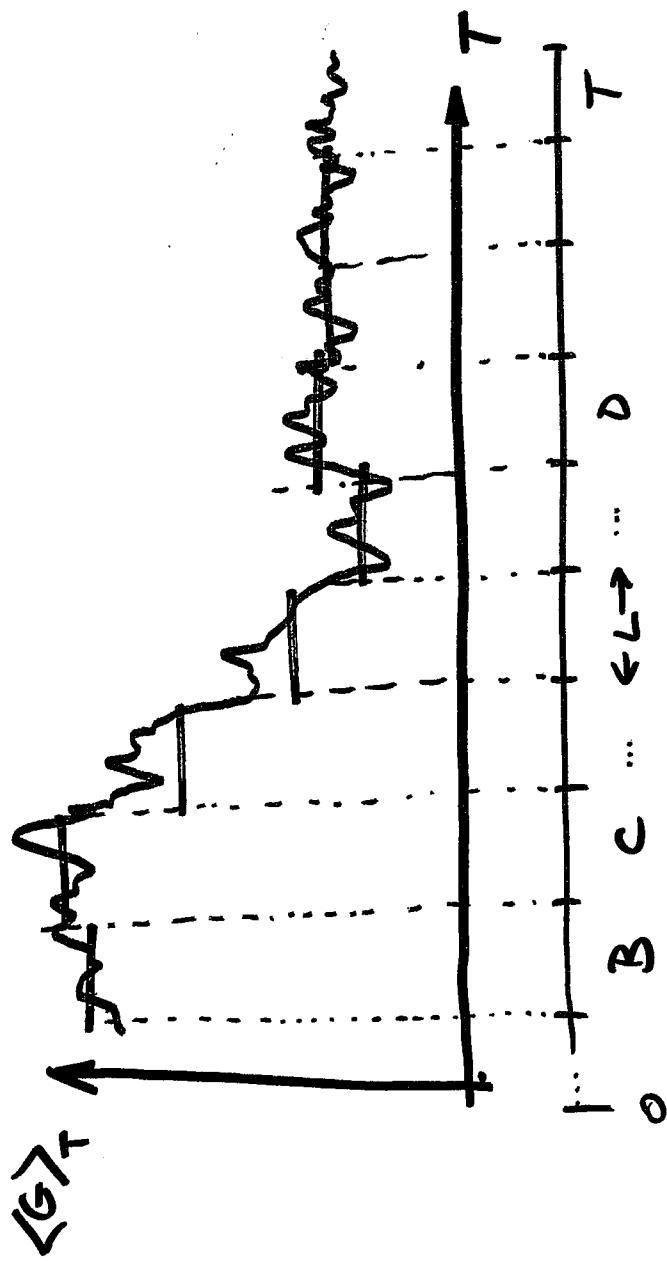
• El equilibrio se dará en $\langle G \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \langle G \rangle_T$

(trayectorias ERGÓDICAS \Rightarrow si $T \rightarrow \infty$, visitamos TODAS las configuraciones (à la Boltzmann), pesando MUCHO más "tiempo MC" en las config. de equilibrio, que en promedio DOMINAN el valor de $\langle G \rangle$)

• ¡Pero el ∞ está muy, muy lejos !!

→ Termination.





$$\langle G \rangle_T = \frac{1}{T} \sum_{I=A, B, \dots} \langle G \rangle^{(I)}$$

$$\Delta \langle G \rangle_T = \left[\frac{1}{T} \sum_I (\langle G \rangle^{(I)} - \langle G \rangle_T)^2 \right]^{1/2}$$

$$\Delta \langle G \rangle \rightarrow 0 \text{ como } T^{-1/2} \text{ cuando } T \rightarrow \infty$$

OJO: la ergodicidad
no se cumple si las
trayectorias resultan
"atrapadas" en un
subespacio de S

los experimentos son IMPREDECIBLES ...

• ¿cómo se genera una trayectoria?

- MC no realiza una verdadera "dinámica"

- Trayectoria MC = "random walk" en el espacio de configs.

- "MONTE CARLO" se llama así por las secuencias random de los ruletas de los casinos.

- En cuanto el sistema es mediano → grande

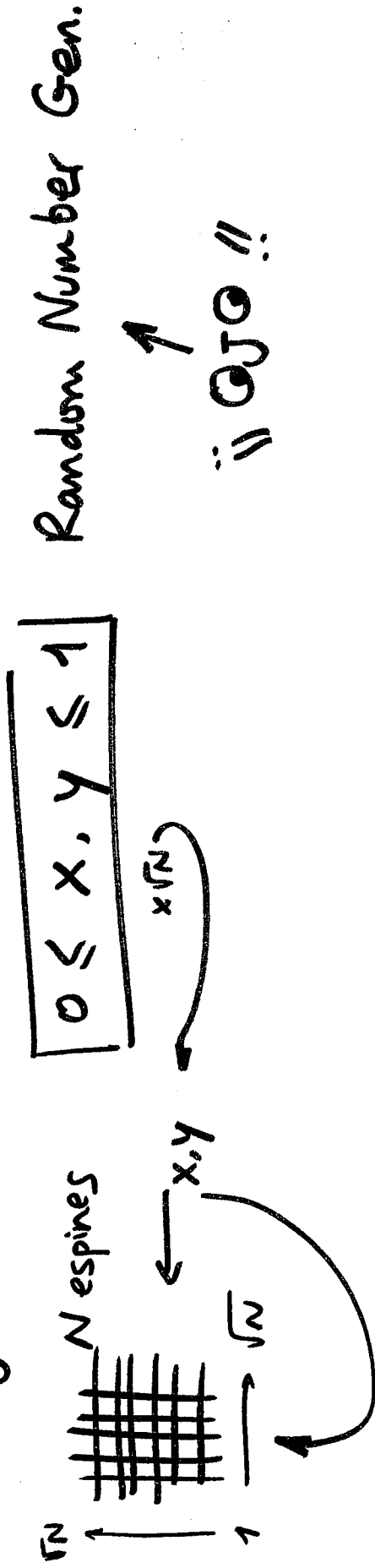
"visitar" la ergodicidad es impracticable

$$2D: \underbrace{20 \times 20}_{400} \text{ Ising} = 2^{400} > 10^{100}$$

- La energía de "casi todos" esos 2^{400} es tan alta que no son significativos:

1) $t=0$. El primer paso es una configuración cualquiera, \checkmark

2) Se elige un espín al azar



3) Se considera ν' , que es ν con el espín seleccionado invertido.

$$\Delta E_{\nu\nu'} = E_{\nu'} - E_{\nu}$$

4) MC original: si $\Delta E_{\nu\nu'} < 0$, "aceptamos" el cambio, y $t=1 \dots$ y pasamos a $t=1 \dots$ si $\Delta E_{\nu\nu'} > 0$ "rechazamos" el cambio, y $t=1 \dots$

• MC original $\rightarrow E$ es monótonamente decreciente

¡OJO! ES FACIL "QUEDAR ATRAPADO" EN UN MÍNIMO LOCAL



• ALGORITMO DE METRÓPOLIS

$$\exp\left(\frac{-\Delta E_{vv'}}{kT}\right) \geq x \rightarrow \text{Aceptado}$$

$$\text{si } \Delta E_{vv'} > 0 ; \text{ X azar } \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(\frac{-\Delta E_{vv'}}{kT}\right) < x \rightarrow \text{Rechazado} \\ (0-1) \end{array} \right.$$

\rightarrow la energía de configs. aceptadas puede subir

es decir:

$$\cdot \nu(t) = \nu$$

$$\cdot \nu(t+1) = \nu' \quad \text{si} \quad \Delta E_{\nu\nu'} \leq 0$$

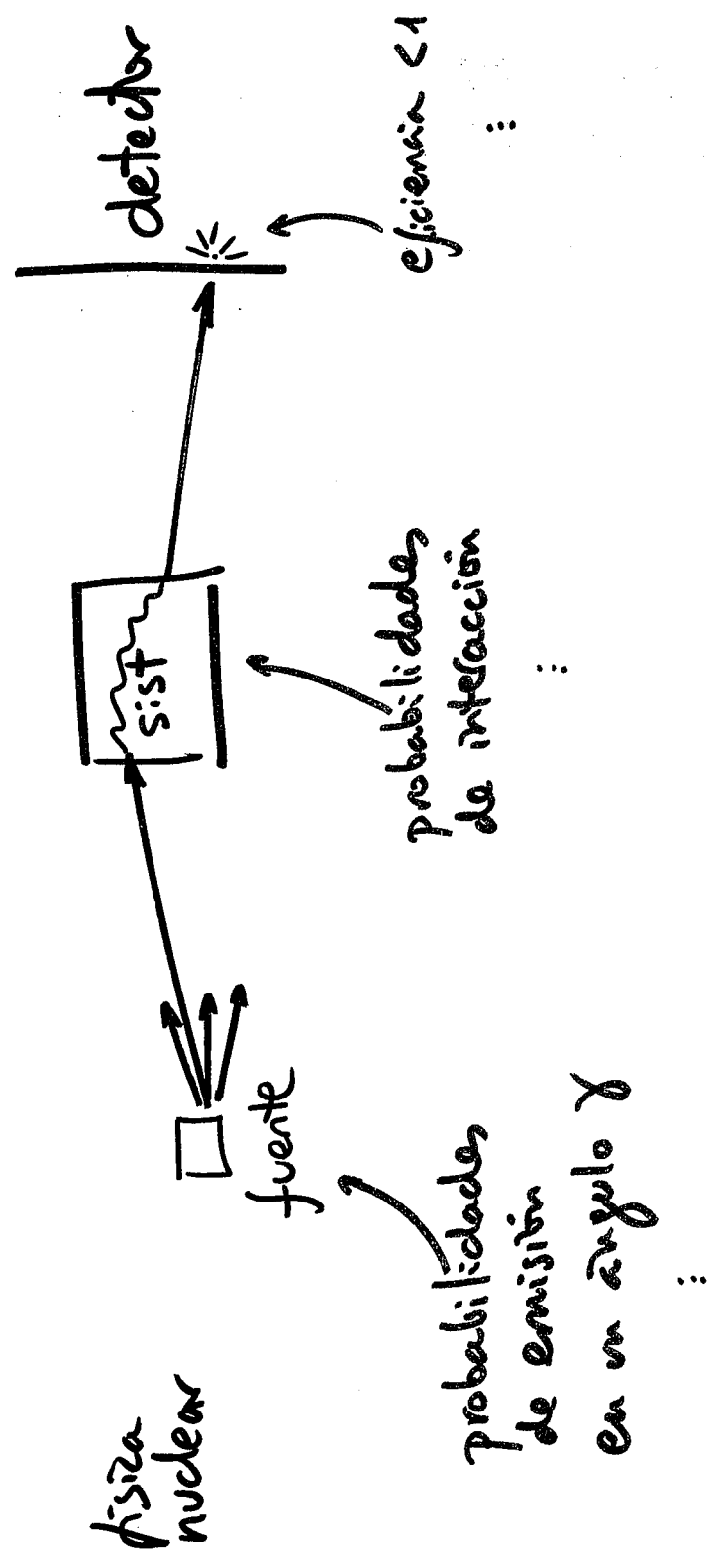
$$\nu \quad \text{si} \quad \exp\left(-\frac{\Delta E_{\nu\nu'}}{k_B T}\right) < x$$

$$\cdot \nu(t+1) = \left\{ \begin{array}{l} \nu' \quad \text{si} \quad \exp\left(-\frac{\Delta E_{\nu\nu'}}{k_B T}\right) \geq x \\ \nu \quad \text{si} \quad \Delta E_{\nu\nu'} > 0 \end{array} \right.$$

N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller & E. Teller, 1953

MC en sistemas NO-TERMODINÁMICOS.

los ejemplos sólo están limitados por la imaginación!

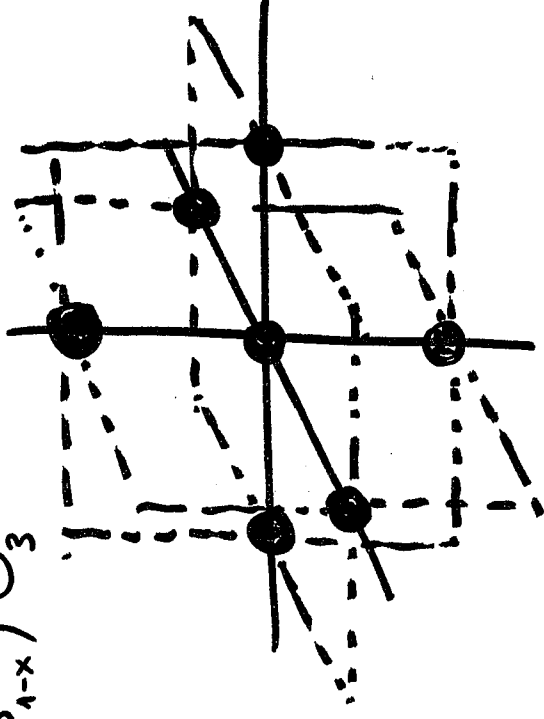


1° paso \equiv 1 "rayo" MC

MC en sistemas NO TERMODINAMICOS

• Solución SÓLIDA : $A(B_x B'_{1-x})O_3$

¿Qué porcentaje de n.n. B' tiene cada B en promedio para un x dado?

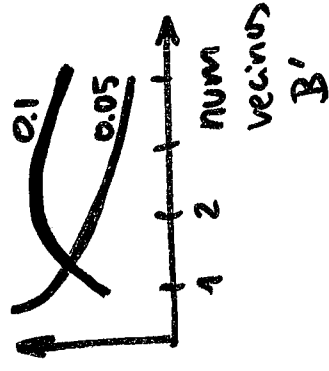


una configuración "química" = un paso MC

se cuentan N situaciones iniciales

y de PROMEDIA ...

S.C. $x = 0.05$
 0.1
 \vdots



• CONDICIONES de CONTENIDO:

→ SÓLIDOS ≡ COND. CONT. PERIÓDICAS OK

→ NANOSISTEMAS = LA SUPERFICIE IMPORTE !!

$$(Surf/Vol) \uparrow \downarrow < D >$$

• RECOCIDO (Annealing)

→ Nos asegura un estado inicial "ergódico" y evitar tomar por totales mínimos locales

- J.M. YEOMANS Statistical Mechanics of Phase Transitions
Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford 1992
- DAVID CHANDLER Introduction to Modern Stat. Mech.
Oxford University Press, Oxford 1987.

ENTREGA PROBLEMAS: 12 NOVIEMBRE (arts de 14h)

CLASE DE RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS: 13 NOVIEMBRE

Física de Bajas Temperaturas

Transiciones de Fase. Problema 3

29 de octubre de 2007

El punto de partida para un tratamiento cuántico del magnetismo y el antiferromagnetismo es el denominado Hamiltoniano de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\mu\nu} S_{\mu} \cdot S_{\nu} - g\mu_B B \cdot \sum_{\mu} S_{\mu} \quad (1)$$

con $S_{\mu} = \pm 1$ y siendo g el factor de Landé, μ_B el magnetón de Bohr y J la integral de intercambio. μ y ν recorren toda la red, y la prima del sumatorio indica que $\mu \neq \nu$.

¿Puedes esquematizar el diagrama de flujo de un programa Montecarlo con algoritmo de Metropolis para medir la imanación de cada subred de un Ising bidimensional antiferromagnético, con campo magnético aplicado? Vamos a suponer una red bidimensional cuadrada de tamaño $N = N_x \times N_y$, con interacciones antiferro a primeros vecinos. ¿Y cómo medirías la capacidad calorífica del sistema? No es necesario programar nada, sólo explicar cómo habría que implementarlo.