

Michael Adler

Monte Carlo simulations of the Ising model



Anchor Academic Publishing

disseminate knowledge

Adler, Michael: Monte Carlo simulations of the Ising model, Hamburg, Anchor Academic Publishing 2016

Buch-ISBN: 978-3-95489-879-4

PDF-eBook-ISBN: 978-3-95489-466-6

Druck/Herstellung: Anchor Academic Publishing, Hamburg, 2016

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek:

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Bibliographical Information of the German National Library:

The German National Library lists this publication in the German National Bibliography. Detailed bibliographic data can be found at: <http://dnb.d-nb.de>

All rights reserved. This publication may not be reproduced, stored in a retrieval system or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Bearbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Die Informationen in diesem Werk wurden mit Sorgfalt erarbeitet. Dennoch können Fehler nicht vollständig ausgeschlossen werden und die Diplomica Verlag GmbH, die Autoren oder Übersetzer übernehmen keine juristische Verantwortung oder irgendeine Haftung für evtl. verbliebene fehlerhafte Angaben und deren Folgen.

Alle Rechte vorbehalten

© Anchor Academic Publishing, Imprint der Diplomica Verlag GmbH
Hermannstal 119k, 22119 Hamburg
<http://www.diplomica-verlag.de>, Hamburg 2016
Printed in Germany

Monte Carlo Methods applied to the Ising model

Michael Adler

The thermodynamic observables of the classical one- and two-dimensional ferromagnetic and antiferromagnetic Ising models on a square lattice are simulated, especially at the phase transitions (if applicable) using the classical Monte Carlo algorithm of Metropolis. Finite size effects and the influence of an external magnetic field are described. The critical temperature of the 2d ferromagnetic Ising model is obtained using finite size scaling.

“My parents”

Contents

1. Statistical mechanics – a short review	3
1.1. Description of state of a system	4
1.1.1. Phase space	4
1.1.2. Statistical ensembles	5
1.2. Transition between different states	7
1.3. Thermodynamic observables	8
1.4. Phase transitions	10
1.5. n-vector models	12
1.5.1. Ising model	13
2. Monte Carlo simulation	17
2.1. Fundamentals	17
2.1.1. Crude Monte Carlo	18
2.1.2. Markov Chain Monte Carlo	19
2.1.3. Markov chains	21
2.2. Monte Carlo simulations in statistical mechanics	22
2.2.1. Ergodicity and detailed balance	22
2.2.2. Acceptance ratios	23
2.2.3. Metropolis algorithm	23
2.2.4. Initialization bias	24
2.2.5. Autocorrelation in equilibrium	25
2.3. Analyzing the data – T_c and more	26
2.3.1. Finite size scaling and the Binder ratio	26
3. Selected results	29
3.1. One-dimensional Ising model	29
3.2. Two-dimensional Ising models	33
3.2.1. The ferromagnetic Ising model	33
3.2.2. Antiferromagnetic Ising model	39

Contents

3.3. The phase transition	44
3.4. The Critical temperature and critical exponents	45
3.4.1. Binder cumulant	45
3.4.2. Critical exponents	46
A. Source code of MC integrators	49
A.1. Crude Monte Carlo	49
A.2. Markov chain MC integrator	50
B. Implementation of the Ising models	55
B.1. Skeleton of the code	55
B.2. Source codes of the Ising models	57
B.2.1. One dimensional Ising model	57
B.3. Two dimensional Ising model	70
Bibliography	91
List of Figures	93

Chapter 1.

Statistical mechanics – a short review

Before presenting the Ising model we will refresh the basic concepts of statistical mechanics. For more information on this important topic the reader is referred to (9, 22)

In thermodynamics we are interested in the properties of systems consisting of a large number of particles. However the sheer number of particles makes it impossible to write down and solve about 10^{23} coupled equations of motion. We would also need the same number of initial conditions. Obviously it is also impossible to get experimentally all the initial conditions required. But we are not interested in the microscopic properties (EOMs of the particles of our system) but rather in *macroscopic observables* like the energy, temperature, heat capacity etc. Hence it is sufficient to have only information about the *statistical* properties of our system. Henceforth we will use the terms *microscopic* and *macroscopic* systems. A macroscopic system consisting of N^1 particles fulfills:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \ll 1$$

Any system that does not fulfill this condition is microscopic. Applications of statistical methods to such a system would entail unreasonable errors.

¹ N is typically $6 \cdot 10^{23}$ or more.