Prof. Dr. Wolfhard Janke WS2025/26

Einführung in die Computersimulation I

6. Übungsblatt

Abgabetermin: Mittwoch, 03. Dezember 2025

11. **Monte-Carlo-Simulationen des 2D Ising-Modells**

    Erweitern Sie Ihr Programm für das 1D Ising-Modell aus Aufgabe 8 bzw. 10 auf zwei (bzw. idealerweise gleich beliebige D) Dimensionen. Betrachten Sie für verschwindendes Magnetfeld quadratische Gitter der Kantenlängen $L = 4$, 8 und 16 mit periodischen Randbedingungen über einen größeren Temperaturbereich ($\beta = J/(k_B T) = 0, \ldots, 1$) und vergleichen Sie die Simulationsergebnisse für die Energie und spezifische Wärme mit exakten Resultaten (s. Vorlesungs-Homepage).

12. **Simulation von 2D Zufallswegen**

    Betrachten Sie zweidimensionale Zufallswege ("random walks"), die im Ursprung starten, mit Positionen $\vec{r}_i = \sum_{k=1}^{i} \vec{b}_k$, wobei die Schritte $\vec{b}_k = (b_{x,k}, b_{y,k})$, $k = 1, \ldots, i$ unabhängige zufällige Einheitsvektoren sind. In Polarkoordinaten können diese durch $\vec{b}_k = (\cos(\phi_k), \sin(\phi_k))$ parametrisiert werden, wobei $\phi_k = 2\pi r$ mit einer (Pseudo) Zufallszahl $r \in [0, 1)$.

    Simulieren Sie 10 000 solcher Zufallswege mit bis zu $N = 100$ Schritten und messen die Mittelwerte des quadratischen "end-to-end" Abstands

    $$\langle r_{ee}^2 \rangle = \langle \vec{r}_N^{\,2} \rangle$$

    und des quadratischen Gyrationsradius

    $$\langle r_{\mathrm{gyr}}^2 \rangle = \frac{1}{2N^2} \sum_{i,j=1}^{N} \langle (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle (\vec{r}_i - \vec{r}_{\mathrm{com}})^2 \rangle \,,$$

    wobei $\vec{r}_{\mathrm{com}} = (1/N) \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i$ der Schwerpunktvektor ist. Testen Sie das Skalierungsverhalten von $\langle r_{ee}^2 \rangle$ und $\langle r_{\mathrm{gyr}}^2 \rangle$ mit N durch Plots der Resultate als Funktion von N.