

இரண்டாம்நிலை சதுர நெய்யரி புள்ளிகளினால் ஐசிங் மாதிரியில்
ஏற்படும் மாற்றம் பற்றிய புலனாய்வு

**Investigation of Ising model on square lattice with the effect of Second
nearest neighbour interaction**

அ. அருள் அனி எல்டன்¹, ம. பொன்முருகன்²
A. Arul Anne Elden¹, M. Ponmurugan²,

1. ஆராய்ச்சி மாணவர்
2. உதவிப் பேராசிரியர்
அடிப்படை மற்றும் பயன்பாட்டு அறிவியல் பாடசாலை,
இயற்பியல் துறை,
தமிழ்நாடு மத்தியப் பல்கலைக்கழகம்,
திருவாரூர் – 610 005,
தமிழ்நாடு, இந்தியா.

1. Research Scholar
2. Assistant Professor
School of Basic and Applied Sciences,
Department of Physics,
Central University of Tamil Nadu,
Thiruvarur-610 005
Tamil Nadu, India.

E-mail address: 1. elden100@gmail.com , 2. ponphy@cutn.ac.in

ஆய்வுச் சுருக்கம்:

இரு பரிமாண நேர்காந்த (ஃபெர்ரோ) தன்மையுள்ள பொருட்களில், முதல் மற்றும் இரண்டாம் நிலை சதுர நெய்யரி புள்ளிகளின் தொடர்பினால் ஏற்படும் மாற்றத்தைப் பற்றி “ஐசிங்” என்ற கணித மாதிரி கொண்டு “மாண்டி-கார்லோ” நுட்பத்தின் உதவியினால் கண்டறிந்து அறிக்கையிடப்பட்டுள்ளது. இந்த அமைப்பு “மெட்ரோபோலிஸ்” என்ற போல்ட்ஸ்மன் நுட்பத்தின் மூலம் வெப்ப இயக்கவியல் மாறிகள் நேரடியாகக் கண்டறியப்படுகிறது. “வாங்-



லாண்டு” என்ற போல்ட்ஸ்மன் அல்லாத நுட்பத்தின் மூலம் “ஆற்றல் நிலைகளின் அடர்த்தி” கண்டறியப்படுகிறது.

இவ்வாறு கண்டுபிடிக்கப்பட்ட ஆற்றல் நிலைகளின் அடர்த்தி மூலம் வெப்ப இயக்கவியல் மாறிகளை எளிதாகக் கண்டறியலாம். இரண்டாம் நிலை நெய்யரி புள்ளிகளின் தொடர்பு வலிமையில் மாற்றம் ஏற்படுத்தினால், அமைப்பின் மாறுநிலை வெப்பநிலை மாறுபடுகிறது. இந்த ஆய்வில், அமைப்பின் சராசரி ஆற்றல் (அக ஆற்றல்), தன் வெப்ப ஏற்புத்திறன் ஆகியவற்றை ஆராய்ந்து அறிக்கையிடப்பட்டுள்ளது.

குறிச் சொற்கள்: மாண்டி-கார்லோ, ஐசிங் மாதிரி, மெட்ரோபோலிஸ், வாங்-லாண்டு.

Abstract:

We have investigated Ising like system on two dimensional square lattice with the effect of second nearest neighbour interactions. This system represents ferromagnetic material and it analyzed by Monte-Carlo technique. We have allowed the system to evolve under the Metropolis algorithm (Boltzmann technique) and the thermodynamic observables were calculated. The density of states also determined by using the Wang-Landau algorithm which is typically a non-Boltzmann Monte-Carlo technique. The thermodynamic observables were computed from the converged density of states. The transition temperature found to be changed when the second nearest neighbour was altered. The calculated density of states, average energy (internal energy) and the specific heat capacity have been plotted and discussed.

Keywords: Monte-Carlo, Ising model, Metropolis, Wang-Landau.

அறிமுகம்:

சுருங்கிய பருப்பொருள் இயற்பியல் பிரிவில் கணினி உருவகப்படுத்துதல் முறை இன்றியமையாத கருவியாகத் திகழ்கிறது [1]. குறிப்பாக கட்ட மாறுபாடு (Phase Transition) மற்றும் மாறுநிலை தேற்றப்பாடுகளைப் பற்றிய ஆய்வில் பெருமளவில் பயன்படுத்தப்படுகிறது. ஐசிங் சதுர நெய்யரியில் (Ising square lattice) ஒவ்வொரு புள்ளியும் அதன் அருகில் உள்ள முதல்நிலை நான்கு புள்ளிகளின் (இடது, வலது, மேல், கீழ்) தொடர்பு வலிமையால் இணைக்கப்பட்டுள்ளன. நிலை புள்ளிகளின் தொடர்பு



வலிமையால் அமைப்பின் பண்புகளில் ஏற்படும் மாற்றத்தினைப் பற்றி ஆராய மெட்ரோபோலிஸ் (Metropolis) [2] மற்றும் வாங்-லாண்டு (Wang-Landau) [3,4] முறைகள் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. நேர் (ஃபெர்ரோ) காந்தத்தன்மை, எதிர் காந்தத்தன்மை அமைப்பின் தொடர்பு வலிமையால் ஏற்படும் மாற்றத்தை மெட்ரோபோலிஸ் முறைப்படி ஏற்கனவே முன்னாய்வாக ஆராயப்பட்டுள்ளது [5]. வாங்-லாண்டு மூலம் கூட்டு ஆற்றல் மற்றும் காந்தமாக்கம் நிலைகளின் அடர்த்தி கண்டுபிடிக்கப்படுகிறது [6]. உயிரக பல்படிமம் [7,8], ஹெய்சென்பெர்க் நேர் காந்த அமைப்பு [6], நீர்ம படிமம் [9,10] போன்ற பல்வேறு ஆய்வுகளில் வாங்-லாண்டு நுட்பம் பயன்படுகிறது. புள்ளியியல் இயற்பியலில், பங்கீட்டுச் சார்பலனைக் (Partition function) கண்டறிந்தால் அதனைக்கொண்டு வெப்ப இயக்கவியல் அளவுகளை எளிமையாகவும் துல்லியமாகவும் கண்டறியலாம். பொதுவாக வெப்ப இயக்கவியல் அமைப்பானது அதிக நலிவளவு கொண்டது. ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்ப நிலையின் பங்கீட்டுச் சார்பலன் என்பது அமைப்பின் போல்ட்ஸ்மன் காரணியால் மதிப்பேற்ற பெற்ற அனைத்து ஆற்றல் நிலை அடர்த்திகளின் (Density of States) கூட்டுதொகையே ஆகும். அதாவது,

$$Z(\beta) = \sum_E g(E) \exp(-\beta E)$$

இங்கு $g(E)$ என்பது ஆற்றல் நிலைகளின் அடர்த்தி ஆகும். $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B என்பது போல்ட்ஸ்மன் மாறிலி ஆகும். T என்பது வெப்பநிலை ஆகும். இங்கு $k_B = 1$ என எடுத்துக்கொள்ளப்படுகிறது. வாங்-லாண்டு நுட்பத்தின் மூலம் பங்கீட்டுச் சார்பலன் கணக்கிடப்படுகிறது. இதனைக் கொண்டு உற்பத்தி ஓட்டம் மூலம் போல்ட்ஸ்மன் மறுமதிப்பு நுட்பத்தினைப் பயன்படுத்தி தரவுகள் பெறப்படுகிறது.

அமைப்பு:

ஐசிங் மாதிரி என்பது நேர் காந்த பொருட்களில் ஏற்படும் கட்ட மாறுபாடுகளைப் பற்றி அறிய உதவும் எளிமையான கணித மாதிரியாகும். இது இரு சுழற்சி நிலைகள் உடைய (மேல், கீழ்) காந்த திருப்புத்திறனை $\{S_k\}$ மாறியாகக் கொண்ட நெய்யரி மாதிரியாகும். இந்த மாறி $\{S_k\}$ ஆனது $+1$ (மேல்) அல்லது -1 (கீழ்) எண்களைப் பெரும். இவ்வாய்வில் சதுர வடிவ நெய்யரி புள்ளிகளைக் கொண்ட ஐசிங் அமைப்பைக் கருதுவோம். இதன் மொத்த ஆற்றல் சமன்பாடு ஹாமில்டோனியன் கீழே கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.

$$H(S) = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{[ik]} S_i S_k$$

S_i என்பது நெய்யரி புள்ளி, S_j அருகில் உள்ள முதல்நிலை நெய்யரி புள்ளி. S_k அருகில் உள்ள இரண்டாம்நிலை நெய்யரி புள்ளி. J_1, J_2 ஆகியன அருகில் உள்ள முதல்நிலை மற்றும் இரண்டாம்நிலை நெய்யரி புள்ளிகளின் தொடர்பு வலிமைகள் ஆகும். காந்த புலம் இல்லாத நிலையில், $J_1 > 0$ என்பது நேர் காந்த தன்மை எனவும், $J_1 < 0$ என்பது எதிர்-காந்த தன்மை எனவும் பிரிக்கப்பட்டுள்ளது. இந்த அமைப்பினை மாண்டி - கார்லோ நுட்பத்தினைக் கொண்டு அணுகப்படுகிறது.

உருவகப்படுத்துதல் முறைகள்:



மெட்ரோபோலிஸ் நுட்பம்:

இந்த நுட்பம் வெப்பநிலையைச் சார்ந்து இருக்கும். இது போல்ட்ஸ்மன் நுட்பங்களில் ஒன்றாகும். ஓர் சதுர நெய்யரியில், சமவாய்ப்பு சுழற்சி கொண்ட ஐசிங் புள்ளிகளை உடைய நுண் (மைக்ரோ) நிலையுடன் C_i தொடங்குவோம். நெய்யரி சுழற்சியை மாற்றுவதன் மூலம் தொடர்ச்சியான, சீரற்ற மைக்ரோ நிலைகளைக் கொண்ட சங்கிலியைப் பெறலாம். இவ்வாறு பெறப்பட்ட சங்கிலி மார்கோவியன் சங்கிலி என்று அழைக்கப்படுகிறது.

$$C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow \dots C_i \rightarrow C_{i+1} \rightarrow \dots C_N$$

மெட்ரோபோலிஸ் நுட்பம் கீழ்க்கண்ட வழிமுறைகளின் படி செயல்படுத்தப்படுகிறது.

1. சீரற்ற நெய்யரி கட்டமைப்பை ஆரம்ப மைக்ரோ நிலை C_i ஆக தேர்வு செய்து, அதன் ஆற்றல் E_i என கண்டுபிடிக்கப்பட்டது.
2. சமவாய்ப்பு (random) முறையில் ஓர் நெய்யரி புள்ளியைத் தேர்வு செய்து, அதன் சுழற்சியை (Spin) மாற்றுவதன் மூலம் புதிய நுண்நிலை C_f தேர்வு செய்யப்பட்டது. அதன் ஆற்றல் E_f ஆகும். $S_i = -S_i$
3. ஆற்றல் வேறுபாடு $\Delta E = E_f - E_i$ கணக்கிடப்பட்டது.
4. $\Delta E \leq 0$ என்றால் புதிய மைக்ரோ நிலையை ஏற்று கொள்ளலாம்.
5. $\Delta E > 0$ எனில் நியம நிகழ்தகவு (Probability) $P = \exp(-\beta\Delta E)$ கணக்கிடப்படுகிறது.
6. P யின் மதிப்பானது r உடன் ஒப்பிட்டு பார்க்கப்படுகிறது. r என்பது 0 முதல் 1 க்கு இடையில் உள்ள சீரான பரவல் கொண்ட தற்போக்கு எண் (Random number) ஆகும். $r \leq P$ எனில் புதிய நுண்நிலையைப் பழைய நுண்நிலையாக ஏற்றுக் கொள்ள வேண்டும்.
7. இந்த நுண்நிலையைக் கொண்டு வெவ்வேறு சராசரி அளவுகளில் பதிவேற்றம் செய்து கொள்ள வேண்டும்.
8. தேவையான மற்றும் சரியான தரவுகள் கிடைக்கும் வரை படிநிலை 2 முதல் 7 வரை தொடர்ந்து மறுசெய்கை முறையை பின்பற்ற வேண்டும்.
9. 1 முதல் 8 வரை உள்ள படிநிலைகள் ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலைக்கு மட்டுமே. வெவ்வேறு வெப்பநிலைகளுக்கு மேற்கண்ட படிநிலைகளைத் தொடர்ந்து செய்ய வேண்டும்.

வாங்-லாண்டு நுட்பம்:

இந்த நுட்பம் வெப்பநிலையைச் சார்ந்தது அல்ல. அதனால் இதனை போல்ட்ஸ்மன் அல்லாத நுட்பம் என்று அழைக்கப்படுகிறது. இதன் மூலம் அமைப்பின் ஆற்றல் நிலை அடர்த்தியைக் கண்டறியலாம். இந்த அணுகுமுறையின் நோக்கமானது, வாய்ப்பு கூறிடல் முறையில் தேர்வு செய்யப்பட்ட நெய்யரி புள்ளியின் சுழற்சியை மாற்றி, ஆற்றல் வெளியில் முற்குறிப்பில்லா நடையை நிகழ்த்துவதாகும், அதன் நிகழ்தகவானது ஆற்றல் நிலைகளின் அடர்த்திக்கு (ஆ.நி.அ.) எதிர்விகிதத்தில் இருக்கும் $P(E) = 1/g(E)$. ஆ.நி.அ. என்பது $g(E)$ என குறிப்பிடப்படுகிறது. முதலில் அனைத்து ஆற்றல் மட்டத்திற்கும் ஆ.நி.அ.-இன் தொடக்க மதிப்பு ஒன்று எனவும் செவ்வக பட தொடக்க மதிப்பு ஒன்று எனவும் எடுத்துக் கொள்ளப்படுகிறது. அதாவது $g(E) = 1$; மற்றும் $H(E) = 1$. சமவாய்ப்பு கூறு ஆரம்ப கட்டமைப்பு C_i ஒன்றினைக் கருதுவோம். அதன் ஆற்றல் E_i ஆகும். சமவாய்ப்பு முறையில் நெய்யரி புள்ளி ஒன்றைத்



தேர்வு செய்து அதன் சுழற்சியை மாற்றி புதிய கட்டமைப்பானது C_f உருவாக்கப்படுகிறது. இதன் ஆற்றல் E_f ஆகும். இந்த புதிய கட்டமைப்பு நகர்வு கீழ்க்கண்ட நிகழ்தகவு மூலம் ஏற்றுக்கொள்ளப்படுகிறது,

$$P(E_i \rightarrow E_f) = \min \left(\frac{g(E_i)}{g(E_f)}, 1 \right).$$

மார்கோவியன் சங்கிலியில் ஒவ்வொரு நுண்நிலை நகர்வுக்கும், அதன் ஆற்றலுக்குத் தொடர்புடைய ஆ.நி.அ.-இன் மதிப்பை மாற்றும் காரணி $f (f > 1)$ ஆல் பெருக்கிப் பதிவேற்றப்படுகிறது. மேலும் பரவல் செவ்வக பட மதிப்பு 1 ஐ கூட்டுவதால் மதிப்பேற்றப்படுகிறது,

$$g(E) = g(E) * f$$

$$H(E) = H(E) + 1.$$

மடக்கையை உபயோகப்படுத்தி ஆ.நி.அ. கண்டுபிடிப்பது எளிதானது. ஆகையால் ஆ.நி.அ. இன் தொடக்க மதிப்பிடல் மற்றும் அதன் மதிப்பேற்றம் ஆகியன கீழ்க்கண்டவாறு செயல்படுத்தப்படுகிறது.

$$\ln[g(E)] = 0; H(E) = 0; \ln f = 1$$

$$\ln[g(E)] = \ln[g(E)] + \ln f.$$

புதிய கட்டமைப்பு நிராகரிக்கப்பட்டால் ஆரம்ப கட்டமைப்பு புதிய கட்டமைப்பாக எடுத்து கொள்ளப்படும். பொதுவாக, ஒவ்வொரு 10,000 மாண்டி-காரலோ சுற்றுக்கும் பரவல் செவ்வக பட மதிப்பு ஏறக்குறைய சமமாக இருக்கிறதா என உறுதி செய்ய வேண்டும். பரவல் செவ்வக பட மதிப்புகள் ஏறக்குறைய 80% சமமாக இருப்பின், மாற்றும் காரணியை 0.5 ஆல் பெருக்குவதன் மூலம் குறைக்கப்பட்டு மற்றும் பரவல் செவ்வக பட மதிப்பு சுழி $H(E) = 0$ என செய்து மேற்கண்ட முறையை மருசெய்கை செய்ய வேண்டும். $\ln f$ மதிப்பானது போதுமான குறைந்த அளவை எட்டும்வரை ($\ln f < 10^{-8}$) மேற்கண்ட மறுசெய்கையைத் தொடர வேண்டும். ஒருங்கிணைந்த ஆற்றல் நிலைகளின் அடர்த்தி கண்டுபிடித்த பின்னர் பங்கீட்டுச் சார்பலன் கண்டுபிடிக்கப்பட்டது. இந்த தரவுகளைக் கொண்டு ஒவ்வொரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலைக்கும் உண்டான சராசரி அளவுகளைக் கண்டறியலாம்.

$$\langle O \rangle_{\beta} = \frac{\sum_C O(C) g(E(C)) \exp(-\beta E(C))}{\sum_C g(E(C)) \exp(-\beta E(C))}$$

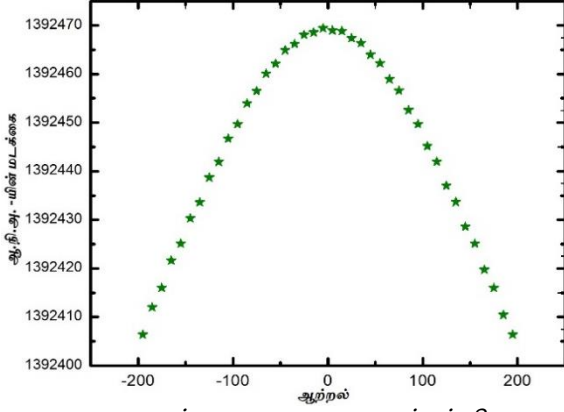
$$C_v(T) = \frac{\langle E^2 \rangle_T - \langle E \rangle_T^2}{k_B T^2}$$

இங்கு, O என்பது கண்டுபிடிக்கப்பட வேண்டிய வெப்ப இயக்கவியல் அளவு, T என்பது அமைப்பின் வெப்பநிலை, $Z(T)$ என்பது பங்கீட்டுச் சார்பலன், E என்பது குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் அமைப்பின் ஆற்றல், C_v என்பது அமைப்பின் தன்வெப்ப ஏற்புத்திறன்.

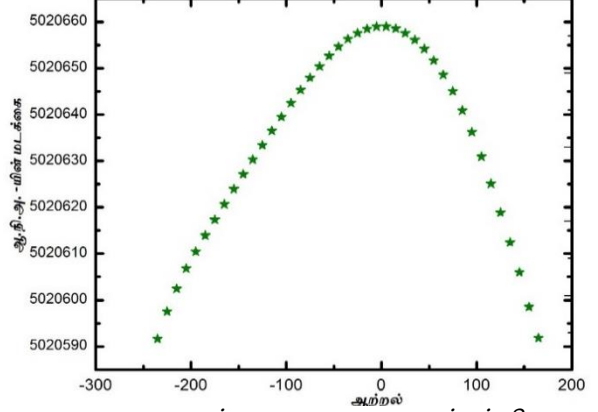
முடிவுகள் மற்றும் விவாதம்:

10 × 10 அளவுள்ள நேர் காந்த நெய்யரி அமைப்பு எடுத்துக்கொள்ளப்பட்டது. இதன் முதல்நிலை நெய்யரி புள்ளியின் தொடர்பு வலிமை $J_1 = 1.0$ என ஆகும். இரண்டாம் நிலை நெய்யரி புள்ளியின் தொடர்பு

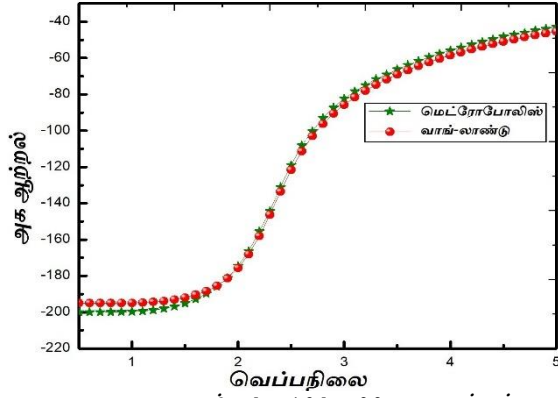
வலிமை J_2 ஐ மாற்றி அமைத்து எண்ணுருவகப்படுத்தப்படுகிறது. வாங்-லாண்டு நுட்பத்தின் மூலம் பெறப்பட்ட அமைப்பின் ஆ.நி.அ.-இன் மடக்கை மதிப்பு வரைபடம். 1,2 ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.



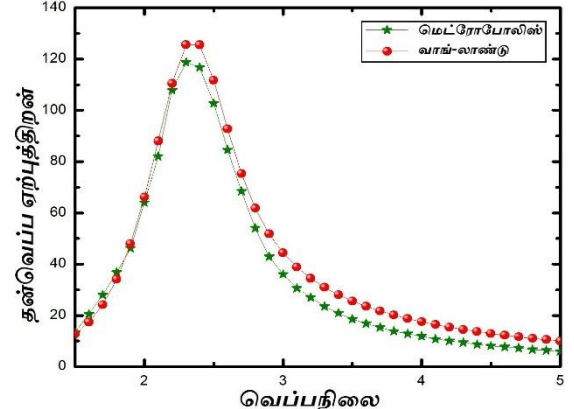
வரைபடம். 1: $J_1 = 1.0; J_2 = 0.0$ ஆற்றல் நிலை அடர்த்தியின் மடக்கை மதிப்பு



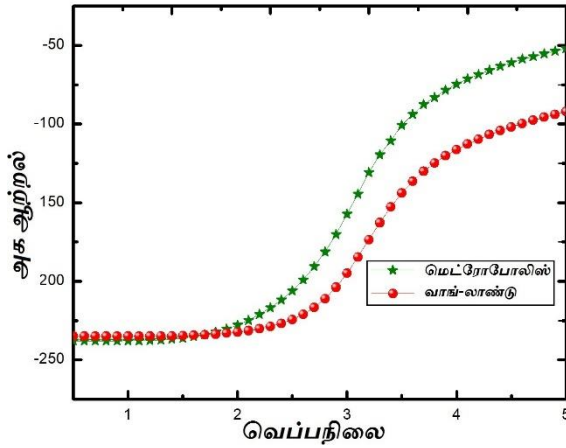
வரைபடம். 2: $J_1 = 1.0; J_2 = 0.2$ ஆற்றல் நிலை அடர்த்தியின் மடக்கை மதிப்பு



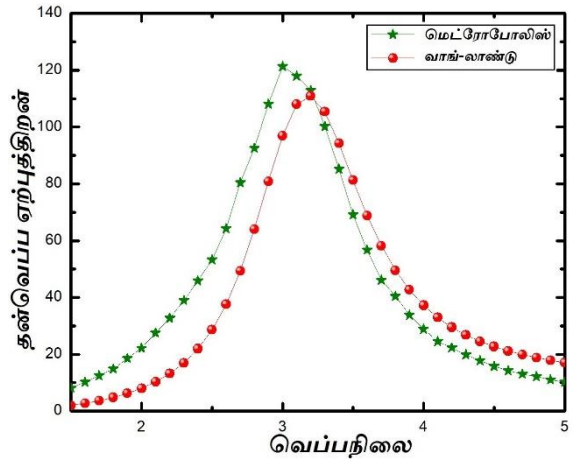
வரைபடம். 3: $J_1 = 1.0 J_2 = 0.0$ அக ஆற்றல் மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறை மூலம் கண்டுபிடிக்கப்பட்டது.



வரைபடம். 4: $J_1 = 1.0 J_2 = 0.0$ தன்வெப்ப ஏற்புத்திறன் மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறை மூலம் கண்டுபிடிக்கப்பட்டது.



வரைபடம். 5: $J_1 = 1.0 J_2 = 0.2$ அக ஆற்றல் மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறை மூலம் கண்டுபிடிக்கப்பட்டது.



வரைபடம். 6: $J_1 = 1.0 J_2 = 0.2$ தன்வெப்ப ஏற்புத்திறன் மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறை மூலம் கண்டுபிடிக்கப்பட்டது.

முதல்நிலை தொடர்பு வலிமை $J_1 = 1.0$ மட்டும் உள்ள நிலையில் நெய்யரி புள்ளி S_i நான்கு புள்ளிகளுடன் தொடர்பில் இருக்கும். இதனை கொண்டு மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறைகளால் எண்ணுவாக்கம் செய்து கொணரப்பட்ட அக ஆற்றல் (சராசரி ஆற்றல்) மற்றும் தன்வெப்ப ஏற்புத்திறன் வரைபடம். 3, 4 ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. இரண்டாம்நிலை தொடர்பு வலிமை J_2 ஐ மாற்றும் போது மேலும் நான்கு புள்ளிகள் தொடர்பில் இருக்கும். இதன் வரைபடம். 5, 6 ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. இந்த தொடர்பு வலிமை மாற்றத்தால் அமைப்பின் மாறுதான வெப்பநிலையில் மாற்றம் ஏற்படுகிறது. மாறுதான வெப்பநிலை T_c என்பது கட்ட மாறுபாடு நிகழும் வெப்ப நிலை புள்ளியாகும். இந்த மாறுதான வெப்பநிலை புள்ளியில் அமைப்பானது ஒரு நிலையில் இருந்து மற்றொரு நிலைக்கு மாறுகிறது. $J_1 = 1.0$; $J_2 = 0.0$ என்ற தொடர்பு வலிமையில் அமைப்பின் மாறுநிலை வெப்பநிலை $T_c \sim 2.3$ என மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறைகளில் கண்டறியப்பட்டது. $J_1 = 1.0$; $J_2 = 0.2$ என்ற தொடர்பு வலிமையில் அமைப்பின் மாறுநிலை வெப்பநிலை மெட்ரோபோலிஸ் முறைப்படி $T_c \sim 3.03$ எனவும் வாங்-லாண்டு முறைப்படி $T_c \sim 3.12$ எனவும் கண்டறியப்பட்டது. இந்த எண்ணுவாக்கத்தில் உள்ள பிழை அளவு தோராயமாக 0.09 . இதனை மெட்ரோபோலிஸ் முறையில் வாய்ப்பு கூறு எடுத்தலை அதிகப்படுத்துதலின் மூலமும், வாங்-லாண்டு முறையில் செவ்வக பட மதிப்பு சமன் செய்யும் அளவை அதிகரிப்பதன் மூலமும் சரி செய்யலாம். இதன் மூலம் $J_1 = 1.0$ என இருக்கும்போது $J_2 > 0$ என மாற்றம் செய்தால் அமைப்பின் மாறுதான வெப்பநிலை அதிகரிக்கும் என்பதை காட்டுகிறது. அமைப்பில் கட்ட மாறுபாடு நிகழ்வதால், மாறுதான வெப்பநிலை புள்ளி வரை அமைப்பு நேர் (ஃபெர்ரோ) காந்த தன்மையுடனும், அப்புள்ளிக்கு மேல் இணை (பாரா) காந்த தன்மையுடனும் இயங்கும்.

முடிவுரை:

இந்த ஆய்வில் இரண்டாம்நிலை சதுர நெய்யரி புள்ளிகளின் தொடர்பு வலிமையால் வெப்ப இயக்கவியல் அமைப்பின் பண்புகளில் ஏற்படும் மாற்றத்தைப் பற்றி ஆராய்ந்து அறிக்கையிடப்பட்டுள்ளது. இது மெட்ரோபோலிஸ் மற்றும் வாங்-லாண்டு முறைகளில் எண்ணுவாக்கப்படுத்தப்பட்டது. அமைப்பின் ஆற்றல் நிலைகளின் அடர்த்தி, அக ஆற்றல் (சராசரி ஆற்றல்), தன்வெப்ப ஏற்புத்திறன் ஆகியன கண்டுபிடிக்கப்பட்டன. இரண்டாம்நிலை நெய்யரி புள்ளியின் தொடர்பு வலிமை $J_2 > 0$ மதிப்பை அதிகரிக்கும்போது அமைப்பின் மாறுநிலை வெப்பநிலை அதிகரிக்கிறது.

துணைநூற்பட்டியல்:

D. P. Landau and K. Binder, A Guide to Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Cambridge University Press, Cambridge, England (2000).

N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, Journal of Chemical Physics, **21**, 1087 (1953).

F. Wang and D. P. Landau, Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states, Phys. Rev. Lett, **86**, 2050 (2001).

F. Wang and D. P. Landau, Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram, Phys. Rev. E, **64**, 056101 (2001).



- A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov and M. K. Badiev, Ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a square lattice, *Solid State Phenomena*, **215**, 17-21 (2014).
- Chenggang Zhou, T. C. Schulthess, Stefan Torbrugge and D. P. Landau, Wang-Landau Algorithm for Continuous Models and Joint Density of States, *Phy. Rev. Lett*, **96**, 120201 (2006).
- N. Rathore, J. J. de Pablo, Monte Carlo simulation of proteins through a random walk in energy space. *J. Chem. Phys.* **116**, 7225-7230 (2002).
- M. Suman Kalyan, K. P. N. Murthy, Monte Carlo study of force induced melting of DNA hairpin. *Physica A*, **428**, 38-45 (2015).
- D. Jayasri, V. S. S. Sastry, K. P. N Murthy, Wang-Landau Monte Carlo simulation of isotropic-nematic transition in liquid crystals. *Phys. Rev. E*, **72**, 036702 (2005).
- K. Mukhopadhyay, N. Ghoshal, S. K. Roy, Monte Carlo simulation of joint density of states in one-dimensional Lebwohl–Lasher model using Wang–Landau algorithm. *Phys. Lett. A*, **372**, 3369-3374 (2008).

