

Курсовая работа

Данилов Максим Данилович

2021 г.

1 Разработка алгоритма минимизации энергии парных взаимодействий в векторных и дискретных моелях

1.1 Фрустрации и явление ферромагнетизма

Отмечается, что некоторые конфигурации спинов у протонов водорода льда воды показывают, как фрустрации приводят к большому числу состояний с равной энергией, в результате чего появляется энтропия не равная нулю при температуре, которая стремится к абсолютному нулю

Ферромагнетизм – это появление спонтанной намагниченности при температуре ниже точки Кюри из-за упорядочения магнитных моментов, большая часть которых при этом параллельна друг другу и сонаправлена

Также, был упомянут такой важный термин, как гамильтониан, его также необходимо разобрать. Гамильтониан – это оператор полной энергии системы. Он имеет свой спектр со множеством возможных значений при измерениях полной энергии системы

1.2 Модель Изинга. Энтропия и критические явления

Данный рисунок является примером фрустрации для 3-х спинов Изинга, которые взаимодействуют друг с другом. При двух антипараллельных спинах с антиферромагнитным взаимодействием третий в любом случае будет сонаправлен с одним и противоположно направлен по отношению к другому спину:

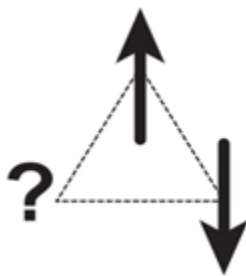


Рис. 1: Фрустрация для трех взаимодействующих спинов Изинга.

Для понимания нужно разобрать, что такое модель Изинга и дать определение спину. Спин – это вращательный момент, которым обладает электрон. А модель Изинга является математической моделью, которая необходима для описания намагниченности материалов, в нашем случае ферромагнетиков и антиферромагнетиков. Она рассматривает совокупность дискретно заданных атомных спинов, которые расположены на периодической решетке (структура с белыми и черными полосами) и которые могут принимать только два значения: ± 1

Гамильтониан для систем одномерного и двумерного измерения задается следующим уравнением:

$$H = -J \sum_{i,j} S_i * S_j$$

где J – константа, определяющая тип взаимодействия, при $J > 0$ – ферромагнитное, при $J < 0$ – антиферромагнитное; S_i и S_j – спины, принимающие значения ± 1 , H – значение гамильтониана

Содержание

1	Разработка алгоритма минимизации энергии парных взаимодействий в векторных и дискретных моелях	1
1.1	Фрустрации и явление ферромагнетизма	1
1.2	Модель Изинга. Энтропия и критические явления	2