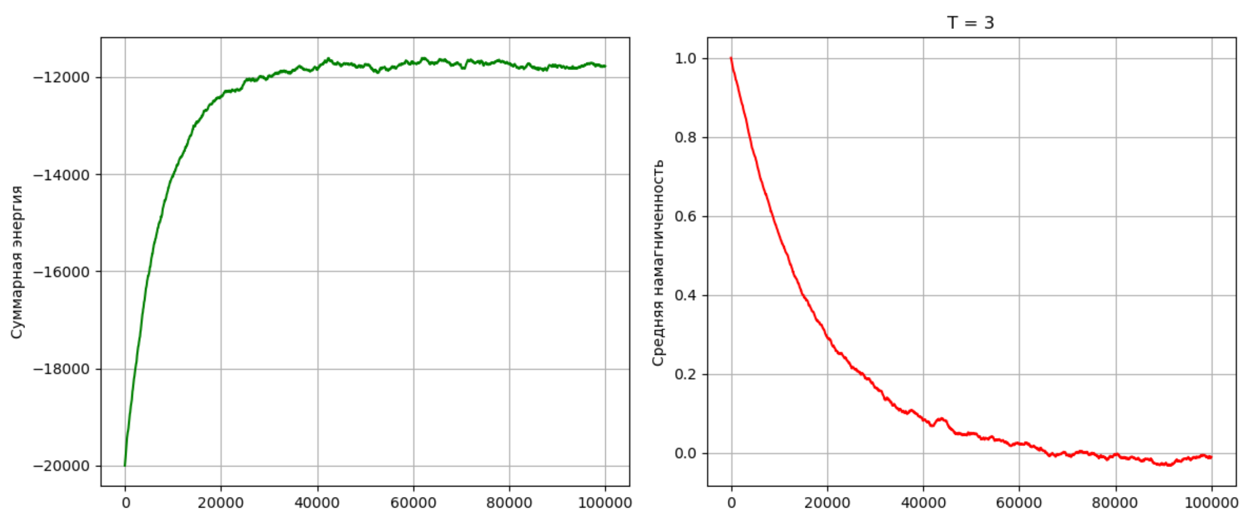
Модель Изинга

Точка Кюри

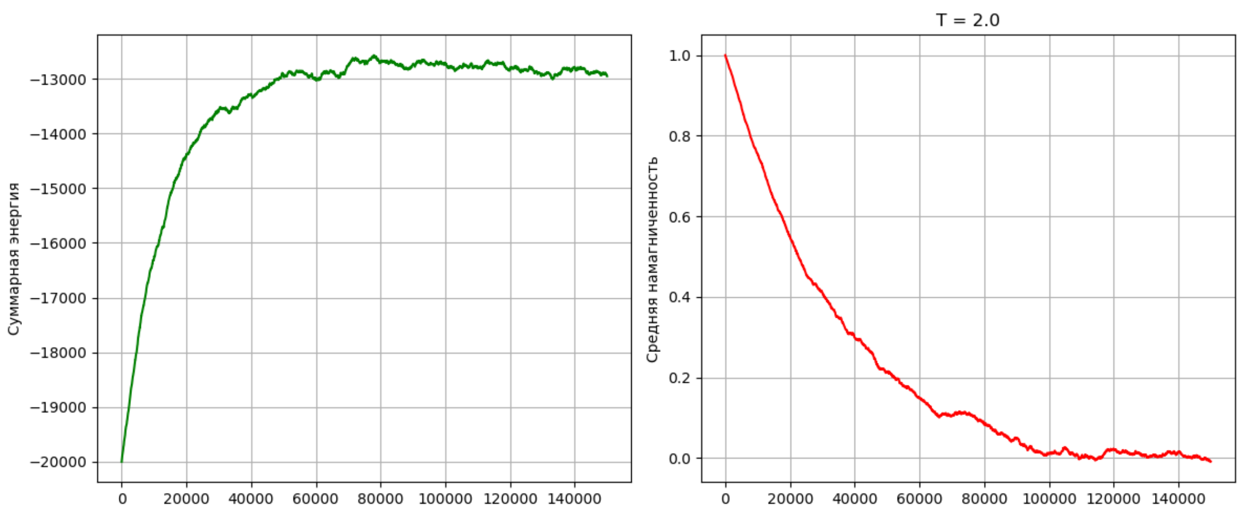
1. Возьмём случайную температуру в у.е., к примеру, $T = 3.0$. Запустим при них код при 100.000 шагов Монте-Карло и построим графики средней намагниченности и суммарной энергии от времени.

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

df = pd.read_csv('data3.0.csv')
n = df['n']
E = df['E']
M = df['M']

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца
plt.title('T = 3')

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(df['n'], df['E'], color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[1].grid(True)
axs[1].plot(df['n'], df['M'], color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')

plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```



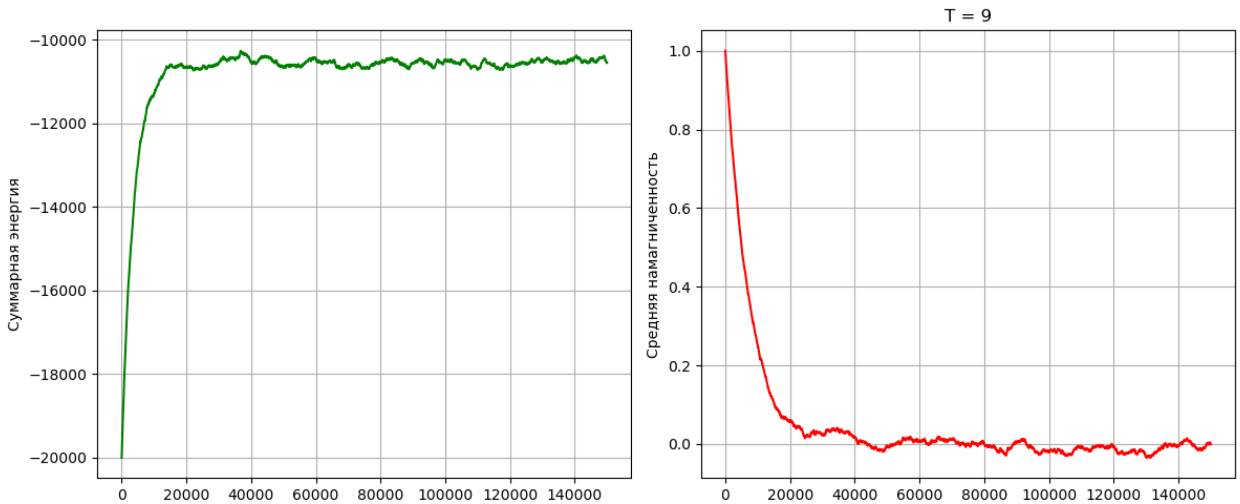
Как видно, для $T = 3.0$ стационарная ситуация достигается на ≈ 70.000 шагов. Попробуем теперь 150.000 шагов для $T = 2.0$ и $T = 9.0$

```
df = pd.read_csv('data2.0.csv')
n = df['n']
E = df['E']
M = df['M']

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца
plt.title('T = 2.0')

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(df['n'], df['E'], color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[1].grid(True)
axs[1].plot(df['n'], df['M'], color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')

plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```



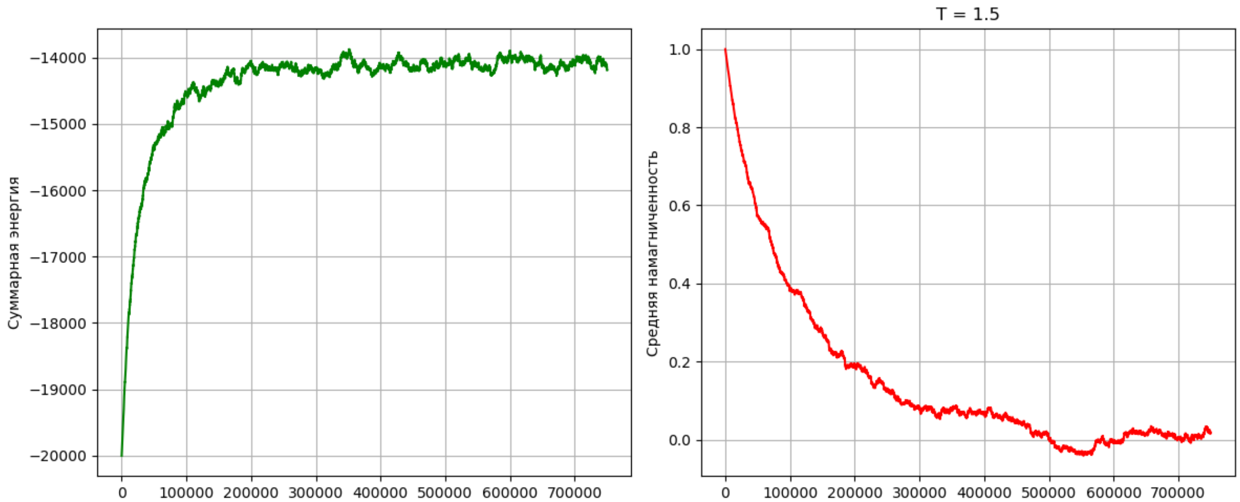

```
df = pd.read_csv('data9.0.csv')
n = df['n']
E = df['E']
M = df['M']

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца
plt.title('T = 9')

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(df['n'], df['E'], color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[1].grid(True)
axs[1].plot(df['n'], df['M'], color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')
```

```
plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```

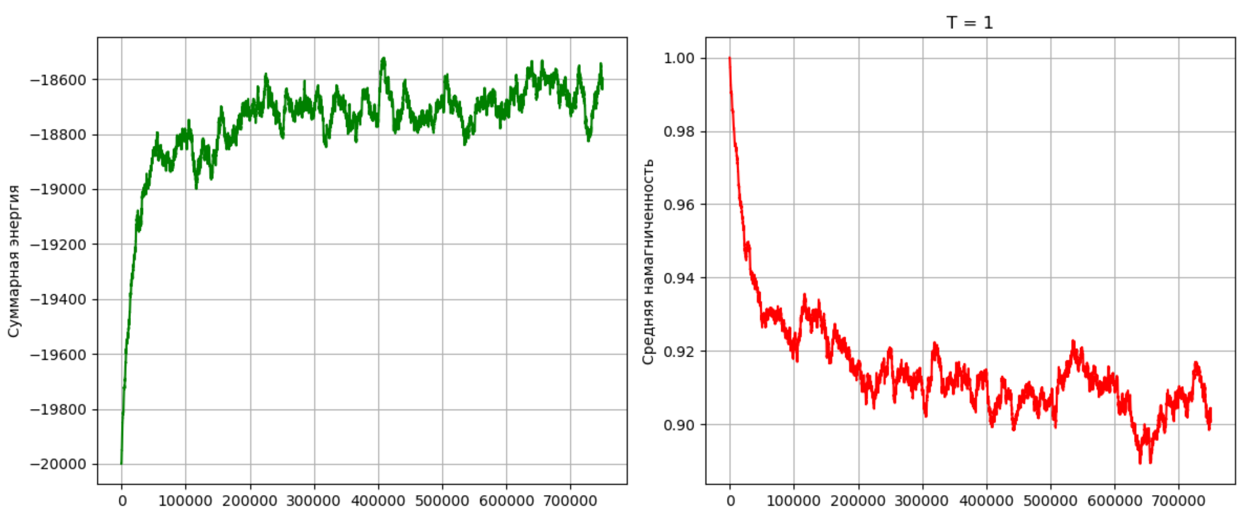


Очевидно, для более низких температур установление равновесия требует бОльшего числа шагов.

```
df = pd.read_csv('data1.5.csv')
n = df['n']
E = df['E']
M = df['M']

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца
plt.title('T = 1.5')

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(df['n'], df['E'], color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[1].grid(True)
axs[1].plot(df['n'], df['M'], color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')

plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```

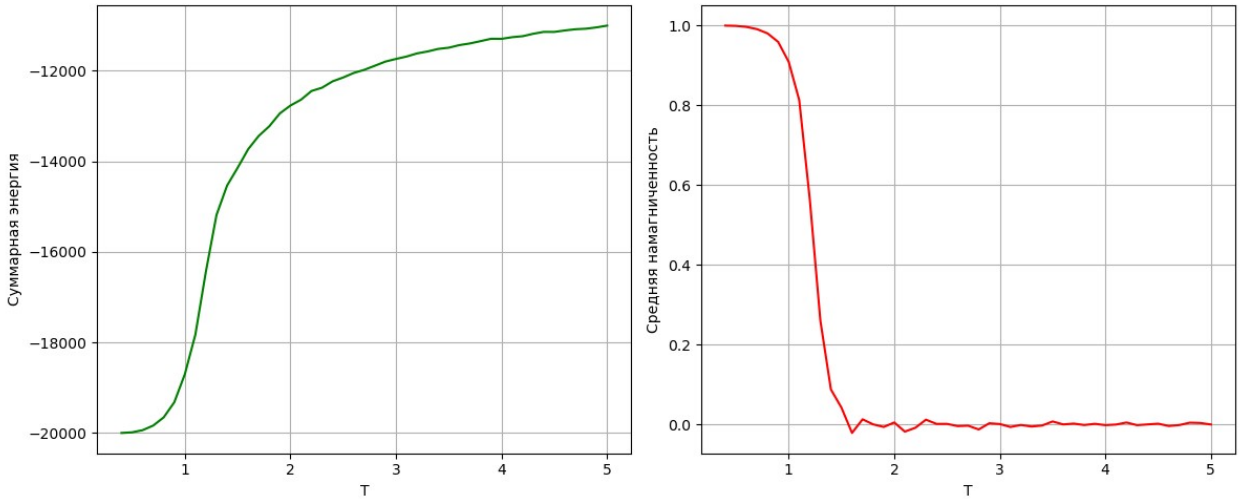



```python
df = pd.read_csv('data1.csv')
n = df['n']
E = df['E']
M = df['M']

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца
plt.title('T = 1')

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(df['n'], df['E'], color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[1].grid(True)
axs[1].plot(df['n'], df['M'], color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')

plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```



Что ж, очевидно где-то в районе $T = 1.5$ и находится точка Кюри, ведь для $T = 1$ равновесие явно при ненулевой намагниченности. Попробуем теперь установить её построением графика средней намагниченности от температуры. Для честности эксперимента, возьмём 800.000 шагов и усредним последние 300.000 шагов. Возьмём температуры в промежутке от 0.4 до 5.0 с шагом в 0.1

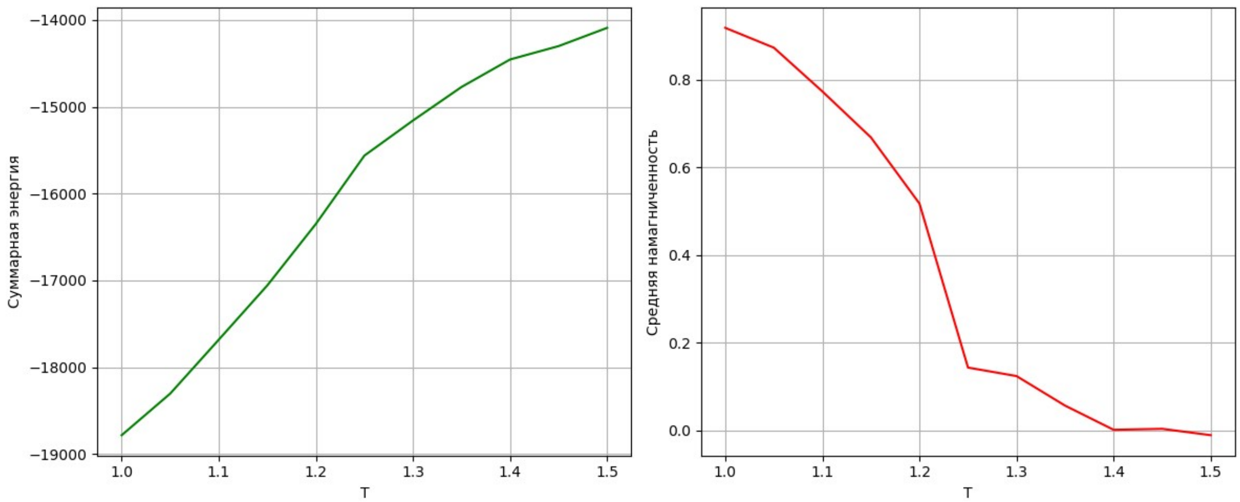
```
mean_E = []
mean_M = []
mean_squared_E = []
mean_squared_M = []

T = []

for i in np.arange(0.4, 5.1, 0.1):
    t = round(i, 1)
    T.append(t)
    df = pd.read_csv(f'curie_data{t}.csv')
    E = df['E']
    M = df['M']

    e = np.mean(E)
    m = np.mean(M)
    mean_squared_e = np.mean(E**2)
    mean_squared_m = np.mean(M**2)

    mean_E.append(e)
    mean_M.append(m)
    mean_squared_E.append(mean_squared_e)
    mean_squared_M.append(mean_squared_m)

mean_E = np.array(mean_E)
mean_M = np.array(mean_M)
mean_squared_E = np.array(mean_squared_E)
mean_squared_M = np.array(mean_squared_M)
T = np.array(T)

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(T, mean_E , color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[0].set_xlabel('T')

axs[1].grid(True)
axs[1].plot(T, mean_M, color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')
axs[1].set_xlabel('T')

plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```



Точка Кюри где-то в промежутке от 1 до 1.5 у.е. температуры. Для уточнения, посмотрим промежуток от 1.0 до 1.5 с шагом 0.05. Так же на всякий случай увеличим количество шагом до 1.500.000, усредняя последние 500.000.

```
mean_E1 = []
mean_M1 = []
T1 = []

for i in np.arange(1.0, 1.55, 0.05):
    t = round(i, 2)
    T1.append(t)
    df = pd.read_csv(f'new_curie_data{t}.csv')
    E1 = df['E']
    M1 = df['M']

    e = np.mean(E1)
    m = np.mean(M1)
    mean_E1.append(e)
    mean_M1.append(m)

mean_E1 = np.array(mean_E1)
mean_M1 = np.array(mean_M1)
T1 = np.array(T1)

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 5))  # 1 строка, 2 столбца

axs[0].grid(True)
axs[0].plot(T1, mean_E1 , color='g')
axs[0].set_ylabel('Суммарная энергия')
axs[0].set_xlabel('T')

axs[1].grid(True)
axs[1].plot(T1, mean_M1, color='r')
axs[1].set_ylabel('Средняя намагниченность')
```

```
axs[1].set_xlabel('T')

plt.tight_layout()  # Автоматическая настройка отступов
plt.show()
```



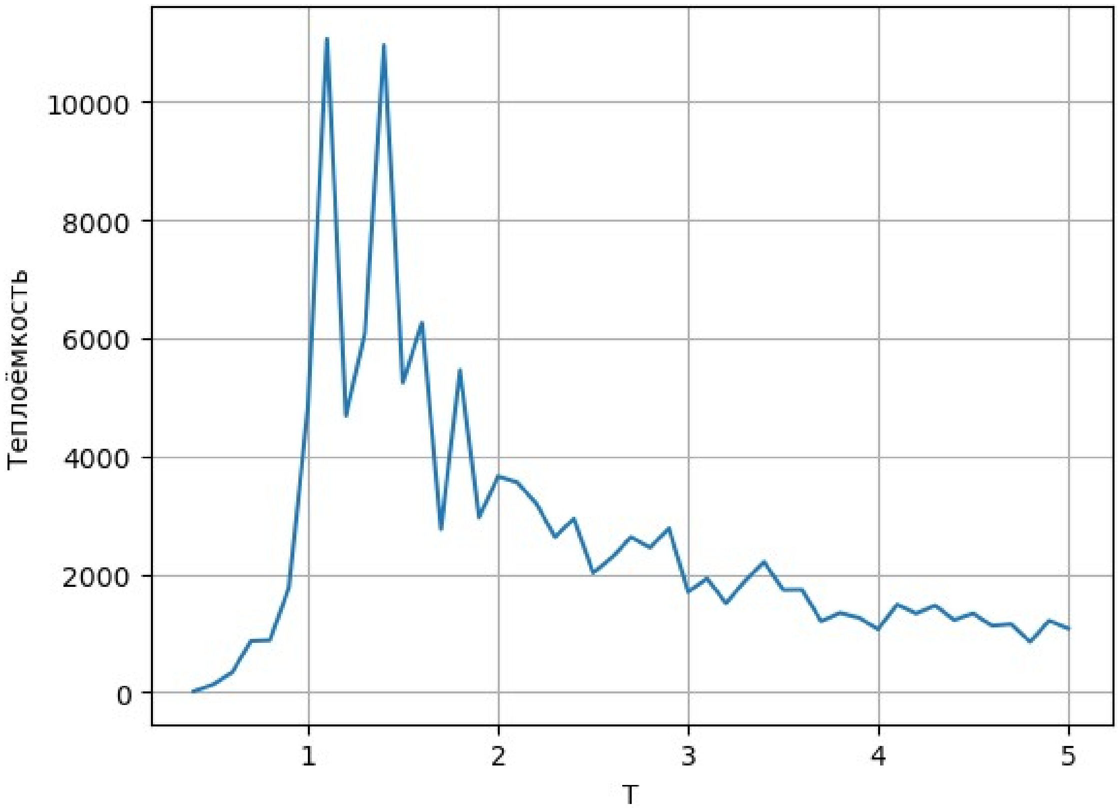
Ну, идеальный ноль начинается с 1.4, однако, очевидно, точка Кюри находится в промежутке от 1.25 до 1.35.

$T_C = 1.30 \pm 0.05$

Теплоёмкость

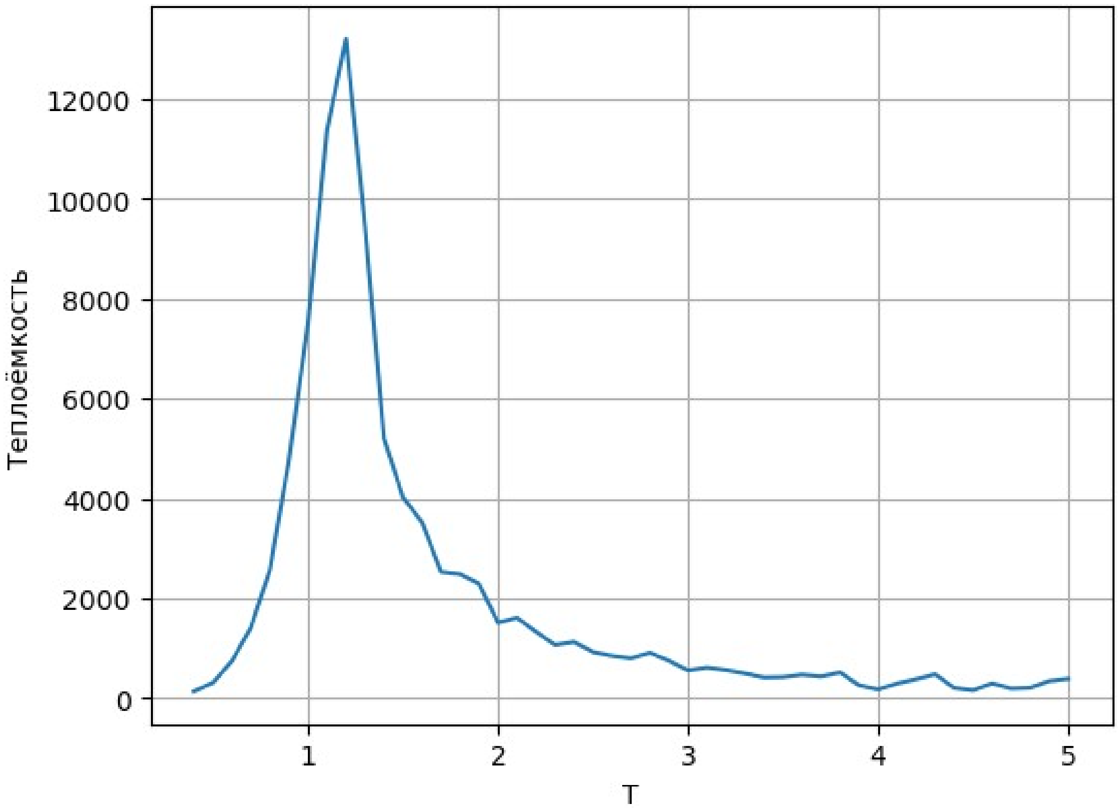
Для начала воспользуемся формулой $C = \frac{¿E^2 > - < E¿^2}{k_B T}$

```
C = (mean_squared_E - mean_E**2)/T

plt.plot(T, C)
plt.xlabel('T')
plt.ylabel('Теплоёмкость')
plt.grid(True)
plt.show()
```



А теперь посчитаем $C = \frac{dE}{dT}$

```
C = np.gradient(mean_E, T)

plt.plot(T, C)
plt.xlabel('T')
plt.ylabel('Теплоёмкость')
plt.grid(True)
plt.show()
```

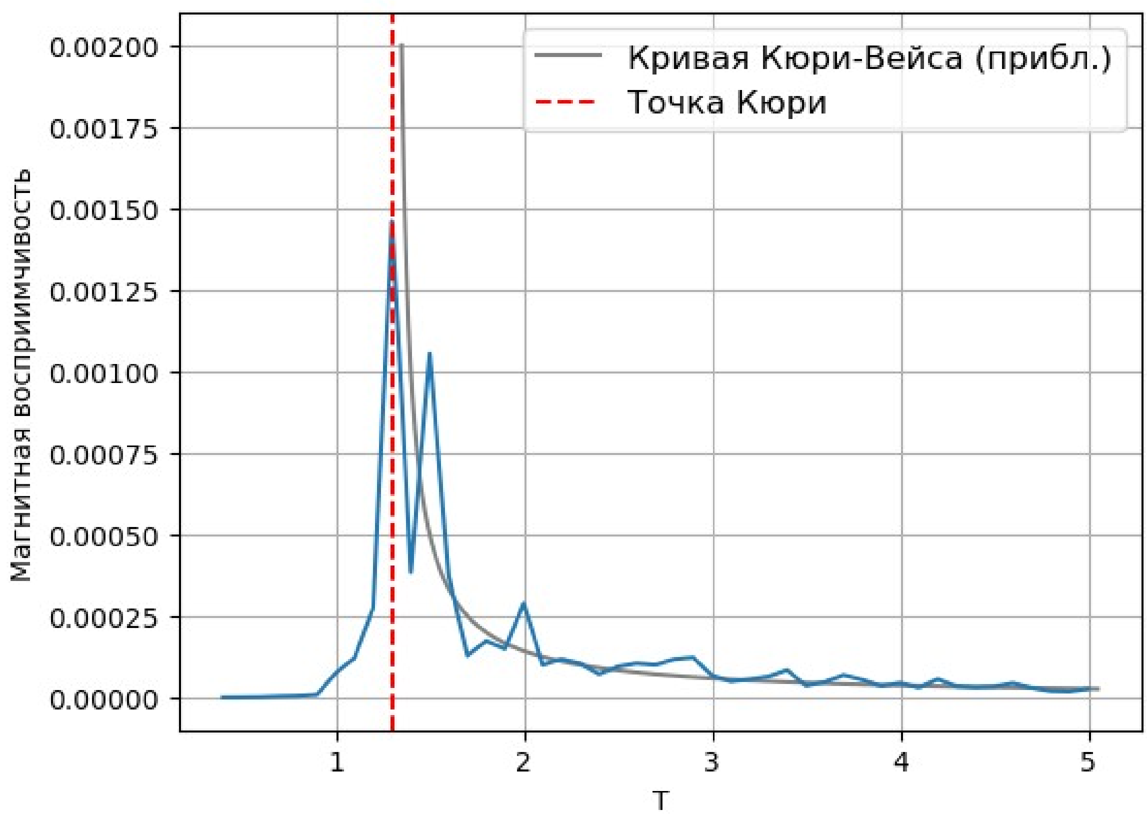


Как видим, графики очень похожи.

Магнитная восприимчивость

Посчитаем намагниченность по формуле $\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}$

```
xi = (mean_squared_M - mean_M**2)/T
ti = np.linspace(1.35, 5.05, 1000)
xti = 0.0001/(ti - 1.3)

plt.plot(ti, xti, color='gray', linestyle='-', label='Кривая Кюри-
Вейса (прибл.)')
plt.plot(T, xi)
plt.xlabel('T')
plt.axvline(x=1.3, color='r', linestyle='--', label='Точка Кюри')  #
Красная пунктирная линия
plt.ylabel('Магнитная восприимчивость')
plt.grid(True)
plt.legend(loc='best', fontsize=12)
plt.show()
```


Кривая Кюри-Вейса (прибл.)
Точка Кюри
Магнитная восприимчивость
T
0.00200
0.00175
0.00150
0.00125
0.00100
0.00075
0.00050
0.00025
0.00000
1
2
3
4
5