

Структура отчета по заданию.

Отчет состоит из описания схемы расчета, демонстрации результатов, представления обработки результатов и выводов.

Для демонстрации результатов рекомендуется привести графики (энергии и магнитного момента от номера шага в методе МК и т. п.).

Следует обратить внимание, что в начале расчетов будет наблюдаться переходный этап, когда система приходит к равновесному состоянию. При усреднении свойств нужно будет его убрать из рабочей выборки.

Следует оценить погрешность расчетов.

Для визуализации расчетов методом МД можно воспользоваться программой OVITO, которая умеет читать выводимые файлы *.data и dump.*.

I. Модель Изинга

Система представляется как решетка спинов в периодических граничных условиях с энергией взаимодействия

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{i \sim j} S_i S_j$$

Спины S_i могут принимать значения ± 1 . Запись $i \sim j$ означает пары соседей (i, j) .

Задание:

1. Реализовать метод Монте-Карло для предлагаемой модели в периодических граничных условиях.
При реализации на Python или другом интерпретируемом языке — основная процедура должна иметь вид `ising(temperature, grid_size, ncycles)`
 - a. `temperature` — температура ($k_B T$ / J)
 - b. `grid_size` — сторона сетки
 - c. `ncycles` — число МК цикловПроцедура должна возвращать или печатать на экран / в файл энергию и магнитный момент в пересчете на 1 спин, погрешности этих величин, удельную теплоемкость и магнитную восприимчивость.
При реализации на компилируемом языке программирования — программа должна считывать со стандартного потока ввода соответствующие величины и печатать ответ в стандартный вывод.
2. Определить критическую температуру ($k_B T$ / J) для модели (рекомендуется рассматривать системы размера 20×20 — 100×100 спинов и начинать с полностью намагниченного состояния)
3. В рассчитанных точках по температуре рассчитать удельную теплоемкость по формуле через флуктуации энергии

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T}$$

и через дифференцирование энергии по температуре

$$C = \frac{dE}{dT}$$

4. При температурах выше критической определить магнитную восприимчивость системы по формуле

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}$$

Выполняется ли соотношение

$$\chi \sim \frac{1}{T - T_c}?$$

Модели:

1. Классическая модель Изинга

Точка (i, j) имеет 4 соседей: $(i-1, j)$, $(i, j-1)$, $(i, j+1)$, $(i+1, j)$

2. Модель Изинга на треугольной решётке

Точка (i, j) имеет 6 соседей: $(i-1, j-1)$, $(i-1, j)$, $(i, j-1)$, $(i, j+1)$, $(i+1, j)$, $(i+1, j+1)$