

Τίτλος Προσομοιώσεις Monte Carlo κλασικού προτύπου Heisenberg, με πολλούς γείτονες, σε διδιάστατα περιοδικά κρυσταλλικά πλέγματα. Monte Carlo simulations of the classical Heisenberg model, including many neighbors, in two-dimensional periodic crystal lattices.

Περίληψη

Υπάρχουν 5 είδη διδιαστάτων περιοδικών κρυσταλλικών πλεγμάτων (πλάγιο, ορθογωνικό, τετραγωνικό, ρομβικό ή κεντρωμένο ορθογωνικό, (ισοπλευρο)τριγωνικό ή εξαγωνικό. Αρχικά, θα μελετήσουμε συστηματικά τον σχηματισμό των πλεγμάτων αυτών από τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως και θα βρούμε το πλήθος όλων των γειτόνων οιασδήποτε τάξεως.

Στη συνέχεια, σε κάθε πλεγματικό σημείο θα τοποθετήσουμε μία μαγνητική ροπή (ένα σπιν). Για τα παραπάνω πλέγματα, θα χρησιμοποιήσουμε προσομοιώσεις Monte Carlo του κλασικού προτύπου Heisenberg, συμπεριλαμβάνοντας μόνο πρώτους γείτονες, ώστε να βρούμε αν υπάρχει μετάβαση από σιδηρομαγνητισμό σε παραμαγνητισμό και σε ποια θερμοκρασία, δηλαδή θα βρούμε την λεγόμενη κρίσιμη θερμοκρασία. Στο πλαίσιο αυτό θα μελετήσουμε θερμοδυναμικά μεγέθη όπως η μέση ενέργεια, η ειδική θερμότητα, το μέσο σπιν, (ουσιαστικά η μαγνήτιση), η μαγνητική επιδεκτικότητα και ο συσσωρευτής 4^{ης} τάξεως.

Κατόπιν, θα μελετήσουμε το πόσο επηρεάζονται τα μεγέθη αυτά από την συμπερίληψη περισσότερων γειτόνων στις μαγνητικές αλληλεπιδράσεις.

Μετά, θα ερευνήσουμε κατά πόσο διατηρείται ο σιδηρομαγνητισμός αν αραιώσουμε τις μαγνητικές προσμίξεις, αν δηλαδή με τυχαίο τρόπο, αρχίσουμε να αφαιρούμε μαγνητικές ροπές ώστε μόνο μέρος των πλεγματικών σημείων να διαθέτει μαγνητική ροπή.

Θα βρούμε τον κρίσιμο εκθέτη ν από το συσσωρευτή 4^{ης} τάξεως ή αν είναι δυνατόν και με άλλες μεθόδους.

Η μελέτη είναι αναλυτική (δηλαδή εξισώσεις) και αριθμητική (δηλαδή προγραμματισμός).

Σχετικές παλαιότερες μεταπτυχιακές ή πτυχιακές διπλωματικές εργασίες

Παναγιώτα Μπίλια [Προσομοιώσεις Monte Carlo προτύπου Heisenberg με 1, 2, 3 και 4 γείτονες στο fcc πλέγμα και με πολλούς γείτονες στο \(Ga,Mn\)N: αραιές μαγνητικές προσμίξεις σε fcc και σε hcp πλέγμα κατιόντων.](#)

Σταματίνα Γεωργίου [Προσομοιώσεις Monte Carlo κλασικού προτύπου Heisenberg με πολλούς γείτονες σε τετραγωνικά πλέγματα.](#)

Κωνσταντίνος Κακλαμάνης [Προσομοιώσεις Monte Carlo κλασικού σιδηρομαγνήτη Heisenberg σε πλέγματα κυβικής συμμετρίας.](#)

Ευάγγελος Παππάς [Μελέτη της δομής νανοσωματιδίων τετραγωνικού κρυσταλλικού πλέγματος.](#)

Σπυριδών Καρύδης [Μελέτη της δομής νανοσωματιδίων κυβικού κρυσταλλικού πλέγματος.](#)

Στολιανός Βασιλόγαμβρος [Διδιάστατα πλέγματα Bravais.](#)

Keywords

Monte Carlo simulations; classical Heisenberg model; critical temperature; ferromagnetism;

paramagnetism; mean energy; specific heat; mean spin (magnetization); magnetic susceptibility; fourth order cumulant; critical exponents.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Γνώση Εισαγωγής στη Φυσική Στερεάς Καταστάσεως ή Καταστάσεων και Ιδιοτήτων της Ύλης. Συγκεκριμένα τα περί περιοδικών πλεγμάτων και κρυστάλλων.
- Αγγλική γλώσσα σε επίπεδο αναγνώσεως επιστημονικών κειμένων.

Επιθυμητές γνώσεις

- Προγραμματισμός σε κάποια γλώσσα κατά προτίμηση fortran ή python. Υπάρχει παρόμοιος κώδικας σε fortran, ο οποίος θα τροποποιηθεί. Πάντως, ο/η φοιτητής/φοιτήτρια θα μάθει κατά τη διαδικασία της διπλωματικής.

Μαθησιακά αποτελέσματα

- Εξοικείωση με την έρευνα και τη συγγραφή επιστημονικών κειμένων.
- Επεξεργασία κειμένου (μπορείτε να μάθετε και Latex).
- Συνδυασμός αναλυτικής και αριθμητικής αντιμετώπισης προβλημάτων.
Πώς η αναλυτική λύση ελέγχει την αριθμητική και αντιστρόφως.
- Απόκτηση προγραμματιστικών δεξιοτήτων σε fortran ή python.
- Εξοικείωση με Linux και batch jobs.

Υπεύθυνος Καθηγητής

- Κωνσταντίνος Σιμσερίδης
- csimseri@phys.uoa.gr