

به نام خدا



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده فیزیک
سمینار هفتگی

کد ESpinS:

یک برنامه برای شبیه سازی‌های مونت کارلو کلاسیک سیستم‌های اسپینی

دکتر مجتبی اعلائی

خلاصه:

در این سخنرانی قصد داریم تا کد ESpinS که برای بررسی خواص ترمودینامیک سیستم‌های اسپینی نوشته شده است را معرفی کنیم. در ابتدا هامیلتونی اسپینی و روش مونت کارلو را توضیح خواهیم داد و سپس به توضیح روش تبادل پیکربندی‌ها می‌پردازیم. در ادامه به جزئیات کد خواهیم پرداخت و در آخر چندین مثال برای نمایش کارایی‌های کد در شبیه سازی سیستم‌های اسپینی آورده خواهد شد. در کد ESpinS علاوه بر برهمکنش هایزنبرگ، برهمکنش‌های دیگری مانند ژیاالوژینسکی-موریا پیاده سازی شده است. کد قادر است خواص زیادی مانند هیستوگرام انرژی، ساختار پراکندگی نوترونی و ... را محاسبه کند. همچنین در این کد می‌توان پارامترهای نظم را به صورت دلخواه تعریف کرد. کد هم با الگوریتم بروزرسانی موضعی و هم با الگوریتم تبادل پیکربندی‌ها کار می‌کند. قسمت اصلی این کد به زبان فرترن ۹۰ نوشته شده است و به صورت سریال و موازی قابل اجرا است. ساخت فایل ورودی بسیار ساده شده و کاربر نیاز به تعریف پیچیدگی‌های موجود در یک هامیلتونی اسپینی را ندارد. این کد به صورت منبع باز در سایت Github (<https://github.com/nafiserb/ESpinS>) به همراه چندین مثال و کتابچه راهنما قابل دسترس است.

زمان: شنبه، ۱۶ بهمن ۱۴۰۰، ساعت ۱۷

مکان: <https://meet.iut.ac.ir/b/kei-10u-2vr-1a1>