

Instrukcja obsługi programu *qtm*

1 Model

Program *qtm* oblicza podatność magnetyczną i energię swobodną dla pierścieni złożonych z parzystej ilości spinów $S=3/2$ (model pierścieni chromowych), opisanych Hamiltonianem:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^n \left\{ J^{\perp} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J^{\parallel} S_i^z S_{i+1}^z + D (S_i^z)^2 - g\mu_B S_i^z \right\}$$

zakładając okresowe warunki brzegowe, tzn. indeks $n + 1 = 1$. Podatność magnetyczna χ liczona jest w kierunku z metodą kwantowej macierzy transferu. Wynikiem są przybliżenia χ_m zależne od parametru Trottera m . Końcowy wynik otrzymuje się ekstrapolując otrzymane wyniki do $m = \infty$. Ekstrapolacja jest łatwa, gdyż dla dostatecznie dużych m przybliżenia χ_m zależą liniowo od $1/m^2$.

2 Zlecenie zadania

Parametry Hamiltonianu należy wpisać w odpowiednio oznaczone pola pamiętając, że:

- Aby otrzymać poprawne wartości χ należy ekstrapolować χ_m obliczone dla dostatecznie dużych m . Najbardziej wymagające pod tym wzg. są wyniki dla niskich temperatur. Np. dla temperatury $T = 2$ Należy wziąć wartości $m = 160, 80, 40$. Dla wyższych temperatur można wziąć mniejsze wartości m
- Czas obliczeń zależy eksponentalnie od wielkości układu i liniowo od wartości m . Dla największego układu $m = 8$ czas obliczeń dla $m = 160$ to około 3 godziny.
- Program może wykonać obliczenia dla kilku wartości m jednocześnie dlatego wartości m można wpisywać w odpowiedniej rubryce oddzielone przecinkiem.
- Link do wyników zostanie przesłany na podany adres poczty elektronicznej. Wyniki są zapisane w pliku tekstowym, gdzie pierwsza kolumna to wartość parametru m , druga zawiera podatność w jednostkach emu mol^{-1} , trzecia to energia swobodna w J , a w ostatniej kolumnie podany jest rozmiar układu n .