

Instrukcja obsługi programu *ring*

Program *ring* oblicza wartości energii poziomów energetycznych dla pierścieniowych układów spinowych. Dzięki użyciu metody ścisłej diagonalizacji wyniki są uzyskiwane z dokładnością ograniczoną tylko arytmetyką maszynową.

1 Model

Układy pierścieniowe są modelowane poprzez następujący anizotropowy Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i=1}^{n-1} \left(J_{i\ i+1}^{\perp} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J_{i\ i+1}^{\parallel} S_i^z S_{i+1}^z \right) \\ & + J_{n\ 1}^{\perp} (S_n^x S_1^x + S_n^y S_1^y) + J_{n\ 1}^{\parallel} S_n^z S_1^z \\ & + \sum_{i=1}^n (D_i (S_i^z)^2 + g_i \mu_B B S_i^z), \end{aligned} \quad (1)$$

gdzie n oznacza liczbę węzłów, operatory $S_i^{x,y,z}$ są odpowiednimi składowymi x , y i z operatora spinowego S na i -tym węźle, D_i oznacza parametr anizotropii jednojonowej dla i -tego węzła, a $J_{i\ j}^{\perp}$, $J_{i\ j}^{\parallel}$ - anizotropowe wartości całki wymiany pomiędzy węzłami i i j . Pole magnetyczne B jest przyłożone wzdłuż osi z prostopadłej do płaszczyzny układu.

2 Zlecenie zadania

Aby zlecić zadanie do obliczenia należy wykonać następujące kroki:

1. Wybrać liczbę węzłów n z listy rozwijanej ($n = 3, 4, \dots, 15$).
2. Jeśli n jest liczbą parzystą należy wybrać sposób przeprowadzenia osi symetrii układu (Sym₁ - oś przechodzi przez dwa węzły, Sym₂ - oś przechodzi przez wiązania). Aktualny wybór jest prezentowany na schemacie, na którym przerywana linia oznacza oś symetrii.
3. Zaznaczyć pole wyboru $J^{\perp} = J^{\parallel}$ jeśli nie występuje anizotropia wymienna. Spowoduje to kopiowanie wartości podanych dla J^{\parallel} do pól tekstowych J^{\perp} .
4. Wprowadzić wartość pola B .
5. Wybrać wartości spinów dla poszczególnych węzłów z list rozwijanych ($S = \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{15}{2}$)*.

6. Wprowadzić wartości anizotropii D dla poszczególnych węzłów*.
7. Wprowadzić wartości współczynników g dla poszczególnych węzłów*.
8. Wprowadzić wartości całek wymiany J^{\parallel} dla poszczególnych par węzłów*.
9. Jeśli nie jest zaznaczone pole wyboru $J^{\perp} = J^{\parallel}$ wprowadzić wartości całek wymiany J^{\perp} dla poszczególnych par węzłów*.
10. Podać adres e-mail, na który mają zostać wysłane wyniki obliczeń.
11. Wcisnąć przycisk *Send*.

* wartości dla węzłów symetrycznych są uzupełniane jednocześnie.

Po wykonaniu powyższych kroków zadanie zostanie zakolejkowane i wyświetli się numer zadania.

3 Wyniki

Po wykonaniu obliczeń system wyśle na podany wcześniej adres wiadomość zawierającą odnośnik do pliku z wynikami. Wyniki umieszczone są w pliku tekstowym w trzech kolumnach. Pierwsza kolumna zawiera liczby kwantowe $M = \sum_{i=1}^n s_i^z$, w drugiej określona jest symetria względem odbicia (s-symetryczne, a-antysymetryczne), w trzeciej podane są wartości energii poziomów energetycznych. Wyniki posortowane są rosnąco według wartości energii poziomów energetycznych.