Contour plot: E ca functie de θ si φ

$$\begin{aligned}\mathcal{H} \;=\; & \frac{I}{2}(A_1+A_2)+A_3I^2+I(I-\frac{1}{2})\sin^2\theta\left(A_1\cos^2\varphi+A_2\sin^2\varphi-A_3\right)\\ +\; & \frac{j}{2}(A_2+A_3)+A_1j^2-2A_1Ij\sin\theta-V\frac{2j-1}{j+1}\sin\left(\gamma+\frac{\pi}{6}\right). \end{aligned} \tag{1}$$

Ecuatia de mai sus se obtine din $\mathcal{H}$ pentru $(\psi,t)=(0,j)$ si $r=I(1+\cos\theta)$

Suprafata de energie constanta trebuie intersectata cu sfera de raza I.

Aceste poze trebuiesc facute pentru cate un spin din fiecare dintre cele 4 benzi.

Punctele stationare ale Hamiltonianului $\mathcal{H}$ se obtin anuland primele derivate:

$$\begin{aligned}&I(I-\frac{1}{2})\sin 2\theta\left(A_1\cos^2\varphi+A_2\sin^2\varphi-A_3\right)-2IjA_1\cos\theta=0\\ &I(I-\frac{1}{2})\left(A_2-A_1\right)\sin^2\theta\sin 2\varphi=0.\end{aligned} \tag{2}$$

Aceste ecuatii sunt satisfacute de urmatoarele perechi de unghiuri:

$$\begin{aligned}
\varphi &= 0, \ \ \sin\theta = \frac{2jA_1}{(2I-1)(A_1-A_3)} \\
\varphi &= 0, \ \ \theta = \frac{\pi}{2} \\
\varphi &= \frac{\pi}{2}, \ \ \theta = \frac{\pi}{2} \\
\varphi &= \pi, \ \ \sin\theta = \frac{2jA_1}{(2I-1)(A_1-A_3)} \\
\varphi &= \pi, \ \ \theta = \frac{\pi}{2}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Dintre acestea unele sunt puncte de minim. Pentru minime hessianul este pozitiv. Hessianul este definit ca fiind determinantul:

$$\Delta = \det\left(\frac{d^2\mathcal{H}}{d\theta^i d\varphi^k}\right); i, k = 0, 1, 2, i + k = 2. \tag{4}$$

Pentru cazul 2 ($\varphi = 0, \ \ \theta = \frac{\pi}{2}$) avem:

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} -I(2I-1)(A_1-A_3) + 2IjA_1 & 0 \\ 0 & I(2I-1)(A_2-A_1) \end{vmatrix} \tag{5}$$

Se verifica usor ca $\Delta_2 > 0$ daca A_1 este minim, adica $\mathcal{J}_1$ este MoI maxim. La fel pentru cazul 3 avem:

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} -I(2I-1)(A_2-A_3) + 2IjA_1 & 0 \\ 0 & I(2I-1)(A_1-A_2) \end{vmatrix} \tag{6}$$

Rezulta ca: $\Delta_3 > 0$ daca A_2 este minim, adica $\mathcal{J}_2$ este MoI maxim.

Pentru cazul 1 se obtine:

$\Delta_1 = (2I-1)^2(A_1-A_3)(A_2-A_1) > 0$ daca $A_2 > A_1 > A_3$ sau $A_2 < A_< A_3$ Deci petru MoI ordonate astfel:

$\mathcal{J}_2 < \mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_3$ respectiv $\mathcal{J}_2 > \mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_3$

Concluzie, exista mai multe minime in timp se contour-ploturile tale contin numai maxime. Ploturile tale pentru $\mathcal{H}$ ca functie de φ pentru θ fixat si ca functie de θ pentru φ fixat nu sunt relevante. Trebuie sa iei unghiurile dintr-un minim fixate pentru unul si ca functie de celalalt.

Te-am rugat sa faci fitul pentru benzile 1,2 si 4 ca groundstate si banda 3 ca fiind un o eexcitatie unifononica a benzii 2

Succes!

AAR