

Contour plot: E ca functie de θ si φ

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

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:

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

Aceste ecuatii sunt satisfacute de urmatoarele perechi de unghiuri:

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

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 $A_2 < A_1 < A_3$ Deci petru MoI ordonate astfel:

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

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 o excitatie unifononica a benzii 2

Elipsoid.

In coordonate carteziene:

$$\begin{aligned}x_1 &= I \sin \theta \cos \varphi, \\x_2 &= I \sin \theta \sin \varphi, \\x_3 &= I \cos \theta,\end{aligned}\tag{7}$$

Hamiltonianul (1) devine:

$$\begin{aligned}E &= \left(1 - \frac{1}{2I}\right) A_1 x_1^2 + \left(1 - \frac{1}{2I}\right) A_2 x_2^2 + \left[\left(1 - \frac{1}{2I}\right) A_3 + A_1 \frac{j}{I}\right] x_3^2 \\&+ \frac{I}{2}(A_1 + A_2) + A_3 I^2 + \frac{j}{2}(A_2 + A_3) + A_1 j^2 - I \left(I - \frac{1}{2}\right) A_3 - 2A_1 I j.\end{aligned}\tag{8}$$

Succes!

AAR