

**Contour plot:** E ca functie de  $\theta$  si  $\varphi$

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

*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  $\varphi$  pentru  $\theta$  fixat si ca functie de  $\theta$  pentru  $\varphi$  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