Fizički fakultet
Univerziteta u Beogradu

Aleksandra Petković

Spinske konfiguracije kvantne tačke u jakom magnetnom polju

diplomski rad

Beograd, oktobar 2005.

Ovaj rad je uradjen u centru za teorijsku fiziku
Instituta za fiziku u Zemunu pod rukovodstvom
dr Milice Milovanović.
Želela bih ovom prilikom da joj se zahvalim
na uvodu u ovu zanimljivu oblast fizike,
zajedničkom radu, mnogobrojnim diskusijama i podršci.
Zahvaljujem se i svima onima koji su na bilo koji način doprineli
da ovaj rad dobije svoj konačan oblik.

Sadržaj

1

Uvod

Kvantne tačke predstavljaju ograničene poluprovodničke strukture dvodimenzionalnog elektronskog gasa u kojima možemo zapaziti interesantne korelacione efekte koji se ne mogu objasniti usrednjenim ili samousaglašenim pristupima. U evoluciji stanja kvantne tačke u magnetnom polju značajnu ulogu ima izmenska interakcija, tj. težnja elektrona da paralelno usmere svoje spinove sa ciljem minimiziranja kratkodometnog dela Kulonove interakcije a u saglasnosti sa Paulijevim principom. I zaista u toku evolucije kvantne tačke sa magnetnim poljem pojavljuje se stanje velike stabilnosti u kome svi elektroni imaju istu projekciju spina i kompaktno popunjavaju najniže orbitale tj. stanje kapljice maksimalne gustine (MDD). Pre ovog stanja polarizacija ne mora monotono da raste, što ukazuju eksperimenti [**?**], već je taj rast isprekidan pojavom potpuno depolarizovanih stanja (spina $S = 0$). Nalažući postepenu promenu spina elektronskog sistema izmenska interakcija dovodi do visoko korelisanih, mnogo čestičnih, depolarizovanih stanja i ona će biti opisana u prvom delu rada (u trećem poglavlju) .

U drugom delu rada (četvrtom i petom poglavlju) pretežno ćemo se baviti stanjima koja se javljaju u evoluciji posle stanja kapljice maksimalne gustine. U tom intervalu Zemanov član (sa porastom magnetnog polja) ima značajnu ulogu i potiskuje potpuno depolarizovana stanja u korist polarizovanih ili delimično polarizovanih stanja [**?**]. Još uvek ne postoji teorija koja bi u celosti opisala tu dosta složenu situaciju [**?**]. Zato je bitno rezultate i rešenja problema klasifikovati u limitu malog ili jednakog nuli Zemanovog člana, jer Zemanov član možemo jednostavno dodati. On samo dovodi do pomeranja nivoa saglasno njihovoj projekciji spina.

U ovom radu su razmatrana stanja kvantne tačke sa četiri elektrona i to najniže energije za zadati orbitalni angularni momenat, bez Zemanovog člana u hamiltonijanu. Saglasno Maksimovoj teoriji [**?**] malih kvantnih tačaka koja omogućava da se problem četiri elektrona posmatra kao “elektronski molekul” gde se elektroni razmeštaju u temenima kvadrata, u radu je pokazano da svakom potpuno depolarizovanom stanju (u aproksimaciji najnižeg Landau-ovog nivoa, videti 2.2.1) odgovara singletno stanje Haldane-Shastry spinskog lanca sa spinovima rasporedjenim u temenima kvadrata. Ovo je donekle već uradjeno u [**?**].

U radu su po prvi put obradjena i tripletna stanja koja se pojavljuju izmedju singletnih stanja pri evoluciji u magnetnom polju. Data je njihova identifikacija sa stanjima Haldane-Shastry spinskog lanca. Takodje je pokazno da se sa periodom orbitalnog angularnog momenta jednakim dva, pojavljuju tripletna stanja koja poseduju orbitalne spinske struje koje naizmenično menjaju smer sa porastom angularnog momenta, tj. magnetnog polja.

2

Kvantne tačke

Razvoj modernih poluprovodničkih tehnologija omogućio je konstrukciju kvantnih tačaka. To su nanostrukture koje su sposobne da “zarobe” (i lokalizuju) jedan do par hiljada elektrona. Tipične dimenzije kvantnih tačaka su u rasponu od jednog nanometra do nekoliko mikrometara. Ove elektronske strukture ispoljavaju zapanjujuće ponašanje. Često se nazivaju “veštačkim atomima” zbog ispoljenih sličnosti sa stvarnim atomima. Kvantne tačke sadrže manje više odredjen broj elektrona, energijski nivoi su diskretni, a centralni potencijal jezgra kod atoma ovde je zamenjen veštački stvorenim potencijalom. Postoji i dosta fizičkih karakteristika po kojima se kvantne tačke razlikuju od realnih atoma. Jedna od značajnijih osobina je da su kvantne tačke mnogo većih dimenzija. Bitna karakteristika kvantne tačke je i da se njeni parametri mogu podešavati po želji: kontrolisanjem geometrije, elektrostatitičkog “gate” potencijala i primenom magnetnog polja. Kvantne tačke su veoma značajne i zbog moguće primene u kvantnim računarima, poluprovodničkim laserima i detektorima.

2.1 Konstrukcija i merenja

U cilju razumevanja “veštačkih atoma” korisno je znati nešto o njihovoj strukturi. Kvantne tačke mogu biti konstruisane na dva načina, kao vertikalne i lateralne kvantne tačke. U vertikalnim kvantnim tačkama elektron-elektron interakcija je slaba i elektronske korelacije ne igraju bitnu ulogu. U lateralnim kvantnim tačkama elektron-elektron interakcija je jaka. Zadržaćemo se na jednom primeru vertikalne i jednom primeru lateralne kvantne tačke [**?**].

Na slici 2.1 gore, shematski je prikazana vertikalna kvantna tačka izmedju ploča kondenzatora. Kako se kvantna tačka nalazi bliže donjoj ploči, tuneli-

Slika 2.1: Shematski dijagram vertikalne kvantne tačke.

ranje elektrona sa donje ploče na kvantnu tačku je moguće, dok sa gornje nije moguće.

Kako je to realizovano u eksperimentu, možemo videti na slici 2.1 dole. Koristeći moderne poluprovodničke tehnologije moguće je napraviti jednoatomski sloj galijum arsenida ($GaAs$). U cilju dobijanja izolatorskog sloja aluminijum galijum arsenida ($AlGaAs$) neki atomi galijuma mogu biti zamenjeni atomima aluminijuma. Sendvičenjem sloja $GaAs$, debljine desetak nanometara, slojevima $AlGaAs$, elektroni ostaju zarobljeni u $GaAs$ potencijalnoj jami i njihovo kretanje je ograničeno na kretanje u ravni sloja. Na površini najvišeg sloja sa slike 2.1 dole, je nanešen hrom koji igra ulogu gornje ploče kondenzatora, dok se dopiranjem najnižeg sloja silicijumom dobija donja ploča kondenzatora.

Slika 2.2: Shematski prikaz lateralne kvantne tačke.

Dovodjenjem napona na ploče kondenzatora uspostavlja se električno polje izmedju njih. Ukoliko je gornja ploča na višem potencijalu, elektroni iz donje ploče će se kretati u pravcu gornje ploče, ka kvantnoj tački. Nakon tuneliranja kroz izolatorski sloj, elektron stiže do kvantne tačke.

Koristeći jednostavne fizičke principe, dodavanje ili odvajanje jednog elektrona od kvantne tačke može biti detektovano. Kada jedan elektron protunelira, kreće se ka gornjoj ploči i indukuje naelektrisanje na njoj (elektron ostaje u sloju GaAs). Indukovano naelektrisanje je malo ali se specijalnim tranzistorima može detektovati što omugućava merenje gejt napona na kojima se to dešava. Kada je napon potreban za dodavanje (ili oduzimanje elektrona) već podešen, naizmeničan napon male amplitude i frekvence od $100Hz$ se dodaje gejt naponu što prouzrokuje tuneliranje elektrona naprednazad izmedju donje ploče kondenzatora i kvantne tačke. Naelektrisanje se sinhrono sa naponom pojavljuje na kvantnoj tački. Sinhronim detektorom se registruje signal i na ovaj način meri kapacitet kvantne tačke. Metod je poznat kao jednoelektronska kapacitativna spektroskopija (SECS).

Na slici 2.2 je dat shematski prikaz lateralne kvantne tačke. Kao i u SECS metodu, u eksperimentima koji se izvode nad lateralnim kvantnim tačkama se meri gejt napon koji omogućava dodavanje elektrona. Ali sada je detekcioni metod u potpunosti drugačiji. Tuneliranje elektrona izmedju levog metalnog kontakta i kvantne tačke je moguće, kao i izmedju desnog metalnog kontakta i kvantne tačke. Mali napon se uspostavlja izmedju levog i desnog metalnog kontakta. Eksperiment se sastoji u merenju struje variranjem gejt napona.

Za proticanje struje neophodno je da jedan elektron protunelira. To se dešava pri specijalnim uslovima. Kao i u SECS eksperimentu, na odredjenim vrednostima gejt napona je energijski povoljno da jedan ili više elektrona budu dodati kvantnoj tački. Broj elektrona u kvantnoj tački može fluktuirati kada je gejt napon tačno onaj koji je potreban za dodavanje elektrona. Ove fluktuacije se odnose na jedan elektron koji može protunelirati do kvantne tačke sa levog metalnog kontakta, a kasnije jedan elektron može protunelirati sa kvantne tačke na desni metalni kontakt. Ovi procesi omogućuju proticanje struje kroz kvantnu tačku.

Nakon što je jedan elektron dodat kvantnoj tački, obično je viši napon potreban za dodavanje sledećeg elektrona, usled većeg Kulonovog odbijanja izmedju elektrona, ali i zato što se usled Paulijevog principa isključenja, novi elektron se smešta na sledeći, viši energijski novo. Na ovaj način merenjem gejt napona, koji omogućuje dodavanje elektrona, dobijamo informacije o energijskim nivoima kvantne tačke.

2.2 Model kvantne tačke

Za teorijske fizičare kvantne tačke su veoma interesantni objekti. Kao jako korelisani mnogočestični sistemi korisni su za ispitivanje elektron-elektron interakcije. Spinski efekti u kvantnim tačkama su takodje izraženi. Magnetno polje potrebno da izazove spinske efekte sličnog intenziteta u realnim atomima je milion puta veće. Za male kvantne tačke kompletna spinska polarizacija može biti lako postignuta u laboratorijama. U ovom radu biće posmatrane dvodimenzionalne kvantne tačke u jakom magnetnom polju.

Konstanta rešetke u poluprovodničkim kristalima je oko 3-4 nm što je oko nekoliko desetina puta manje od dijametra kvantne tačke. Zato se efekti rešetke uračunavaju korišćenjem aproksimacije efektivne mase $m^* = m_r m_0$, gde je m_0 masa mirovanja elektona, m_r je koeficijent relativne mase odredjen kristalnom strukturom, a m^* je efektivna masa koja će u daljim izračunavnjima zamenjivati masu mirovanja.

Spoljašnji potencijal koji ograničava lateralno kretanje elektrona dobro je opisan harmonijskim potencijalom

$$V_{ext} = \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2, \tag{2.1}$$

gde je $r^2 = x^2 + y^2$ rastojanje od centra kvantne tačke, a ω_0 odredjuje jačinu konfinirajućeg potencijala. Vrednost $\hbar\omega_0$ je tipično reda meV.

Jednočestični hamiltonijan elektrona naelektrisanja $-e\,(e > 0)$ u kon-

(a) (b)
$\hbar\omega_0 =$ $\hbar\omega_0 =$
2 meV 6 meV

Slika 2.3: Jednoelektronski energijski nivoi (2.6) bez Zemanovog člana kao funkcija od magnetnog polja za $m_r = 0.067$ i različite energije konfiniranja $\hbar\omega_0$. Stanja za $2n+|m| \leq 7$ su prikazana.

stantnom spoljašnjem magnetnom polju $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ dat je izrazom

$$H_i = \frac{1}{2m^*}\left(\mathbf{p}_i + e\mathbf{A}_i\right)^2 + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2\mathbf{r}_i^2 + \frac{g^*\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}\mathbf{s}_i, \tag{2.2}$$

gde su $\mathbf{r}_i$ i $\mathbf{p}_i$ operatori koordinate i impulsa čestice indeksa i, a $\mathbf{A}_i$ vektorski potencijal koji oseća i-ta čestica. Borov magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}$ je uzet sa pravom masom mirovanja jer je efektivna masa uračunata u efektivni Landeov g-faktor g^*. Sa $\mathbf{s}_i$ je označen operator spina.

Interakcioni deo hamiltonijana usled Kulonove interakcije je

$$H_{int} = \sum_{i<j}\frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon r_{ij}}, \tag{2.3}$$

gde je $\epsilon = \epsilon_r\epsilon_0$, ϵ_0 je dielektrična propustljivost vakuuma, a ϵ_r je relativna propustljivost sredine. Rastojanje izmedju čestica sa indeksima i i j je r_{ij}.

2.2.1 Jednočestične funkcije stanja

Svojstveni problem jednočestičnog hamiltonijana (2.2) može biti rešen analitički. Ako je vektorski potencijal $\mathbf{A} = -\frac{B}{2}(y\mathbf{e}_x - x\mathbf{e}_y)$ dat u simetričnom gejdžu, važi $[\mathbf{A}, \mathbf{p}] = 0$, pa izraz (2.2) postaje

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m^*} + \frac{\mu_B^*}{2\hbar}Bl_z + \frac{1}{2}m^*\left(\frac{eB}{m^*}\right)^2\frac{1}{4}r^2 + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2r^2 + \frac{g^*\mu_B}{\hbar}Bs_z \\ &= \frac{p^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega^2r^2 + \frac{\mu_B^*B}{\hbar}\left(l_z + \gamma^*s_z\right), \end{aligned} \tag{2.4}$$

gde je $\mu_B^* = \frac{\mu_B}{m_r}$ efektivni Borov magneton, $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ ciklotronska frekvenca, $\omega^2 = \left(\omega_o^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2\right)$, a $\gamma^* = g^*m_r$. Svojstvene funkcije hamiltonijana (2.4) su Fok-Darvinove funkcije [**?**, **?**]. Nenormirani oblik ovih funkcija u polarnim koordinatama je dat sledećim izrazom:

$$\langle\mathbf{r}|n,m\rangle = r^{|m|}\exp\left(im\varphi\right)L_n^{|m|}\left(\frac{r^2}{2a^2}\right)\exp\left(-\frac{r^2}{4a^2}\right), \tag{2.5}$$

gde su $L_n^{|m|}(x)$ asocirani Lagerovi polinomi, a $a^2 = \frac{\hbar}{2m^*\omega}$. Jednočestične energije zavise od kvantnih brojeva ($n, |m| = 0, 1, 2 \ldots$ i $\sigma = \pm\frac{1}{2}$) kao

$$E_{n,m,\sigma} = (2n + 1 + |m|)\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega_c(m + \gamma^*\sigma), \tag{2.6}$$

gde je $\hbar\sigma$ svojstvena vrednost operatora s_z. Svojstvena vrednost operatora orbitalnog angularnog momenta l_z je $\hbar m$. U nultom magnetnom polju će stanja sa istim $2n + |m|$ biti degenerisana, dok u beskonačno velikom magnetnom polju (tj. za $\omega_c \gg \omega_0$) će stanja sa istim σ i istim $n_- = n + \frac{1}{2}(|m| + m)$ biti degenerisana.

Razmatraćemo sistem u jakom magnetnom polju tako da se jednočestična stanja grupišu gradeći diskretne tzv. Landauove nivoe, ekvidistantne i razdvojene za $\hbar\omega_c$ što se može videti na slici 2.3. Energije Landauovih nivoa su odredjene brojem n_-. Porastom magnetnog polja se energijska razlika $\hbar\omega_c$ uvećava. Ako je magnetno polje dovoljno jako samo najniži Landauov nivo postaje značajan, jer su ostali mnogo viših energija. Mi ćemo smatrati da je ovaj uslov zadovoljen i raditi u najnižem Landauovom nivou (LLL), tj. u takozvanoj aproksimaciji najnižeg Landauovog nivoa. Najniži Landauov nivo je odredjen uslovom $n_- = 0$, tj. $n = 0$ i $m \leq 0$ tako da Fok-Darvinove funkcije (2.5) u LLL su oblika

$$\langle \mathbf{r}|0, m\rangle = C_m r^{|m|} \exp\left(im\varphi\right) \exp\left(-\frac{r^2}{4\hbar} m^*\omega_c\right), \tag{2.7}$$

gde je C_m konstanta normiranja. U novim jedinicima $l_b = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} = 1, \hbar = 1, \frac{e^2}{4\pi\epsilon l_b} = 1$ funkcije (2.7) postaju

$$\psi_m(r, \varphi) = \langle \mathbf{r}|0, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2^m m!}} r^m \exp\left(-im\varphi\right) \exp\left(-\frac{r^2}{4}\right), \tag{2.8}$$

gde je $m \geq 0$. Izraz za jednočestične energije (2.6) u LLL je oblika

$$E_{0,m,\sigma} = \hbar\omega(1 + m) + \frac{1}{2}\hbar\omega_c(-m + \gamma^*\sigma), \tag{2.9}$$

gde je $m \geq 0$. Detaljno rešavanje svojstvenog problema hamiltonijana (2.4) bez Zemanovog člana za slučaj jakog magnetnog polja dat je u dodatku A.

2.2.2 Kulonova interakcija izmedju elektrona u najnižem Landauovom nivou

Posmatraćemo dvodimenzionalni elektronski gas u jakom magnetnom polju zanemarujući mešanje Landauovih nivoa, tj. radićemo isključivo u najnižem

Landauovom nivou kao što je to ranije pomenuto. Interakcioni deo hamiltonijana (2.3) u reprezentaciji druge kvantizacije je

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1,m_2 \geq 0 \\ m_3,m_4 \geq 0}} \sum_{\sigma,\sigma'=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a^{\dagger}_{m_1\sigma} a^{\dagger}_{m_2\sigma'} a_{m_3\sigma'} a_{m_4\sigma} \langle m_1 | \langle m_2 | V_{12} | m_4 \rangle | m_3 \rangle. \quad (2.10)$$

Operatori $a^{\dagger}_{m\sigma}$ i $a_{m\sigma}$ kreiraju i anihiliraju elektron u jednočestičnom stanju sa projekcijom spina σ i z komponentom orbitalnog angularnog momenta $-\hbar m$. V_{12} predstavlja operator potencijalne energije Kulonove interakcije izmedju dva elektrona, čiji su vektori položaja $\mathbf{r}_1$ i $\mathbf{r}_2$ a ϵ dielektrična propustljivost sredine, u koordinatnoj reprezentaciji

$$V_{12} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.11)$$

Izraz $\langle m_1 | \langle m_2 | V_{12} | m_4 \rangle | m_3 \rangle$ se koristeći oblik jednočestičnih funkcija (2.8) i nakon smene $z_i = r_i \exp(i m_i \varphi_i)$ i smene $z_+ = z_1 + z_2$ i $z_- = z_1 - z_2$ lako računa i konačan rezultat u novim jedinicama je oblika

$$\begin{aligned} \langle m_1 | \langle m_2 | V_{12} | m_4 \rangle | m_3 \rangle = & \sum_{k_1=0}^{m_3+m_4-m_2} \sum_{k_3=0}^{m_3} \sum_{k_4=0}^{m_4} (-1)^{m_2+m_3-2k_3-k_4+k_1} \quad (2.12) \\ & \times \binom{m_3+m_4-m_2}{k_1} \binom{m_4}{k_4} \binom{m_3}{k_3} \binom{m_2}{k_3+k_4-k_1} \delta_{m_1+m_2,m_3+m_4} \\ & \times \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{(k_3+k_4)!\,(2(m_1+m_2-k_3-k_4)-1)!!}{\sqrt{(m_3+m_4-m_2)!\,m_2!\,m_3!\,m_4!}\,2^{2(m_1+m_2)-k_3-k_4}}. \end{aligned}$$

Nenulti matrični elementi su oblika [?][1]

$$\begin{aligned} \langle m+k | \langle n-k | V_{12} | m \rangle | n \rangle = & \sum_{\alpha=0}^{m} \sum_{\beta=0}^{m+k} \sum_{\gamma=0}^{n} \frac{\sqrt{\pi}}{2} (-1)^{\beta-\alpha-k} \binom{m+k}{\beta} \binom{n}{\gamma} \quad (2.13) \\ & \times \binom{m}{\alpha} \binom{n-k}{\alpha+\gamma-\beta} \frac{2^{2(\alpha+\gamma)-3(m+n)}(\alpha+\gamma)!\ (2(m+n-\alpha-\gamma))!}{\sqrt{(m+k)!\,m!\,n!\,(n-k)!}\,(m+n-\alpha-\gamma)!}. \end{aligned}$$

2.2.3 Egzaktna dijagonalizacija

Zanemarivanje mešanja Landauovih nivoa i rad u LLL omogućava egzaktnu dijagonalizaciju hamiltonijana jer je broj bazisnih vektora konačan. Bazisni

[1] Primetiti grešku u originalnom radu.

vektori su Slejterove determinante dobijene od jednočesticnih bazisnih vektora $|m,\sigma\rangle$. Pošto je z komponenta orbitalnog angularnog momenta (u daljem tekstu angularni momenat) dobar kvantni broj tj. sistem je invarijantan na rotacije oko z ose, i pošto u svim jednočestičnim stanjima angularni momenat ima isti znak, broj bazisnih vektora je konačan i odredjen brojem čestica N i angularnim momentom L. (U daljem tekstu ćemo sa $L\hbar$ označavati apsolutnu vrednost angularnog momenta, jer je angularni momenat celog sistema manji od nule. Slično, $S\hbar$ će označavati vrednost spina.) Na primer za $N=3$ i $L=1$ postoje samo dve Slejterove determinante. Sastavljene su od jednočestičnih stanja $|0,+\frac{1}{2}\rangle, |0,-\frac{1}{2}\rangle, |1,\sigma\rangle$, gde je $\sigma=+\frac{1}{2}$ za jednu , a $\sigma=-\frac{1}{2}$ za drugu Slejterovu determinantu. Druge kombinacije jednočestičnih stanja nisu dozvoljene.

Za zadate vrednosti N i L formiramo bazis brojeva popunjenosti koristeći algoritam za pravljenje particija broja L [**?**] a zatim se može izvršiti reprezentovanje i egzaktna dijagonalizacija hamiltonijana u dobijenom bazisu. Matrični elementi hamiltonijana su oblika

$$\langle \dots n_f \dots |H| \dots n'_f \dots \rangle = \hbar \left(\omega N + (\omega - \frac{1}{2}\omega_c)L + \frac{1}{2}\gamma^* \omega_c S_z \right) I + \tag{2.14}$$
$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon l_b}\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{L}\sum_{n=0}^{L}\sum_{k=\mathrm{Max}(-m,n-L)}^{\mathrm{Min}(L-m,n)}\sum_{\sigma=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\sum_{\sigma'=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \langle m+k|\langle n-k|V_{12}|m\rangle|n\rangle$$
$$\times \langle \dots n_f \dots |a^\dagger_{m+k,\sigma} a^\dagger_{n-k,\sigma'} a_{n,\sigma'} a_{m,\sigma}| \dots n'_f \dots \rangle,$$

gde je I jedinični operator, $f=(m,\sigma)$, a n_f je broj čestica u stanju $|m,\sigma\rangle$. Za egzaktnu dijagonalizaciju korišćen je Jakobijev metod [**?**] koji je implementiran u programskom jeziku C.

Za odredjivanje spina svojstvenih stanja hamiltonijana potrebno je operator ukupnog spina reprezentovati u bazisu brojeva popunjenosti. Jednočestični operatori spina i-te čestice u bazisu $|+\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle$ su oblika

$$s_{i,x} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_{i,y} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_{i,z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.15}$$

U reprezentaciji druge kvantizacije operatori ukupnog spina $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{s}_i$ su oblika

$$S_x = \frac{1}{2}\sum_m (a^\dagger_{m,+}a_{m,-} + a^\dagger_{m,-}a_{m,+}), \tag{2.16}$$

$$S_y = \frac{1}{2}\sum_m (-a^\dagger_{m,+}a_{m,-} + a^\dagger_{m,-}a_{m,+}), \tag{2.17}$$

$$S_z = \frac{1}{2}\sum_m (a^\dagger_{m,+}a_{m,+} - a^\dagger_{m,-}a_{m,-}) \tag{2.18}$$

Kvadriranjem i sabiranjem prethodnih izraza uz korišćenje komutacionih relacija izmedju fermionskih kreacionih i anihilacionih operatora [2] dobijamo

$$\mathbf{S}^2 = \frac{N}{2} - \sum_{m,n} a^\dagger_{m,+}a^\dagger_{n,-}a_{m,-}a_{n,+} + S_z^2 \tag{2.19}$$

Svojstvena vrednost operatora ukupnog spina je odredjena izrazom $\mathbf{S}^2 = S(S+1)$.

[2] $[a_f, a^\dagger_{f'}]_+ = \delta_{f,f'}$, $[a_f, a_{f'}]_+ = 0$, $[a^\dagger_f, a^\dagger_{f'}]_+ = 0$, gde je $[A,B]_+ = AB + BA$.

3

Evolucija angularnog momenta i spina u magnetnom polju

Posmatrajmo elektrone u najnižem Landauovom nivou. Konfinirajući potencijal favorizuje kompaktnu elektronsku distribuciju za razliku od Kulonove repulzije koja teži da udalji elektrone jedne od drugih. Neka se u svakoj orbitali, odredjenoj kvantnim brojem m, nalaze po dva elektrona različitog spina. Pojačanjem intenziteta magnetnog polja, radijusi orbita (A.23) konvergiraju ka centru kao $\frac{1}{\sqrt{B}}$. Kada elektroni ne bi napuštali svoje orbite u slučaju beskonačno velikog magnetnog polja, bili bi sabijeni u centar kvantne tačke. Ovo se svakako ne dešava jer se elektroni medjusobno odbijaju. Pojačanjem magnetnog polja elektroni spina dole se premeštaju u nepopunjena stanja menjajući projekciju spina i snižavaju elektronsku gustinu u centru kvantne tačke. Dolazi do povećanja angularnog momenta. Za ovakvo ponašanje je uglavnom odgovorna Kulonova interakcija, a ne Zemanova interakcija koja je slaba da izazove ovaj efekat. Bez Zemanovog člana u hamiltonijanu predvidja se isto ponašanje. Bitno je naglasiti da evolucija sistema sa pojačanjem magnetnog polja nije baš tako jednostavna kao što je gore opisano.

Kako se Kulonova interakcija modelira? Najčešće korišćeni metodi su Hartrijeva aproksimacija i Hartri-Fokova aproksimacija[**?**]. Razlikuju se po izboru probnih funkcija koje se koriste u varijacionom metodu. U Hartrijevoj aproksimaciji za probne funkcije uzima se proizvod jednoelektronskih talasnih funkcija. Ovaj metod elektrone tretira kao nezavisne objekte čija je jedina interakcija sa ostalim elektronima preko srednjeg polja koje jedino zavisi od usrednjene raspodele naelektrisanja preostalih elektrona (težinski faktor je moduo talasne funkcije elektrona za dati položaj, tj. verovatnoća da se elektron nadje u datom položaju). Ali interakcija je mnogo suptilnija u stvarnosti.

Pravilnim tretiranjem Kulonove interakcije, tj. uz zahtev da talasna fun-

Slika 3.1: Energija osnovnog stanja kvantne tačke od $N = 4$ elektrona u zavisnosti od magnetnog polja za konfinirajući potencijal $\hbar\omega_0 = 6meV$: puna linija prikazuje ukupnu, tačkasta linija jednočestičnu, a isprekidana Kulonovu energiju.

(a)(b)(c)(d)
$NNNN$==
3 4 3 4
u u
LLLLL

Slika 3.2: Ukupan angularni momenat i ukupan spin osnovnog stanja za različite nenulte vrednosti magnetnog polja u $GaAs$ kvantnoj tački za $N = 3$ i $N = 4$ elektrona u konfinirajućem potencijalu $\hbar\omega_0 = 6meV$: (*a*), (*b*) u aproksimaciji LLL; (*c*), (*d*) uključeni su i viši Landauovi nivoi (iz [**?**]).

kcija koja opisuje sistem fermiona bude antisimetrična (da pri medjusobnoj transpoziciji proizvoljnog para čestica talasna funkcija sistema menja znak) javlja se čisto kvantnomehanički efekat, interakcija izmene. Hartri-Fokov metod uračunava interakciju izmene jer za probne funkcije koristi antisimetrizovane talasne funkcije, tj. Slejterove determinante. U Hartri-Fokovoj aproksimaciji su uračunate korelacije koje su posledica Paulijevog principa, takozvane kinematičke korelacije, dok dinamičke korelacije (usled sila) nisu uključene.

Izračunavanja u Hartrijevoj aproksimaciji ne daju najbolje slaganje sa eksperimentom, što nam govori da interakcija izmene igra bitnu ulogu u preraspodeli elektrona pri porastu magnetnog polja [**?**]. Ali egzaktna dijagonalizacija [**?**] za slučaj kvantne tačke u jakom magnetnom polju daje iznenadjujuće bogatu spektralnu zavisnost od magnetnog polja koju Hartri-Fokov metod ne predvidja, što nam govori da neuračunate korelacije igraju značajnu ulogu.

3.1 Rezultati egzaktne dijagonalizacije. Pojava depolarizovanih stanja

Na slici 3.1 prikazna je zavisnost energije osnovnog stanja, Kulonove energije kao i jednočestične energije od magnetnog polja za slučaj $GaAs$ kvantne tačke od $N = 4$ elektrona, dobijena egzaktnom dijagonalizacijom u aproksimaciji LLL. Za parametre su uzete vrednosti $m_r = 0.067$, $\epsilon_r = 13$, $g^* = -0.44$ i konfinirajući potencijal $\hbar\omega_0 = 6meV$.

Primećujemo oštre skokove Kulonove energije i jedno čestične energije. Ovakvo ponašanje možemo najlakše objasniti ako ispitamo evoluciju angularnog momenta i spina osnovnog stanja. Na slici 3.2 je prikazna zavisnost angularnog momenta i spina osnovnog stanja sa porastom magnetnog polja, za $N = 3$ i $N = 4$ elektrona, dobijena egzaktnom dijagonalizacijom. Osnovno stanje je u potpunosti odredjeno kvantim brojevima (L, S, S_z). Vrednost S_z u osnovnom stanju je maksimalana, tj. $S_z = S$, zbog Zemanovog člana. Do trenutka kada svi elektroni imaju spin projekcije $+\frac{1}{2}$ i nalaze se u orbitalama $m = 0, \dots N-1$ (tj. nalaze se u stanju takozvane kapljice maksimalne gustine, MDD) smenjuju se različite vrednosti spina i angularnog momenta u osnovnom stanju. Angularni momenat raste kao što smo i očekivali, dok spin ispoljava oscilatorno ponašanje. Upravo ovim promenama kvantnih brojeva odgovaraju oštre promene energija. Kulonova energija sa porastom magnetnog polja raste kao $\sqrt{B}$, jer se dimenzije kvantne tačke smanjuju. Ali kada dodje do povećanja angularnog momenta dimenzije postaju veće (A.23) i Kulonova energija doživljava nagli pad. Ovakvo ponašanje se ponavlja. Za nižu vrednost konfinirajućeg potencijala niže vrednosti magnetnog polja bi bile potrebne za opaženu evoluciju jer bi Kulonova interakcija pre nadjačala konfinirajući potencijal. Jednočestična energija opada sa porastom magnetnog polja za fiksiranu vrednost angularnog momenta, ali u tačkama promene angularnog momenta ona doživljava porast.

Vrednosti ukupnog angularnog momenta i spina za tri čestice se smenjuju kao $(L, S) = (1, \frac{1}{2}) \to (2, \frac{1}{2}) \to (3, \frac{3}{2})$, a za četiri čestice kao $(L, S) = (2, 0) \to (3, 1) \to (4, 0) \to (5, 1) \to (6, 2)$. Na slici 3.2 su prikazani i rezultati egzaktne dijagonalizacije za $N = 3$ i $N = 4$ čestice, ali uzimajući i više Landauove nivoe u razmatranje. Rezultati su preuzeti iz [?] gde vrednosti parametara *GaAs* kvantne tačke nisu navedeni, sem vrednosti konfinirajućeg potencijala. Redosled pojavljivanja kvantnih brojeva sa porastom magnetnog polja je isti. Početno stanje $(L, S) = (0, 1)$, koje vidimo na 3.2(d), se ne može javiti ako radimo u LLL aproksimaciji zbog Paulijevog principa isključenja.

(a)	(b)	(c)
$(2, 0, 0)$	$(3, 1, 1)$	$(6, 2, 2)$

Slika 3.3: Shematski prikaz osnovnog stanja (L, S, S_z) za $N = 4$. Isprekidanom linijom je prikazan Fermijev nivo.

Slika 3.4: Shematski prikaz osnovnog stanja za $N = 4, (L, S, S_z) = (4, 0, 0)$. Isprekidanom linijom je prikazan Fermijev nivo.

Na slici 3.3 su shematski prikazana osnovna stanja (Slejterove determinante) za sistem od četiri elektrona, za angularne momente $L = 2, 3, 6$, koja

Slika 3.5: Shematski prikaz osnovnog stanja za $N = 4, (L, S, S_z) = (5, 1, 1)$. Isprekidanom linijom je prikazan Fermijev nivo.

se na slici 3.2(a) smenjuju sa porastom magnetnog polja. Ova stanja su jedini bazisni vektori koji imaju odgovarajuće kvantne brojeve. U početnom stanju ($L = 2$) elektroni su kompaktno rasporedjeni. U orbitalama $m = 0, 1$ se nalaze po dva elektrona različitih projekcija spina. Porastom magnetnog polja elektron spina dole prelazi u orbitalu $m = 3$ menjajući projekciju spina, pa ukupni angularni momenat sistema raste za jedan. Daljim porastom magnetnog polja angularni momenat raste, sistem se širi. Osnovno stanje za $L = 4$ se sastoji iz stanja prikazanih na slici 3.4. Ova stanja imaju različit doprinos u osnovnom stanju. Doprinos stanja $|1\rangle$ je 43.91%, stanja $|2\rangle$ i $|3\rangle$ je 7.18%, a stanja $|4\rangle$ i $|5\rangle$ je 21.36%. Najveći je doprinos stanja sa dve šupljine ispod Fermijevog nivoa. Ukupan spin je nula. Daljom evolucijom angularni momenat sistema raste i postaje $L = 5$. Doprinosi stanja sa slike 3.5, za $L = 5$, su 0.04, 18.57, 32.56, 48,84% redom za stanja $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$ tako da je najveći doprinos stanja sa dve šupljine ali iste projekcije spina. Stanja imaju isti sastav nezavisno od intenziteta magnetnog polja (dobijamo ih dijagonalizacijom Kulonove interakcije). Stanje za $L = 6$ je MDD.

Na slici 3.6(a) prikazana je zavisnost Kulonove energije od angularnog momenta za $N = 4$ i $N = 6$ elektrona. Ona opada jer se srednje rastojanje medju česticama povećava. Zanimljivo je primetiti i karakteristične oscilacije spina u zavisnosti od angularnog momenta do pojave MDD, na slici 3.6(b). Deo grafika sa ove slike, do $L = 6$ odgovara ponašnju spina za četiri elektrona, a ceo grafik opisuje šest elektrona. Na osnovu rezultata iz rada [**?**] možemo zaključiti da se analogne oscilacije spina javljaju i za $N = 10$.

Evolucija sistema uzrokovana porastom magnetnog polja nije jednostavna. U evoluciji sistema, od kompaktnog stanja sa po dva elektrona u svakoj orbitali pa do MDD, nema oštrih promena spina. Spin ne raste monotono sa porastom magnetnog polja već se uočava i pojava potpuno depolarizovanih stanja. Javljaju se visoko korelisana osnovna stanja koja Hartri-Fokova aproksimacija ne predvidja. Prelazak iz jednog u drugo osnovno stanje sa porastom magnetnog polja uzrokuje promene fizičkih veličina (kao što su hemijski potencijal, magnetizacija . . .) koje je moguće meriti. Pojava depolarizovanih stanja pri opisanoj evoluciji je eksperimentalno potvrdjena [**?**].

(a)(b)

Slika 3.6: (a) Kulonova energija sistema po čestici za $N = 4$ i $N = 6$ elektrona kao funkcija ukupnog angularnog momenta L. Veličina tačake prikazuje vrednost spina, tj. tačka većeg poluprečnika je za veću vrednost spina. (b) Oscilacije spina u zavisnosti od angularnog momenta za $N = 4$ i $N = 6$ elektrona. Videti objašnjenje u tekstu.

4

Maksimova teorija interagujućih elektrona u kvantnim tačkama

Detaljno izlaganje ove teorije je dato u [**?**], a za nas će od interesa biti samo motivacija za nastanak ove teorije kao i izvedeno selekciono pravilo.

Za slučaj klasičnih interagujićih elektrona čije je kretanje ograničeno na kretanje u ravni i koji se nalaze u centralnom potencijalu očekujemo da stanje minimalne energije bude simetrično. Na primer, za slučaj tri elektrona, očekujemo da se razmeste u temenima rotirajućeg jednakostraničnog trougla. Da li takvu simetriju ima i kvantnomehaničko stanje najniže energije?

Za karakterizaciju stanja elektrona, u ranije opisanom modelu kvantne tačke, koristimo korelacionu funkciju

$$P_{s,s'}(\mathbf{r},\mathbf{r}_0) = \frac{(2\pi\lambda^2)^2}{N(N-1)}\langle\sum_{i\neq j}\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r})\delta_{s,s_i}\delta(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_0)\delta_{s',s_j}\rangle, \tag{4.1}$$

gde je $\lambda = \frac{\hbar}{2m^*\omega}$ a s, s', s_i, s_j označavaju spinove, a N broj elektrona. Ugaone zagrade označavaju očekivnu vrednost izraza u stanju koje razmatramo. Vektor $\mathbf{r}_0$ je fiksiran, a $\mathbf{r}$ je promenljiva. Korelaciona funkcija je proporcionalna verovatnoći nalaženja elektrona spina s u tački $\mathbf{r}$ ukoliko je jedan elektron spina s' u $\mathbf{r}_0$, tj. uslovnoj verovatnoći. Normalizaciona konstanta je odabrana tako da

$$\frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{s,s'}\int P_{s,s'}(\mathbf{r}',\mathbf{r}'_0)\mathrm{d}\mathbf{r}'\mathrm{d}\mathbf{r}'_0 = 1, \tag{4.2}$$

kada su $\mathbf{r}'$ i $\mathbf{r}'_0$ bezdimenzionalni i mereni u jedinicama λ. Elektronska gustina je

Slika 4.1: Kvantnomehanička korelaciona funkcija $P_{s,s'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ za tri do šest potpuno polarizovanih elektrona u konfinirajućem potencijalu $\hbar\omega_0 = 4meV$ i magnetnom polju $B = 20T$ (gore) i odgovarajuće ravnotežne klasične konfiguracije (dole). Tačka odgovara vektoru položaja $\mathbf{r}_0$. Slika je preuzeta iz [**?**].

$$n_s(r) = \frac{N}{(2\pi\lambda^2)^2} \sum_{s'} \int P_{s,s'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \mathrm{d}\mathbf{r}_0. \tag{4.3}$$

Na slici 4.1 je prikazana korelaciona funkcija za stanja navedenih angularnih momenata i za slučaj potpuno polarizovanih elektrona u $GaAs$ kvantnoj tački, za $B = 20T$ i $\hbar\omega = 4meV$ u LLL aproksimaciji i uporedjena sa ogovarajućom klasičnom ravnotežnom konfiguracijom. Tačka na slici predstavlja vektor položaja $\mathbf{r}_0$, čiji je intenzitet odredjen iz uslova za maksimum elektronske gustine (4.3). Slika je preuzeta iz [**?**].

Primećujemo da tačke u kojim korelacija ima maksimalnu vrednost zajedno sa tačkom $\mathbf{r}_0$ ispoljavaju istu simetriju kao i odgovarajuća ravnotežna klasična konfiguracija. Zanimljivo je primetiti da se za pet elektrona mogu javiti dve konfiguracije, kvadrat sa elektronom u centru i pravilan petougao. Slično, za sest elektrona javljaju dve mogućnosti, pravilan šestougao i petougao sa elektronom u centru. Uočeno je da za veći angularni momenat, za dati broj elektrona, maksimumi korelacione funkcije postaju oštriji.

Primećena simetrija $P_{s,s'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ poslužila je kao motivacija za opis sistema kao "elektronskog molekula" koji rotira sa ukupnim angularnim momentom L i vibrira oko klasične ravnotežne konfiguracije. Zapaženo dobro slaganje klasičnog radijusa (na kome se nalaze klasični elektroni) sa radijusom na kome gustina (4.3) ima maksimum ukazuje da bi ovakva fizička slika mogla biti i precizna.

Radi otklanjanja rotacionog kretanja prelazimo u pokretni referentni sistem. Prisustvo Koriolisove sile dovodi do kuplovanja koordinate i impulsa u hamiltonijanu, pa je potrebno koristiti referentni sistem u kome je ovo kuplovanje minimalno. Dobar izbor je Ekartov referentni sistem [**?**]. Hamiltonijan razvijamo oko klasične ravnotežne konfiguracije, a elektronska stanja aproksimiramo antisimetrizovanim vibracionim stanjima. Ako klasična konfiguracija ima grupu simetrije C_m simetrijska razmatranja daju selekciono pravilo koje povezuje angularni momenat i spinsku konfiguraciju stanja. Neka je Ψ_{spin} spinska talasna funkcija koja se pri rotaciji za $\frac{2\pi}{m}$ transformiše kao $\exp\left(-i\frac{2\pi k_s}{m}\right)\Psi_{spin}$, gde je k_s ceo broj iz intervala $0 \leq k_s \leq m-1$. Analogno, i-to vibraciono stanje je opisano celobrojnim kvantnim brojem k_v u intervalu $0 \leq k_v \leq m-1$, a broj kvanata u svakoj vibracionoj modi je n_i. Selekciono pravilo glasi

$$L + k_s + \sum_{i=1}^{2N-3} n_i k_v(i) \equiv \begin{cases} 0 \pmod{m}, & m \text{ neparan} \\ \frac{m}{2} \pmod{m}, & m \text{ paran.} \end{cases} \tag{4.4}$$

Maksim je ovom teorijom uspeo da precizno odredi i energije osnovnog stanja za sistem od $N = 3, 4, 5, 6$ elektrona[**?**, **?**]. Teorija daje dobro slaganje sa rezultatima egzaktne dijagonalizacije za slučaj jakog polja (tj. za veće vrednosti angularnog momenta). Ona dobro opisuje i pojavu tzv. magičnih brojeva, videti više o magičnim brojevima polarizovanih elektrona u dodatku B.

5

Spinske konfiguracije u kvantnoj tački za slučaj četiri elektrona

Posmatraćemo stanje najniže energije za kvantnu tačku koja sadrži četiri elektrona za odredjenu vrednost angularnog momenta u aproksimaciji LLL, izostavljajući Zemanov član u hamiltonijanu. To stanje je u opštem slučaju degenerisano, tj. stanja sa istim spinom i angularnim momentom imaće istu energiju, ali različite projekcije spina. Ispitujući spinske korelacije izvršićemo identifikaciju spinskih konfiguracija koje se javljaju u ovim stanjima, naime prepoznaćemo stanja Haldane-Shastry (HS) spinskog lanca.

Za računanje spinskih korelacija $\langle S^+(r,0)S^-(r,\varphi)\rangle$, $\langle S_z(r,0)S_z(r,\varphi)\rangle$ gde ugaona zagrada označava očekivanu vrednost operatora u ispitivanom stanju, neophodno je operatore snižavanja i podizanja ukupnog spina S^-, S^+ reprezentovati u bazisu brojeva popunjenosti, o čijem formiranju smo govorili u poglavlju 2.2.3.

$$S^- = \sum_m a^\dagger_{m,-} a_{m,+} \ , \tag{5.1}$$

$$S^+ = \sum_m a^\dagger_{m,+} a_{m,-} \ , \tag{5.2}$$

dok su odgovarajući operatori polja

$$S^-(r,\varphi) = \sum_{m_1,m_2} a^\dagger_{m_1,-} a_{m_2,+} \psi^*_{m_1}(r,\varphi)\psi_{m_2}(r,\varphi), \tag{5.3}$$

$$S^+(r,\varphi) = \sum_{m_1,m_2} a^\dagger_{m_1,+} a_{m_2,-} \psi^*_{m_1}(r,\varphi)\psi_{m_2}(r,\varphi). \tag{5.4}$$

U daljem radu će nam biti potreban operator polja

$$S_z(r,\varphi) = \frac{1}{2}\sum_{m_1,m_2}(a^\dagger_{m_1,+}a_{m_2,+} - a^\dagger_{m_1,-}a_{m_2,-})\psi^*_{m_1}(r,\varphi)\psi_{m_2}(r,\varphi). \qquad (5.5)$$

kao i operator gustine

$$\rho(r,\varphi) = \sum_{m_1,m_2}\sum_{\sigma}\psi^*_{m_1}(r,\varphi)\psi_{m_2}(r,\varphi)a^\dagger_{m_1,\sigma}a_{m_2,\sigma}. \qquad (5.6)$$

5.1 Haldane-Shastry spinski lanac

U ovom izlaganju biće iznete karakteristike HS spinskog lanca koje su biti bitne za dalje izlaganje. Više detalja dato je u [**?**, **?**, **?**, **?**].

5.1.1 Hamiltonijan

Posmatrajmo jednodimenzionalnu rešetku sa N čvorova, čiji su krajevi spojeni tako da ona formira jedinični krug. Svakom čvoru možemo pridružiti kompleksni broj z_α koji zadovoljava

$$z_\alpha^N - 1 = 0. \qquad (5.7)$$

Neka se u svakom čvoru nalazi polucelobrojni spin $\frac{1}{2}$ i neka je odgovarajući operator spina $\mathbf{S}_\alpha$. Haldane-Shastry hamiltonijan je

$$H_{HS} = J(\frac{2\pi}{N})^2\sum_{\alpha<\beta}^{N}\frac{\mathbf{S}_\alpha\mathbf{S}_\beta}{|z_\alpha - z_\beta|^2}. \qquad (5.8)$$

Hamiltonijan je translaciono invarijantan, tj. zadovoljava

$$[H_{HS},\mathbf{S}] = 0, \qquad \mathbf{S} = \sum_{\alpha}^{N}\mathbf{S}_\alpha, \qquad (5.9)$$

i poseduje specijalnu unutrašnju simetriju

$$[H_{HS},\mathbf{\Lambda}] = 0, \qquad \mathbf{\Lambda} = \frac{i}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\left(\frac{z_\alpha + z_\beta}{z_\alpha - z_\beta}\right)(\mathbf{S}_\alpha\times\mathbf{S}_\beta). \qquad (5.10)$$

5.1.2 Osnovno stanje

Talasna funkcija osnovnog stanja je pravilo koje svakoj konfiguraciji spinova u lancu dodeljuje kompleksan broj. Spinska konfiguracija osnovnog stanja je linearna kombinacija više različitih konfiguracija, a koeficijenti uz te konfiguracije su upravo pomenuti kompleksni brojevi koje im dodeljuje talasna funkcija. Neka je broj N paran i neka brojevi $z_1, z_2, \ldots, z_{\frac{N}{2}}$ predstavljaju čvorove u kojima je projekcija spina $+\frac{1}{2}$. Broj takvih čvorova je $\frac{N}{2}$. Talasna funkcija osnovnog stanja je

$$\Psi(z_1, z_2, \ldots, z_{\frac{N}{2}}) = \prod_{j<k}^{\frac{N}{2}} (z_j - z_k)^2 \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} z_j, \tag{5.11}$$

a odgovarajuća energija je

$$H_{HS}|\Psi\rangle = -J\frac{\pi^2}{24}(N + \frac{5}{N})|\Psi\rangle. \tag{5.12}$$

Pri translaciji za jednu konstantu rešetke argumente talasne funkcije množimo brojem $z = \exp{(i\frac{2\pi}{N})}$ i ona postaje

$$\Psi(zz_1, zz_2, \ldots, zz_{\frac{N}{2}}) = \exp(i\frac{N\pi}{2})\Psi(z_1, z_2, \ldots, z_{\frac{N}{2}}), \tag{5.13}$$

jer je homogena funkcija reda $(\frac{N}{2})^2$. Sledi da je talasna funkcija osnovnog stanja translatorno inavarijantna. Kristalni impuls stanja (q) je odredjen relacijom

$$\Psi(zz_1, zz_2, \ldots, zz_{\frac{N}{2}}) = \exp(iq)\Psi(z_1, z_2, \ldots, z_{\frac{N}{2}}). \tag{5.14}$$

Kristalni impuls osnovnog stanja je nula ukoliko je $N = 4k$, a π ukoliko je $N = 2(2k+1)$, gde je $k \in Z$.

Projekcija spina osnovnog stanja je nula, što je očigledno, jer je broj spinova gore je jednak broju spinova dole, tj. $\frac{N}{2}$. Može se pokazati i da je svojstvena vrednost operator S^- u ovom stanju nula, pa je osnovno stanje spinski singlet.

Bitno je pomenuti da spinska korelaciona funkcija $\langle \mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta \rangle$ u osnovnom stanju teži nuli kada $|z_\alpha - z_\beta| \to \infty$, što nam govori da nema dugodometne uredjenosti i da je u pitanju spinska tečnost a ne uredjeni antiferomagnet.

Osnovno stanje HS lanca nije degenerisano, ali postoji stanje bliske energije, tzv. alternativno osnovno stanje, čija je talasna funkcija oblika

$$\Psi'(z_1, z_2, \ldots, z_{\frac{N}{2}}) = \prod_{j<k}^{\frac{N}{2}} (z_j - z_k)^2 \left[1 - \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} z_j^2\right]. \tag{5.15}$$

Ovo stanje je takodje spinsko singletno stanje, a njegova energija je

$$H_{HS}|\Psi'\rangle = -J\left(\frac{\pi^2}{24}\right)(N - \frac{7}{N})|\Psi'\rangle. \tag{5.16}$$

Talasna funkcija alternativnog osnovnog stanja (5.15) je homogeni polinom stepena $\frac{N}{2}(\frac{N}{2}-1)$, a kristalni impuls alternativnog stanja je za π veći od kristalnog impulsa osnovnog stanja.

5.1.3 Spinoni

Elementarne ekscitacije osnovnog stanja HS spinskog lanca su spinoni, čestice spina $\frac{1}{2}$, a ne spinski talasi koji su elementarne ekscitacije kod uredjenih antiferomagnetika.

Neka je broj čvorova N neparan i neka je

$$\Psi_\alpha(z_1, z_2, \ldots, z_M) = \prod_j^M (z_\alpha - z_j) \prod_{j<k}^M (z_j - z_k)^2 \prod_j^M z_j, \tag{5.17}$$

gde je $M = \frac{N-1}{2}$. Ovo stanje ogovara spinu dole u čvoru α koji se nalazi u spinskom singletnom moru, tj. važi

$$\sum_{\beta\neq\alpha}^N S_\beta^- \Psi_\alpha = 0. \tag{5.18}$$

Kombinacija ovih stanja oblika

$$\Psi_m(z_1, z_2, \ldots, z_M) = \sum_\alpha^N (z_\alpha^*)^m \Psi_\alpha(z_1, z_2, \ldots, z_M), \tag{5.19}$$

pri čemu je $0 \leq m \leq \frac{(N-1)}{2}$ je svojstveno stanje hamiltonijana (5.8) sa svojstvenom vrednošću

$$H_{HS}|\Psi_m\rangle = \left\{-J\left(\frac{\pi^2}{24}\right)\left(N - \frac{1}{N}\right) + \frac{J}{2}\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 m\left(\frac{N-1}{2} - m\right)\right\}|\Psi_m\rangle. \tag{5.20}$$

Stanje $|\Psi_m\rangle$ predstavlja propagirajući spinon spina dole i kristalnog momenta

$$q = \frac{\pi}{2}N - \frac{2\pi}{N}\left(m + \frac{1}{4}\right) \pmod{2\pi} \tag{5.21}$$

Osnovno stanje spinskog lanca sa neparnim brojem čvorova je četvorostruko degenerisano. Spinonska stanja $|\Psi_m\rangle$ za $m = 0$ i $m = \frac{N-1}{2}$ i odgovarajuća spinonska stanja spina gore imaju istu energiju.

Za slučaj N parno, dvospinonsko stanje

$$|\Psi_{mn}\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{N} f_{mn}(z_\alpha^* z_\beta)(z_\alpha^*)^m (z_\beta^*)^n |\Psi_{\alpha\beta}\rangle \tag{5.22}$$

gde je

$$\Psi_{\alpha\beta}(z_1, \ldots, z_M) = \prod_j^M (z_\alpha - z_j)(z_\beta - z_j) \prod_{j<k}^M (z_j - z_k)^2 \prod_j^M z_j, \tag{5.23}$$

a $M = \frac{N}{2} - 1$ i

$$f_{mn}(z) = \sum_{l=0}^{N/2} a_l z^l - \frac{1}{2} a_{N/2} z^{N/2}, \tag{5.24}$$

$$a_l = \frac{m - n + 2l}{2l(l + m - n - 1/2)} \sum_{k=0}^{l-1} a_k, \qquad (a_0 = 1) \tag{5.25}$$

uz uslov $M \geq m \geq n \geq 0$, je svojstveno stanje hamiltonijana (5.8) sa svojstvenom vrednošću

$$\begin{aligned} H_{HS}|\Psi_{mn}\rangle = \Bigg\{ &- J \left(\frac{\pi^2}{24}\right) \left(N - \frac{19}{N} + \frac{24}{N^2}\right) + \frac{J}{2} \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \\ &\times \left[m \left(\frac{N}{2} - 1 - m\right) + n \left(\frac{N}{2} - 1 - n\right) - \left|\frac{m-n}{2}\right| \right] \Bigg\} |\Psi_{mn}\rangle. \end{aligned} \tag{5.26}$$

Za svako tripletno stanje $|\Psi_{mn}\rangle$ postoji odgovarajuće singletno stanje iste energije, koje je dato sa $\Lambda^z S^+ |\Psi_{mn}\rangle$, gde je Λ definisano u (5.10).

5.2 Singletna stanja

Na slici 5.1 je prikazana korelacija $\langle S_z(r,0) S_z(r,\phi)\rangle$ za stanje najniže energije, bez Zemanovog člana u hamiltonijanu, za odredjenu vrednost angularnog momenta za četiri elektrona. Sva ova stanja su spinski singleti, tj. spina nula. Pažljivim posmatranjem realnog dela korelacije (slika 5.1(a)) možemo uočiti karakteristične oblike koji se smenjuju. Za angularne momente $L = 2, 10, 14$ javlja se jedan oblik, dok za $L = 4, 8, 16$ drugi oblik.

(a) realni deo (b) imaginarni deo

Slika 5.1: Korelacija $\langle S_z(r,0)S_z(r,\phi)\rangle$ za osnovno stanje datog angularnog momenta za četiri elektrona. Sva stanja imaju spin nula. Vrednosti na osama su u jedinicama $l_b = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. Konture tamnije od podloge označavaju oblasti u kojima korelacija negativna, a svetlije od podloge označavaju oblasti u kojima je korelacija pozitivna.

Imaginarni deo korelacije nije od značaja jer se isti oblik javlja za sve angularne momente, pa posmatrajući imaginaran deo ne možemo ih razlikovati. Korelacija $\langle S^+(r,0)S^-(r,\phi)\rangle$ nije prikazana pošto je u slučaju singletnog stanja duplo već od odgovarajuće $\langle S_z(r,0)S_z(r,\phi)\rangle$, pa ne pruža nove informacije.

Zadržaćemo se za trenutak na stanjima HS lanca. Talasna funkcija osnovnog (5.11) i alternativnog osnovnog stanja (5.15) HS spinskog lanca za $N = 4$ je

$$\Psi(z_1,z_2) = (z_1-z_2)^2 z_1 z_2, \tag{5.27}$$
$$\Psi'(z_1,z_2) = (z_1-z_2)^2(1-z_1^2 z_2^2). \tag{5.28}$$

Jednostavnim izračunavanjem dobijamo osnovno i alternativno osnovno stanje koja su, do na faktor proporcionalnosti, oblika

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 2[|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle], \tag{5.29}$$
$$|\Psi'\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle. \tag{5.30}$$

Prva strelica označava projekciju spina u čvoru kome pridružujemo $z = 1$ i redni broj jedan, a svaka sledeća označava projekciju spina u čvoru pomerenom za $\frac{\pi}{2}$, u suprotnom smeru od kazaljke na časovniku, od prethodnog. Spinske korelacije u osnovnom stanju su

$$\begin{aligned} \langle\Psi|S_z(1)S_z(2)|\Psi\rangle &= -2, \\ \langle\Psi|S_z(1)S_z(3)|\Psi\rangle &= 1, \end{aligned} \tag{5.31}$$

a u alternativnom osnovnom stanju su

$$\begin{aligned} \langle\Psi'|S_z(1)S_z(2)|\Psi'\rangle &= 0, \\ \langle\Psi'|S_z(1)S_z(3)|\Psi'\rangle &= -1. \end{aligned} \tag{5.32}$$

Analizom korelacija prikazanih na slici 5.1 možemo izvršiti identifikaciju stanja za koja smo računali korelacije. Ispitivanjem da li je zadovoljen uslov

(5.31) ili uslov (5.32) na nekom radijusu izvodimo zaključak da stanjima angularnog momenta $L = 2, 10, 14$ odgovara spinska konfiguracija osnovnog stanja, dok stanjima $L = 4, 8, 16$ odgovara spinska konfiguracija alternativnog osnovnog stanja HS lanca. Ispunjenost pomenutih uslova smo tražili do na konstantu skaliranja, tj. tražili smo da odnosi izmedju korelacija budu zadovoljeni.

Navešćemo kao primer singletno stanje angularnog momenta $L = 14$. Korelacija $\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle$ je veća ili jednaka nuli za svako r, pa zaključujemo da ovo stanje ne može biti alternativno osnovno stanje. Što se tiče ispunjenosti uslova (5.31) tražićemo da bude zadovoljeno

$$Re[\langle S_z(r,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle] = -2\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle \tag{5.33}$$

$$|Im[\langle S_z(r,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle]| \ll \langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle. \tag{5.34}$$

Napomenimo da je vrednost korelacije $\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle$ uvek realna. Na slici 5.2(b) su prikazane funkcije

$$f_1(r) = \frac{Re[\langle S_z(r,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle] + 2\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle}{|\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle|}, \tag{5.35}$$

$$f_2(r) = \frac{|Im[\langle S_z(r,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle]|}{|\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle|}. \tag{5.36}$$

Vidimo da su uslovi (5.33) i (5.34) dobro ispunjeni (kvalitativno) za sve vrednosti prikazanih radijusa izuzimajući one u neposrednoj okolini $r = 1.5$. (Dužina je izražena u jedinicama $l_b = 1$.) Vrednosti korelacija za $r = 2.1$ u jedinicama $\hbar = 1$ su

$$\begin{aligned}
\langle S_z(2.1,0)S_z(2.1,\frac{\pi}{2})\rangle &= (-2.56 + 0.0596i)10^{-3} \\
\langle S_z(2.1,0)S_z(2.1,\pi)\rangle &= 1.19 * 10^{-3} \\
\frac{\langle S_z(2.1,0)S_z(2.1,\frac{\pi}{2})\rangle}{\langle S_z(2.1,0)S_z(2.1,\pi)\rangle} &= -2.15 + 0.0501i \approx -2,
\end{aligned} \tag{5.37}$$

i smatramo da dobro ispunjavaju uslove (5.31). Očekivana vrednost operatora gustine (5.6) u ovom stanju je prikazna na slici 5.2(a). Gustina je radijalna, tj. ne zavisi od polarnog ugla. Ima maksimalnu vrednost za $r_0 = 2.56$, a vrednosti korelacija u toj tački su

$$\begin{aligned}
\langle S_z(r_0,0)S_z(r_0,\frac{\pi}{2})\rangle &= (-3.62 + 0.0204i)10^{-3} \\
\langle S_z(r_0,0)S_z(r_0,\pi)\rangle &= 1.58 * 10^{-3} \\
\frac{\langle S_z(r_0,0)S_z(r_0,\frac{\pi}{2})\rangle}{\langle S_z(r_0,0)S_z(r_0,\pi)\rangle} &= -2.29 + 0.0129i \approx -2,
\end{aligned} \tag{5.38}$$

(a)(b)

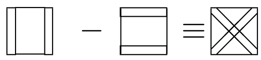
Slika 5.2: (a) Gustina za stanje $L = 14, S = 0$. Dužina je u izražena u jedinicama $l_b = 1$. Gustina je normirana tako da je $2\pi \int_0^\infty \rho(r) r dr = 4$. (b) Punom linijom je prikazana funkcija $f_1(r)$, a isprekidanom linijom $f_2(r)$. Za one vrednosti radijusa u kojima su uslovi (5.31) kvalitativno ispunjeni funkcije f_1 i f_2 treba da imaju vrednost blisku nuli.

i takodje prilično dobro zadovoljavaju uslove (5.31). Bitno je naglasiti da su u oblasti oko maksimuma gustine uslovi (5.31) ispunjeni pa možemo reći da je ovo stanje osnovno stanje HS lanca. Isto važi i za ostala stanja, tj. samo jedna grupa uslova (5.31) ili (5.32) je ispunjena i to za radijuse na kojima je gustina značajna.

Vrednosti kvantnog broja k_s (definisanog u poglavlju 4) za osnovno stanja HS lanca je $k_s = 0$, a za alternativno osnovno stanje je $k_s = 2$. Sledi da je izneta klasifikacija singletnih stanja u skladu sa Maksimovom zakonitošću (4.4), tj. od razmatranih singletnih stanja ona stanja čiji angularni momenat zadovoljava $L = 2 \pmod 4$ su identifikovana kao osnovno stanje HS lanca, a stanja angularnog momenta $L = 0 \pmod 4$ su identifikovana kao alternativno osnovno stanje HS lanca.

U prostoru spinskih konfiguracija spina $S = 0$ za četiri čvora rešetke u kojim su spinovi $\frac{1}{2}$, postoji bazis [?]. Bazis je dobijen pokrivanjem čvorova rešetke spin singletnim parovima $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Bazis čine dva vektora, a njihove linerane kombinacije daju osnovno i alternativno osnovno stanje HS spinskog lanca [?]

$|\Psi\rangle =$  (5.39)

$|\Psi'\rangle =$  (5.40)

gde je $\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Ostale linearne kombinacije bazisnih vektora nisu dozvoljene u našem slučaju, jer ne bi bile invarijantne na rotacije za $\frac{\pi}{2}$.

5.3 Tripletna stanja

Na slici 5.3 prikazan je realni deo korelacije $\langle S^+(r,0)S^-(r,\phi)\rangle$ za osnovno stanje datog angularnog momenta za četiri elektrona. Nije uračunat Zemanov član u hamiltonijanu. Stanja su tripleti projekcije spina $S_z = -1$. Pažljivim posmatranjem realnog dela spinske korelacije uočavamo da se samo za stanja

Slika 5.3: Realni deo korelacije $\langle S^+(r,0)S^-(r,\phi)\rangle$ za osnovno stanje datog angularnog momenta za četiri elektrona. Spin za sva stanja je $S=1, S_z=-1$. Vrednosti na osama su u jedinicama $l_b=\sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. Konture tamnije od podloge označavaju oblasti u kojima korelacija uzima negativne vrednosti, a svetlije od podloge označavaju oblasti u kojima je korelacija pozitivna.

Slika 5.4: Imaginarni deo korelacija $\langle S^+(r,0)S^-(r,\phi)\rangle$ za osnovno stanje datog angularnog momenta za četiri elektrona. Spin za sva stanja je $S=1, S_z=-1$. Vrednosti na osama su u jedinicama $l_b=\sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. Konture tamnije od podloge označavaju oblasti u kojima korelacija uzima negativne vrednosti, a svetlije od podloge označavaju oblasti u kojima je korelacija pozitivna.

angularnog momenta $L=3$ i $L=12$ javljaju različiti oblici, njima karakteristični, dok ostala stanje ne možemo razlikovati po realnom delu pomenute korelacije. Analizom slike 5.4 primećujemo da jedan oblik karakteriše stanja angularnog momenta $L=5,9,13,17$, a drugi karakteriše stanja $L=7,11,15$. Oblici za $L=12$ i $L=3$ su samo njima osobeni. Ispostavilo se da korelacija $\langle S_z(r,0)S_z(r,\phi)\rangle$ ne prikazuje razlike medju razmatranim stanjima, zato njen grafik ne navodimo.

Zadržaćemo se za trenutak na stanjima HS lanca. Talasne funkcije dvospinonskog stanja (5.22) tj. ekscitovanog osnovnog stanja za $N=4$ su oblika

$$\Psi_{00}(z)=16z^3, \tag{5.41}$$
$$\Psi_{10}(z)=-16z^2, \tag{5.42}$$
$$\Psi_{11}(z)=16z. \tag{5.43}$$

Jednostavnim izračunavanjem dobijamo da su odgovarajuća stanja, do na konstantu normiranja, oblika

$$|00\rangle=|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle-i|\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle-|\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle+i|\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \tag{5.44}$$
$$|10\rangle=|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle+|\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \tag{5.45}$$
$$|11\rangle=|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle+i|\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle-|\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle-i|\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \tag{5.46}$$
$$\tag{5.47}$$

Korišćene su oznake kao i u prethodnom poglavlju. Spinska korelacija je za sva gore navedena stanja ista i iznosi

$$\langle S_z(1)S_z(2)\rangle=\langle S_z(1)S_z(3)\rangle=0. \tag{5.48}$$

Ali stanja se razlikuju po vrednostima korelacije $\langle S^+(\alpha)S^-(\beta)\rangle$. Vrednosti

(a)(b)

Slika 5.5: (a) Gustina za stanje $L = 15, S = 1, S_z = -1$. Dužina je u izražena u jedinicama $l_b = 1$. Gustina je normirana tako da je $2\pi \int_0^\infty \rho(r) r dr = 4$. (b) Punom linijom je prikazana funkcija $f_1(r)$, tačkastom linijom $f_2(r)$, isprekidanom crta-crta linijom $f_3(r)$, crta-tačka-crta linijom $f_4(r)$, a crta-crta-crtica linijom $f_5(r)$. Definicija ovih funkcija data je u tekstu. Za one vrednosti radijusa u kojima su uslovi (5.49) kvalitativno ispunjeni navedene funkcije treba da imaju vrednost blisku nuli.

su sledeće

$$\langle 00|S^+(1)S^-(2)|00\rangle = -i, \quad (5.49)$$
$$\langle 00|S^+(1)S^-(3)|00\rangle = -1;$$

$$\langle 10|S^+(1)S^-(2)|10\rangle = -1, \quad (5.50)$$
$$\langle 10|S^+(1)S^-(3)|10\rangle = 1;$$

$$\langle 11|S^+(1)S^-(2)|11\rangle = i, \quad (5.51)$$
$$\langle 11|S^+(1)S^-(3)|11\rangle = -1.$$

Analizom korelacija prikazanih na slikama 5.3,5.4 možemo izvršiti identifikaciju stanja za koja smo računali korelacije. Ispitivanjem da li je zadovoljen neki od uslova (5.49,5.50,5.51), uz zahtev (5.48), za neku vrednost radijusa za koju je očekivana vrednost operatora gustine (5.6) značajna (tj. u blizini maksimuma gustine), možemo tvrditi da stanjima angularnog momenta $L = 5, 9, 13, 17$ odgovara spinska konfiguracija stanja $|11\rangle$, stanjima $L = 7, 11, 15$ odgovara spinska konfiguracija stanja $|00\rangle$, a stanju $L = 12$ odgovara spinska konfiguracija stanja $|10\rangle$. Pri identifikaciji smo zahtevali da odnosi medju spinskim korelacijama budu zadovoljeni.

Navešćemo kao primer tripleno stanje angularnog momenta $L = 15$. Uslovi (5.50) nisu ispunjeni ni za jednu vrednost radijusa, što odmah vidimo i sa slike 5.3 jer korelacija $\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle$[1] nije pozitivna. Imaginarni deo korelacije $\langle S^+(r,0)S^-(r,\frac{\pi}{2})\rangle$ je manji ili jednak nuli (moguće je videti i na slici 5.4) za sve vrednosti radijusa pa nije u pitanju ni stanje $|11\rangle$. Na slici

[1] vrednost korelacije $\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle$ je realan broj

5.5(b) su prikazane funkcije

$$f_1(r) = \frac{Im[\langle S^+(r,0)S^-(r,\frac{\pi}{2})\rangle] - \langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle}{|\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle|}, \tag{5.52}$$

$$f_2(r) = \frac{Re[\langle S^+(r,0)S^-(r,\frac{\pi}{2})\rangle]}{|\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle|}, \tag{5.53}$$

$$f_3(r) = \frac{Re[\langle S_z(r,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle]}{|\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle|}, \tag{5.54}$$

$$f_4(r) = \frac{Im[\langle S_z(r,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle]}{|\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle|}, \tag{5.55}$$

$$f_5(r) = \frac{\langle S_z(r,0)S_z(r,\pi)\rangle}{|\langle S^+(r,0)S^-(r,\pi)\rangle|}. \tag{5.56}$$

Očekivana vrednost operatora gustine (5.6) za ovo stanje je prikazana na slici 5.5(a). Gustina je radijalna i ima maksimalnu vrednost u tački $r_0 = 2.65$ a vrednosti korelacija u toj tački su

$$\langle S_z(r_0,0)S_z(r,\frac{\pi}{2})\rangle = (-2.24 - 0.845i)10^{-5}, \tag{5.57}$$

$$\langle S_z(r_0,0)S_z(r,\pi)\rangle = 3.80 * 10^{-5}, \tag{5.58}$$

$$\langle S^+(r_0,0)S^-(r,\frac{\pi}{2})\rangle = (-0.0381 - 2.67i)10^{-3}, \tag{5.59}$$

$$\langle S^+(r_0,0)S^-(r,\pi)\rangle = -2.44 * 10^{-3}, \tag{5.60}$$

a odgovarajući odnosi su

$$\frac{\langle S_z(r_0,0)S_z(r_0,\frac{\pi}{2})\rangle}{\langle S^+(r_0,0)S^-(r_0,\pi)\rangle} = (9.18 + 3.46i)10^{-3} \approx 0, \tag{5.61}$$

$$\frac{\langle S_z(r_0,0)S_z(r_0,\pi)\rangle}{\langle S^+(r_0,0)S^-(r_0,\pi)\rangle} = 1.56 * 10^{-2} \approx 0, \tag{5.62}$$

$$\frac{\langle S^+(r_0,0)S^-(r_0,\frac{\pi}{2})\rangle}{\langle S^+(r_0,0)S^-(r_0,\pi)\rangle} = 0.156 + 1.11i \approx i. \tag{5.63}$$

Zaključak je da su zahtevi (5.48) kao i uslovi (5.49) ispunjeni kvalitativno dobro za radijus r_0 u kome gustina ima maksimum, kao i za ostale vrednosti radijusa prikazane na slici 5.5(a) (grubo odredjeno) veće od 1.9 . I za stanja ostalih angularnih momenata možemo izvršiti identifikaciju na sličan način. Uvek je ispunjena samo jedna grupa uslova (5.49 ili 5.50 ili 5.51) za vrednosti radijusa u kojima je gustina značajna (tj. odstupa manje od 10% od maksimalne vrednosti gustine).

Vrednost kvantnog broja k_s (definisanog u poglavlju 4) je $3, 2, 1$ redom za stanja $|00\rangle, |10\rangle, |11\rangle$, pa vidimo da je Maksimova zakonitost (4.4) zadovoljena za identifikacije koje smo uočili. Za tripletna stanja koja smo razmatrali, važi da ako je $L = 1 \pmod 4$ pronalazimo spinsku konfiguraciju stanja $|11\rangle$, ako je $L = 3 \pmod 4$ pronalazimo spinsku konfiguraciju stanja $|00\rangle$, ako je $L = 0 \pmod 4$ pronalazimo spinsku konfiguraciju stanja $|10\rangle$. Stanje angularnog momenta $L = 3$ nismo uspeli da identifikujemo.

U tripletnim stanjima koja imaju veću projekciju spina pronalazimo spinske konfiguracije koje dobijamo delovanjem operatora S^+ na već prepoznate konfiguracije za $S_z = -1$.

5.4 Orbitalna spinska struja

Posmatrajmo sistem od tri spina $S = \frac{1}{2}$. Dimenzija Hilbertovog prostora je $2^3 = 8$. Operator ukupnog spina je $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$. Definišimo operator

$$E_{123} = \mathbf{S}_1 * (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3), \tag{5.64}$$

takozvani operator kiralnosti [?]. Važe sledeće komutacione relacije

$$[\mathbf{S}^2, S_z] = 0, \tag{5.65}$$
$$[\mathbf{S}^2, E_{123}] = 0, \tag{5.66}$$
$$[S_z, E_{123}] = 0, \tag{5.67}$$

pa ovi operatori imaju zajednički svojstveni bazis. Svojstvenu vrednost operatora kiralnosti označavaćemo slovom χ i nazivati kiralnost stanja. Stanja ćemo označavati kao $|S, S_z, \chi\rangle$, gde je kvantni broj S odredjen relacijom $\mathbf{S}^2 = S(S+1)$, projekcija spina datog stanja je S_z, a χ kiralnost stanja.

Ukupan spin sistema može biti $S = \frac{1}{2}$ ili $S = \frac{3}{2}$. Vektore spina $S = \frac{3}{2}$ možemo jednostavno dobiti delovanjem operatora S^- na stanje najveće projekcije spina $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$:

$$|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 0\rangle, \tag{5.68}$$
$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2} - m, 0\rangle = (S^-)^m |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 0\rangle \quad , m = 1, 2, 3. \tag{5.69}$$

Tvrdjenje da sva stanja spina $S = \frac{3}{2}$ imaju kiralnost nula će biti dokazno. Stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ ima nultu kiralnost jer je invarijantno na permutaciju bilo koja dva spina (videti definiciju operatora kiralnosti (5.64)).

Operator kiralnosti izražen preko operatora $S^\pm$ i S_z je oblika

$$E_{123} = \frac{i}{2}(-S_1^- S_2^+ S_{3,z} + S_1^+ S_2^- S_{3,z} + S_1^- S_{2,z} S_3^+ + \\ - S_1^+ S_{2,z} S_3^- - S_{1,z} S_2^- S_3^+ + S_{1,z} S_2^+ S_3^-). \tag{5.70}$$

Sada je očigledno da važi

$$E_{123}|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = 0. \tag{5.71}$$

Jednostavno se pokazuje korišćenjem komutacionih relacija

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_{i,z}\delta_{i,j}, \tag{5.72}$$

$$[S_i^\pm, S_{j,z}] = \mp S_i^\pm \delta_{i,j}, \tag{5.73}$$

gde i, j označavaju čvorove, da važi

$$[E_{123}, S^\pm] = 0, \tag{5.74}$$

pa je relacija (5.69) očigledno zadovoljena.

Prostor stanja spina $S = \frac{1}{2}$ grade četiri bazisna vektora. Prostor stanja $S = \frac{1}{2}$ i $S_z = \frac{1}{2}$ je dvostruko degenerisan i grade ga medjusobno ortogonalni vektori

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \exp\left(i\frac{2\pi}{3}\right) + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \exp\left(-i\frac{2\pi}{3}\right)\right), \tag{5.75}$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \exp\left(-i\frac{2\pi}{3}\right) + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \exp\left(i\frac{2\pi}{3}\right)\right). \tag{5.76}$$

Stanje $|+\rangle$ je svojstveno stanja operatora kiralnosti sa svojstvenom vrednošću χ_+

$$E_{123}|+\rangle = -\frac{1}{2}\sin\frac{2\pi}{3}|+\rangle, \tag{5.77}$$

a stanje $|-\rangle$ ima svojstvenu vrednost χ_-

$$E_{123}|-\rangle = \frac{1}{2}\sin\frac{2\pi}{3}|-\rangle. \tag{5.78}$$

Stanja $|\pm\rangle$ su stanja $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \chi_\pm\rangle$, a slično se može uraditi i za stanja spina dole.

Posmatrajući jednačine (5.75) i (5.76) možemo primetiti da se spin dole kreće od jednog do drugog temena trougla pri čemu je spinski orbitalni angularni momenat $k_s = \pm 1$. Stoga je stanje nenulte kiralnosti stanje u kome postoji nenulta spinska struja, pošto se spin dole premešta po temenima trougla.

5.4.1 Operator kiralnosti u Haldane-Shastry spinskom lancu

Operator kiralnosti u HS spinskom lancu je $(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S})$, gde je $\mathbf{\Lambda}$ definisano u (5.10). Koristeći komutacione relacije

$$[S_a, S_b] = i\epsilon_{abc}S_c, \tag{5.79}$$
$$[S_a, \Lambda_b] = i\epsilon_{abc}\Lambda_c, \quad a, b, c = x, y, z \tag{5.80}$$

jednostavno se pokazuje da važi

$$[(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S}), S_z] = 0, \tag{5.81}$$
$$[(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S}), S^{\pm}] = 0. \tag{5.82}$$

Na osnovu prethodnih relacija sledi

$$[(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S}), \mathbf{S}^2] = 0. \tag{5.83}$$

Operatori $H_{HS}, \mathbf{S}^2, S_z$ i $(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S})$ komutiraju, pa imaju zajednički svojstveni bazis. Kiralnost je dobar kvantni broj.

Za slučaj četiri spina $S = \frac{1}{2}$ u čvorovima kvadrata bazisnih vektora ima $2^4 = 16$. Od toga dva singletna stanja osnovno i alternativno osnovno stanje, $3 * 3 = 9$ tripletnih i 5 stanja spina $S = 2$, ali različite projekcije. Stanja spina $S = 1, S_z = -1$ su $|00\rangle, |10\rangle, |11\rangle$. Kvantni broj koji ih razlikuje je kiralnost. Jednostavno se pokazuje da važi

$$(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S})|00\rangle = 2|00\rangle, \tag{5.84}$$
$$(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S})|10\rangle = 0, \tag{5.85}$$
$$(\mathbf{\Lambda} * \mathbf{S})|11\rangle = -2|11\rangle. \tag{5.86}$$

Možemo primetiti da se u našoj identifikaciji tripletnih stanja, datoj u poglavlju 5.3, stanja smenjuju sa porastom angularnog momenta tako da se sa periodom angularnog momenta jednakim dva javljaju stanja nenulte orbitalne spinske struje koja menja smer.

6

Zaključak

U ovom radu korišćen je metod egzaktne dijagonalizacije u aproksimaciji najnižeg Landauovog nivoa, za ispitivanje fizičkih osobina kvantne tačke u jakom magnetnom polju.

Prvo poglavlje je uvod u tematiku i problematiku ovog rada, dok je u drugom poglavlju dat detaljan opis modela kvantne tačke koji je korišćen u radu. Izračunati su matrični elementi Kulonove interakcije. Opisano je formiranje bazisa brojeva popunjenosti za dati broj elektrona i izračunati su matrični elementi hamiltonijana celog sistema u tom bazisu. Pored toga spinski operatori su predstavljeni u reprezentaciji druge kvantizacije.

U trećem poglavlju detaljno je obradjena evolucija angularnog momenta i spina sistema u magnetnom polju do pojave stanja kapljice maksimalne gustine. Primećene su karakteristične oscilacije spina za $N = 4$ i $N = 6$ elektrona. Uočena je pojava potpuno depolarizovanih stanja.

Poglavlje četiri daje kratak pregled Maksimove teorije interagujućih elektrona zadržavajući se na najbitnijim zaključcima.

Poglavlje pet počinje uvodjenjem Haldane-Shastry spinskog lanca. U nastavku poglavlja izračunate su spinske korelacije u osnovnim stanjima za dati angularni momenat, za kvantnu tačku od $N = 4$ elektrona, bez Zemanovog člana u hamiltonijanu. Izvršena je identifikacija spinskih konfiguracija u ovim stanjima. Od razmatranih singletnih stanja ona stanja čiji angularni momenat zadovoljava $L = 2 \pmod 4$ su identifikovana kao osnovno stanje HS lanca, a stanja angularnog momenta $L = 0 \pmod 4$ su identifikovana kao alternativno osnovno stanje HS lanca.

Po prvi put je izvršena identifikacija i tripletnih stanja projekcije spina $S_z = -1$. Zaključili smo da ukoliko je $L = 1 \pmod 4$ pronalazimo spinsku konfiguraciju stanja $|11\rangle$, ako je $L = 3 \pmod 4$ pronalazimo spinsku konfiguraciju stanja $|00\rangle$, ako je $L = 0 \pmod 4$ pronalazimo spinsku konfiguraciju stanja $|10\rangle$. Stanje angularnog momenta $L = 3$ nismo uspeli da identifikujemo. Primetili smo da se ova stanja smenjuju sa porastom angularnog momenta tako da se sa periodom angularnog momenta jednakim dva javljaju stanja nenulte orbitalne spinske struje koja menja smer.

U daljem istraživanju bi bilo zanimljivo ispitati nisko pobudjena stanja za četiri elektrona, kao i pokušati sličnu identifikaciju stanja najnižih energija za sisteme sa većim brojem elektrona.

Dodatak A

Svojstvene funkcije u najnižem Landauovom nivou

Posmatrajmo jednočestični hamiltonijan

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2, \tag{A.1}$$

koji opisuje elektron naelektrisanja $-e$ u spoljasnjem konstantnom magnetnom polju $\mathbf{B} = -B\mathbf{e}_z$ gde je vektorski potencijal $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B(y\mathbf{e}_x - x\mathbf{e}_y)$ dat u simetričnom gejdžu. U cilju rešavanja svojstvenog problema hamiltonijana (A.1) uvodimo hermitski operator $\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ koji zadovoljava komutacionu relaciju

$$[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar eB. \tag{A.2}$$

Uvodjenjem operatora $\Pi_+ = \Pi_x + i\Pi_y$ i $\Pi_- = \Pi_x - i\Pi_y$, definišemo operatore b i b^+ kao

$$b = \sqrt{\frac{1}{2eB\hbar}}\Pi_+, \tag{A.3}$$

$$b^+ = \sqrt{\frac{1}{2eB\hbar}}\Pi_-. \tag{A.4}$$

Lako se proverava da novi operatori zadovoljavaju bozonsku komutacionu relaciju

$$[b, b^+] = 1 \tag{A.5}$$

i da adjungovanjem jednog dobijamo drugi:

$$(b)^\dagger = b^+, \tag{A.6}$$

$$(b^+)^\dagger = b. \tag{A.7}$$

Hamiltonijan (A.1) izražen preko novih operatora se svodi na hamiltonijan linearnog harmonijskog oscilatora:

$$H = \hbar\omega_c(b^+b + \frac{1}{2}), \tag{A.8}$$

gde je $\omega_c = \frac{eB}{m}$. Energetski nivoi ovog LHO se nazivaju Landauovi nivoi. Lako se pokazuje da operatori:

$$R_x = x + \Pi_y \frac{l_b}{\hbar}, \tag{A.9}$$

$$R_y = y - \Pi_x \frac{l_b}{\hbar}, \tag{A.10}$$

gde je l_b takozvana magnetna dužina i iznosi $l_b = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$, zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[R_i, \Pi_j] = 0 \qquad i,j = x,y \tag{A.11}$$

odakle je očigledno da komutiraju i sa hamiltonijanom (A.1). Fizička interpretacija magnetne dužine je da kroz površinu $2\pi l_b^2$ prodire jedan kvant magnetnog fluksa $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ tj. gustina magnetnog fluksa je $B = \frac{\Phi_0}{2\pi l_b^2}$. U daljem tekstu ćemo smatrati da je $\hbar = 1$ i $l_b = 1$, radi jednostavnijeg zapisa. Operatori

$$Z^+ = \frac{R_x + iR_y}{\sqrt{2}} \tag{A.12}$$

$$Z^- = \frac{R_x - iR_y}{\sqrt{2}} \tag{A.13}$$

zadovoljavaju komutacionu relaciju

$$[Z^+Z^-, H] = 0 \tag{A.14}$$

odakle sledi da operatori Z^+Z^- i H imaju zajednički svojstveni bazis. Svojstvene vrednosti operatora b^+b su n=0,1,2...i označavaju Landauove nivoe. Iz uslova za najniži Landaouv nivo(LLL)

$$bf(z,z^*) = 0 \tag{A.15}$$

gde je $z = x + iy$, jednostavno se dobija da je $f(z,z^*) = f(z)\exp\left(-\frac{1}{4}|z|^2\right)$ gde je $f(z)$ proizvoljna analitička funkcija samo od z. Operatori Z^+ i Z^- zadovoljavaju uslove

$$[Z^-, Z^+] = 1 \tag{A.16}$$

$$(Z^-)^\dagger = Z^+ \tag{A.17}$$

$$(Z^+)^\dagger = Z^- \tag{A.18}$$

i predstavljaju dodatne operatore podizanja i spuštanja koji deluju u fiksiranom Landauovom nivou. Svojstvene vrednosti operatora Z^+Z^- su $m = 0, 1, 2, \ldots$ Iz uslova

$$Z^+Z^- f(z, z^*) = mf(z, z^*) \tag{A.19}$$

koji se svodi na

$$z\frac{\partial}{\partial z}f(z) = mf(z) \tag{A.20}$$

dobijamo da je svojstvena funkcija razmatranog hamiltonijana u najnižem Landauovom nivou tj. za $n = 0$ oblika

$$\psi_m(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2^m m!}} z^m \exp\left(-\frac{1}{4}|z|^2\right) \tag{A.21}$$

m predstavlja svojstvenu vrednost operatora angularnog momenta $L_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$ gde je φ polarni ugao tj. argument kompleksnog broja z. Lako se pokazuje da je

$$\langle m||z|^2|m\rangle = 2(m+1) \tag{A.22}$$

što kvalitativno pokazuje koliko daleko od centra čestica orbitira. Maksimalna vrednost $|\Psi_m(\mathbf{r})|^2$ je na takozvanom radijusu orbite

$$r_m = \sqrt{2m} \tag{A.23}$$

pa površina $2\pi m$ sadrži m kvanata fluksa tako da je gustina stanja jedno stanje po Landauovom nivou po kvantu fluksa koji prodire kroz sistem.

Dodatak B

Magični brojevi

Primećeno je da osnovna stanja mogu imati jedino odredjene vrednosti spina i angularnog momenta. Na primer, angularni momenat tri polarizovana elektrona je uvek celobrojni umnožak broja tri, dok za četiri polarizovana elektrona $L = 2$ (mod 4). Na slici B.1 najviša kriva prikazuje zavisnost ukupne energije četiri polarizovana elektrona od angularnog momenta, u aproksimaciji LLL. Tačke na krivama predstavljaju minimum ukupne (tj. Kulonove) energije za dati angularni momenat i odgovarajuća stanja ćemo nazivati osnovna stanja. Strelice ukazuju na minimum ukupne energije za prikazane angularne momente, i odgovarajuće stanje ćemo nazivati apsolutno osnovno stanje.

Sa porastom angularnog momenta čestice se medjusobno udaljavaju i Kulonova energija osnovnog stanja opada, dok jednoelektronska energija osnovnog stanja linerano raste. Ukupna energija osnovnog stanja je zbir Kulonove i jednoelektronske energije osnovnog stanja. Kao funkcija angularnog momenta ima globalni minimum koji se sa porastom magnetnog polja pomera ka većim vrednostim angularnog momenta, o čemu je već bilo reči u poglavlju 3. Na krivoj koja predstavlja ukupnu energiju primećujemo i više izraženih lokalnih minimuma. Ovi minimumi imaju period četiri i globalni minimum

(a) $B = 3T$
(b) $B = 4T$

Slika B.1: Najviša kriva na graficima predstavlja ukupnu, srednja jednoelektronsku, a najniža Kulonovu energiju za $N = 4$ polarizovana elektrona, kao funkciju ukupnog angularnog momenta. Konfinirajući potencijal je $\hbar\omega_0 = 2meV$. Tačke na krivama predstavljaju minimum ukupne (tj. Kulonove) energije za dati angularni momenat. Strelice ukazuju na minimum ukupne energije za prikazane angularne momente.

(a)(b)
$B =$ $B =$
$3T$ $7.2T$

Slika B.2: Najvisa kriva na graficima predstavlja ukupnu, srednja jednoelektronsku, najniža Kulonovu energiju za $N = 6$ polarizovanih elektrona, kao funkciju ukupnog angularnog momenta. Konfinirajući potencijal je $\hbar\omega_0 = 2meV$. Tačke na krivama predstavljaju minimum ukupne (tj. Kulonove) energije za dati angularni momenat. Strelice ukazuju na minimum ukupne energije za prikazane angularne momente.

se uvek (za različite vrednosti magnetnog polja) poklapa sa nekim od njih.

U opštem slučaju angularni momenat apsolutno osnovnog stanja je odredjen brojem elektrona i spinom S ($\mathbf{S}^2 = S(S+1)$). Dozvoljene vrednosti angularnih momenata apsolutno osnovnog stanja se nazivaju magičnim brojevima.

Na slici B.2 je prikazana zavisnost ukupne energije šest polarizovanih elektrona. Vidimo da za razliku od četiri elektrona smenjivanje magičnih brojeva nije tako jednostavno. Primećujemo da pravilnost nije samo $L = 3 \pmod 6$ već se javljaju i brojevi koji zadovoljavaju $L = 0 \pmod 5$, sto se vidi na slici B.2(b).

Magične brojeve polarizovanih elektrona možemo objasniti pomoću argumenata koje nam pruža interakcija izmene. U slučaju jakog polja kada možemo pretpostaviti da se svi elektroni nalaze u najnižem Landauovom nivou, najveću energiju izmene ima ona Slejterova determinanta sastavljena od jednočestičnih stanja uzastopnih angularnih momenata. Ovakva konfiguracija se može dobiti samo za odredjene angularne momente, magične momente. Na primer, za četiri elektrona jedan od načina da dobijemo opisanu Slejterovu determinantu je da odaberemo stanja angularnog momenta $m = 1, 2, 3, 4$, pa je ukupni angularni momenat $L = 10$, što je jedan od magičnih brojeva za četiri polarizovana elektrona. Ali za veći broj elektrona Hartrijeva energija je veća od izmenske za opisanu raspodelu elektrona, pa favorizovana konfiguracija ima jedan elektron u $m = 0$ a ostali elektroni se nalaze u susednim orbitalama. Na primer, za šest elektrona $m = 0, 4, 5, 6, 7, 8$ što daje $L = 30$, što jeste jedan od magičnih brojeva za šest polarizovanih elektrona. Opisane (obe) konfiguracije se javljaju sa velikom verovatnoćom u apsolutno osnovnom stanju [**?**] (apsolutno osnovno stanje je linearna kombinacija Slejterovih determinanti). Na ovaj način moguće je konstruisati moguće vrednosti magičnih brojeva za dati broj polarizovanih elektrona.

Objašnjenje magičnih brojeva pruža i Maksimova zakonitost (4.4). Za polarizovane elektrone $k_s = 0$, a za apsolutno osnovno stanje $\forall i, n_i = 0$ pa je

$$L \equiv \begin{cases} 0 & (\mathrm{mod}\ m), \quad m \text{ neparan} \\ \frac{m}{2} & (\mathrm{mod}\ m), \quad m \text{ paran.} \end{cases} \tag{B.1}$$

Odavde sledi da za šest polarizovanih elektrona važi $L = 3 \pmod 6$ (što smo ranije uočili) ali samo uoliko se elektroni "nalaze" u temenima šestougla. U slučaju raspodela elektrona u temenima pravilnog petougla sa elektronom u centru važi $L = 0 \pmod 5$, što smo takodje ranije primetili.

Maksimova zakonitost daje sve magične brojeve koji su nadjeni u numeričkim izračunavanjima za kvantne tačke koje sadrže manje do sedam elektrona.