

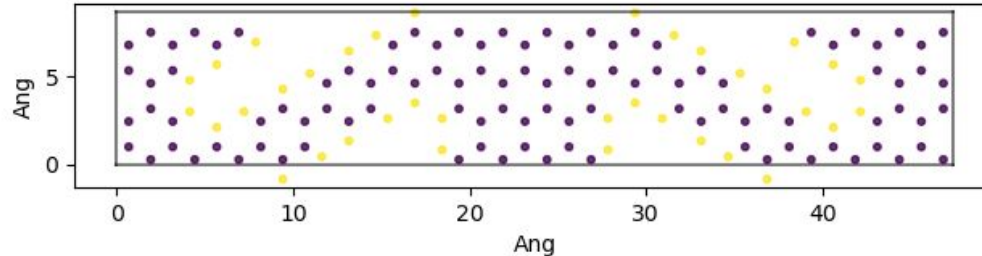
Rotación de los feniles en los puentes del double-pore NPG para-para (DPPP) a mano (sin relajar en cada paso) empezando de una estructura relajada.

Mirando el puente de la izquierda en la imagen de abajo, llamando los feniles 1 y 2 de izq. a dcha., el eje x del gráfico (Θ_{21}) es la rotación del fenil 2 respecto de 1, y el eje y (Θ_1) es la rotación del fenil 1.

El otro puente viene dado por la equivalencia de los ribbons (rotar un ribbon 180° r.d. eje x)

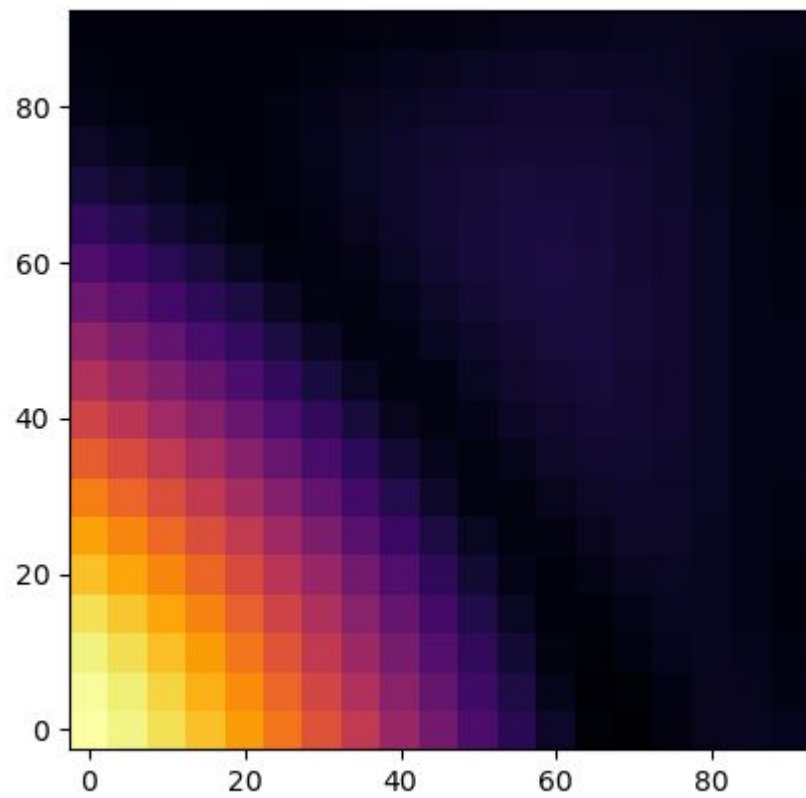
(Por ejemplo a lo largo de $\Theta_{21}=0$ los dos feniles rotan juntos)

El vector de rotación es de hacia la izquierda



Esta imagen no es la estructura relajada sino el DPPP “perfecto” (distancias C-C, C-H fijas y ángulos de 60°)

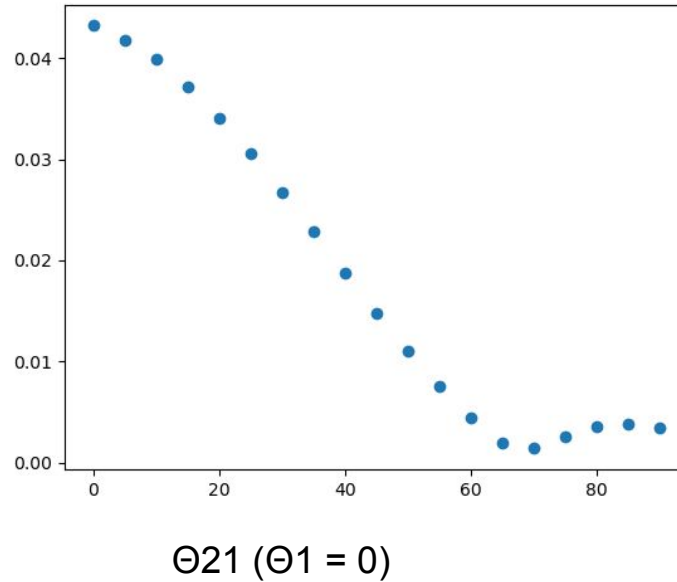
Θ_1

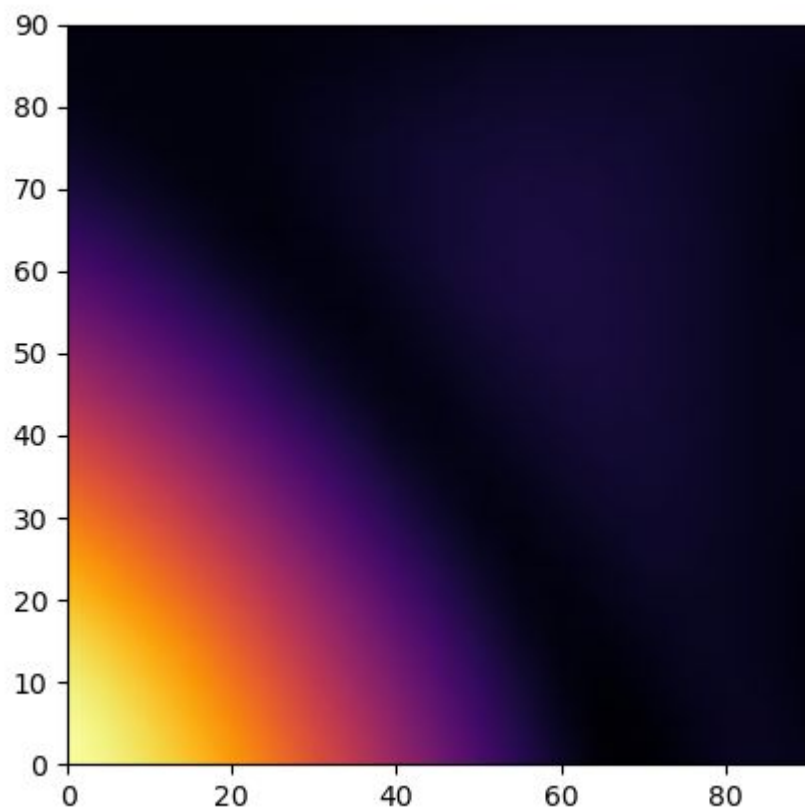


Θ_{21}

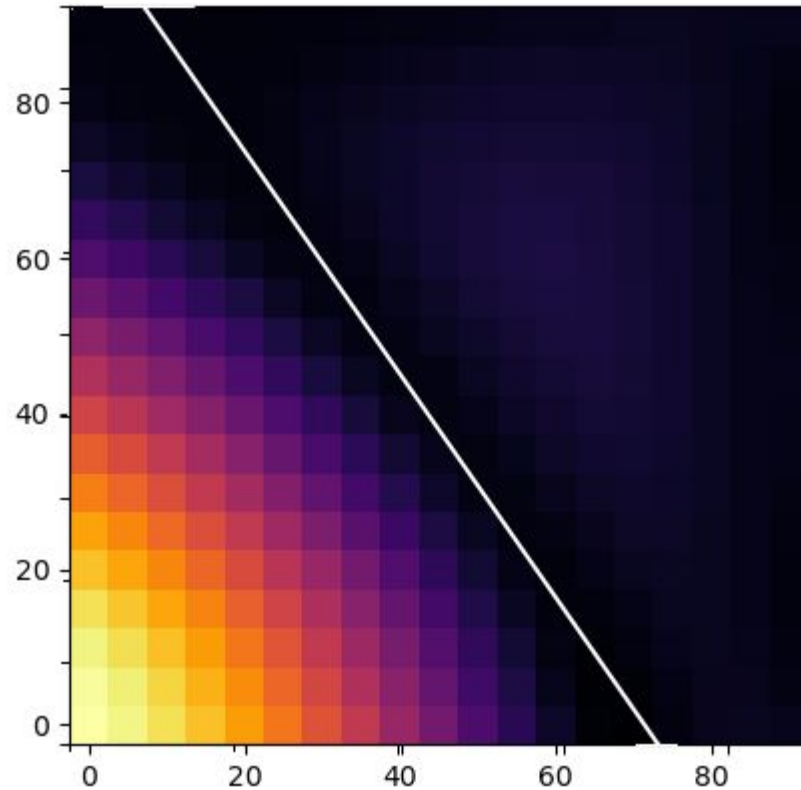
Al girar solo un fenil ($\Theta_1 = 0$) el mínimo se encuentra en $\sim 75^\circ$ (este caso es el de la imagen de abajo). Al girar los dos feniles juntos ($\Theta_{21} = 0$) el mínimo vuelve a $\sim 90^\circ$ (quizás porque de alguna manera se compensa la dirección de los puentes por los dos lados)

ΔE en Γ
(eV)

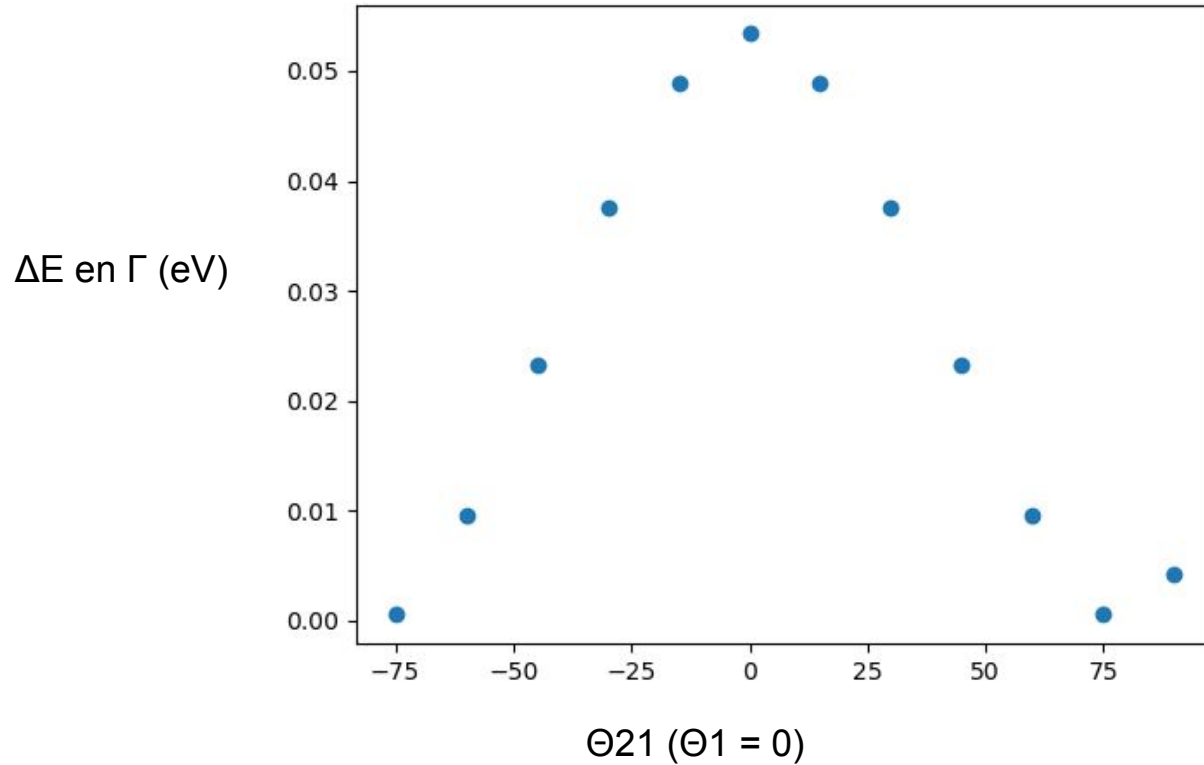




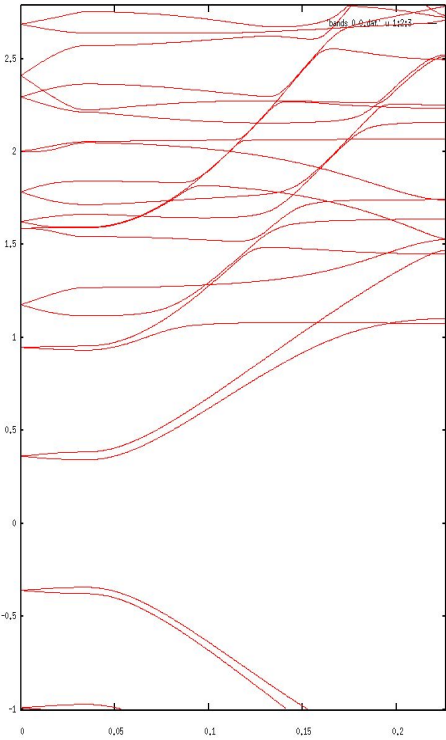
“Recta best-fit” de los mínimos (considerando un mínimo cuando lo es para todo el eje x o todo el eje y) $R^2 = 0.977$



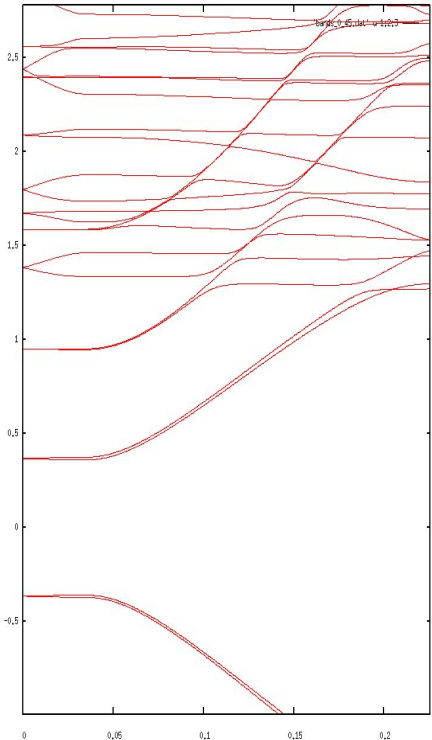
Al repetir los cálculos con el DPPP “perfecto” se obtiene el mismo mínimo (distinto a 90°):



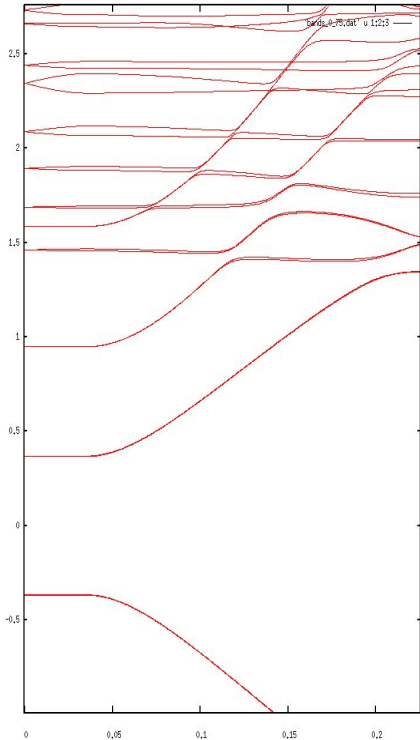
Bandas de X a Γ a Y del DPPP a distintos ángulos Θ_{21} ($\Theta_1 = 0$).



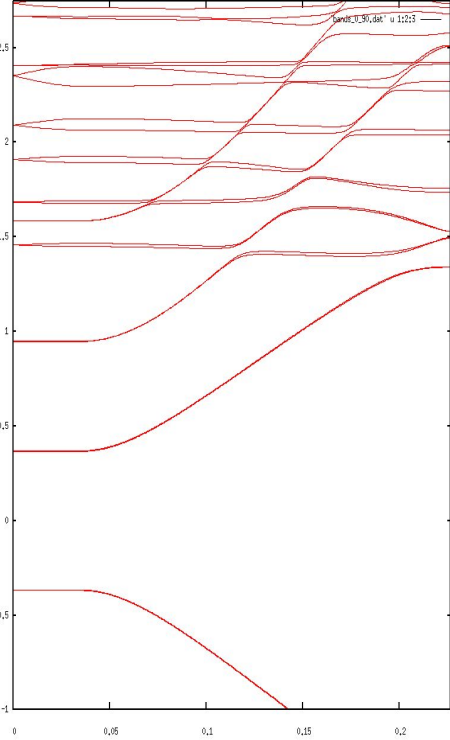
0°



45°



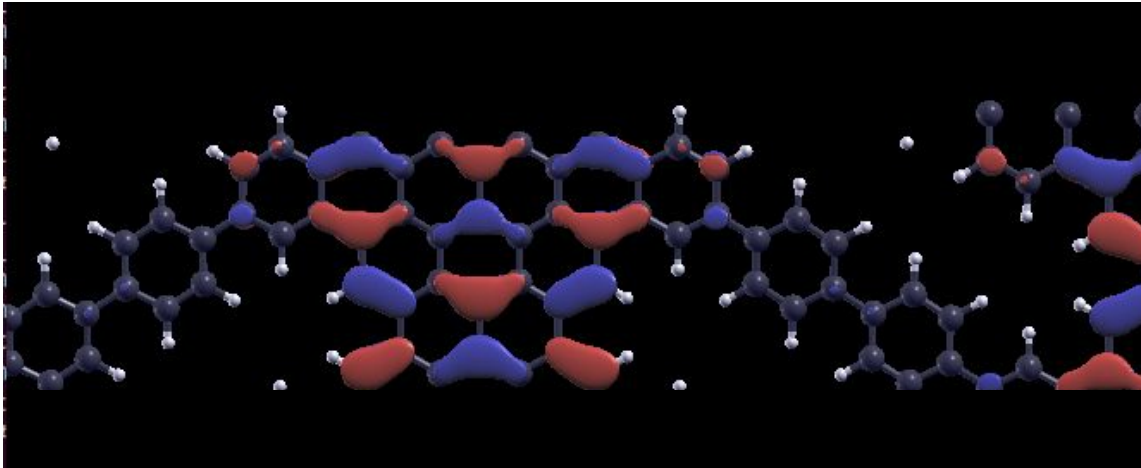
75°



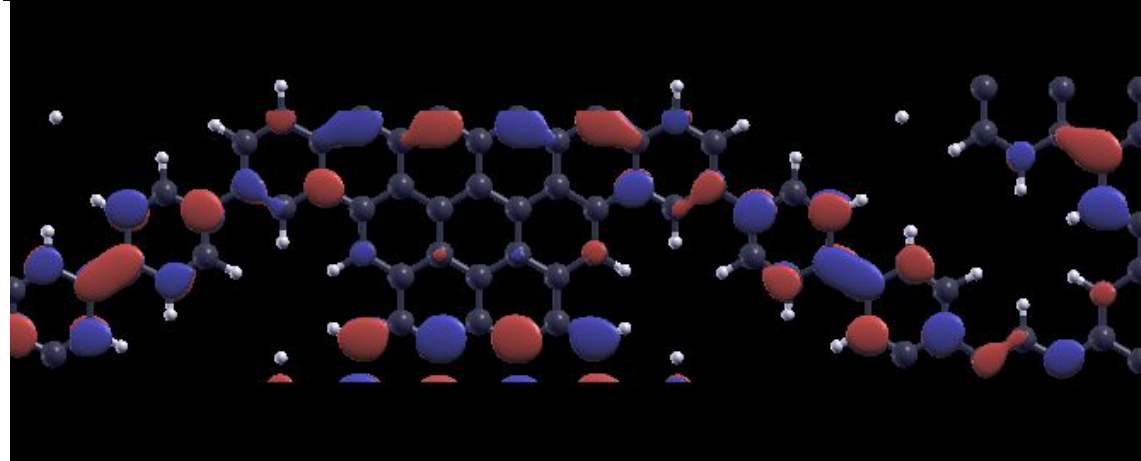
90°

F. de onda longitudinal y transversal a 0°

Valor iso
(ang^{-3})

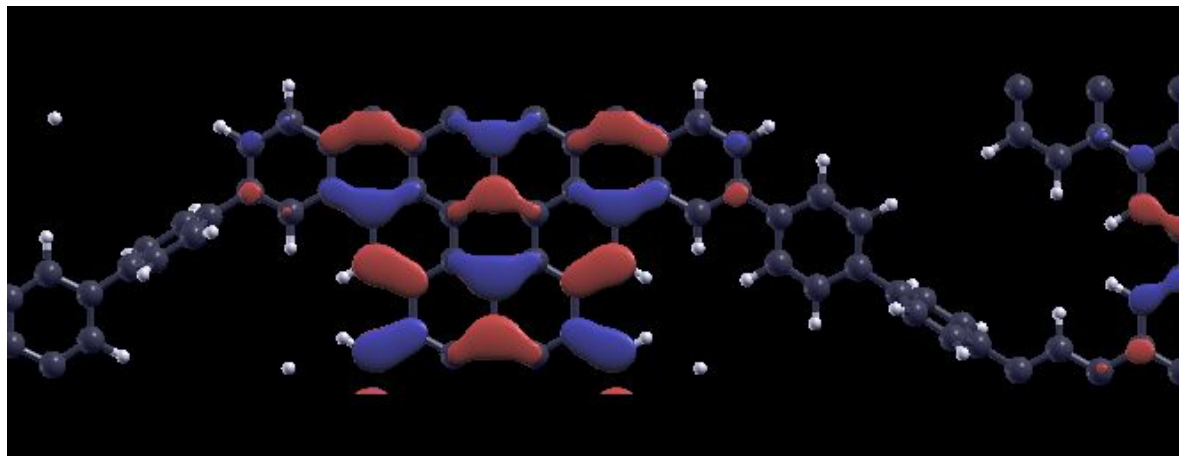


0.025

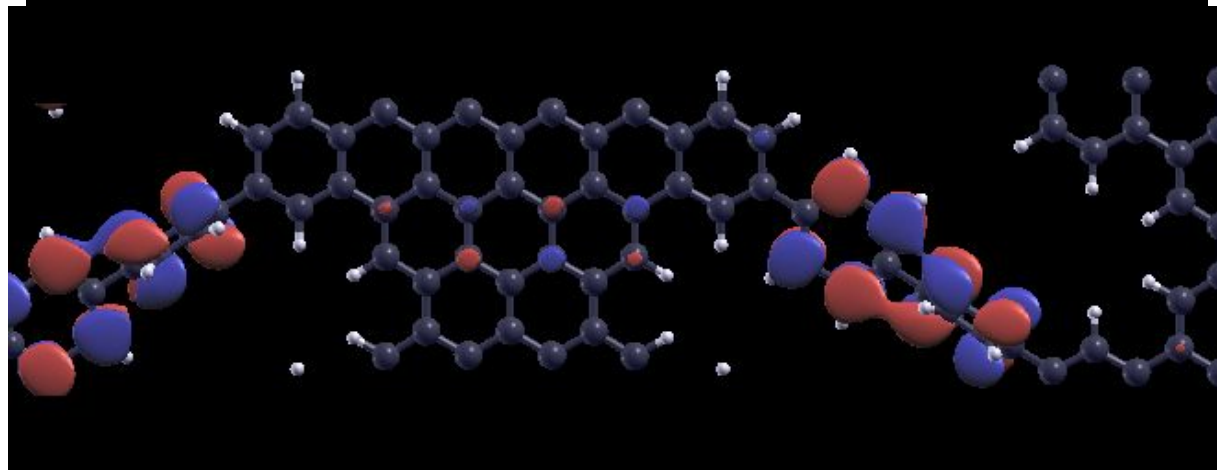


0.017

F. de onda longitudinal y transversal a 75°

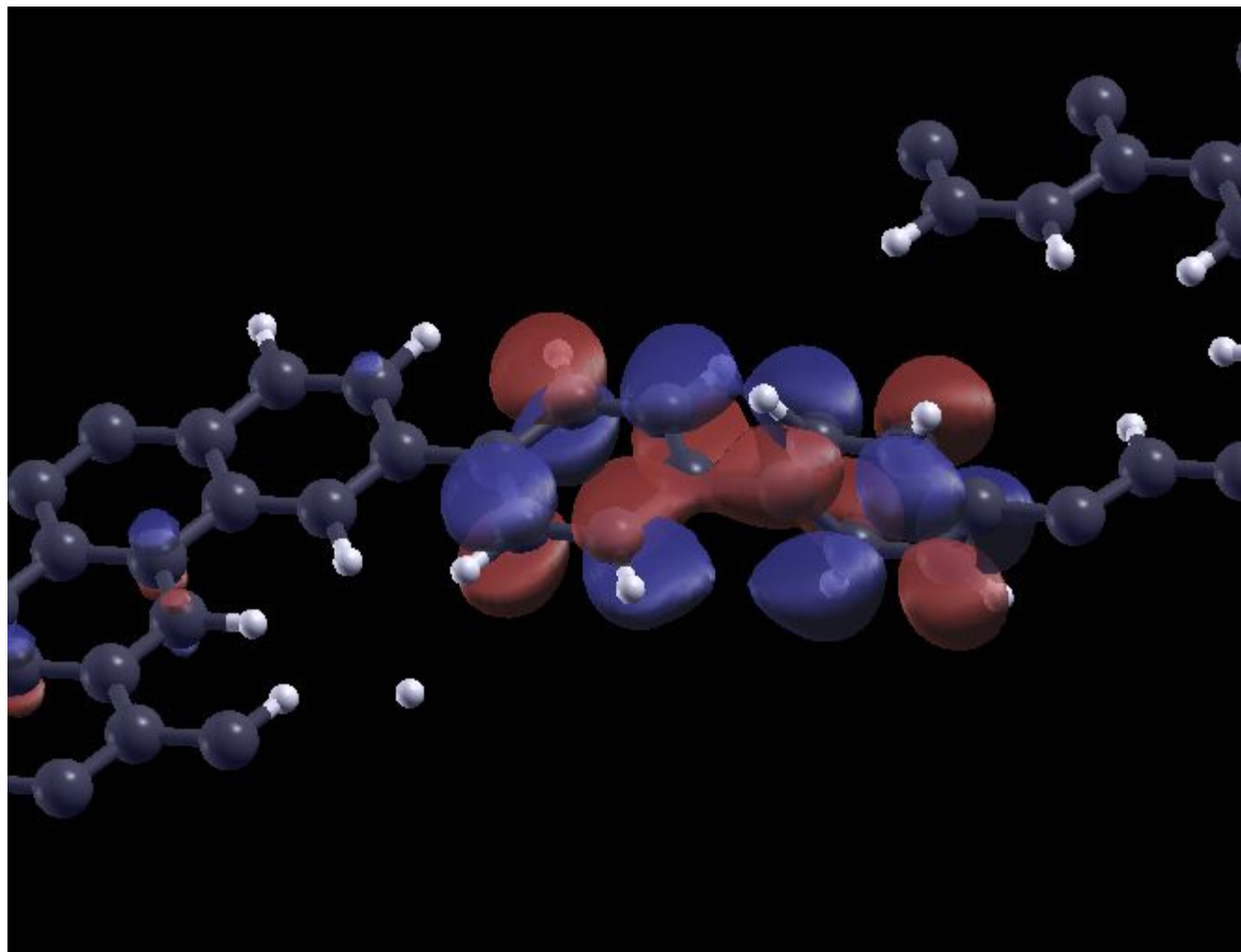


0.025



0.020

75° (zoom)



El tema de los grupos nitro...

DOS de 2-2'-dinitro biphenyl (DNBP) con PDOS de átomos N y O (arriba), $E_F = -2.178\text{eV}$

DOS de biphenyl (abajo). $E_F = -4.766\text{eV}$

Ambos relajados con SIESTA a los ángulos que se encuentran en la literatura (se mantienen parecido)

