

Estructuras: C₁₆H₁₆–boat, C₁₆H₈–up y C₁₆H₂

Te mando el reporte de cálculos para cada una de las estructuras en las que he estado trabajando con sus respectivas gráficas e ilustraciones de la misma para identificarlas.

1. Estructura C₁₆H₁₆–boat

En la (fig. 1) se muestran dos vistas de la estructura C₁₆H₁₆–boat. Para esta estructura hice lo que me pediste para la respuesta lineal. Partiendo la ecuación de la respuesta lineal

$$Im \left[\chi^{ab}(\omega) \right] = \frac{\pi e^2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{8\pi^3} \sum_{vc} r_{vc}^a(\mathbf{k}) r_{cv}^b(\mathbf{k}) \delta(\omega_{cv}(\mathbf{k}) - \omega) \quad (1)$$

la dividí para hacer dos casos de la misma, el primero conservando sólo $r_{vc}^a(\mathbf{k})$ y después conservando únicamente $r_{cv}^b(\mathbf{k})$ en el integrando. Para cada uno de los casos compilé e hice el cálculo de la respuesta usando sólo 10 Ha como energía de corte. La gráfica correspondiente para distintas componentes y distinta cantidad de puntos \mathbf{k} se muestra en la (fig. 2)

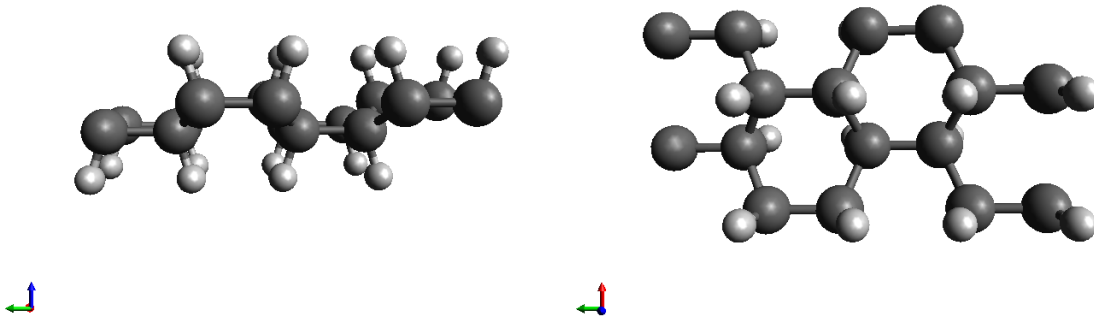
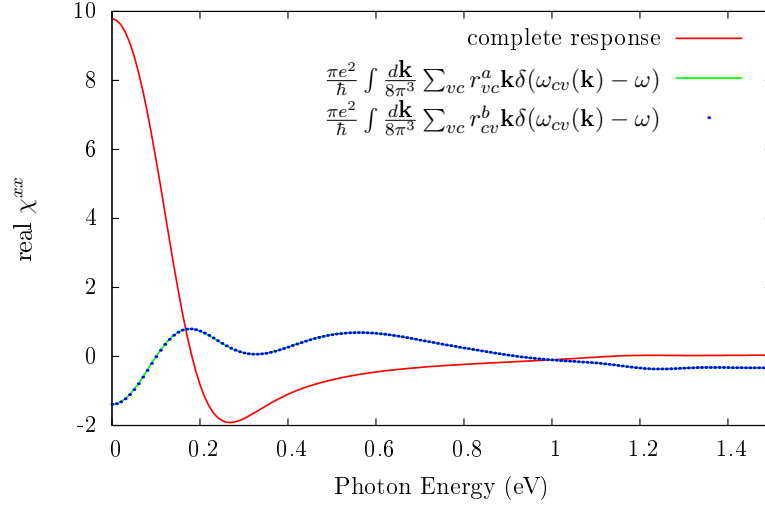


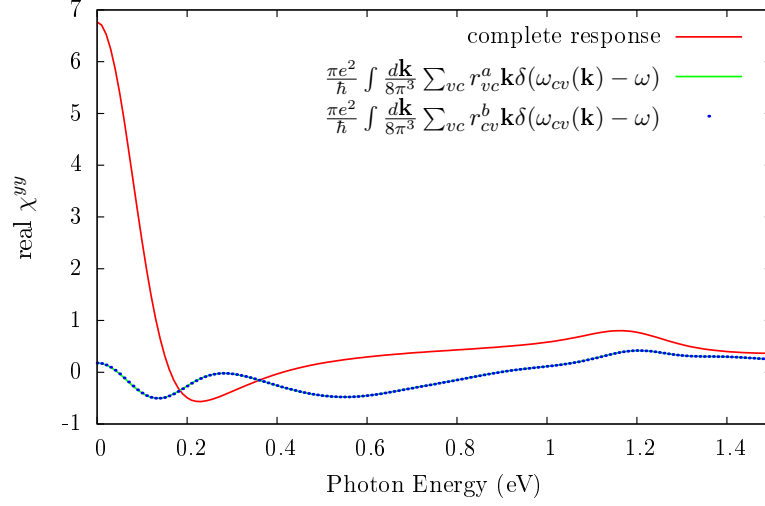
Figura 1: Estructura C₁₆H₁₆–boat

Después de esto hice gráficas para la convergencia para la respuesta lineal, manteniendo sólo la mitad del integrando.

Comparison of real χ^{xx} : original and half responses (1802 K-pts)



Comparison of real χ^{yy} : original and half responses (7202 K-pts)



Comparison of real χ^{zz} : original and half responses (14452 K-pts)

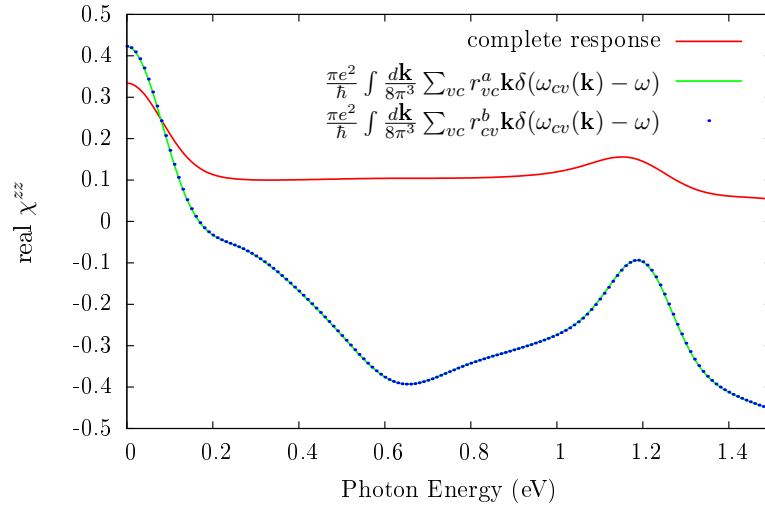
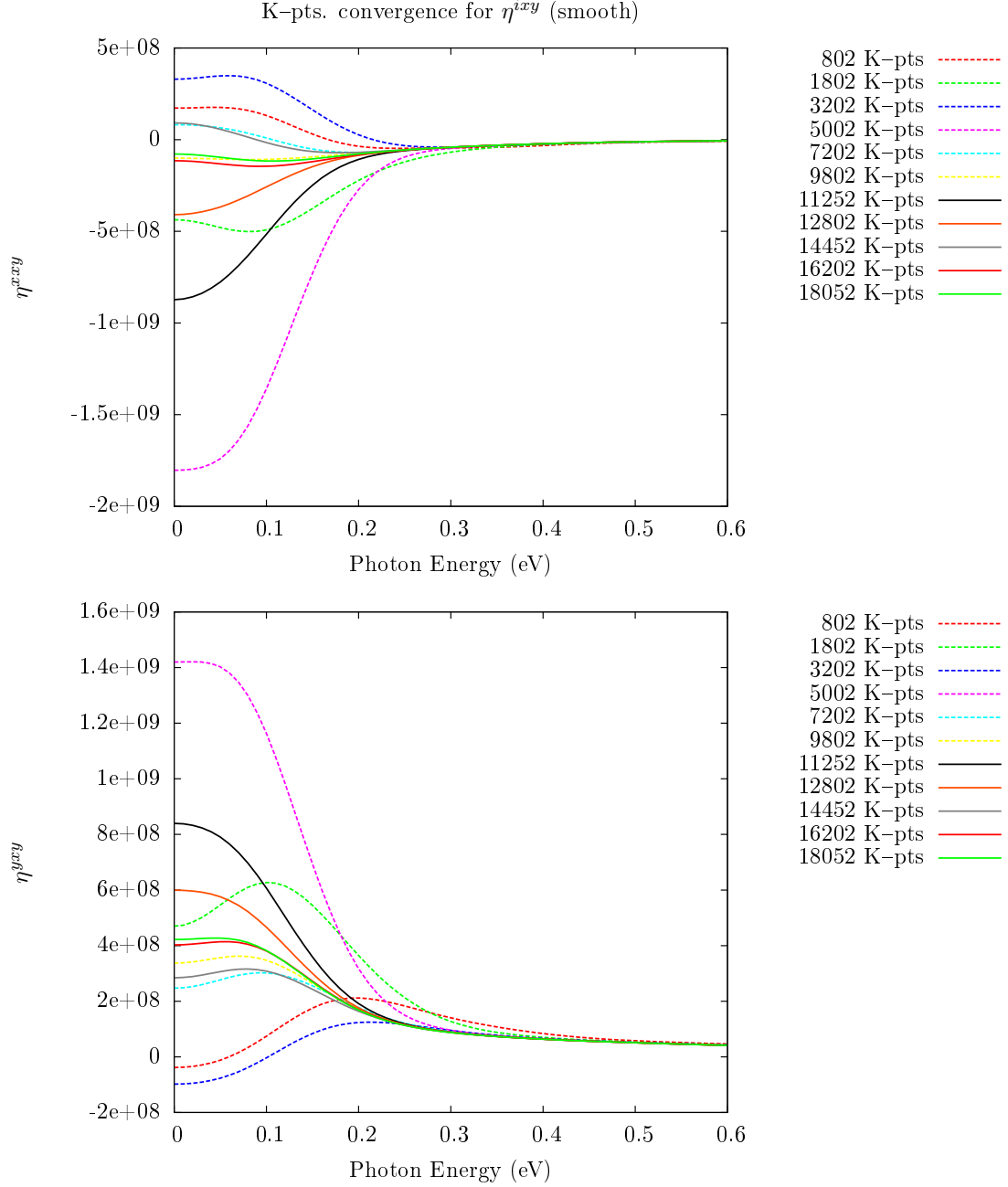


Figura 2: Respuesta lineal, completa e integrandos.

Puesto que la respuesta para cada una de las mitades es simétrica únicamente incluyo, en la (fig. 3), las respuestas manteniendo $r_{vc}^a(\mathbf{k})$ en el integrando de la (Ec. 1). Como se puede ver, el comportamiento es similar al mostrado en la respuesta lineal completa que anteriormente te había mandado.



En la (fig. 4) incluyo la respuesta a la inyección de corriente, η^{ixy} , para distintos puntos \mathbf{k} . Al igual que como ha sucedido con otras respuestas para esta estructura, no hay convergencia.

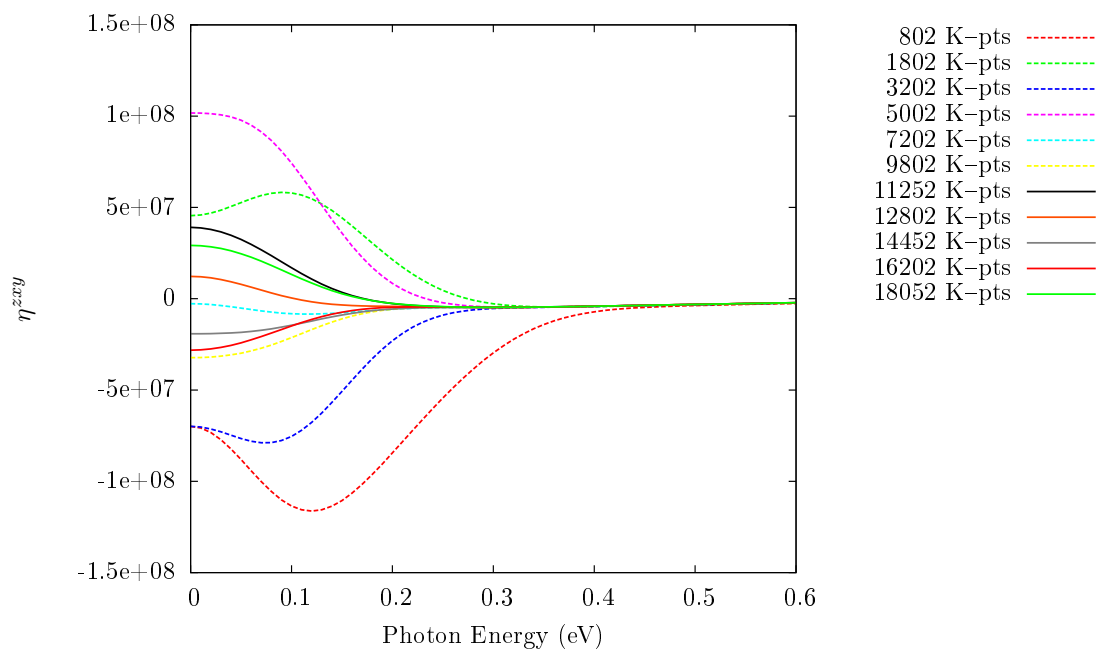


Figura 4: inyección de corriente, η^{xy} , para distintos puntos \mathbf{k} .

Como también ya te mencioné, una vez que acabe con lo que estoy corriendo, intentaré la convergencia utilizando la sintaxis que me mandaste para una red de puntos \mathbf{k} desplazada.

2. Estructura C_{16}H_8 -up

En la (fig. 5) se muestra la estructura C_{16}H_8 -up. Esta es una de las dos estructuras trabajadas en la maestría. Como te mencioné en el correo, los cálculos anteriores son incorrectos.

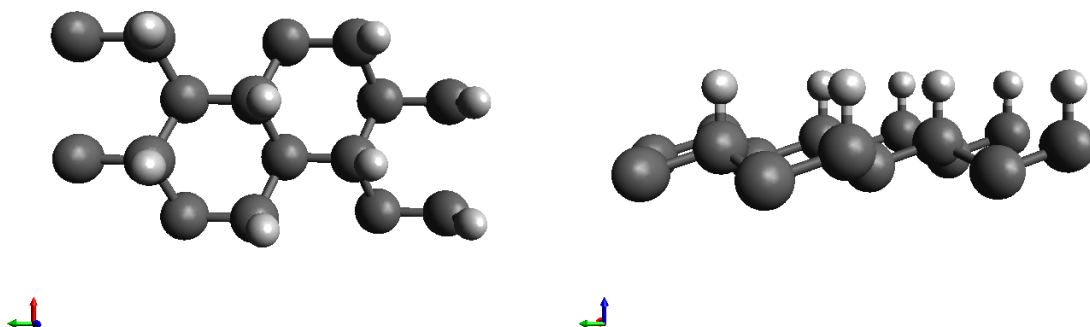


Figura 5: estructura C_{16}H_8 -up

Para hacer la convergencia en puntos \mathbf{k} utilicé como energía de corte 10 Ha. Como se puede ver en las (figs. 6–8) hay convergencia en todas las respuestas para un valor de 6052 puntos \mathbf{k} (salvo tu mejor observación).

En seguida comenzaré a hacer la convergencia para la energía de corte.

3. Estructura C_{16}H_2

Con esta estructura no se había trabajado. Comencé corriendo nuevamente con una energía de corte de 10 Ha y 60 bandas como en los casos anteriores. Sucedió que había 66 bandas de valencia así que tuve que revisar la convergencia para bandas de valencia.

Para ello utilicé 122 bandas y sólo 52 puntos \mathbf{k} . Como se puede ver en las (figs. 9–11). La convergencia para las bandas de valencia se da de inmediato.

Actualmente estoy corriendo convergencia para puntos \mathbf{k} para esta estructura. Estoy usando 77 bandas para que el cálculo sea lo más ágil posible. En cuanto tenga los resultados de la convergencia de puntos para esta estructura te lo envío.

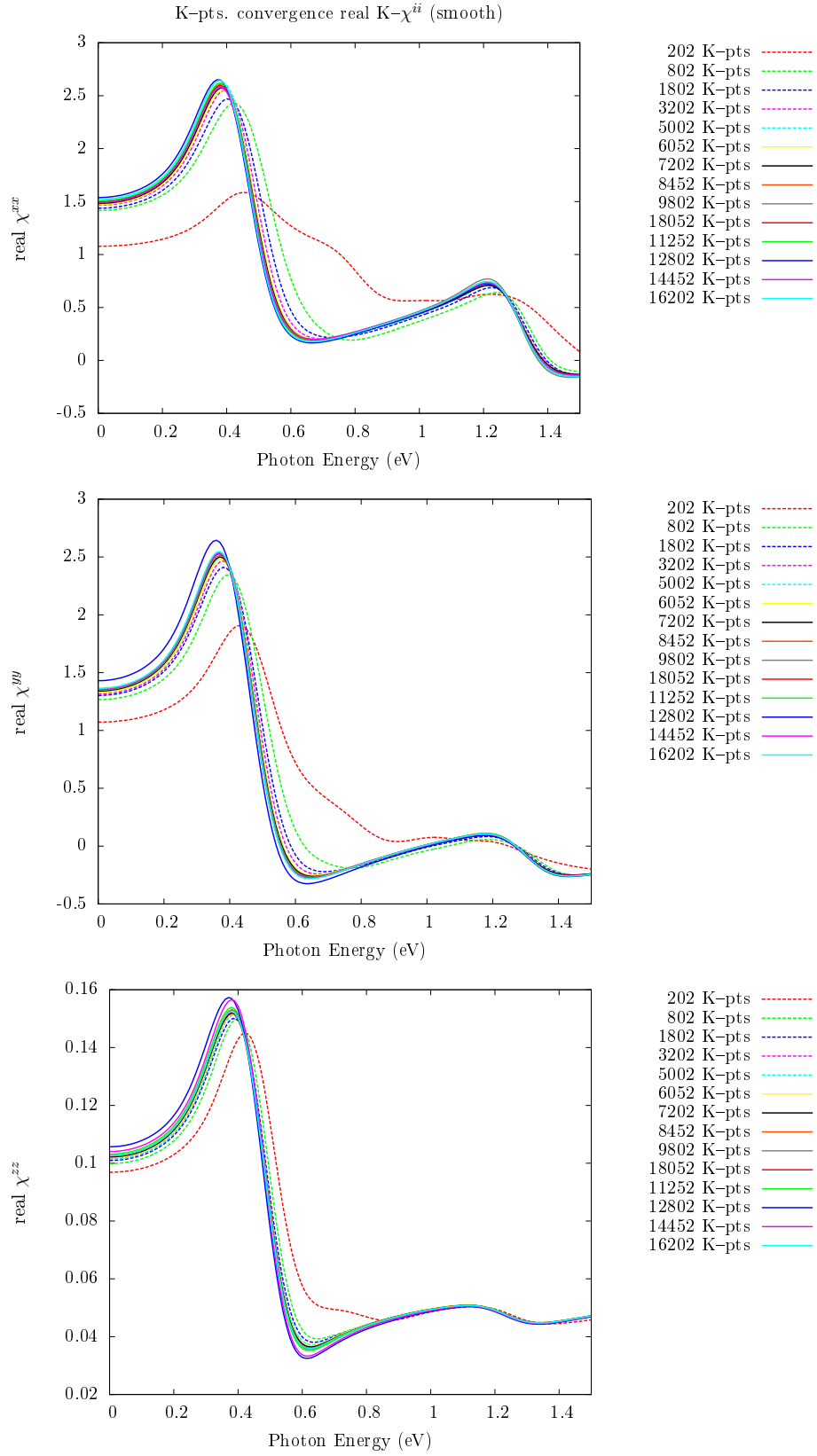


Figura 6: Convergencia de puntos \mathbf{k} para χ^{ii} .

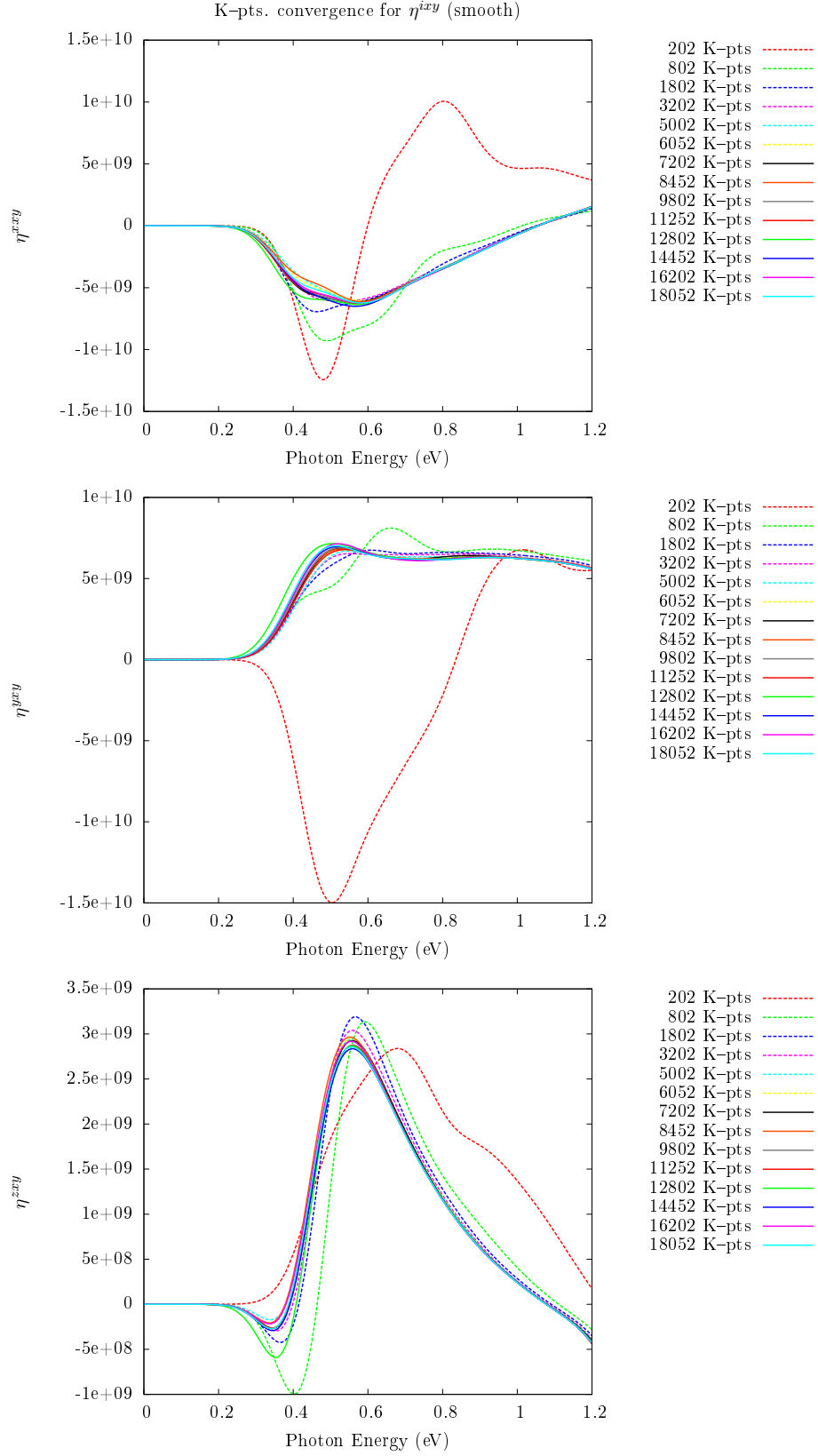


Figura 7: Convergencia de puntos \mathbf{k} para η^{ixy} .

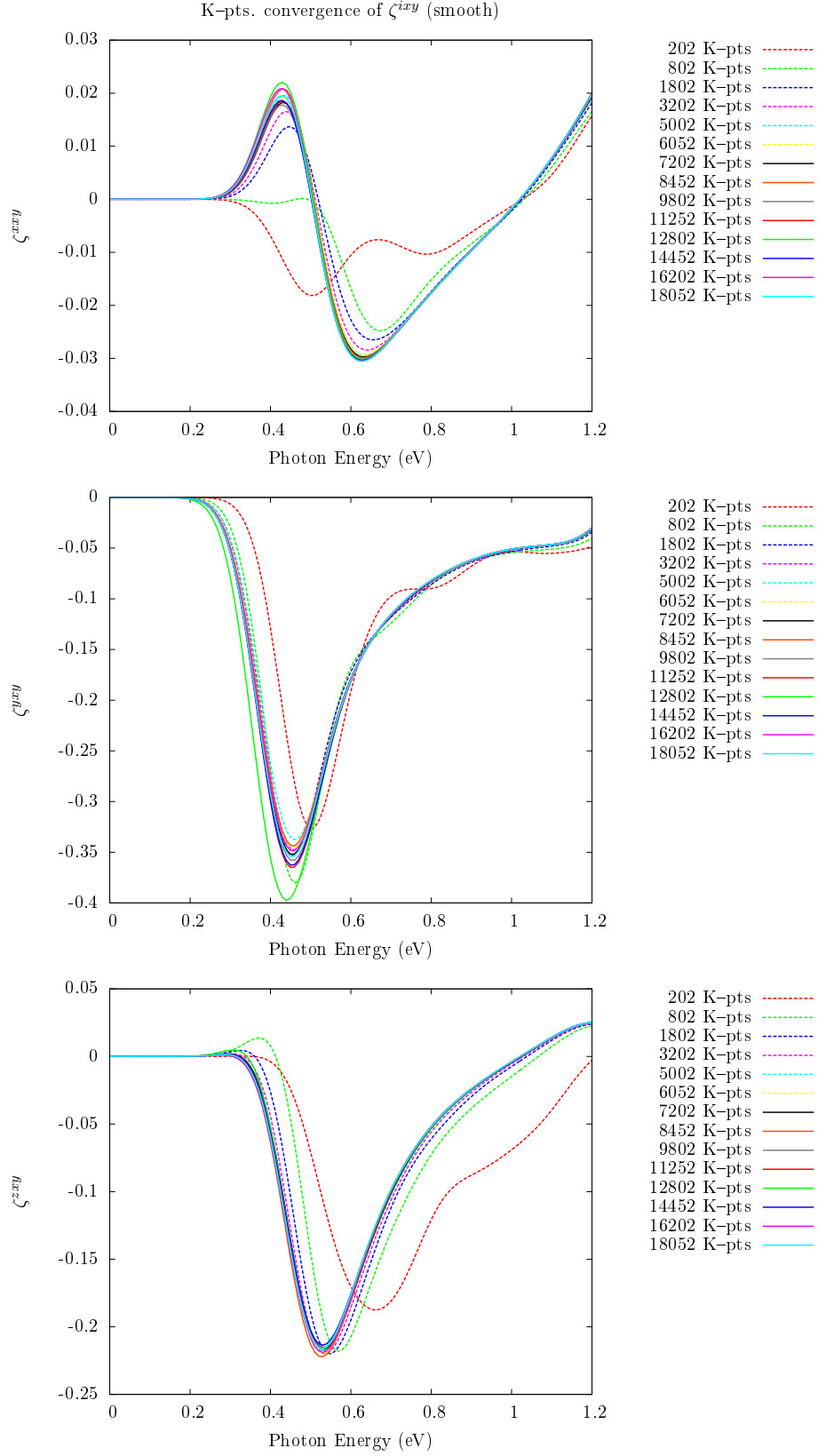


Figura 8: Convergencia de puntos \mathbf{k} para ζ^{ixy} .

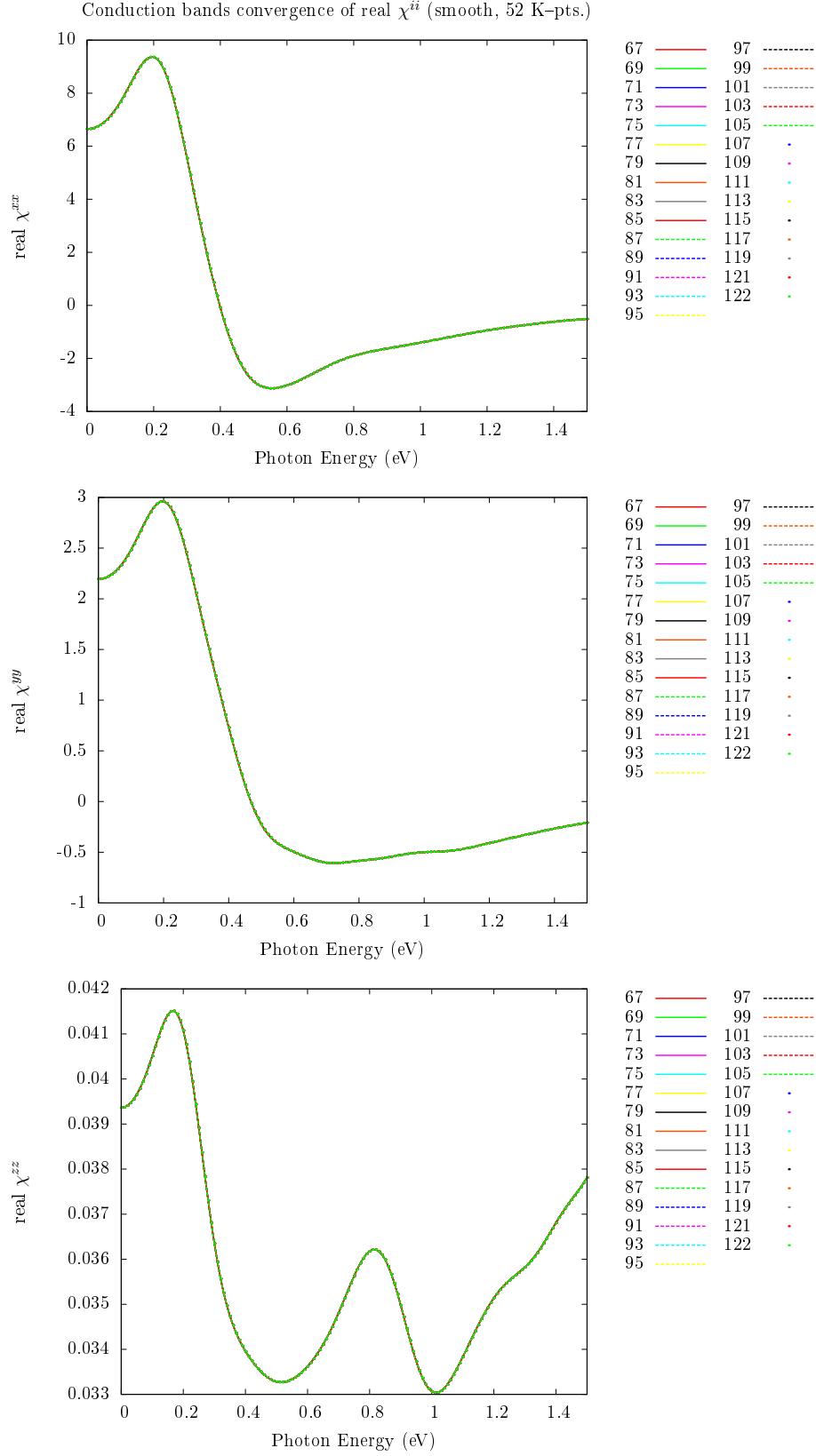


Figura 9: Convergencia en bandas de conducción para χ^{ii} .

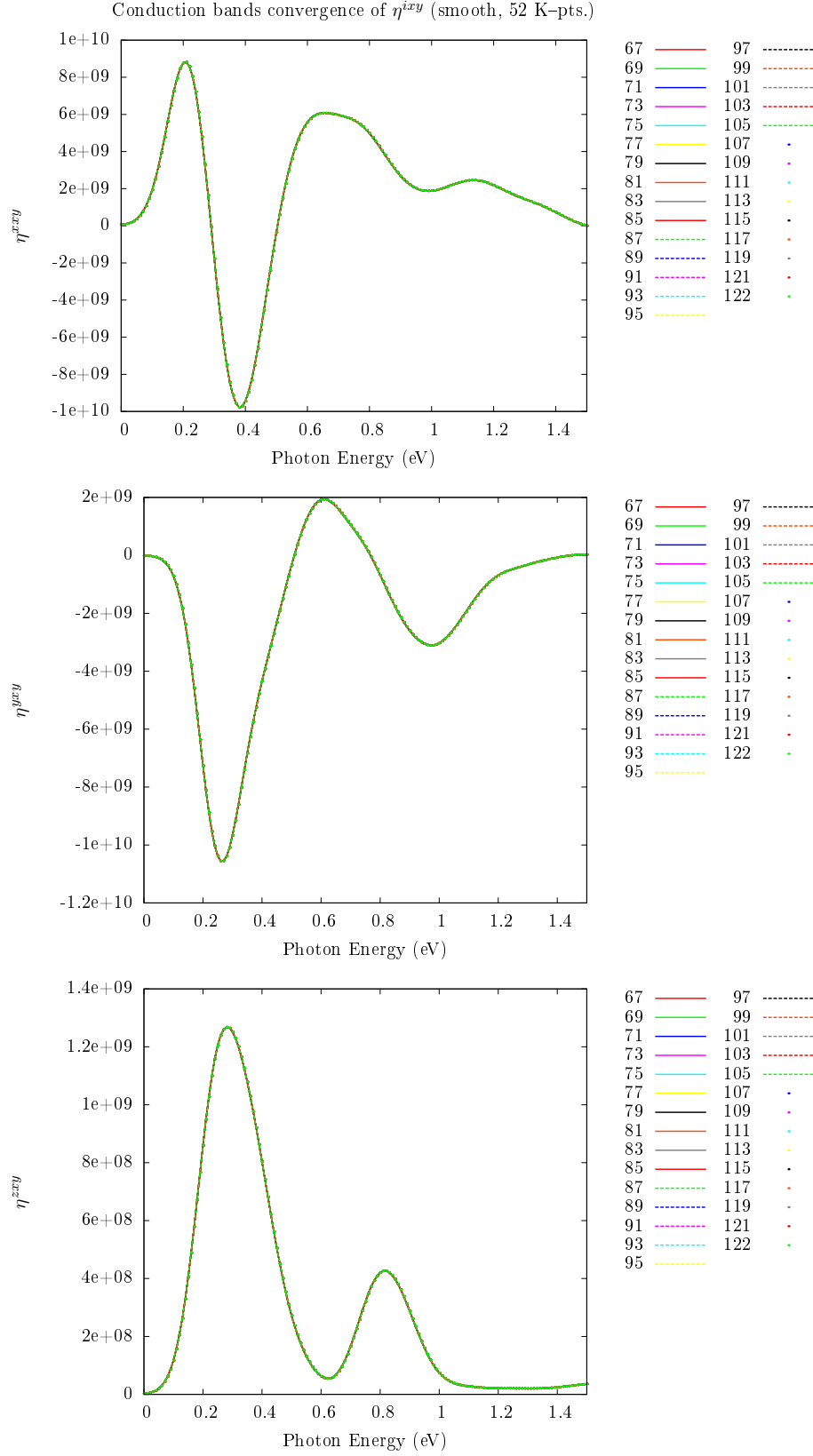


Figura 10: Convergencia en bandas de conducción para η^{ixy} .

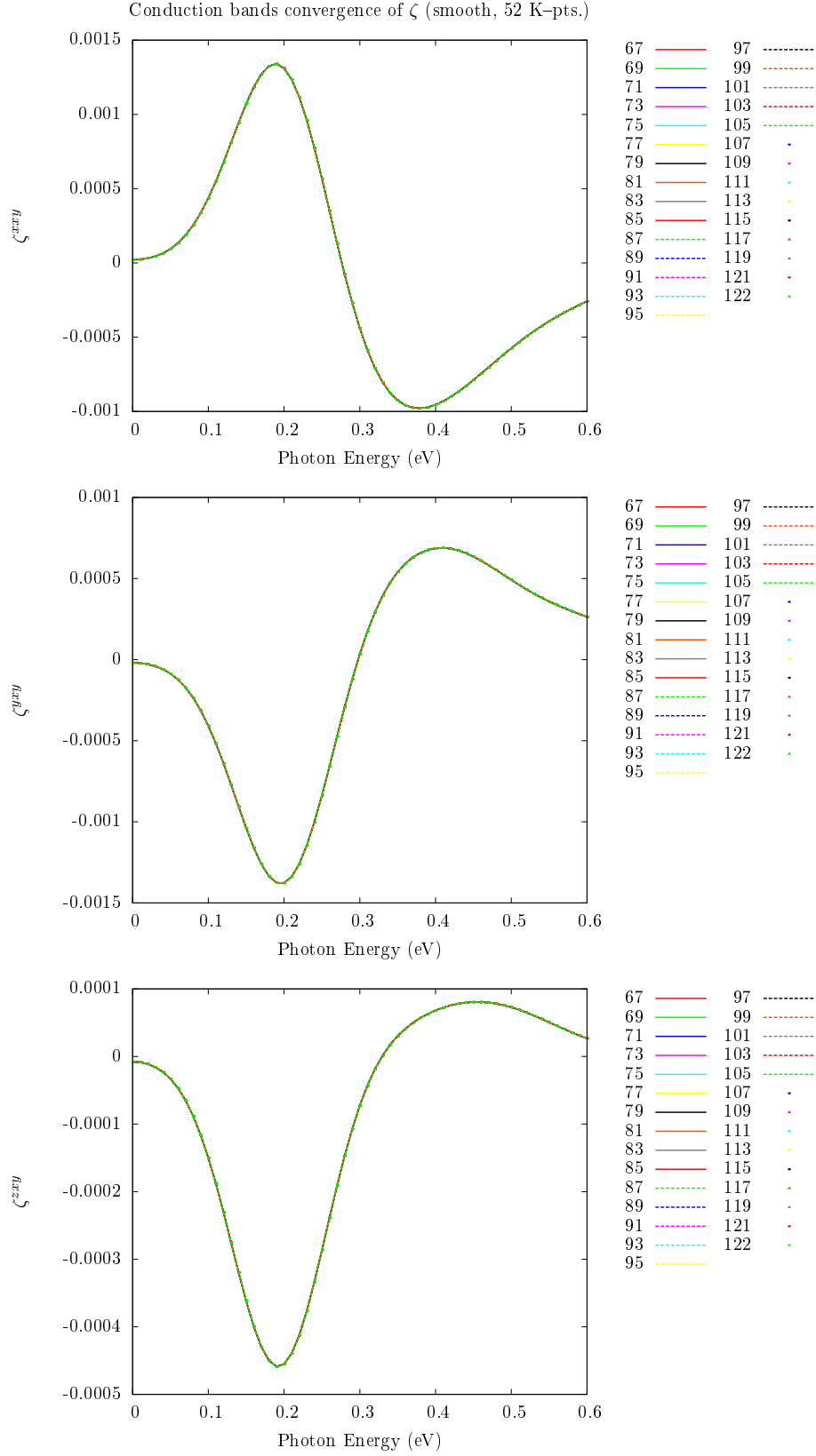


Figura 11: Convergencia en bandas de conducción para ζ^{ixy} .