

# Todas las estructuras

El total de estructuras que tenemos son cinco:

- $C_{16}H_2$ -row-close (12.5 % de hidrogenación)
- $C_{16}H_8$ -alt (50 % de hidrogenación)
- $C_{16}H_8$ -up (50 % de hidrogenación)
- $C_{16}H_{16}$ -boat (100 % de hidrogenación)
- $C_{16}H_{16}$ -chair (100 % de hidrogenación).

Por lo que he podido ver la convergencia para las respuestas que estamos calculando se alcanza utilizando pocos puntos  $\mathbf{k}$  exceptuando para las componentes de la respuesta del tensor de inyección de spin  $\zeta^{abc}$ .

## 1. Estructura $C_{16}H_2$ -row-close

En la (Fig. 1) se presentan dos vistas de esta estructura. En el reporte anterior te mandé la convergencia para bandas de conducción de esta estructura. Convergen de inmediato para todas las respuestas. De esta manera, y para ahorrar tiempo de cálculos emencé a correr únicamente con 7 bandas de conducción ya que tiene 66 bandas de valencia. La (Fig. 2) muestra un rango reducido de  $\text{Im}[\chi^{xx}]$  (sin suavizado) para una energía de 10 Ha y sólo 53 puntos  $\mathbf{k}$ . De allí se puede ver que el gap LDA es aproximadamente 0.17 eV.

En estos días estuve haciendo convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para esta estructura. La respuesta lineal (Fig. 3) y la inyección de corriente (Fig. 5) convergen por pocos puntos. No sucede lo mismo para el tensor de polarización de spin (Fig. 5).

Ahora estoy corriendo par esta estructura incrementando la cantidad de puntos para analizar si se alcanza la convergencia. Debido a que la celda unitaria de esta estructura es de mayor tamaño, el tiempo de cálculo respecto a los otros casos es mayor. Encima de ello hay fallas en 3 de 5 de los nodos de procesamiento que estaba utilizando (hexa[26,29,31]) además de otros dos del cluster (hexa[16,30]). LUFAC se está haciendo cargo de esto.

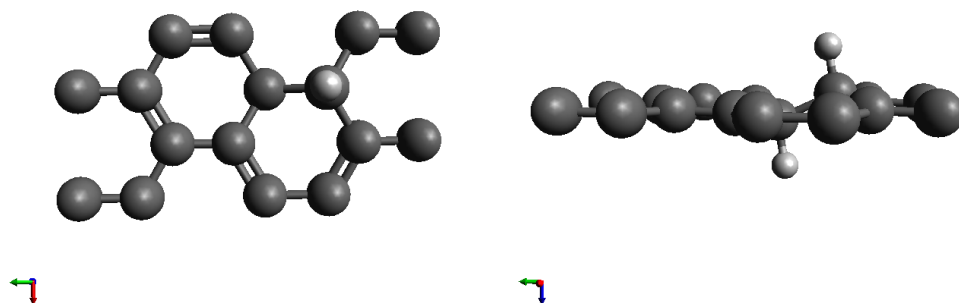


Figura 1: Estructura  $C_{16}H_2$ -row-close desde dos ángulos de vista.

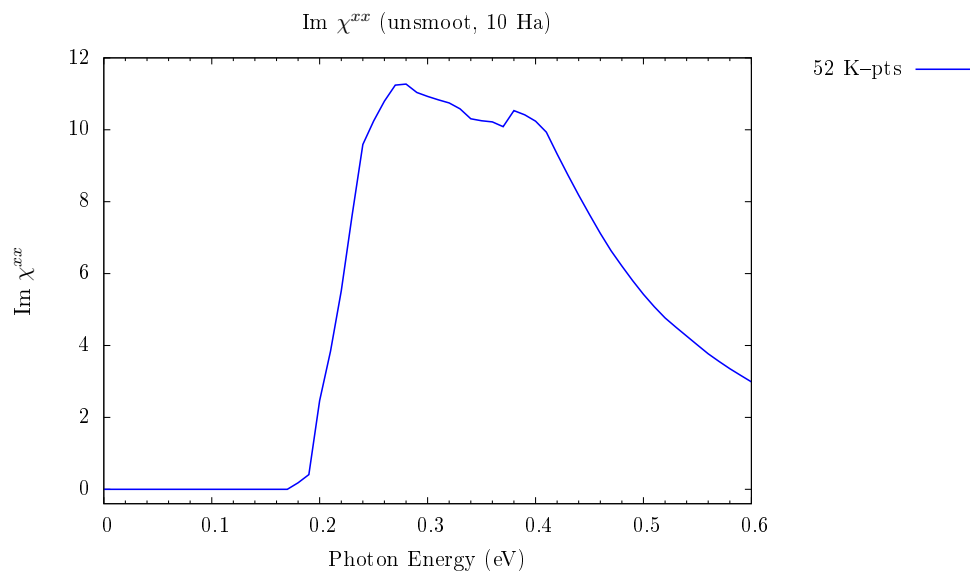


Figura 2: Análisis del gap para la estructura  $C_{16}H_2$ -row-close.

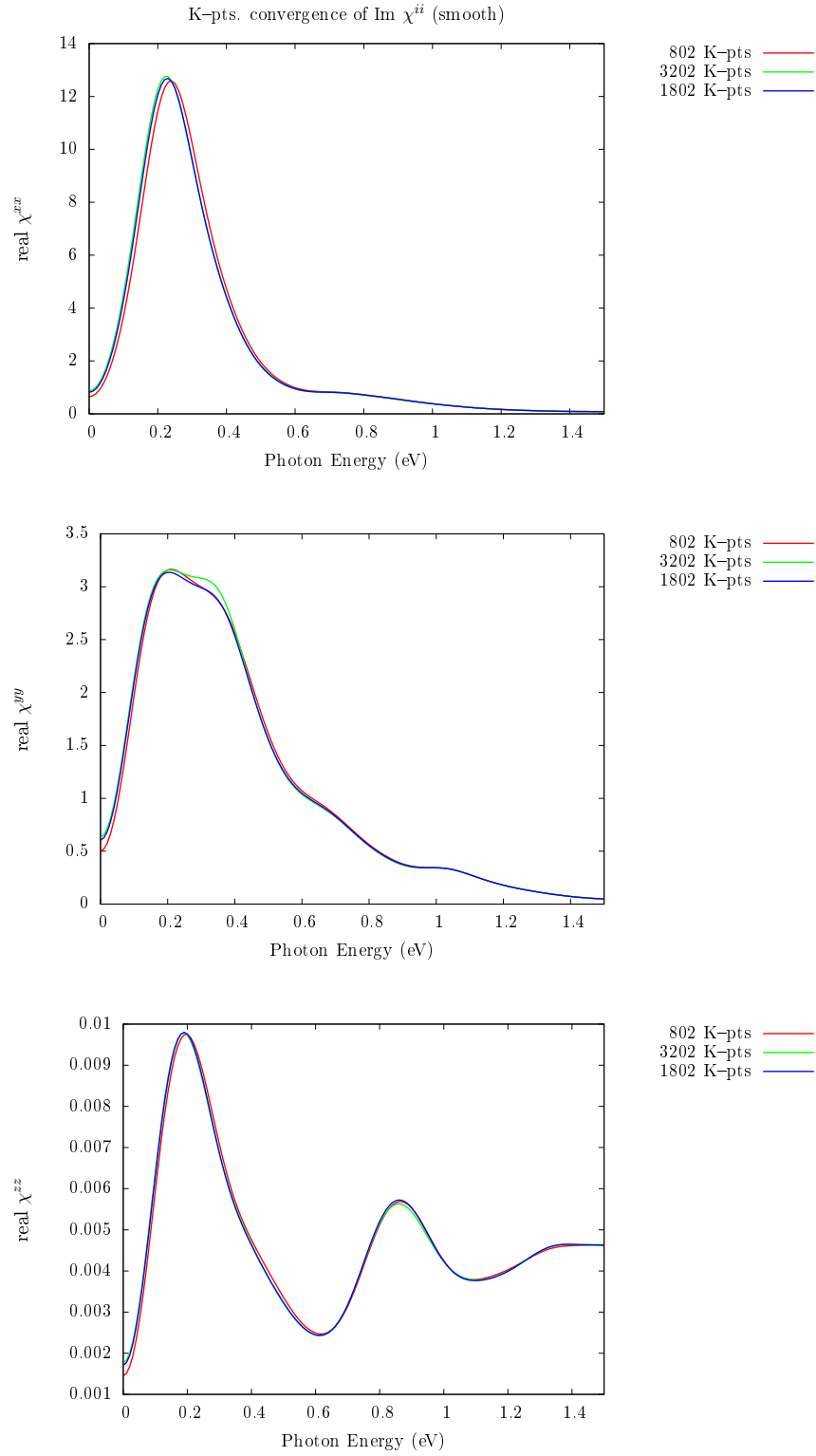


Figura 3: Convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para la respuesta lineal imaginaria de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_{16}$ -boat.

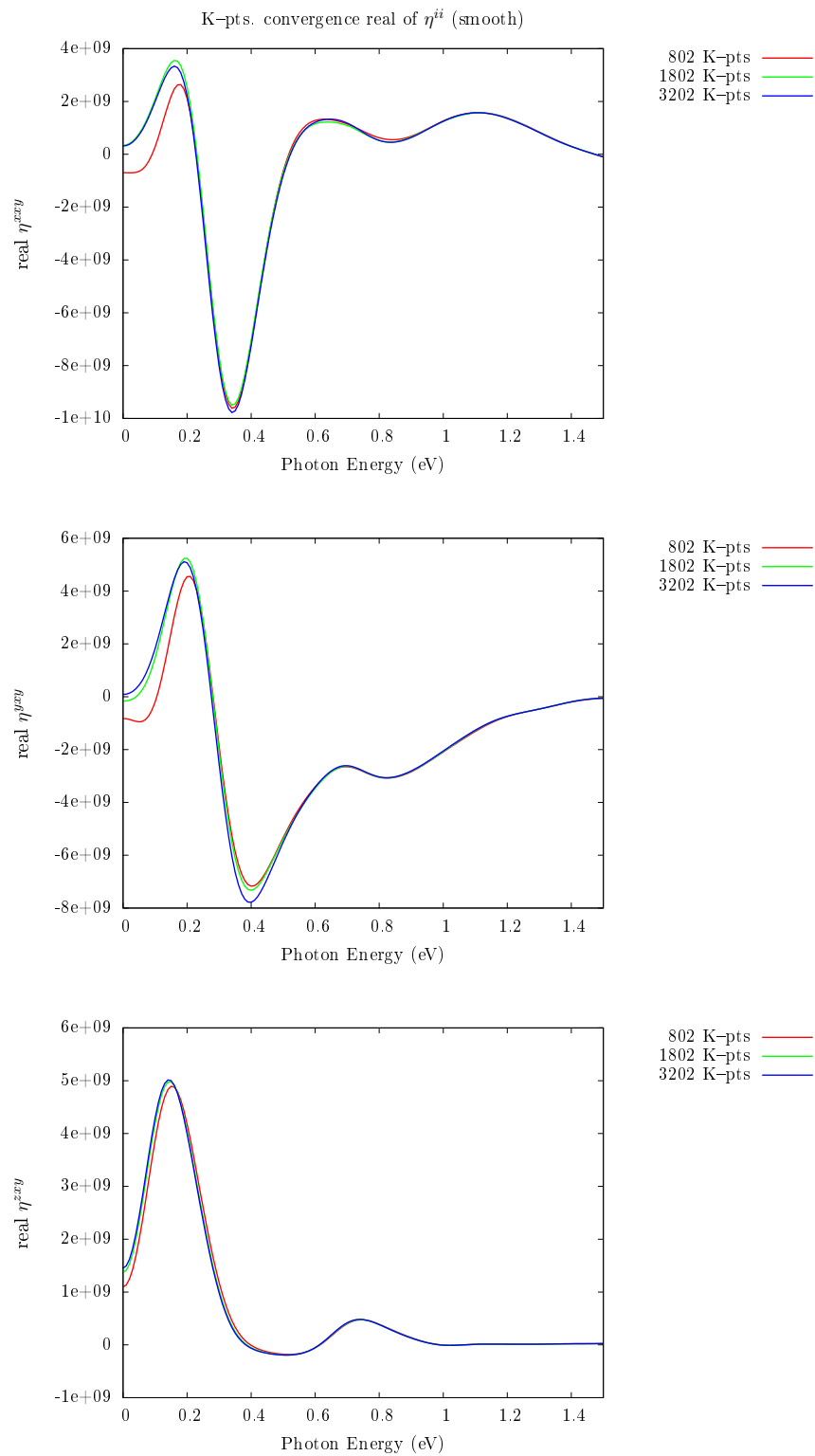


Figura 4: Convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para la inyección de corriente de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_{16}$ -boat.

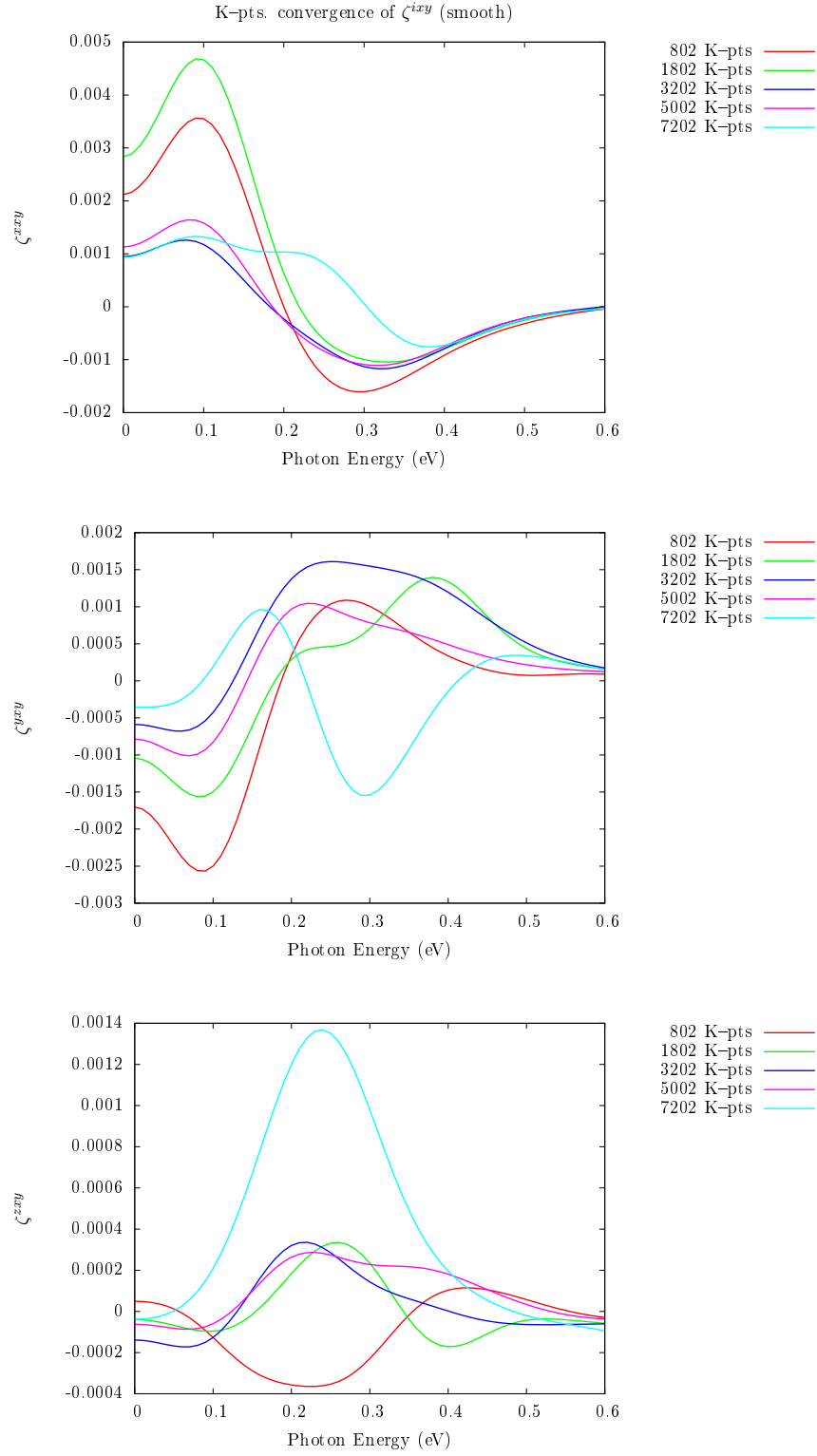


Figura 5: Convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para la inyección de spin de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_{16}$ -boat.

## 2. Estructura $C_{16}H_8$ -alt

En la (Fig. 6) se muestran dos ángulos de vista para esta estructura. Esta es con la primer estructura con la que comencé a trabajar. Para esta estructura se tienen resultados tanto de convergencia para puntos  $\mathbf{k}$  (14452 puntos) como para energía de corte (65 Ha). A continuación se muestran los resultados finales par la respuesta lineal imaginaria  $\text{Im}[\chi]$  (Fig. 7), la inyección de corriente  $\eta$  (Fig. 8) y la polarización de spin  $\zeta$  (Fig. 9)

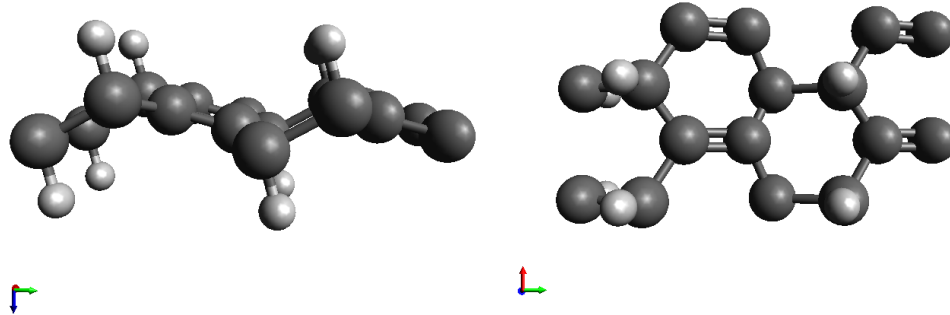


Figura 6: Estructura  $C_{16}H_8$ -alt desde dos ángulos de vista.

De la figura (Fig. 7) se puede ver que el gap LDA es aproximadamente 0.7 eV.

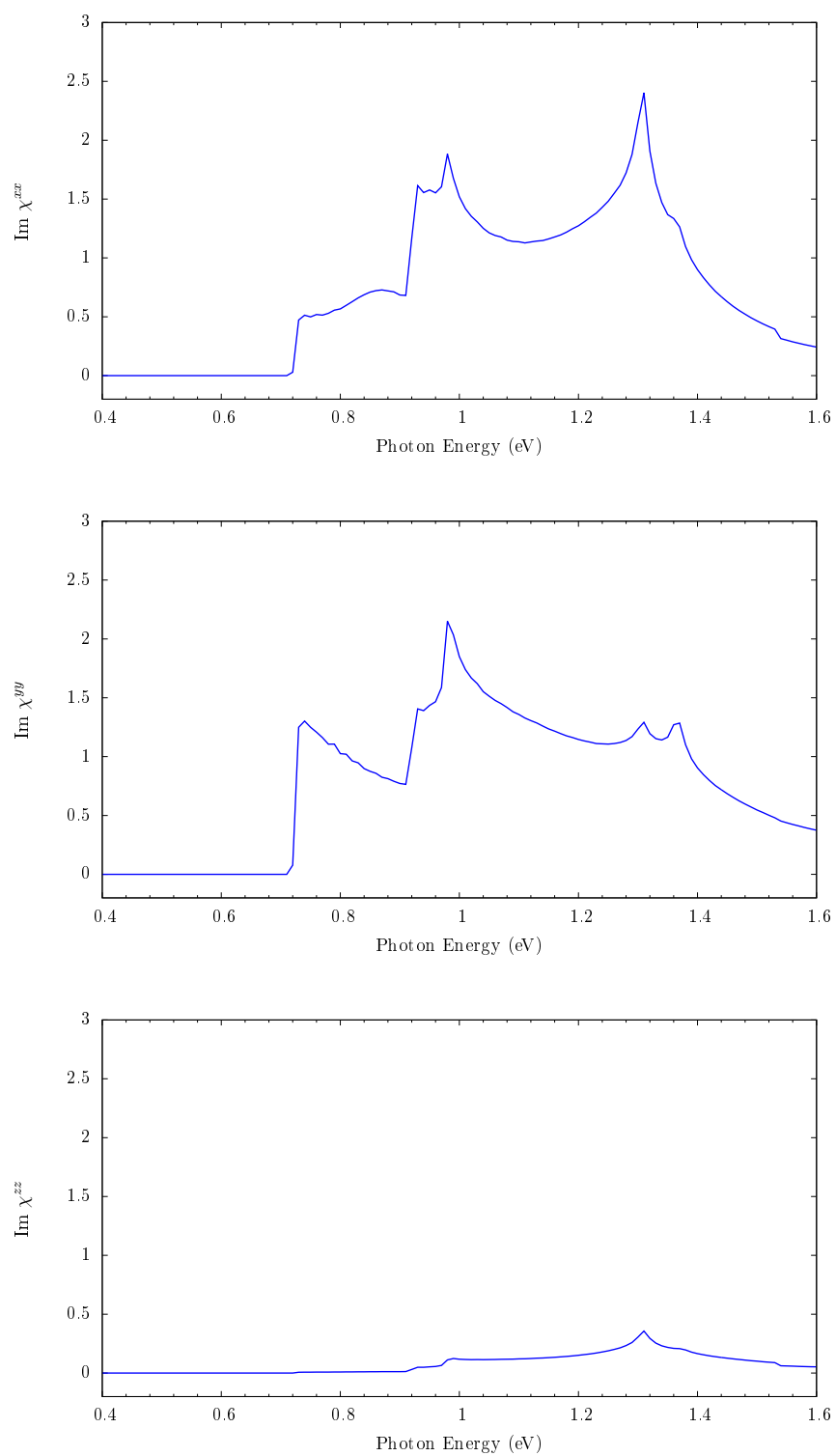


Figura 7: Respuesta lineal imaginaria de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_8\text{-alt}$ .

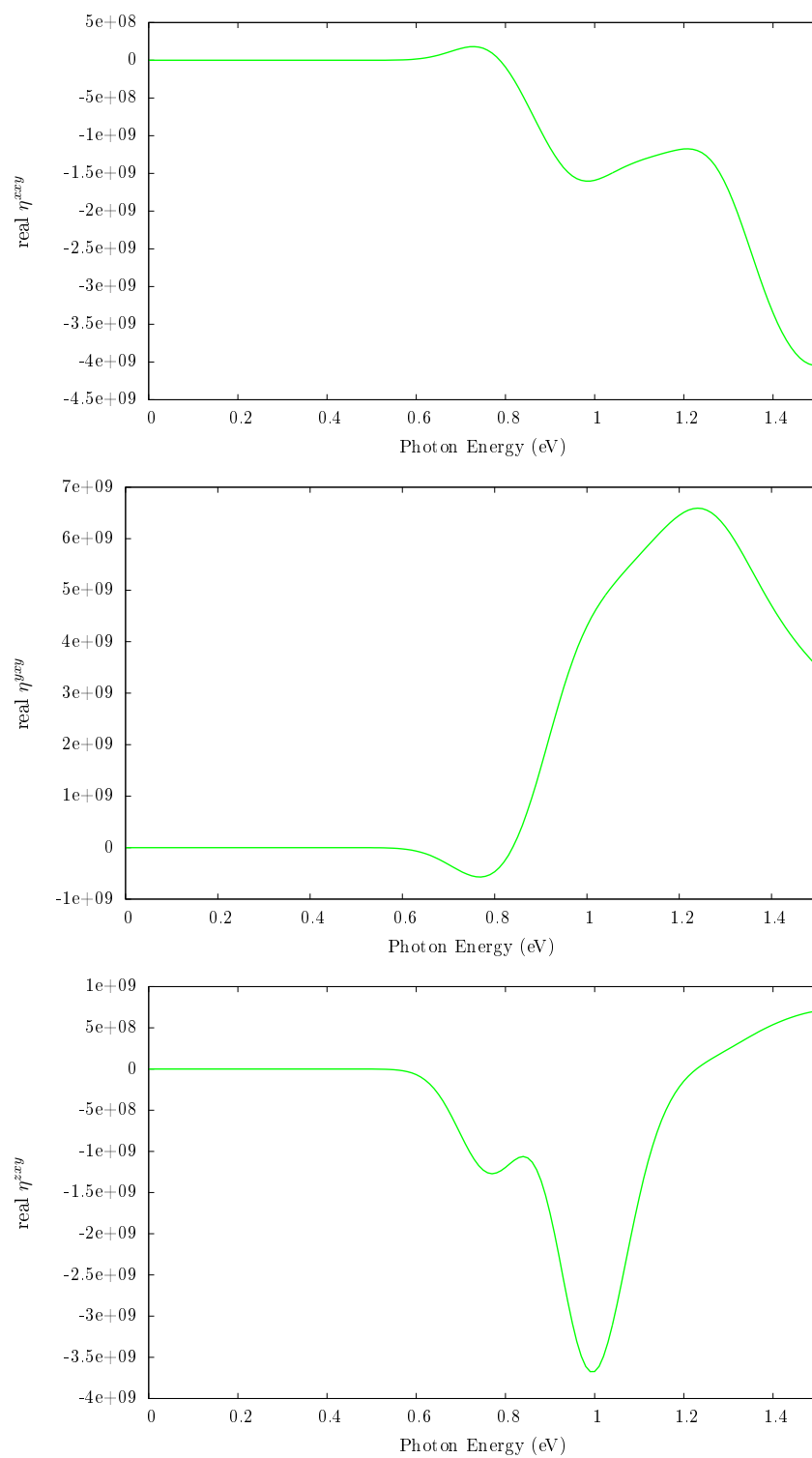


Figura 8: Inyección de corriente de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_8\text{-alt}$ .



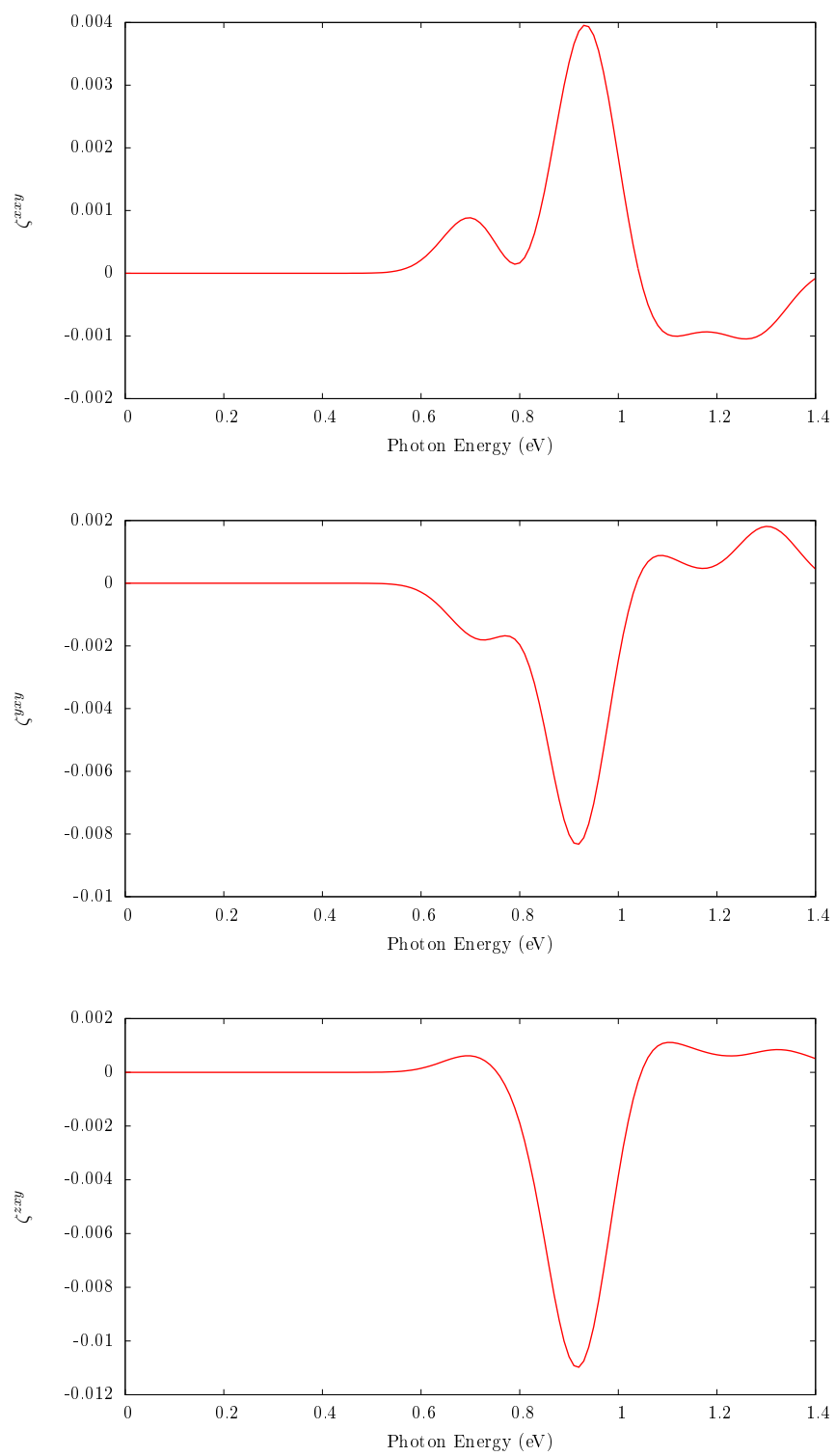


Figura 9: Inyección de spin de la estructura C<sub>16</sub>H<sub>8</sub>-alt.

### 3. Estructura $C_{16}H_8$ -up

En la (Fig. 10) se muestran dos ángulos de vista para esta estructura. Esta es con la primer estructura con la que comencé a trabajar. Para esta estructura se tienen resultados de convergencia para puntos  $\mathbf{k}$  para todas las respuestas (Figs. 11–13). Como se puede observar, para esta estructura la convergencia se alcanzó con 6052 puntos  $\mathbf{k}$ , una cantidad significativamente menor a la necesaria para las estructuras de las secciones 1 (Fig. 5), 2 y 4.

De la (Fig. 11) se puede ver que el gap LDA para esta estructura es 0.38 eV.

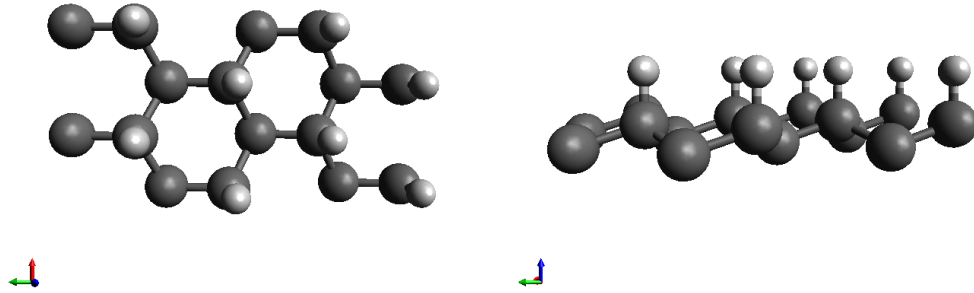


Figura 10: Estructura  $C_{16}H_8$ -up desde dos ángulos de vista.

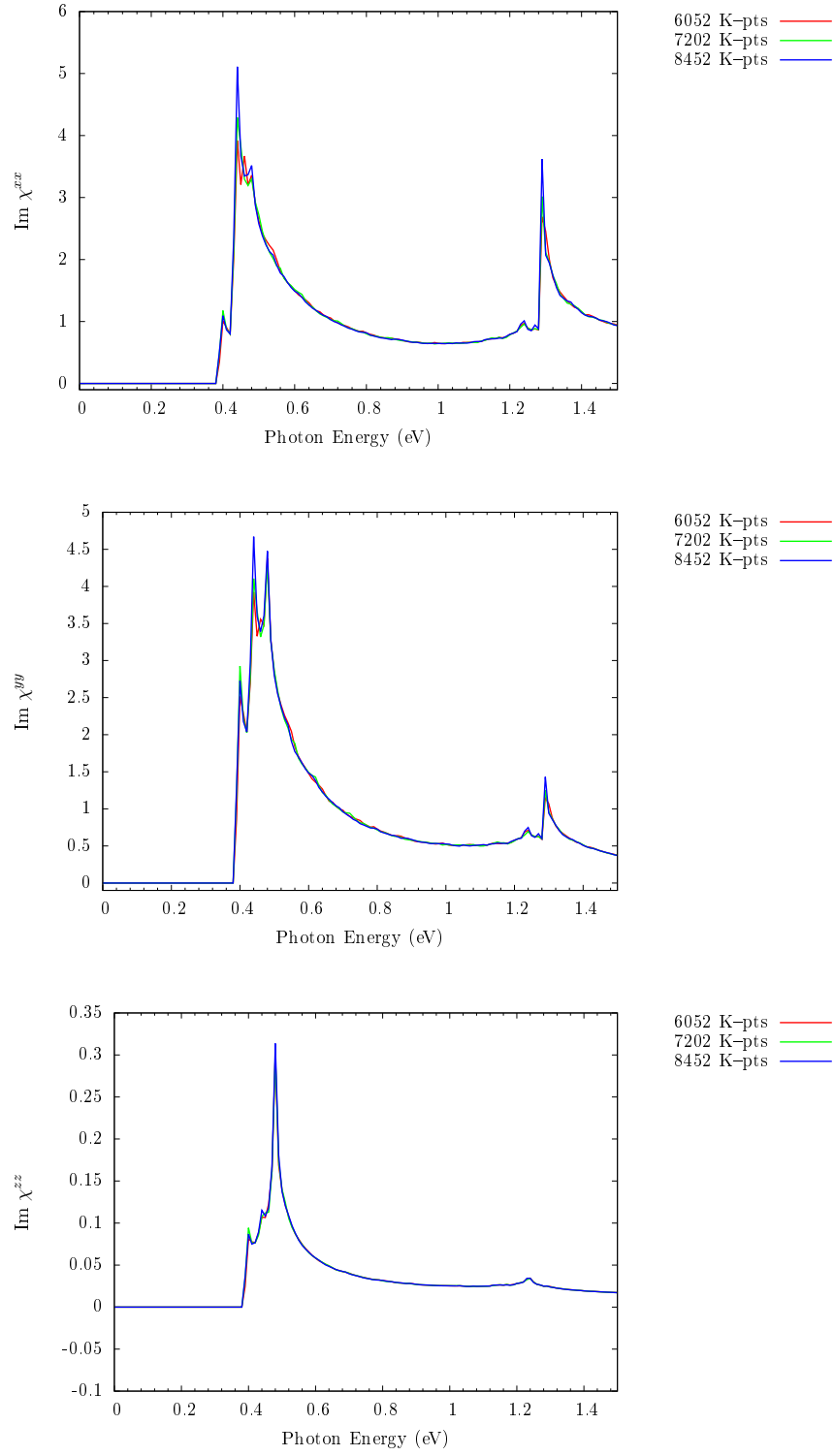


Figura 11: Convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para la respuesta lineal imaginaria de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_8\text{-up}$  (sin suavizado).

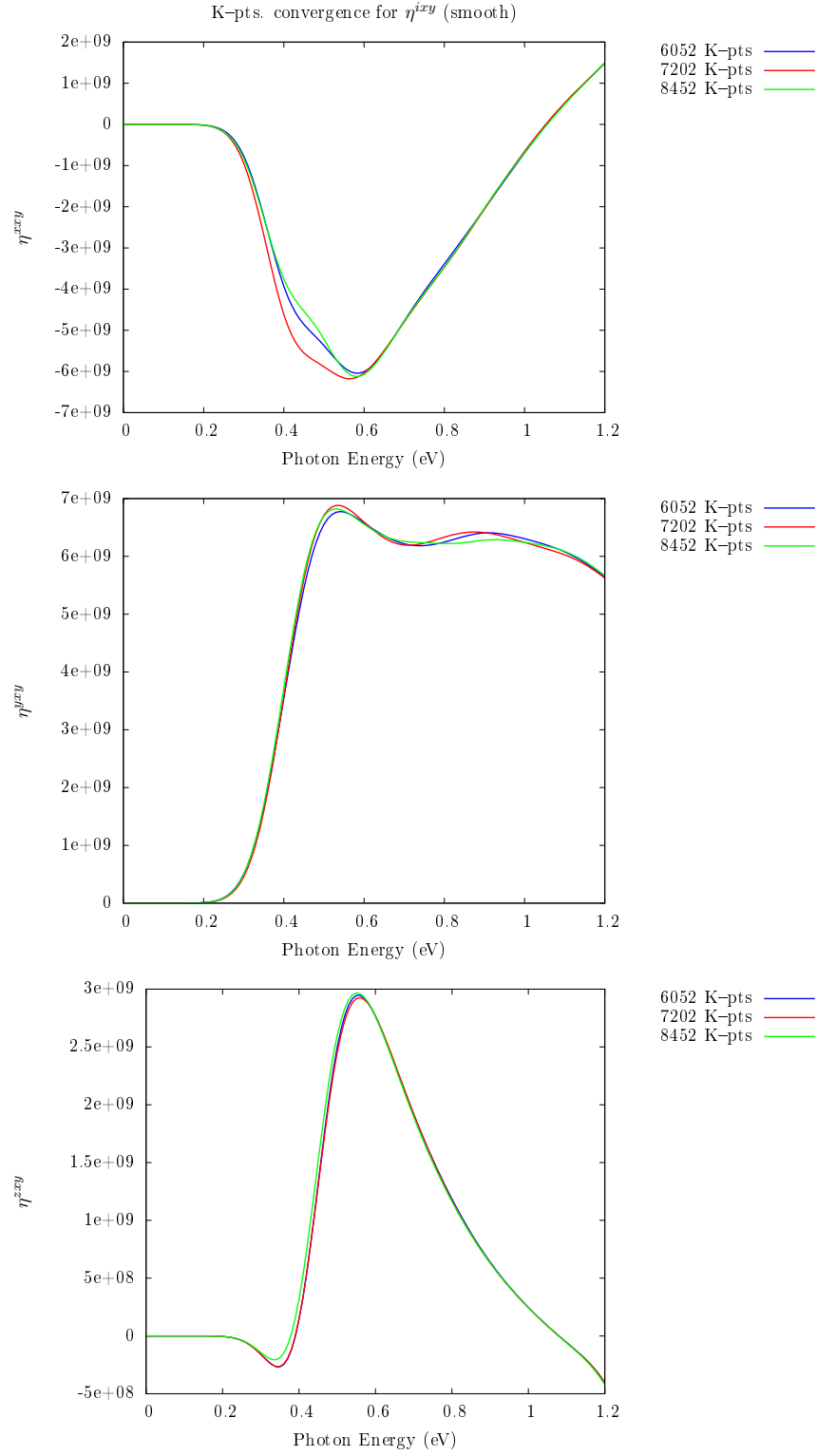


Figura 12: Convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para la inyección de corriente de la estructura  $\text{C}_{16}\text{H}_8$ -up.

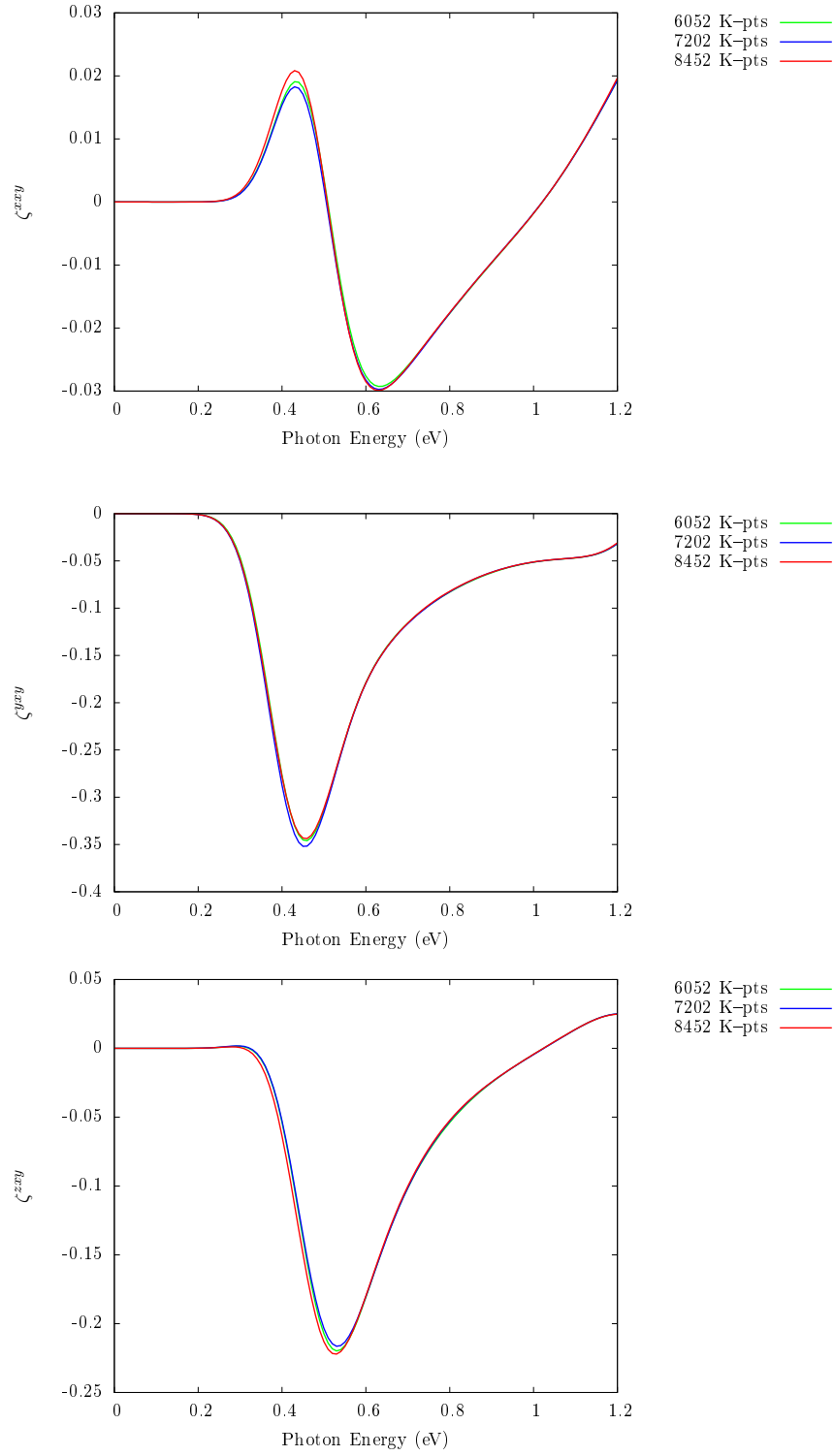


Figura 13: Convergencia en puntos  $\mathbf{k}$  para la inyección de spin de la estructura  $C_{16}H_8$ -up.

#### 4. Estructura $C_{16}H_{16}$ –boat

En la (Fig. 14) se muestran dos ángulos de vista para esta estructura. Esta es con la estructura a la que más tiempo le he dedicado y en la que no se ha llegado a la convergencia en puntos  $k$ . La (Fig. 15) muestra un rango reducido de  $\text{Im}[\chi^{xx}]$  (sin suavizado) para una energía de 10 Ha y sólo 53 puntos  $k$ . De allí se puede ver que el gap LDA es aproximadamente 0.17 eV.

La (Fig. 15) muestra un rango reducido de  $\text{Im}[\chi^{xx}]$  (sin suavizado) para una energía de 10 Ha y tres valores distintos de puntos  $k$ . De allí se puede ver que el gap LDA es aproximadamente 0.2 eV.

De esta estructura es de la que te he enviado los últimos reportes, incluyendo las respuestas con medios integrandos. Se tiene convergencia para todas las respuestas, exceptuando par el tensor  $\zeta^{abc}$ .

Antes de correr con una red desplazada de puntos me comunico contigo par ponernos de acuerdo acerca de si lo estoy haciendo bien, o bien, como tú sugeriste, descartarla.

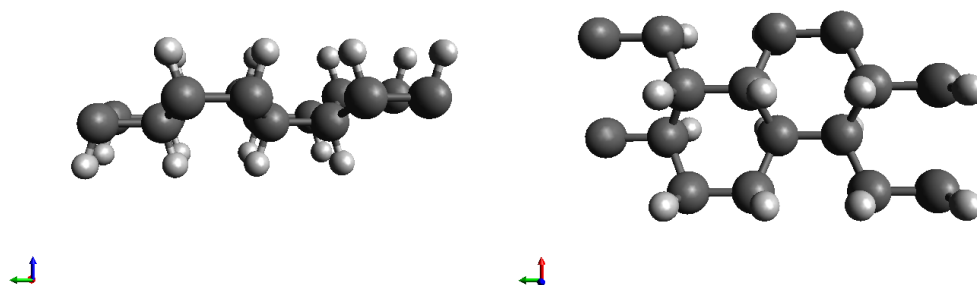


Figura 14: Estructura  $C_{16}H_{16}$ –boat desde dos ángulos de vista.

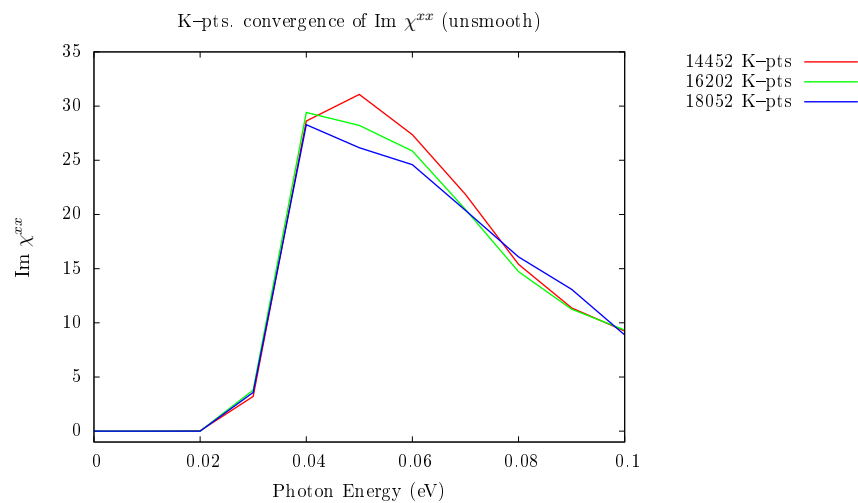


Figura 15: Análisis del gap para la estructura  $C_{16}H_{16}$ -boat.

## 5. Estructura $C_{16}H_{16}$ -chair

En la (Fig. 16) se muestran dos ángulos de vista para esta estructura. Esta es una de las estructuras usadas en la tesis de maestría. Como te mencioné anteriormetne, los cálculos son incorrectos. Estoy esperando a terminar con las demás estructuras par comenzar a trabajar con esta.

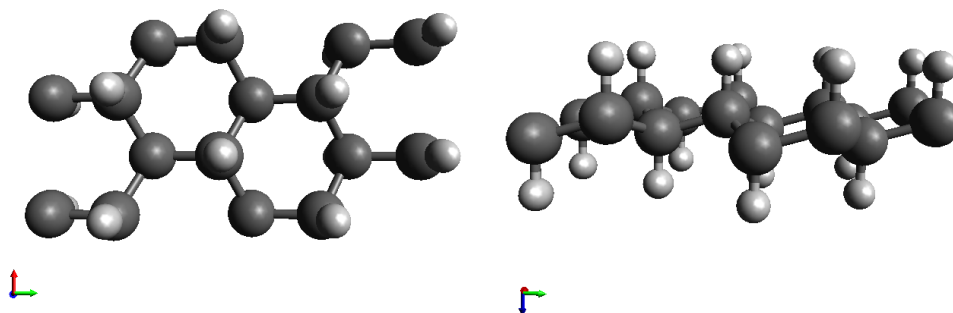


Figura 16: Estructura  $C_{16}H_{16}$ -boat desde dos ángulos de vista.