Hartree-Fock, Kohn-Sham y Cristales

Jorge Garza

Departamento de Química
Área de Fisicoquímica Teórica
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

21 de agosto de 2018

Casa abierta al tiempo

¿Qué entendemos por simetría?

1. f. Correspondencia exacta en forma, tamaño y posición de las partes de un todo.
2. f. Biol. Correspondencia que se puede distinguir, de manera ideal, en el cuerpo de una planta o de un animal respecto a un centro, un eje o un plano, de acuerdo con los cuales se disponen ordenadamente órganos o partes equivalentes.
3. f. Geom. Correspondencia exacta en la disposición regular de las partes o puntos de un cuerpo o figura con relación a un centro, un eje o un plano.

Simetría traslacional

¿Qué entendemos por simetría?

1. f. Correspondencia exacta en forma, tamaño y posición de las partes de un todo.
2. f. Biol. Correspondencia que se puede distinguir, de manera ideal, en el cuerpo de una planta o de un animal respecto a un centro, un eje o un plano, de acuerdo con los cuales se disponen ordenadamente órganos o partes equivalentes.
3. f. Geom. Correspondencia exacta en la disposición regular de las partes o puntos de un cuerpo o figura con relación a un centro, un eje o un plano.

Tanto en Hartree-Fock como en Kohn-Sham se tienen que resolver ecuaciones del tipo

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{ef}(\vec{r})\right)\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}). \tag{1}$$

donde

$$v_{ef}(\vec{r}) = v(\vec{r}) + v_{ee}(\vec{r}) \tag{2}$$

Para cristales

$$v(\vec{r}+\vec{R}) = v(\vec{r}), \tag{3}$$

¿Qué representa la $\vec{R}$?

Tanto en Hartree-Fock como en Kohn-Sham se tienen que resolver ecuaciones del tipo

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{ef}(\vec{r})\right)\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}). \tag{1}$$

donde

$$v_{ef}(\vec{r}) = v(\vec{r}) + v_{ee}(\vec{r}) \tag{2}$$

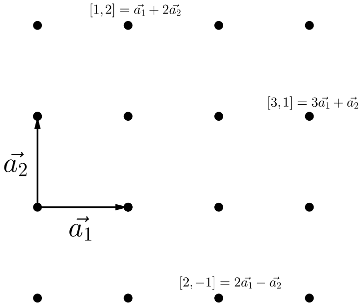
Para cristales

$$v(\vec{r} + \vec{R}) = v(\vec{r}), \tag{3}$$

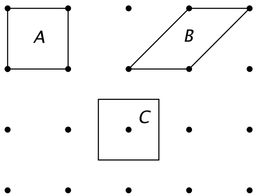
¿Qué representa la $\vec{R}$?

Una **malla** (malla de Bravais) es un conjunto infinito de puntos definidos por las sumas de números enteros de un conjunto de vectores linealmente independientes.

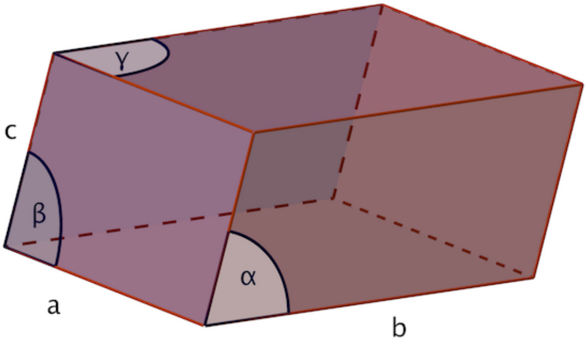
$$\vec{R} = n_1\vec{a_1} + n_2\vec{a_2} + n_3\vec{a_3} \tag{4}$$



- **celda unitaria**: región del espacio tal que cuando muchas unidades idénticas se colocan unas pegadas a otras, llenan todo el espacio y reconstruyen la estructura completa.
- **celda unitaria primitiva**: contiene exactamente un punto de la malla.
- **celda unitaria convencional**: permite hacer el trabajo más simple.

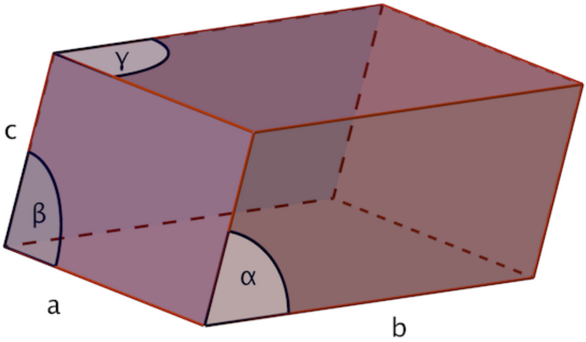


Celda unitaria convencional



Coordenadas cartesianas y coordenadas relativas.

Celda unitaria convencional

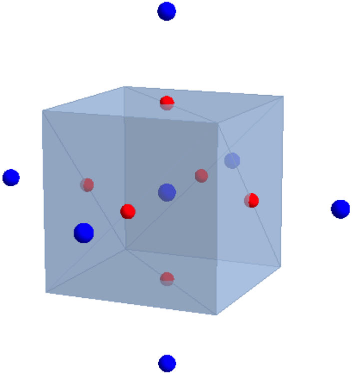


Coordenadas cartesianas y coordenadas relativas.

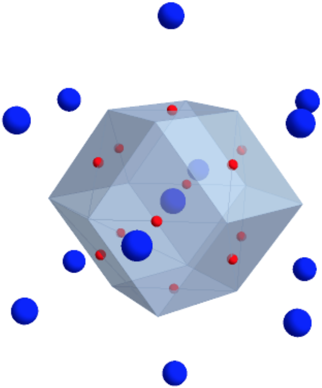
Tabla: Tipos de celdas encontradas en sistemas cristalinos

Celda	Lados	Ángulos	Malla permitida
Cúbica	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	P, F, I
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	P, I
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	P, F, A (B o C)
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$	P
Trigonal(a)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$	P
Trigonal(b)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2$	R
Monoclínica	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = \pi/2, \beta \neq \pi/2$	P, C
Triclínica	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$	P

Celda de Wigner-Seitz

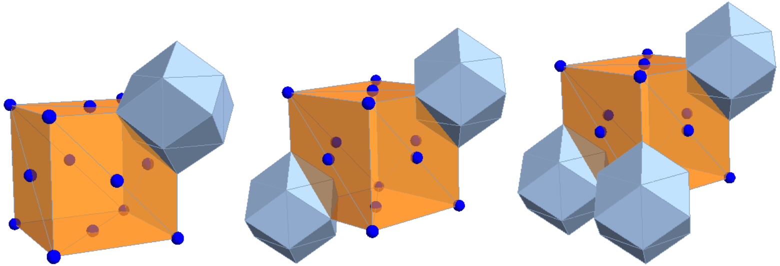


Celda de Wigner-Seitz

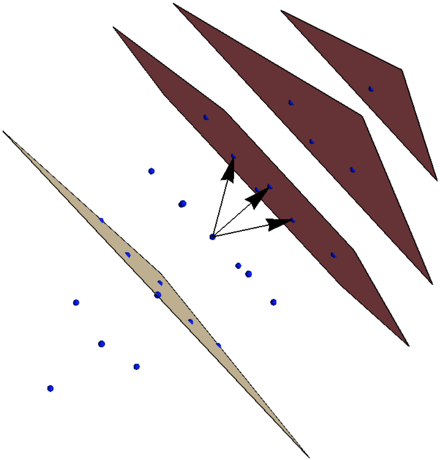


Simetría traslacional

Celda convencional y de Wigner-Seitz

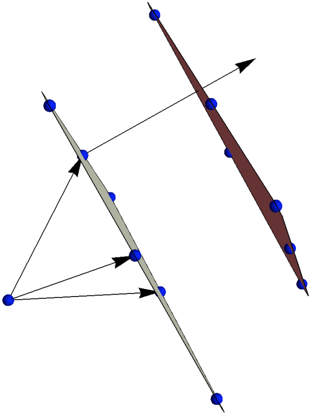


Puntos de la malla generan planos



Simetría traslacional

Los vectores normales a los planos generan otra malla

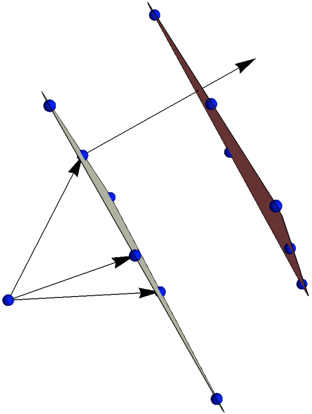


Malla recíproca

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \tag{5}$$

Simetría traslacional

Los vectores normales a los planos generan otra malla



Malla recíproca

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (5)$$

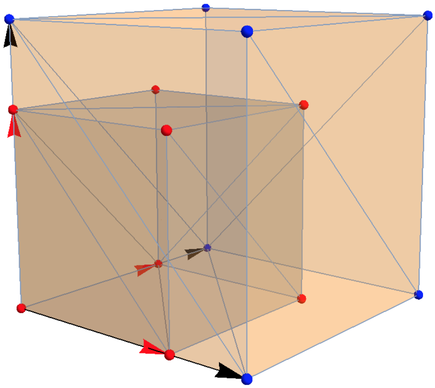
Distancia entre planos

$$d = \frac{2\pi}{\vec{G}} \tag{6}$$

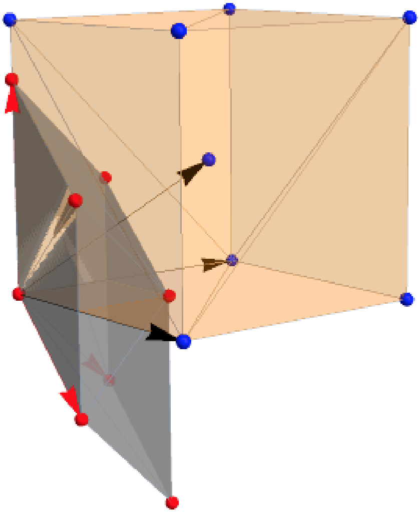
$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \tag{7}$$

$h, k, l \rightarrow$ Índices de Miller

Malla recíproca (Rojo) y Malla en espacio real (Azul)

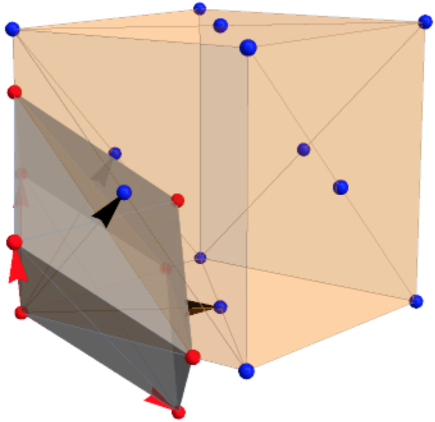


Malla recíproca (Rojo) y Malla en espacio real (Azul)



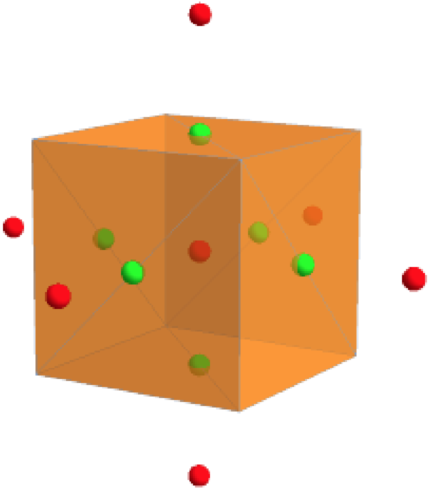
Simetría traslacional

Malla recíproca (Rojo) y Malla en espacio real (Azul)



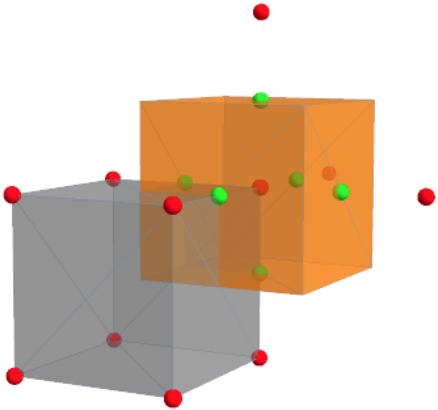
Simetría traslacional

Primera Zona de Brillouin



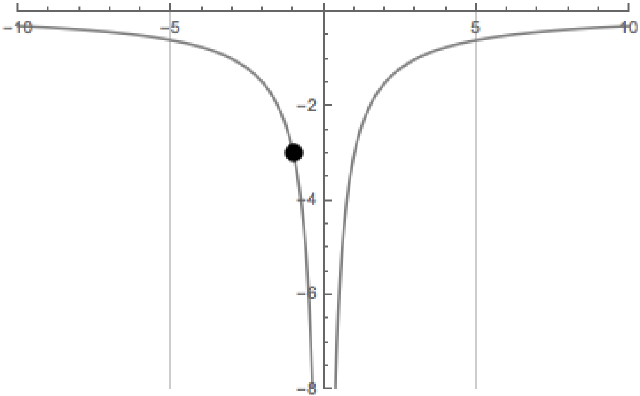
Los puntos rojos representan puntos de la malla recíproca

Primera Zona de Brillouin



Los puntos rojos representan puntos de la malla recíproca

Simetría traslacional



Simetría traslacional