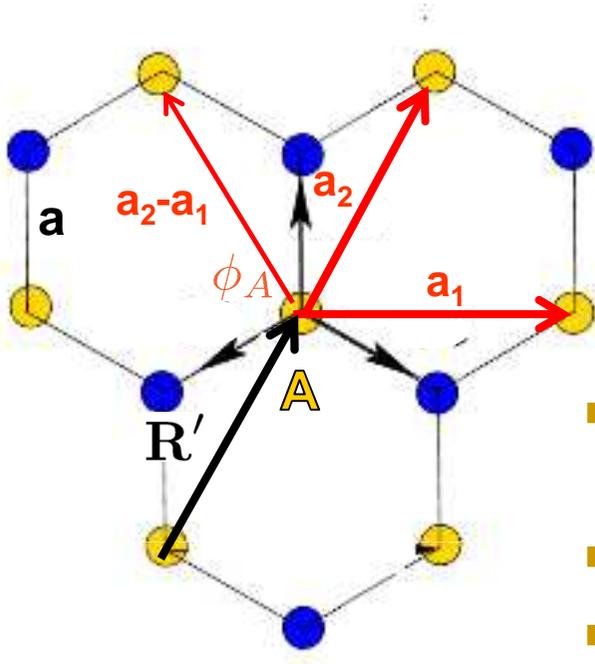


Tarefa 11: Cálculo de H^{AA} e H^{BB} .



- Agora calcule H^{AA} ($=H^{BB}$):

$$H^{AA} = \int (\Psi_{\mathbf{q}}^A(\mathbf{r}))^* H \Psi_{\mathbf{q}}^A(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r}$$

- Dado um \mathbf{R}' , considere apenas as integrais no mesmo orbital ($\mathbf{R}''=\mathbf{R}'$) e nos orbitais com \mathbf{R}'' nos sítios A mais próximos.
- Quantos desses sítios A teremos?
- Mostre que as integrais que aparecem são todas idênticas a:

$$t_{AA} = \int \phi_A^*(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) \Delta V(\mathbf{r}) \phi_A(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r}$$

$$\text{e} \quad \Delta \epsilon = \int \phi_A^*(\mathbf{r}) \Delta V(\mathbf{r}) \phi_A(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r}$$

Despreze os overlaps diretos dos As vizinhos:

$$S_{AA} = \int \phi_A^*(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_1) \phi_A(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r} \approx 0 \quad \text{etc}$$

$$\mathbf{R}' = n'_1 \mathbf{a}_1 + n'_2 \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{a}_1 = \sqrt{3} a \hat{x}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{x} + \frac{3}{2} \hat{y}$$