



Desempeño de funcionales de intercambio y correlación vdW-DF en algunas propiedades de metales nobles

Joana Avelar Robledo, Rubicelia Vargas, Jorge Garza
Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, San Rafael Atlixco 186, Col, Vicentina, Iztapalapa, C.P., 09340, Ciudad de México, México.
dannyro34@gmail.com

Se sabe que las fuerzas de dispersión son importantes en el estudio de adsorción molecular sobre superficies metálicas. Dentro de los métodos computacionales para abordar este tipo de problemas, sobresale la Teoría de los Funcionales de la Densidad (TFD) en su versión de Kohn-Sham. Dentro de esta teoría se han realizado diferentes propuestas para incluir fuerzas de dispersión dentro de las aproximaciones de los funcionales de intercambio y correlación (xc). En particular, el funcional de xc C09-vdW_x,¹ basado en un funcional de correlación no local propuesto por Rutgers y Chalmers, ha demostrado un buen desempeño en predecir distancias intermoleculares y energías de interacción, esto permite estudiar correctamente aquellos sistemas donde las fuerzas de dispersión juegan un papel relevante.

En este trabajo se evalúa el desempeño del funcional de xc C09-vdW_x en la reproducción de las constantes de celda, módulos de bulto, energías cohesivas y superficiales para los metales con estructura cristalina cúbica centrada en las caras (*fcc* por sus siglas en inglés): Cu, Ag, Au, Pd y Pt. Los resultados son comparados con los obtenidos de los funcionales PBE, BEEF-vdW² y optPBE-vdW³. Nuestros resultados muestran la importancia de considerar correcciones por dispersión para sistemas metálicos, así mismo sugieren que el funcional C09-vdW_x es una buena opción para estudiar estos sistemas. Todos los cálculos TFD que se reportan se llevaron a cabo en el código GPAW^{4,5} usando ondas planas como conjunto de funciones de base; los cores atómicos fueron descritos mediante el método PAW.⁶

Referencias:

- [1] V. R. Cooper. *Phys. Rev. B*, **81**:161104(R), 2010.
- [2] J. Wellendorff, K. T. Lundgaard, A. Møgelhøj, *et al. Phys. Rev. B*, **85**:235149, 2012.
- [3] J. Klimeš, D. R. Bowler y A. Michaelides. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **22**:022201, 2010.
- [4] J. J. Mortensen, L. B. Hansen y K. W. Jacobsen. *Phys. Rev. B*, **71**(3):035109, JAN 2005.
- [5] J. Enkovaara, C. Rostgaard, J. J. Mortensen, *et al. J. Phys.: Condens. Matter.*, **22**:253202, 2010.
- [6] P. E. Blöchl. *Phys. Rev. B*, **50**:17953, 1994.