



Efectos del intercambio exacto sobre las propiedades de CuCl_2 y CuCl en fase cristalina

Juan José García Miranda, Jorge Garza
Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa; México
e-mail: garciajuan.quimica@gmail.com

Los estudios teóricos, basados en la mecánica molecular y el modelo de Kohn-Sham (KS), sobre los compuestos de cobre, CuCl_2 y CuCl , en fase cristalina han arrojado resultados que se alejan en gran medida de la información experimental.¹⁻⁴ Varios autores atribuyen los malos resultados en los parámetros de celda de dichos compuestos sólo a efectos de dispersión dentro de la celda unitaria. En nuestro trabajo se parte con la hipótesis de que los efectos de intercambio exacto junto con los de dispersión son determinantes en la descripción de los compuestos de cloruro de cobre (II) y cloruro de cobre (I). La distorsión tetragonal del octaedro debido efecto Jahn-Teller presente en el CuCl_2 debido a su configuración d^9 de igual manera influye en la correcta descripción de los parámetros de celda.

La metodología utilizada en este trabajo, para el estudio de los cloruros de cobre, están basados en el modelo de KS utilizando funcionales de intercambio y correlación que contienen diferentes porcentajes de intercambio exacto, estos fueron: PBE, PBE0, M06, M06-2X, B3LYP y B3LYP-D, utilizando el software CRYSTAL14 y la base pob-TZVP. Obteniendo como resultado principal que el intercambio exacto tiene un impacto benéfico en la descripción de los parámetros de celda para tener una mejor comparación con los valores experimentales.

1. Burns, P. C.; Hawthorne, F. C. *Am. Mineral.* **1993**, *78*, 187.
2. Stepakova, L. V.; Skripkin, M. Y.; Chernykh, L. V.; Starova, G. L.; Hajba, L.; Mink, J.; Sandström, M. *J. Raman Spectrosc.* **2008**, *39*, 16.
3. Peljhan, S.; Kokalj, A. *J. Phys. Chem. C* **2009**, *113*, 14363.
4. Saraireh, S. A.; Altarawneh, M. *J. Nanomater.* **2012**, 767128.