



ESTUDIO TEÓRICO DE LA NATURALEZA DEL ENLACE QUÍMICO EN EL SISTEMA InP

Fernando Cisneros¹, Marco Revilla¹ · Andrés Garay²

¹Universidad de Guanajuato; México ²Centro de Investigación en Materiales Avanzados;

Unidad Monterrey; México

af.cisnerosgaytan@ugto.mx

Mediante el uso de la teoría del funcional de la densidad (DFT) se determinaron las propiedades estructurales y electrónicas de tres fases del fosforo de indio, Zn-blenda (ZB), Wurtzita (WZ) y NaCl. Para ello se trabajó dentro de la aproximación del gradiente generalizado (GGA) con el funcional de intercambio y correlación propuesto por Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Las funciones de onda fueron expandidas en un conjunto finito de ondas planas, tratando solamente los electrones de valencia de manera explícita en el paquete de estructura electrónica VASP. La ausencia de frecuencias negativas en el cálculo de la dispersión de fonones, calculados por el método "Frozen phonon" aseguró que las estructuras optimizadas son dinámicamente estables. Se encontró que la fase más estable es la ZB, la cual bajo presión sufre una transición de fase a NaCl. La estructura de bandas electrónica junto con el estudio de densidad de estados mostró que las fases ZB y WZ son semiconductores de band gap directo y en cambio la fase NaCl presenta un comportamiento conductor. A través de la función de localización electrónica (ELF), el índice de interacciones no covalentes (NCI) y la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM) implementado en CRITIC2, sugieren que el enlace químico en las tres fases del InP es de naturaleza covalente polar, tal cual lo corrobora el índice de ionicidad en el marco de QTAIM y el valor del laplaciano de la densidad electrónica en el punto crítico de enlace. A pesar de que las fases presentan la misma composición, los resultados demuestran que el número de coordinación ejerce una fuerte influencia sobre las propiedades electrónicas, mecánicas y en la dispersión de fonones pero en menor medida en el comportamiento del enlace químico e interacciones no covalentes.

(1) Kohn W.; Sham L. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev. Lett.* **1965**, *140*, 1133-1138.

(2) Perdew, J. P.; Burke, K; Ernzerhof, M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 3865-3868.

(3) Becke, A.; Edgecombe, K. A simple of electron localization in atomic and molecular systems. *J. Chem. Phys.*, **1990**, *9*, 5397-5403.

(4) Otero-de-la-Roza, A.; Johnson, E.; Luaña, V. CRITIC2: A program for real-space analysis of quantum chemical interactions in solids. *Comput. Phys. Commun.* **2014**, *185*, 1007-1018.