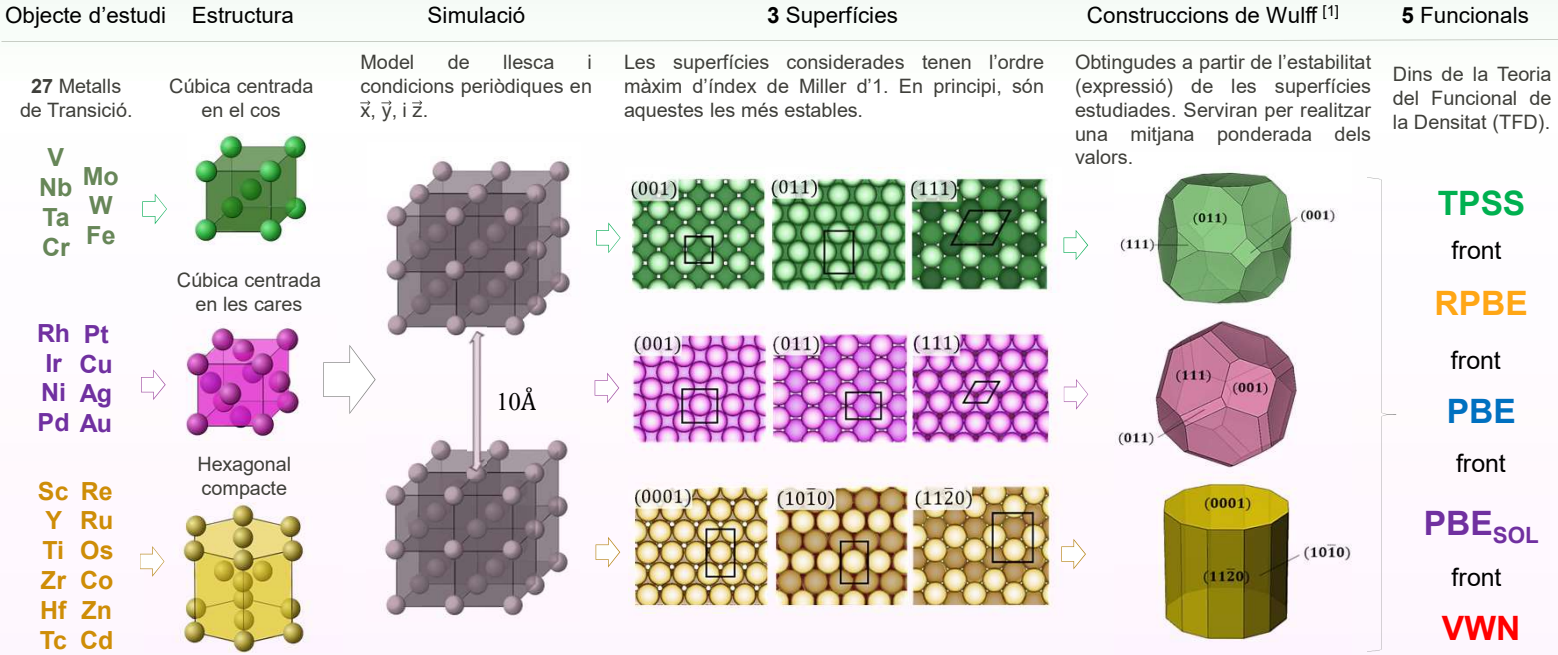


PRECISIÓ DELS FUNCIONALS DE LA DENSITAT EN LA DESCRIPCIÓ DE LES PROPIETATS SUPERFICIALS DELS METALLS DE TRANSICIÓ

Lorena Vega, Judit Ruvireta, Francesc Viñes i Francesc Illas

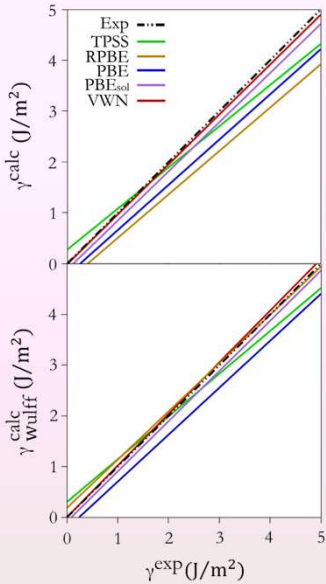
Departament de Ciència de Materials i Química Física, i l'Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTCUB), Universitat de Barcelona, C/Martí i Franquès 1, 08028 Barcelona, Espanya.



Energia Superficial (γ):

Energia necessària per generar una superfície.

$$\gamma = \frac{E_{\text{llesca}} - N \cdot E_{\text{cos}}}{2 \cdot \text{Àrea}}$$

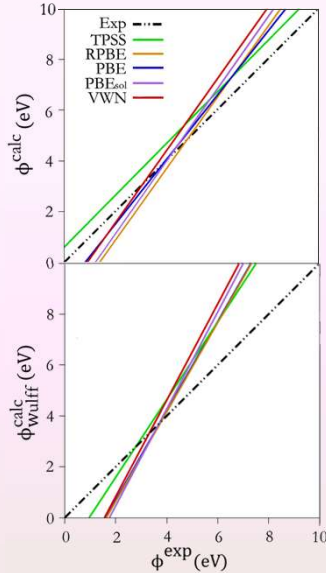


Comparació de l'ajust lineal entre les energies superficials calculades pels diferents funcionals i les dades experimentals (γ^{exp}). El gràfic superior considera només les superfícies més estables (γ^{calc}), mentre que, en el gràfic inferior es compara amb les mitjanes obtingudes amb construccions de Wulff ($\gamma_{\text{Wulff}}^{\text{calc}}$).

Funció de Treball (ϕ):

Energia necessària per arrencar un electró des de l'últim nivell ocupat (nivell de Fermi, E_F) fins al buit (V).

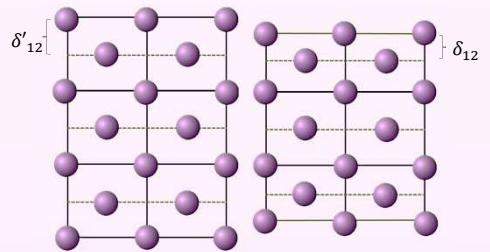
$$\phi = V - E_F$$



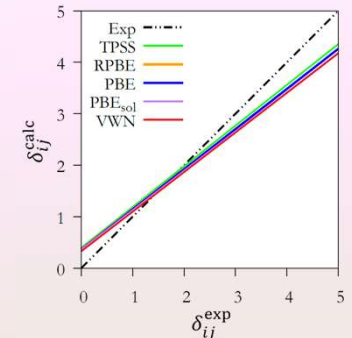
Comparació de l'ajust lineal entre les funcions treball calculades pels diferents funcionals i les dades experimentals (ϕ^{exp}). El gràfic superior compara els valors concrets per cada superfície (ϕ^{calc}), mentre que, en el gràfic inferior es compara amb les mitjanes obtingudes amb construccions de Wulff ($\phi_{\text{Wulff}}^{\text{calc}}$) amb les dades experimentals policristal·lins.

Distància entre capes (δ_{ij}):

Distància entre capes després que la superfície es creada i relaxada.



Model de 6 capes abans de relaxar (δ'_{ij}) i després de relaxar (δ_{ij}), respectivament.



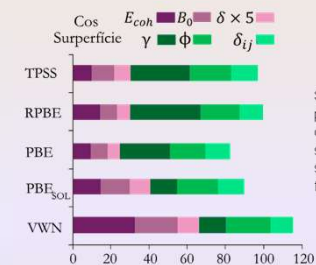
Comparació de les distàncies entre capes calculades ($\delta_{ij}^{\text{calc}}$) i experimentals (δ_{ij}^{exp}) ajustades amb una regressió lineal per cada funcional.

Conclusions [2]

- Les construccions de Wulff proveeixen millors resultats per energies superficials, mentre que per les funcions de treball són els valors particulars. Però, donada la poca quantitat de dades concretes experimentals disponibles considerem les construccions de Wulff (cas policristal·lí) com el més representatiu.
- Les propietats superficials dels metalls de transició no coincideixen en un mateix millor funcional.

γ	ϕ	δ_{ij}
VWN	PBE	TPSS

- L'escala de Jacob no se segueix per a tots els sistemes i propietats estudiades.
- Tenint en compte les propietats del cos [3] i superfície dels metalls, el millor funcional és PBE seguit de PBE_{SOL}.



Suma de tots els percentatges d'errors mitjans de totes les propietats superficials i de cos dels sistemes pels diferents funcionals estudiats.

[1] Viñes, F., Gomes, J.R.B., Illas, F., *Chem. Soc. Rev.*, **43**, 4922 (2014).

[2] Vega, L., Ruvireta, J., Viñes, F., Illas, F., *J. Chem. Theory Comput.*, **14**, 395 (2018).

[3] Janthon, P., Lao, S., Kozlov, S.M., Viñes, F., Limtrakul, J., Truhlar, D.G., Illas, F., *J. Chem. Theory Comput.*, **10**, 3832 (2014).