

## Seminario: Departamento de Química

### Estudios teóricos de las fases $\varepsilon$ y $\zeta$ del oxígeno sólido a altas presiones: Propiedades electrónicas vs. presión y la transición aislante-superconductor a 96 GPa

A. J. Ochoa-Calle,\* C. M. Zicovich-Wilson, and A. Ramírez-Solís

*Departamento de Química, Fisicoquímica teórica, Universidad Autónoma Metropolitana*

( $\Omega$ Dated: 7 de septiembre de 2018)

Se presentan resultados de cálculos periódicos de estructura electrónica del oxígeno sólido respecto a la presión hidrostática en el rango de 10 hasta 160 GPa con diversos métodos *ab initio* y de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT, del inglés). Mientras Hartree-Fock no predice la transición  $\varepsilon - \zeta$ , las aproximaciones LDA y GGA de la DFT la predicen a presiones muy bajas comparadas con la experimental (96 GPa). El desempeño de los métodos híbridos es muy dependiente del porcentaje del intercambio no-local Hartree-Fock. Sólo los métodos híbridos predicen la coexistencia de las soluciones de las fases en un dominio de presiones que contiene la coexistencia experimental de las fases (95-110 GPa), y los parámetros de la celda unitaria en excelente acuerdo con los experimentos. Cálculos fonónicos a 110 GPa revelan que la simetría  $C2/m$  experimental de la celda unitaria  $(O_2)_4$  de la fase  $\zeta$  es un estado de transición y que surge experimentalmente a temperatura ambiente de un promedio temporal de estructuras estables pero de simetría rota  $P1$  cuya celda unitaria es  $(O_2)_{16}$ . Nuestros resultados predicen un decaimiento exponencial de la brecha electrónica con la presión. Finalmente, usando cálculos a nivel CASSCF, demostramos que la evolución del carácter multireferencial de la función de onda de la celda unitaria explica la mayor precisión de la descripción DFT híbrida a presiones mayores.