

Van der Waalsovské (vdW) interakce, též disperzní síly, jsou klíčové v mnoha chemických, fyzikálních a biologických procesech a přitahují pozornost mnoha vývojářů metod založených na teorii funkcionálu hustoty (DFT). Nejčastěji používaná neempirická DFT metoda pro popis vdW interakcí je vdW funkcionál hustoty Diono a kol. (vdW-DF). Navzdory jeho úspěchu, vdW-DF neposkytuje dostatečnou přesnost v mnoha chemických aplikacích. V této práci zkoumáme dva možné způsoby jak zlepšit přesnost vdW-DF. Za prvé, optimalizujeme jediný částečně volný parametr vdW-DF pro několik semi-lokálních funkcionálů. Na testovací S22 databázi je revPBE nejlepším kandidátem, s jehož použitím se chyba snižuje z 8.8% na 6.3%. Za druhé, představujeme systémově specifické ale velmi přesné (~ 0.1 kcal/mol) DFT korekční schéma, které lze použít k precizním výpočtům interakcí mezi adsorbentem a adsorbátem. Schéma kombinuje vdW-DF a empirické korekční schéma DFT/CC. Tento nový přístup testujeme na malých molekulách (CH_4 , CO_2 , H_2 , H_2O , N_2) interagující s povrchem křemenu a s lamelou zeolitu UTL. Vysoká přesnost našeho schématu a relativní snadnost jeho použití ve srovnání se starším DFT/CC schématem nabízejí přímočaré řešení pro získání spolehlivých předpovědí adsorpčních energií.