

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Titulo

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

PG144

Cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica, uma abordagem via NRG

DINIZ, Gustavo; OLIVEIRA, Luiz Nunes de

gustavodiniz0310@usp.br

A adsorção de partículas atômicas em superfícies metálicas é um processo de grande importância, tanto para estudos teóricos, como para aplicações práticas. A catálise e corrosão são dois temas que sobressaem nesse contexto. Ambos os fenômenos podem ser entendidos a partir do processo de colisão entre um átomo ou molécula e uma superfície. Qualitativamente o problema pode ser descrito por uma partícula, inicialmente neutra se aproximando da superfície metálica. A superposição entre os orbitais da partícula e os dos átomos na superfície cresce e possibilita transferência de carga do átomo para superfície. Quando um elétron é transferido a partícula passa a ter carga elétrica e consequentemente aparece um potencial de carga imagem, o que acelera a partícula em direção à superfície. Na colisão subsequente a geração de fôons e de pares elétron-buraco no metal rouba energia da partícula incidente, que pode ficar presa no potencial atrativo. Existe, portanto, uma probabilidade de que essa partícula seja adsorvida pela superfície. O desafio teórico é calcular essa probabilidade, que recebe o nome de coeficiente de adsorção S . O cálculo da contribuição dos pares elétron-buraco para S , em função da energia cinética inicial, é uma questão ainda aberta e constituirá o foco deste trabalho. Em trabalhos anteriores, foi mostrado que a aproximação de Born-Oppenheimer, tradicionalmente empregada, é pouco confiável, e que um cálculo completo empregando tratamento numérico preciso da função de onda dependente do tempo é necessário. Esse trabalho, entretanto, tem precisão limitada porque recorre a uma aproximação de campo médio para descrever a interação entre o átomo e os elétrons da banda. Queremos aqui aperfeiçoar o cálculo, para isso, substituiremos a aproximação de campo médio por meio do método do grupo de renormalização numérico (NRG), que produz resultados essencialmente exatos. (1) A modelagem desse problema é realizada de forma simplificada pela incidência normal de um átomo de hidrogênio, inicialmente neutro, sobre a superfície de um metal, que será descrito por uma banda de condução sem estrutura. Para descrever esse sistema, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza. (2) Simplificadamente o procedimento para encontrar S baseia-se em calcular o espectro de energias eletrônicas, utilizando NRG, para cada valor de distância. No estado inicial, a partícula está longe da superfície, e sua função de onda é o produto entre o estado fundamental eletrônico e uma gaussiana centrada numa posição inicial, a qual descreve a parte nuclear. O procedimento de Crank-Nicolson (3) permite calcular a evolução temporal da função de onda, até que, depois da colisão, a função se divide em uma parte localizada perto da superfície e outra que se afasta dela. A integral espacial do módulo quadrado da primeira parte determina o coeficiente de adesão S .

Palavras-chave: Coeficiente de adsorção. NRG.

Agência de fomento: CAPES (88887.495890/2020-00)

Referências:

1 REGO, C. R.; REQUIST , R.; GROSS, E. K. U.; OLIVEIRA, L. N. **Sticking coefficient for atoms scattering off metallic surfaces** (não publicado).

2 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, n. 2, p. 395, 2008.

3 CRANK, J.; NICOLSON, P.; HARTREE, D. R. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type, **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society** v. 43, n.1,p.50-67,1947.