

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP

2021



Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2021

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

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

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

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

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

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

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.].
São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

PG56

Abordagem NRG para o cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica.

DINIZ, G.¹; OLIVEIRA, L. N.¹

gustavodiniz0310@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Fenômenos de adsorção de partículas atômicas, como corrosão e catálise, por exemplo, 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. 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 fônons 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 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. (1) Esse trabalho, entretanto, tem precisão limitada porque recorreu 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. (2) A modelagem pode ser simplificada pela incidência normal de um átomo de hidrogênio, inicialmente neutro, sobre a superfície de um metal, que será descrito por uma banda sem estrutura. Para descrever esse sistema, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza, $H = \sum_d \sigma \varepsilon_d c_d^\dagger c_d + U n_d \uparrow n_d \downarrow + \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + V(z)(f_0^\dagger c_d + c_d^\dagger f_0) + \frac{P}{2M} z^2 + W(z)(n_d - 1)^2 f_0^\dagger f_0$. Os quatro primeiros termos são os tradicionais termos do modelo de Anderson (c_d denota o orbital atômico, $f_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k$ e N é o número de estados c_k da banda de condução). O penúltimo termo é a energia cinética do núcleo e o último termo é o potencial da carga imagem. O procedimento numérico baseia-se em encontrar o espectro de energias eletrônicas, utilizando NRG, para cada valor da coordenada $z = z_m$. 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 divida 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 . Todos os cálculos analíticos para auxiliar na solução desse problema já foram realizados, e atualmente o foco concentra-se em finalizar o código do NRG. Com esse código em mãos, poderemos aplicar o procedimento descrito acima para obter o coeficiente S .

Palavras-chave: Coeficiente de adsorção. Grupo de renormalização numérico.**Referências:**

- 1 REGO, C. R.; REQUIST, R.; GROSS, E. K. U.; OLIVEIRA, L. N. **Sticking coefficient for atoms scattering off metallic surfaces**. 2021. (em fase de elaboração).
- 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. 395-450, 2008.
- 3 CRANK, J.; NICOLSON, P. 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, 50-67, 1947.