

**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. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

IC24

Cálculo de espectros de fotoemissão por grupo de renormalização numérico no espaço real

LENZARINI, Marino; OLIVEIRA, Luiz Nunes de

marinopl@usp.br

O objetivo deste trabalho é descrever precisamente o comportamento singular do espectro de fotoemissão de um metal simples nas vizinhanças da frequência limiar, região energética sob a influência da catástrofe de Anderson. (1) Fisicamente, o excesso de energia acima do limiar promove elétrons de condução, inicialmente abaixo do nível de Fermi, para estados acima dele. Para descrever adequadamente tais excitações partícula-buraco, o projeto explorará uma formulação alternativa ao método do grupo de renormalização numérico (NRG) (2), recentemente proposta e apelidada eNRG (3). Em contraste com a construção do NRG, no espaço dos momenta, o eNRG é formulado no espaço real. Ao tempo em que retém as virtudes do método tradicional, o eNRG permite descrever mais fielmente o acoplamento entre bandas de condução e estados localizados. Deste modo, será descrito o modelo da fotoemissão com o eNRG, onde a fotoemissão ejeta um elétron, sem considerar o spin, de um nível profundo para um estado livre com energia pré-fixada, e o Hamiltoniano assume formas diferentes nos estados inicial e final. O estado profundo é então desacoplado da banda, mas no estado final a carga positiva criada pela ejeção gera um potencial de espalhamento com uma intensidade pré-determinada. Assim, é possível calcular a taxa de transição por unidade de tempo a partir da formulação do eNRG, utilizando a regra de ouro de Fermi e entender como resultam os espectros a partir das contribuições de diversos estados finais. É válido notar que esta abordagem permite um amplo estudo do espectro, como sua suavização, o que também será estudado neste trabalho.

Palavras-chave: Grupo de renormalização numérico. Fotoemissão. Singularidades de raios-X.

Agência de fomento: FAPESP (2021/11154-5)

Referências:

- 1 ANDERSON, P. W. Infrared catastrophe in Fermi gases with local scattering potentials. *Physical Review Letters*, v. 18, n. 24, p. 1049, 1967.
- 2 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, v. 47, n. 4, p. 773, 1975.
- 3 FERRARI, A. L.; OLIVEIRA, L. N.de. Real-space numerical renormalization group computation of transport properties in side-coupled geometry. *Physical Review B*, v. 106, n. 7, p. 075129, 2022.