

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

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

13^a edição

Livro de Resumos

**São Carlos
2023**

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado
por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.
358p.

Texto em português.
1.Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

PG68

Coeficiente de adesão em átomos colidindo em uma superfície metálica

SILVA, Gustavo Diniz¹; OLIVEIRA, Luiz Nunes de¹

gustavodiniz0310@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Estamos interessados na taxa de adesão que acontece a partir do processo de colisão entre um átomo ou molécula e uma superfície. Esse mecanismo de adsorção é de grande importância nas áreas de Física e Química, explicando fenômenos como a catálise e corrosão.

Qualitativamente o problema pode ser descrito por um átomo, inicialmente neutro se aproximando da superfície metálica. A superposição entre os orbitais desse átomo e os da superfície cresce e possibilita transferência de carga. Quando um elétron é transferido o átomo 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 do átomo incidente, que pode ficar preso 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 adesão S .

A aproximação de Born-Oppenheimer, tradicionalmente empregada para separar a parte nuclear da função de onda da eletrônica, não é capaz de explicar o fenômeno. Além disso, não podemos usar aproximações adiabáticas uma vez que são justamente as não-adiabáticas que possibilitam a perda de energia do átomo. Portanto, o cálculo completo empregando tratamento numérico preciso da função de onda dependente do tempo $\Psi(z, t)$ é necessário.

A dinâmica da colisão unidimensional é descrita pela Eq. de Schrödinger,

$$i\hbar\partial_t\Psi(z, t) = \left[-\frac{\hbar^2\partial_z^2}{2M} + H^e(z) \right] \Psi(z, t),$$

onde M é a massa do átomo, z é a distância entre o átomo e a superfície e H^e é o Hamiltoniano eletrônico.

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 a parte eletrônica, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza com um termo extra que é o potencial de carga-imagem,

$$H^e = \varepsilon_d d^\dagger d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k (d^\dagger c_k + \text{h.c.}) + (n_d - 1)^2 \frac{W}{N} \sum_{kk'} c_k^\dagger c_{k'}. \quad (1)$$

Aqui d representa o orbital atômico, c_k os orbitais da banda, $V = V_0 e^{-rz}$ é o acoplamento entre o orbital do átomo e a banda e $W = \frac{W_0}{z_{im} + z}$ é a amplitude do potencial de carga-imagem que só aparece se o átomo for ionizado ($n_d = 0$ ou 2).

Simplificadamente o procedimento para encontrar o S baseia-se em calcular o espectro de energias

eletrônicas, utilizando o método de Grupo de Renormalização Numérico (NRG), para cada valor da distância z . (2) No estado inicial, a partícula está longe da superfície, e sua função de onda é o produto entre o estado inicial eletrônico e uma Gaussiana centrada numa posição inicial, a qual descreve a parte nuclear. O procedimento de Crank-Nicolson 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. (3) A integral espacial do módulo quadrado da primeira parte determina o coeficiente de adesão S .

Palavras-chave: Coeficiente de adesão. Grupo de renormalização numérica. Colisão atômica.

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

Referências:

- 1 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. **Physical Review**. v. 124, n.1, p. 41–53, 1961.
- 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,p.50-67, 1947.