

ESTUDO TEÓRICO DA ADSORÇÃO DO OXIGÊNIO SOBRE O PALÁDIO (111) VIA STM (SCANNING TUNNELING MICROSCOPY)

F. T. Freitas(1), A. S. C. Esperidião (2)

(1) Departamento de Engenharia Mecânica, Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia, Rua Aristides Novis 2, Federação, Salvador-BA, CEP 40210-630.

(2) Departamento de Física Geral, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário da Federação, Salvador-BA, CEP 40210-340.

Palavras Chaves: STM, Paládio e Oxigênio.

RESUMO

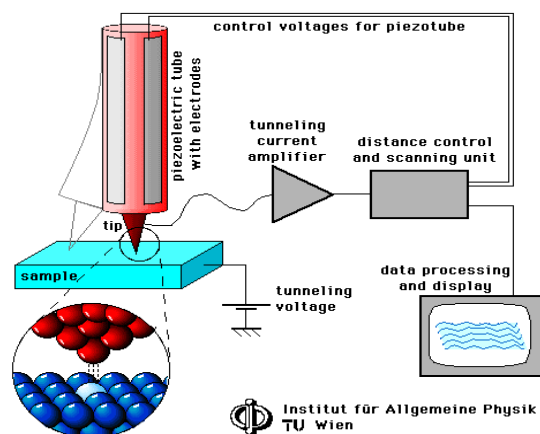


Fig.1. Esquema de um processo realizando microscópica por varredura

Imagens em escala atômica de superfícies condutoras são obtidas habitualmente com o Scanning Tunneling Microscopy (STM), fig.1. Esse microscópio é constituído de uma minúscula ponta (Tip) feita de material condutor que percorre – ou varre – toda a superfície da amostra a ser analisada. A ponta e o substrato onde se deposita a amostra ficam ligados por um circuito. Aplica-se uma tensão elétrica no circuito e abaixa-se a ponta do microscópio até quase encostar na amostra. A distância entre a ponta e a amostra chega a alguns nanômetros. Os elétrons, que só deviam passar da amostra para a ponta se as duas estivessem encostadas, realizam um processo

de tunelamento fechando o circuito entre a ponta e a amostra, criando uma corrente com uma voltagem infinitamente pequena, da ordem de alguns nanoampéres. A maior dificuldade desde que esta técnica foi introduzida, foi identificar a superfície em escala atômica, a qual fornece padrões de imagens em escala atômica. Existem poucas teorias STM que podem ser usadas para simular imagens para uma grande variedade de sistemas. Realizamos assim, um estudo da adsorção do Oxigênio sobre o Paládio (111), variando o tamanho da célula na superfície, a corrente de tunelamento e a voltagem aplicada.

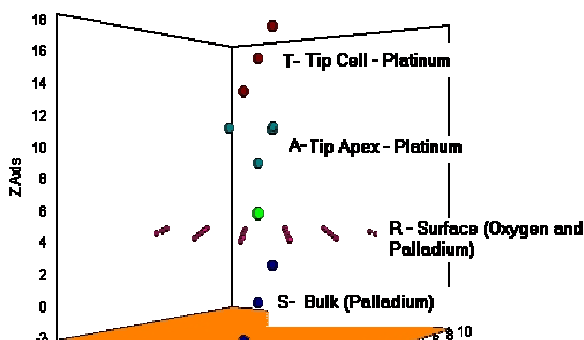


Fig.2 Representação gráfica do modelo simulado

Na realização deste trabalho foi utilizada simulação computacional, ou seja, utilizou-se um programa feito em Fortran que simula o funcionamento de um Scanning Tunneling Microscopy. A ponta (Tip) do microscópio foi simulada como um cluster formado por quatro átomos de platina dispostos em forma piramidal e depositados sobre uma superfície também de platina, esta ponta varre uma superfície de Paládio (111) onde um átomo de Oxigênio está adsorvido, fig. 2.

Os resultados obtidos através da simulação computacional, fig. 3, estão em concordância

com os resultados obtidos experimentalmente, fig. 4, evidenciando que para baixas voltagens obtêm-se uma configuração tipo “dip”, fig.5, e para altas uma configuração tipo “bump”, fig. 6. Os estudos foram realizados para células, fig. 7, nas superfícies dos

tipos 2x2, 3x3, 5x5 e 6x6, obtendo-se os mesmos resultados. A importância de se variar o tamanho da célula da superfície está no fato de estarmos variando o número de átomos de paládio na mesma.

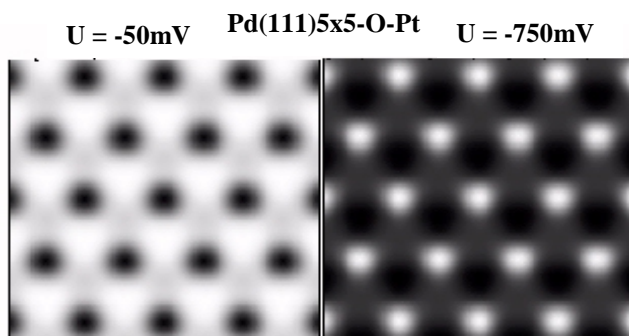


Fig. 3 - Imagem obtida através da simulação

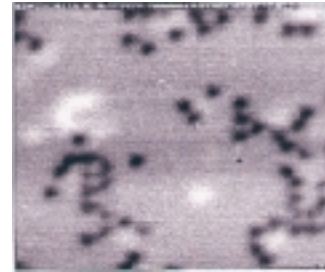


Fig. 4 - Imagem obtida através do microscópio de Tunelamento do Lawrence Berkeley -UCB- USA. Prof^{os}. Miguel Salmeron e Marck Rose (1997).

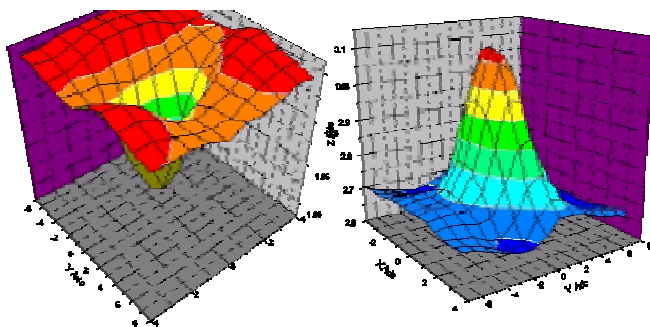


Fig. 5 - Formação Dip

Fig. 6 - Formação Bump

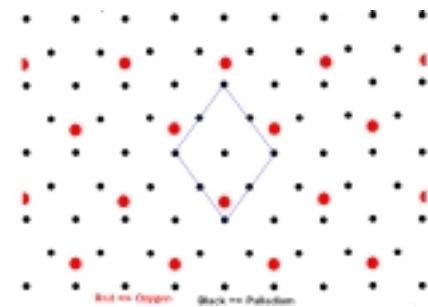


Fig. 7 - Célula Unitária

As imagens mostradas na fig. 3, foram obtidas através da simulação para o caso Pd1113x3-O-Pt. A imagem da esquerda foi obtida para $U = 50\text{mV}$ de ddp e $i = 20\text{ nA}$, onde os pontos escuros representam a posição do átomo de oxigênio, mostrando uma formação tipo “dip”, como ilustrado na fig. 5, onde apresentamos a topografia da superfície em 3-D obtida através do software *Origin*. No mapa bi-dimensional, fig. 3 a esquerda, a profundidade é representada pela variação do cinza para o preto.

Na fig. 3, à direita, a voltagem aplicada foi de $U = 750\text{mV}$ e $i = 20\text{ nA}$, onde os pontos claros representam a posição do átomo de oxigênio, indicando uma formação do tipo “bump”, também mostrado na fig. 6 e os pontos escuros representam átomos de paládio numa formação hexagonal como era esperado.

A fig. 4, mostra a imagem obtida através do microscópio de tunelamento nas seguintes condições: $i = 19,5\text{ nA}$ e $U = -32\text{ mV}$, podemos através da comparação com as imagens obtidas pela simulação e apresentada na fig. 3, à esquerda, identificar os pontos escuros como sendo átomos de oxigênio adsorvidos na superfície do paládio. Observamos que as manchas claras que aparecem na imagem experimental foram causadas por contaminantes na superfície.

Com a técnica utilizada para simulação das imagens foi possível caracterizar a amostra estudada experimentalmente podendo identificar a posição do Oxigênio sobre a superfície do Paládio como também caracterizar a sua estrutura. No momento a teoria referente à simulação de imagens STM, encontra-se em uma fase não muito bem consolidada e dispomos de pouquíssimos software para a geração de tais imagens. Enquanto que a parte experimental está bastante desenvolvida.

Agradecimentos: Agradeço ao PIBIC/CNPq/UFBA pela bolsa de iniciação científica, ao Instituto de Física da UFBA, ao profº orientador Antonio Sergio Cavalcante Esperidião e aos participantes do Grupo de Física de superfície.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

- 1. J. CERDÁ, M.A. VAN HOVE, P. SAUTET and M. SALMERON, Phys. Rev. B 56, 15885 (1997); 56, 15900 (1997), J.CERDA et al, PRB 61,7965 (2000).**
- 2. P.SAUTET, C. JOACHIM, Phys. Rev. B 38,12238 (1988) ; Chem. Phys. Lett. 185, 23 (1991) ; Surf. Sci. 271, 387 (1992).**
- 3. M.O. PEDERSEN, M.-L. BOCQUET ; P. SAUTET, E. LÄGSGAARD, I. STENSGAARD AND F. BESENBACHER, CHEM. PHYS. LETT. 299, 403 (1999);**
- 4. M.-L. BOCQUET, J. CERDÁ and P. SAUTET, Phys. Rev. B 59, 15437 (1999). C. I. CARLISLE et al, Phys. Rev. Lett. 84, 3899 (2000).**
- 5. KITTEL, Charles. Introdução à Física do Estado Sólido. Ed. Guanabara Dois S.A Rio – RJ, 1978.**
- 6. GASIOROWICZ, Estephen. Quantum Physics. Ed. John Wiley & Sons, New York, 1974.**
- 7. SZPOGANICZ, Bruno. Apostila da matéria Química Geral- QMC-5104, QMC 5105. UFSC.**
- 8. WOOD, E. A. (1964) J. Appl. Phys., 35, 1306.**