



EL COEFICIENTE DE STICKING EN UN GAS DE RED BIDIMENSIONAL CALCULADO POR DOS MÉTODOS DIFERENTES

V.J. Huespe, W.Masy, S.J. Manzi*

Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada (INFAP) – CONICET.
Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina.

*sergiojmanzi@gmail.com

RESUMEN

El desarrollo de métodos experimentales, tales como la microscopía iónica de campo o de efecto túnel, posibilita monitorear las reacciones químicas en las superficies de los catalizadores metálicos en tiempo real con aproximación atómica. Como consecuencia de esto, la conducta de las partículas en la superficie, prácticamente comienza a observarse directamente. La teoría de la cinética de adsorción-desorción sobre superficies homogéneas está bien entendida [1-7]. Uno de los métodos usados en el análisis del problema es el Modelo de Gas de Red Cinético (KLGM) aplicado a la capa adsorbida. Este método se realizó en analogía al modelo de Ising dependiente del tiempo para sistemas magnéticos, introducido originalmente por R.J.Glauber [8]. Ambos métodos se basan en la aproximación de la ecuación maestra. Existen diferentes modelos dinámicos aplicados al modelo de gas de red cinético, pero pocos han estudiado los diferentes observables dinámicos. A continuación se presenta el coeficiente de sticking para 2 dimensiones para un gas de monómeros con interacciones laterales a primeros vecinos, se incluyen dinámicas clasificadas en blandas, aquellas en las que las probabilidades de transición se pueden factorizar en dos términos, uno función de la energía de interacción lateral y dinámicas duras, con las cuales tal factorización no es posible. Los resultados marcan la fuerte relación entre el observable y la dinámica elegida y los mismos se comparan con el Método de Monte Carlo y el de Matriz de Transferencia.

Palabras clave: Coeficiente de Sticking, Dinámicas Blandas y Duras, Monte Carlo, Matrices de Transferencia.

Referencias

- [1] H.J. Kreuzer y Z.W. Gortel, Physisorption Kinetics, Springer-Verlag, Berlín, 1986.
- [2] H.J. Kreuzer y S.H. Payne, en Equilibria and Dynamics of Gas Adsorption on Heterogeneous Solid Surfaces Science and Catalysis, eds. W. Rudzinski, W.A. Steele y G. Zgrablich, Vol. 104, 1997, p. 153.
- [3] S.J. Lombardo y A.T. Bell, Surf. Sci. Reports, 13 (1991) 1.
- [4] S.H. Payne, H.J. Kreuzer, M.Kinne, R.Denecke, H-P-Steinruck, Surf.Sci(2002). 513,174.
- [5] S.J. Lombardo y A.T. Bell, Surf. Sci. Reports, 13 (1991) 1.
- [6] S.H. Payne, A. Wierzbicki y H.J. Kreuzer, Surf. Sci., 209 (1993) 242.
- [7] G. Costanza, S. Manzi y V. Pereyra, Surf. Sci. 524 (2003), 89
- [8] K. Kawasaki, in Phase Transitions and Critical Phenomena ed. C. Domb y M. S. Green, Academic Press, New York, Vol.2, 1972, p. 443.