

## Estudos comparativos do hidrogênio atômico, molecular e sólido.

Giovanne L. D. P. Mariano\*, Edison Z. da Silva.

### Resumo

Este projeto visou estudar as principais propriedades que sistemas compostos pelo átomo de hidrogênio podem apresentar. Os sistemas em foco vão desde moléculas à estruturas cristalinas em diferentes arranjos de rede. Para tanto, são utilizados conceitos da mecânica quântica e da física do estado sólido, bem como métodos da física computacional.

### Palavras-chave:

Hidrogênio, mecânica quântica, Density Functional Theory (DFT).

### Introdução

O estudo de propriedades dos materiais é de extrema importância dentro da física da matéria condensada. Com o advento da mecânica quântica e de métodos de cálculo físico computacionais, no século XX, este estudo deixou de ter viés majoritariamente empírico e ganhou forte base teórica e metodológica, possibilitando, além de um entendimento mais profundo das propriedades físico-químicas, a previsão de alguns dos comportamentos de sistemas ainda não testados empiricamente.

Alguns dos sistemas de grande interesse teórico e prático são formados pelo H. O átomo de hidrogênio e a molécula  $H_2$  são de grande interesse teórico, na medida que apresentam soluções analíticas para os problemas de orbitais atômicos e orbitais moleculares, sendo importante benchmark para a compreensão da teoria envolvida nestes problemas e para aproximações como combinação linear de orbitais atômicos (LCAO), Hartree-Fock (HF) e teoria do funcional de densidade (DFT)<sup>1</sup>.

O H, quando em estruturas cristalinas em diferentes redes, também se mostra muito útil para ratificar métodos computacionais de cálculo baseados em DFT. Além deste interesse teórico, alguns destes sistemas, sob condições específicas de temperatura e pressão, apresentam interesse prático, uma vez que estudos recentes corroboram com previsões do século passado de que o H pode apresentar características metálicas e supercondutoras<sup>2</sup>.

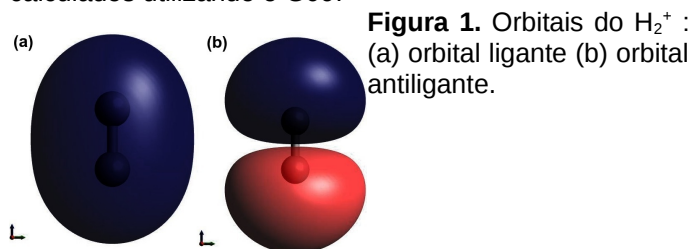
### Resultados e Discussão

Este projeto teve como foco o estudo do H em vários cenários. Para alcançar tal objetivo, as fundamentações teóricas desta pesquisa foram alicerçadas, majoritariamente, sobre a mecânica quântica<sup>3</sup>, suas aplicações nas soluções para os problemas do átomo e da molécula de hidrogênio e sobre a física da matéria condensada, com ênfase em estados eletrônicos, LCAO e DFT, partindo de trabalhos da literatura.

Os estudos moleculares foram desenvolvidos utilizando o Software GAUSSIAN (G09)<sup>4</sup> e os estudos sobre estruturas sólidas utilizaram o software Quantum Espresso (QE)<sup>5</sup>.

Na inspeção das características moleculares do  $H_2^+$  e do  $H_2$ , os resultados obtidos nos cálculos efetuados indicam concordância com o previsto por LCAO. A Fig. 1

apresenta os orbitais ligante e anti-ligante do  $H_2^+$  calculados utilizando o G09.



**Figura 1.** Orbitais do  $H_2^+$  : (a) orbital ligante (b) orbital antiligante.

Na inspeção das características do H sólido, foram estudadas três possíveis estruturas para o H, a rede cúbica de face centrada (fcc), a rede cúbica de corpo centrado (bcc) e a rede hexagonal compacta (hcp), sobre as quais obtivemos estruturas de bandas de energia e densidades de estados (DOS). Este estudo utilizou o QE e os resultados foram comparados com cálculos anteriores.

Os resultados de estrutura de bandas e DOS para a rede fcc concordam com referências de cálculos de propriedades eletrônicas<sup>6</sup>. Da mesma maneira, os resultados para as estruturas de bandas e DOS, para as três estruturas, indicam o comportamento metálico do H. Bem como, as condições de equilíbrio obtidas para o parâmetro de rede, energia e pressão têm valores compatíveis com resultados da literatura.

### Conclusão

Este projeto permitiu o aprendizado teórico sobre moléculas e sólidos, assim como o aprendizado de métodos de simulações computacionais que são o estado da arte em seu domínio, G09 e QE. Utilizando esta formação, estudamos o hidrogênio atômico, molecular e em fase sólida. Como perspectiva futura, seria interessante desenvolver um estudo sistemático destas e outras estruturas para diferentes pressões.

<sup>1</sup> Kaxiras E. Atomic and Electronic Structure of Solids. Cambridge: Cambridge University Press; 2003.

<sup>2</sup> Dias RP, Silvera IF. Science 2017 Feb;355:715-718.

<sup>3</sup> Merzbacher E. Quantum Mechanics. 2<sup>nd</sup> ed. New York: John Wiley & Sons; 1970.

<sup>4</sup> Giannozzi P, et al. J. Phys.: Condens. Matter 2009 Set;21(39):395502.

<sup>5</sup> Frisch MJ, et al. Gaussian 09. Gaussian, Inc., Wallingford CT; 2009.

<sup>6</sup> Moruzzi VL, Janak JF, Williams AR. Calculated electronic properties of metals. Pergamon Press: New York; 1978.