

Uso da equação de Calogero e teorema de Levinson no estudo do número de estados ligados do sistema Ar_2

Nelson H. T. Lemes¹(PQ)*, Rita de Cássia de O. Sebastião²(PQ) e João P. Braga²(PQ)

¹Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas (37130-000) Alfenas – Minas Gerais

²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais (31270-901) Belo Horizonte – Minas Gerais

*nelsonlemes@unifal-mg.edu.br

Palavras Chave: estados ligados, equação de Calogero e teorema de Levinson.

Introdução

No espalhamento quântico a autofunção espalhada incorpora a distorção introduzida pelo potencial espalhador na onda incidente, e pode ser expressa, para potenciais centrais e longe do centro espalhador, por um deslocamento de fase na onda plana incidente, δ_l . Neste trabalho o deslocamento de fase foi indentificado como a solução assintótica em distâncias intermoleculares grandes da variável fase na equação de Calogero.¹

O teorema de Levinson, que relaciona o deslocamento de fase no limite de energia zero com o número de estados ligados do sistema, é usado para contar o número de estados ligados no nível eletrônico fundamental do sistema Ar_2 .² O potencial proposto por Aziz foi utilizado para descrever a interação elástica entre os átomos de argônio.³

A proposta deste trabalho é de estudar a acurácia do potencial proposto por Aziz para descrever o número de estados ligados do sistema Ar_2 . A questão envolvendo a possibilidade de dímeros de gases raros suportarem estados ligados é de fundamental interesse na química.

Resultados e Discussão

O caminho usual para o cálculo do deslocamento envolve a integração da equação radial de Schrodinger, uma equação diferencial de segunda ordem, cuja solução assintótica é da forma $\sin(kr+\delta_l)$. Outro método, proposto por F. Calogero (1967), é baseado numa equação diferencial de primeira ordem. A equação de Calogero pode ser obtida de uma adequada parametrização da equação de Schrödinger,

$$\frac{dS_l(R)}{dR} = -\frac{1}{k} \left[U(R) + \frac{l(l+1)}{R^2} \right] \sin^2[kR + S_l(R)].$$

O deslocamento de fase δ_l , para energia $E=k^2/2\mu$, é obtido no limite assintótico de distâncias intermoleculares grandes, $\delta_l=S_l(R \rightarrow \infty)$.

O teorema de Levinson relaciona o deslocamento de fase no limite de energia zero com o número de estados ligados do sistema,²

$$n_l \pi = \delta_l(E \rightarrow 0).$$

O número de estados ligados do sistema Ar_2 , para diferentes momentos angulares, são apresentados na figura (1). Potenciais anteriores ao proposto por

Aziz suportam um número maior de estados ligados para o momento angular zero, figura (2).

Figura 1. Número de estados ligados para diferentes valores de momento angular.

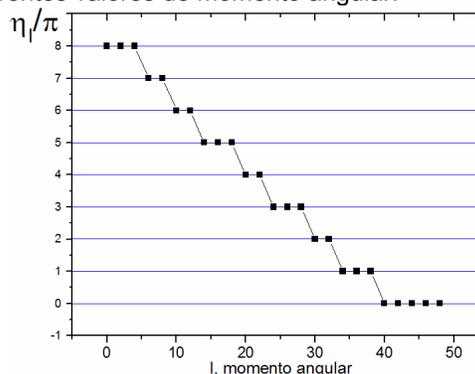
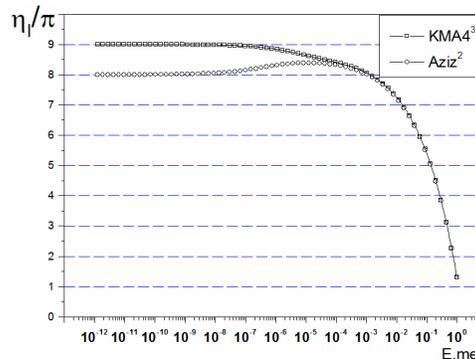


Figura 2. Comparação entre dois potenciais, KMA4 e Aziz.^{3,2}



Conclusões

Para o momento angular zero o potencial proposto por Aziz prevê 8 estados vibracionais para o estado eletrônico fundamental, valor compatível com os resultados experimentais.⁴

Um estudo semelhante pode ser estendido para todos os outros dímeros da família dos gases nobres. A literatura tem mencionado pelo menos um estado ligado nestes casos, exceto para o Hélio-Hélio.¹

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pela ajuda financeira.

¹ Braga, J. P. and Murrell, J. N.; *Mol. Phys.* 1984, **53**, 295-99.

² Aziz, Ronald A.; *J. Chem. Phys.* 1993, **99**, 4518-25.

³ Koide, A.; Meath, W. J. and Allnatt, A. R.; *Mol. Phys.* 1980, **39**, 895-11.