

Colisões elásticas de enxofre com hidrogênio e halogênios

Yuri Alexandre Aoto* (PG), Fernando Rei Ornellas (PQ)

*email: yuri.aoto@usp.br

Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 26077, São Paulo, SP, 05513-970, Brasil

Palavras Chave: MRCl, seção de choque, espalhamento elástico, colisões.

Introdução

O espectro contínuo de espécies diatômicas é muito informativo para a caracterização do potencial internuclear, e seu estudo pode ser realizado pela análise da seção de choque da colisão atômica em questão. Neste particular, espalhamentos de átomos de enxofre com hidrogênio ou halogênios tem sido muito pouco investigados, experimental ou teoricamente [1].

O conhecimento das interações de enxofre com halogênios é fundamental para o entendimento da cinética de alguns processos atmosféricos. Visando aprofundar a caracterização da interação entre estes átomos, neste trabalho foram realizados cálculos de seção de choque pelo método de ondas parciais, integrando-se numericamente a parte radial da equação Schrödinger com momento angular definido. Para tal, foram utilizados potenciais interatômicos obtidos por cálculos do tipo interação de configurações multirreferencial com excitações simples e duplas e bases atômicas do tipo aug-cc-pVnZ, onde $n = D, T, Q$ e 5.

Resultados e Discussão

Foram realizados cálculos de seção de choque, a baixas energias, para as colisões de enxofre com hidrogênio e halogênios, apresentados na figura 1.

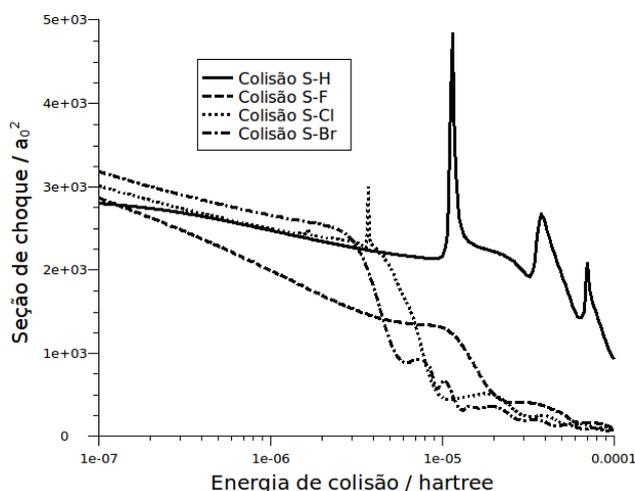


Figura 1. Seção de choque, até onda $l = 8$, para as colisões de enxofre com hidrogênio e halogênios.

Nota-se claramente que, a baixas energias, a seção de choque é praticamente constante e possui contribuição exclusivamente da onda s, como é possível notar na figura 2.

Por outro lado, para energias mais altas, as contribuições das ondas p, d, f, g, etc. começam a ser mais significativas e são estas que provocam o aparecimento dos diversos picos observados a essas energias. O grande pico em $1.1 \cdot 10^{-5}$ hartree, por exemplo, resulta da contribuição exclusivamente da onda g.

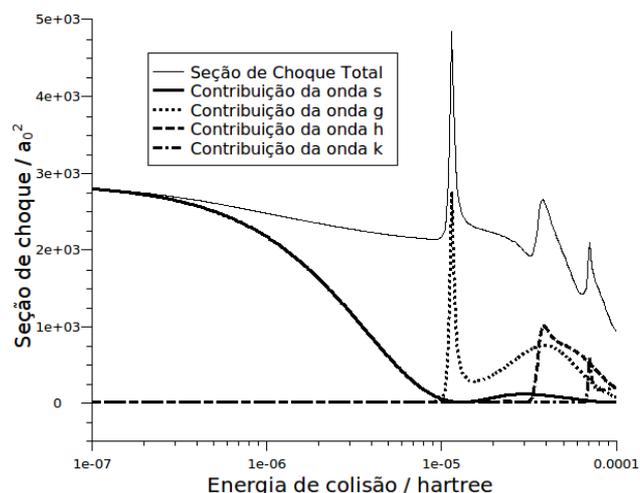


Figura 2. Contribuição das ondas s, g, h e k ($l = 0, 4, 5$ e 8) para a seção de choque total para a colisão de enxofre com hidrogênio.

Conclusões

A seção de choque total e a contribuição das várias ondas parciais foram determinadas para a colisão de enxofre com hidrogênio e halogênios. Para a colisão com hidrogênio, é possível notar claros picos na seção de choque, que resultam das contribuições das ondas g, h e k. Para as colisões com halogênios, a influência das ondas de alto momento angular na seção de choque total ocorre a energias bem mais baixas.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo apoio financeiro.

¹Shi D H; Zhang J P; Sun J F; Liu Y F; Zhu Z L; Ma H e Yang X D, *Chin. Phys. B* 2008, 17, 3678.