

Recuperação da energia potencial a partir do ângulo de espalhamento pelo método de inversão de Firsov.

Márcio O. Alves^{1*} (PG), Jessé M. Oliveira¹ (PG), Nelson H. Lemes² (PQ), Rita C. O. Sebastião¹ (PQ), João P. Braga¹ (PQ).

¹Departamento de Química, ICEX, UFMG CEP-31270-901, ²Departamento de Química, ICEX, UNIFAL, CEP-37130-000.

*marcio28oa@yahoo.com.br

Palavras Chave: *Angulo de Espalhamento, Potencial, Inversão.*

Introdução

No estudo do espalhamento clássico, o ângulo de espalhamento pode ser determinado conhecendo-se a energia cinética da partícula incidente E , o seu parâmetro de impacto b e o potencial de ação sobre o sistema V . Se o potencial depender apenas de R , a expressão para o ângulo de espalhamento é^[1],

$$\chi = \pi - 2b \int_{R_c}^{\infty} \frac{dR}{R^2 \left(1 - b^2/R^2 - V(R)/E\right)^{1/2}} \quad (1)$$

No entanto é possível também obter o potencial a partir dos dados do ângulo de espalhamento. Uma das maneiras é através do método de inversão de Firsov, onde (1) é invertida fazendo-se as devidas mudanças de variáveis e manipulações algébricas e transformada em^[2,3],

$$I(s) = -\frac{1}{\pi} \int_s^{\infty} \frac{\chi(b) db}{\sqrt{b^2 - s^2}} \quad (2)$$

Como s é uma função de r e,

$$V(R) = E \left(1 - e^{2I(s)}\right) \quad (3)$$

Pode-se determinar o potencial a partir do ângulo resolvendo-se a integral em (2) e substituindo esse resultado em (3).

Resultados e Discussão

Quanto maior a energia menor o ângulo de espalhamento, pois menor será a influência do potencial sobre a partícula incidente, sobretudo na parte atrativa de longo alcance. Para pequenos ângulos pode-se fazer uma aproximação em (1) obtendo-se uma função analítica para $\chi(b)$ ^[3] e a expressão para inversão torna-se,

$$V(R) = \frac{2E}{\pi} \int_R^{\infty} \frac{\chi(b) db}{\sqrt{b^2 - R^2}} \quad (4)$$

Tal aproximação foi testada para o sistema H-H descrito pelo potencial de Lennard-Jones. Os resultados da inversão e o potencial original estão dispostos na Figura 1.a.

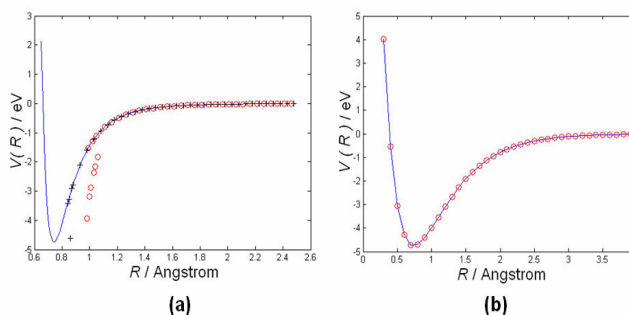


Figura 1. (a) Inversão para aproximação em baixos ângulo, (-) original, (+) inversão em 4 eV, (o) inversão em 1eV. (b) Inversão sem aproximação, (-) original, (o) invertido.

O método aproximado para inversão torna-se mais efetivo para maiores energias. Para 1 eV a convergência em relação ao potencial original começa em 1,09 *Angstrom* e para 4 eV começa em 0.87 *Angstrom*.

Na inversão sem o uso da aproximação para baixos ângulos, surge uma dificuldade por não existir a função analítica $\chi(b)$, tendo a necessidade de parametrizá-la numericamente. Entretanto a precisão dos resultados dessa inversão (Figura 1.b) não dependem da energia e cobrem toda a região do potencial, inclusive a parte repulsiva, diferente do método aproximado que descreve de forma satisfatória somente a parte atrativa de longo alcance.

Conclusões

O método de inversão de Firsov apresenta resultados bastante satisfatórios na recuperação de potenciais a partir do ângulo de espalhamento, servindo também como suporte para inversão no espalhamento quântico.^[4]

Agradecimentos

Agradecemos à CAPES, CNPQ e FAPEMIG pelo suporte financeiro.

¹ Child, M. S.; *Molecular Collision Theory*. **1986**.

² Braga, J.P. e Varandas, A.J.C.; *Journal of Physics. B. Atomic, Molecular and Optical Physics*, **1990**, 23, 3113

³ Landau, L., Lifchitz, E.; *Mecânica*. **1961**,

⁴ Lemes, N.H.T.; Borges, E.; Souza, R.V. e Braga, J.P. *International Journal of Quantum Chemistry*, **2008**, 108, 2623..