

## APLICAÇÃO DO MODELO GEOMÉTRICO NO ESTUDO DOS EFEITOS *GLORY* E *RAINBOW* EM COLISÕES ATÔMICAS

N. H. T. Lemes, J. C. Belchior e J. P. Braga

Departamento de Química - ICEx - Universidade Federal de Minas Gerais - Pampulha - 31 270-901 - Belo Horizonte - MG

Recebido em 15/8/97; aceito em 14/4/98

**GEOMETRIC MODEL APLIED FOR STUDYING GLORY AND RAINBOW EFFECTS IN ATOMIC COLLISIONS.** A simple analysis of glory and rainbow effects, together with the description of their trajectories is given by the geometric model. The energy dependence of glory and rainbow impact parameters and the energy dependence of the rainbow angle are determined analytically within the model. An universal function for glory and rainbow trajectories can be easily determined.

**Keywords:** geometric model; glory; rainbow.

### INTRODUÇÃO

A descrição do problema de colisão entre dois corpos pode ser feita pelo método da trajetória clássica através do formalismo de Hamilton em coordenadas esféricas do centro de massa, utilizando a distância relativa  $\dot{R}$  e a velocidade relativa  $\dot{R} = d\dot{R}/dt$  para acompanhar a dinâmica. Um exemplo simples é a colisão elástica entre dois átomos que não possuem estrutura interna, e portanto, a energia cinética antes e após a colisão é constante,  $\frac{1}{2}\mu\dot{R}^2$ , onde  $\mu$  é a massa reduzida do sistema. Neste caso a colisão entre os átomos produz uma mudança na direção da velocidade relativa  $\dot{R}$ , mas não na norma  $\|\dot{R}\|$ .

Em colisões atômicas o parâmetro de impacto  $b$  e o ângulo de espalhamento  $\chi$  são duas quantidades que caracterizam a dinâmica do processo. O parâmetro de impacto  $b$ , é definido como a distância entre o centro espalhador à uma linha paralela a velocidade inicial da partícula fictícia de massa  $\mu$ . O ângulo de espalhamento  $\chi$  é definido como o ângulo que dá a mudança na direção da partícula espalhada e é um efeito das interações interatômicas presentes durante a dinâmica. As quantidades  $b$  e  $\chi$  estão definidas na figura 1.

A dependência do ângulo de espalhamento  $\chi$  com o parâmetro de impacto  $b$  apresenta algumas características importantes. Esta função possui valores positivos e negativos de  $\chi$ ; valores de  $b$  que correspondem a um mesmo ângulo de deflexão; um valor mínimo de  $\chi$ , chamado ângulo de *rainbow*,  $\chi_r$ ; e uma trajetória com ângulo de deflexão igual a zero, mesmo quando as forças ainda estão presentes na interação, que

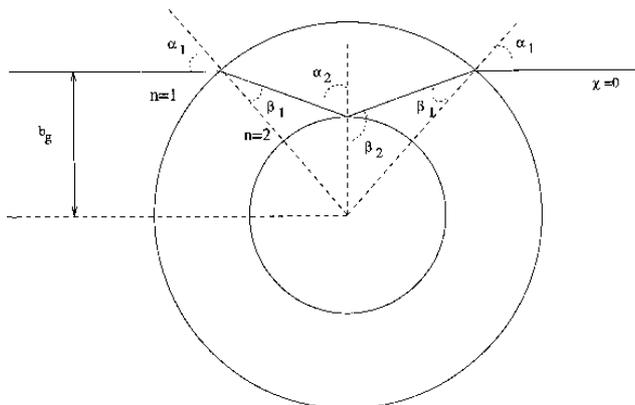


Figura 1. Condição para o efeito glory.

ocorre para um parâmetro de impacto  $b$  igual ao parâmetro de *glory*  $b_g$ .

Experimentalmente temos acesso a seção de choque diferencial,  $d\sigma/d\Omega$ , relacionada com a probabilidade  $P(\chi)$  do átomo ser espalhado em um determinado ângulo  $\chi$  por unidade de ângulo sólido  $\Omega$ . Esta quantidade pode ser calculada teoricamente pela expressão<sup>1</sup>.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i \left| \frac{b_i}{\sin\chi (d\chi/db)_{b=b_i}} \right|, \quad (1)$$

onde o somatório é sobre todas as trajetórias que contribuem para um mesmo ângulo de espalhamento  $\chi$ . Como podemos ver na equação acima, a função deflexão  $\chi(b)$  é suficiente para o cálculo de  $d\sigma/d\Omega$ . A seção de choque é definida para valores de  $\chi$  de 0 à  $\pi$ , uma vez que ângulos negativos e positivos são indistinguíveis no laboratório.

Determinadas características da função deflexão causam singularidades na seção de choque diferencial. O efeito *glory* causa uma singularidade porque  $\sin\chi = 0$  quando  $\chi = 0$ . A outra singularidade é devida ao efeito *rainbow*, e acontece porque a inclinação da função deflexão  $d\chi/db$  é zero, em  $b=b_r$ .

Como a seção de choque esta relacionada com a probabilidade  $P(\chi)$ , as singularidades representam uma coalisão de átomos espalhados em determinado ângulo  $\chi$ . No caso do *rainbow* várias trajetórias em torno da condição inicial  $b_r$  são espalhadas em um determinado ângulo  $\chi_r$ , portanto, a seção de choque diferencial apresenta uma singularidade em  $\chi_r$ . A singularidade em  $\chi=0$  da seção de choque diferencial é devida a trajetória de *glory* e a todas as trajetórias com parâmetro de impacto  $b > b_{max}$  que contribuem para o ângulo de espalhamento  $\chi = 0$ , onde  $b_{max}$  é o valor de  $b$  para o qual o ângulo de espalhamento seja aproximadamente zero.

O estudo sistemático da estrutura da seção de choque diferencial e total é um dos objetivos importantes para os cientistas que trabalham em dinâmica atômica e molecular. Informações essenciais destas estruturas podem ser obtidas se estudarmos a influência dos efeitos *glory* e *rainbow* nas seções de choque diferencial e total. Por exemplo, como já discutimos, a singularidade na seção de choque ocorre no ângulo de *rainbow*<sup>2</sup>. Apesar do efeito *glory* ocorrer para ângulos pequenos, que é uma região de pouco interesse, tanto teórico como experimental, a importância do efeito *glory* aparece quando tentamos explicar as oscilações na seção de choque total. A frequência destas oscilações está relacionada com a derivada

$dy/db$  em  $b = b_g$ . O número de estados ligados que esta molécula (resultante da combinação dos átomos em colisão) teria, está também relacionada com a derivada acima. Um outro ponto importante sobre o efeito *glory* é que a derivada acima serve de base também para a aproximação da fase estacionária. Para referências genéricas sobre este assunto o leitor deve consultar a referência 2. A análise do efeito *rainbow* em estruturas complexas, aparece, por exemplo, na referência 3. A análise do efeito *glory*, no contexto da fase estacionária aparece na referência 4.

No estudo teórico do espalhamento atômico pode-se utilizar diversos modelos na descrição dos fenômenos envolvidos e no cálculo da seção de choque. Um deles é o modelo geométrico<sup>5,6</sup>, que é uma imagem adequada e um caminho simples para o entendimento das principais características do espalhamento atômico como o efeito *rainbow* e *glory*. Este modelo requer somente o conhecimento de geometria elementar, substituindo a necessidade de se conhecer métodos numéricos para solução de sistemas de equações diferenciais acopladas, de integrais impróprias e técnicas para o cálculo de raízes.

Neste trabalho iremos aplicar o modelo geométrico ao espalhamento atômico para a análise do efeito *glory* e *rainbow* e determinar analiticamente a trajetória de *rainbow*,  $\chi_r(E)$  e  $b_r(E)$ , e a trajetória de *glory*,  $b_g(E)$ .

## MODELO GEOMÉTRICO

O modelo geométrico, para o caso atômico, baseia-se em dividir o espaço de colisão em diversos sub-espacos  $e_i$  que são esferas concêntricas de raio  $R_{max}-ih$ , onde  $R_{max}$  é o valor máximo para a coordenada de espalhamento,  $h$  o tamanho de cada setor e  $i$  um indexador. Assim uma partícula em um determinado setor  $i$  possui momento constante dado por  $\sqrt{2\mu(E-V(R_{max}-ih))}$ , onde  $E$  é a energia de colisão. Portanto a partícula ao passar de um sub-espaco  $e_i$  para  $e_k$  muda sua quantidade de movimento e ela o faz sofrendo uma refração de forma a conservar o momento. Então a partir da conservação do momento e considerações geométricas para substituir o cálculo do ponto de retorno clássico,  $R_c$ , podemos encontrar o ângulo de espalhamento  $\chi$ , equação (11) da referência 6.

$$\chi = 2 \sum_{i=1}^n (\beta_i - \alpha_i) \quad (2)$$

onde  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  são respectivamente o ângulo de incidência e refração no setor  $i$ , e  $n$  é o número total de setores. Com esta equação acumulamos a mudança da direção ao longo da trajetória, assim a trajetória contínua de uma partícula de massa reduzida  $\mu$  é composta de  $n$  segmentos de trajetórias descontínuas na fronteira de cada setor  $i$ .

Este modelo foi comparado na referência 6 ao resultado obtido pela quadratura de Gauss-Mehler<sup>7</sup> da integral imprópria do ângulo de espalhamento<sup>1</sup>.

$$\chi = \pi - 2b \int_{R_c}^{\infty} \frac{dR}{R^2 \left[ 1 - \frac{b^2}{R^2} - \frac{V(R)}{E} \right]^{1/2}}, \quad (3)$$

com o cálculo do ponto de retorno clássico feito pelo procedimento de Newton-Raphson<sup>8</sup>. O modelo foi considerado quantitativamente apropriado para um mínimo de 10.000 seções, com um erro de ~0,5%. Maiores detalhes desta comparação são apresentados na referência citada.

## APLICAÇÃO NA ANÁLISE DO EFEITO GLORY

No espalhamento atômico existe uma situação em que o efeito das forças atrativas é igual ao efeito das forças repulsivas,

neste caso o ângulo de espalhamento é zero, e esta trajetória, em particular, é conhecida como trajetória do *glory*. Portanto o parâmetro de impacto do *glory*,  $b_g$ , é importante porque delimita as regiões das trajetórias repulsivas  $\chi > 0$ , da região das trajetórias atrativas  $\chi < 0$ .

Na dedução das condições analíticas do *rainbow* e *glory* pelo modelo geométrico utilizaremos o potencial degrau abaixo como exemplo

$$V(R) = \begin{cases} 0 & R \geq R_I \\ -D_e & R_O \leq R \leq R_I \\ \infty & R \leq R_O \end{cases} \quad (4)$$

com isto estamos dividindo o espaço de colisão em dois setores  $i=1$  e  $i=2$ , conforme ilustrado na figura 1.

O ângulo de espalhamento  $\chi$  é dado pela equação 2 e portanto, a condição do *glory*,  $\chi = 0$ , é dada no modelo geométrico por,

$$\sum_{i=1}^n \beta_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \quad (5)$$

No caso simples de dois setores, sendo um de diâmetro  $R_O$ , e outro de diâmetro  $R_I$ , teremos  $\alpha_1 + \alpha_2 = \beta_1 + \beta_2$ . Conforme discutido na referência 6  $\beta_n = \pi/2$ , que é a condição que define o ponto de retorno clássico no modelo geométrico, e portanto

$$\alpha_1 + \alpha_2 = \beta_1 + \frac{\pi}{2} \quad (6)$$

O parâmetro de impacto que satisfaz a condição acima é o parâmetro de impacto do *glory*,  $b_g$ . Devemos portanto determinar  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  e  $\beta_1$ .

Conforme podemos observar na figura 1 o ângulo de incidência no primeiro setor,  $\alpha_1$ , é dado por

$$\sin \alpha_1 = \frac{b_g}{R_{max}}, \quad (7)$$

e neste caso  $R_{max} = R_1$ . No primeiro setor a energia cinética do átomo é  $p_1^2 / 2\mu = E$ , e no segundo setor  $p_2^2 / 2\mu = E + D_e$ , portanto, usando a conservação do momento podemos obter o ângulo de refração no primeiro setor,  $\beta_1$  dado por

$$\sin \beta_1 = \left( \frac{E}{E + D_e} \right)^{1/2} \sin \alpha_1. \quad (8)$$

O ângulo de incidência no segundo setor,  $\alpha_2$ , é dado por

$$\sin \alpha_2 = \frac{R_{max}}{R_c} \sin \beta_1, \quad (9)$$

onde  $R_c = R_O$ . Esta equação é obtida através de considerações geométricas discutidas na referência 6. Finalmente depois de um rearranjo, substituindo a equação 7 na equação 8 e o resultado na equação 9, obtemos

$$\sin \alpha_2 = \left( \frac{E}{E + D_e} \right)^{1/2} \frac{b_g}{R_c}. \quad (10)$$

Como os ângulos  $\alpha_1$  e  $\beta_1$  dependem inversamente da coordenada

de espalhamento podemos fazê-los tão pequenos quanto desejado e conseqüentemente podem ser desprezados numa primeira aproximação. Para altas energias, além deles serem pequenos, estes ângulos serão também aproximadamente iguais, o que pode ser visto pela equação (8). Portanto a equação (6) pode ser escrita aproximadamente como

$$\sin^{-1}\left(\frac{E}{E+D_e}\right)^{1/2} \frac{b_g}{R_c} = \frac{\pi}{2}, \quad (11)$$

Rearranjando esta equação obtemos a trajetória de *glory*

$$b_g = R_c (1 + D_e / E)^{1/2}, \quad (12)$$

uma aproximação que deve ser melhor para altas energias.

A expressão analítica encontrada para a trajetória de *glory* mostra que o parâmetro do *glory* é dependente do potencial de interação interatômico, neste caso é função da energia de dissociação  $D_e$  e do parâmetro  $R_0$  do potencial degrau utilizado. No limite de altas energias o parâmetro de impacto de *glory* é aproximadamente o ponto de retorno clássico, ou seja, a trajetória é praticamente retilínea.

O resultado da equação 12 é comparado na figura 2 ao valor obtido pelo método da trajetória clássica utilizando-se o método de Runge-Kutta de 4ª ordem com passo fixo<sup>8</sup> para integração das equações acopladas. A correção do ângulo de espalhamento é dada pela solução analítica da integral 3 de  $R_{max}$  à  $\infty$ . Os cálculos foram feitos para o sistema  $H_2$ , descrito pelo potencial de Morse

$$V(R) = D_e(1 - e^{-\alpha_m(R-R_e)})^2 - D_e, \quad (13)$$

com parâmetros  $D_e = 4,747\text{eV}$ ,  $\alpha_m = 1,945 \text{ \AA}^{-1}$  e  $R_e = 0,7414\text{\AA}^9$ . O método de Newton-Raphson<sup>8</sup> foi usado para encontrar o ponto de retorno clássico.

Podemos observar na figura 2 que o modelo geométrico descreve corretamente o resultado obtido por trajetória clássica e que o resultado de ambos os métodos se aproximam quantitativamente para altas energias.

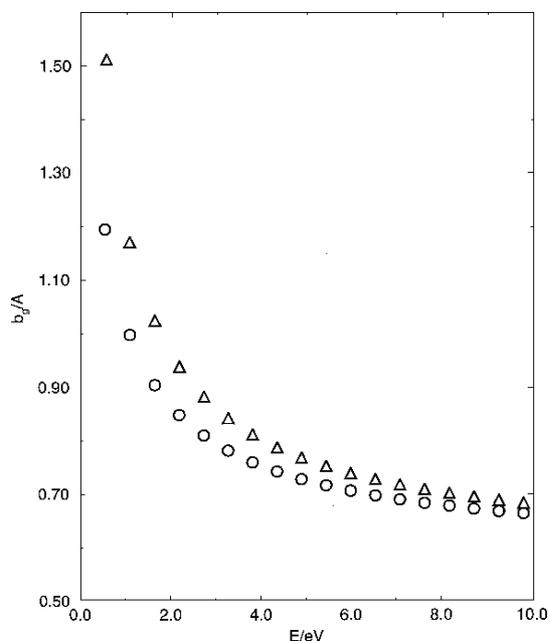


Figura 2. Dependência do parâmetro de impacto de glory com a energia, usando trajetória clássica (○) e o modelo geométrico (Δ).

## APLICAÇÃO NA ANÁLISE DO EFEITO RAINBOW

O efeito *rainbow* corresponde a uma coalisão de trajetórias no ângulo de deflexão máximo. O ângulo de *rainbow* divide a região em que a mecânica clássica poderá ser usada com maior segurança. Na dependência de  $\chi$  x  $b$  a situação física fica mais clara, podemos observar que para valores de  $\chi < \chi_r$  existem três trajetórias ( $b_0$ ,  $b_1$  e  $b_2$ ) que contribuem para o mesmo ângulo de espalhamento  $\chi$ , acima deste valor a correspondência entre  $\chi$  e  $b$  é unívoca. Se usarmos uma expressão mais elaborada (semi-clássica) para a intensidade do feixe de partícula espalhada, veremos que devido a correspondência entre vários parâmetros de impacto com o mesmo ângulo de espalhamento teremos um fenômeno conhecido como interferência, fenômeno este não clássico<sup>2</sup>.

A condição de *rainbow* é dada formalmente por

$$\left(\frac{d\chi}{db}\right)_{b=b_r} = 0 \quad (14)$$

e através da equação (2) podemos encontrar uma condição equivalente no modelo geométrico

$$\sum_{i=1}^n (d\beta_i / db) = \sum_{i=1}^n (d\alpha_i / db). \quad (15)$$

Conforme fizemos na dedução do efeito *glory*, também, para a dedução do efeito *rainbow*, dividiremos o espaço de colisão em dois setores (ver figura 3). Geometricamente podemos observar que o efeito *rainbow* ocorre quando o ângulo de incidência em cada setor  $i$  é  $\pi/2$  e como já discutimos  $\beta_n$  também é igual a  $\pi/2$ . Assim, considerando apenas dois setores, o ângulo de *rainbow* é dado por

$$\chi_r = 2\left(\beta_1 - \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}\right) = 2\beta_2 - \pi. \quad (16)$$

Usando as equações (7) e (8), com  $\alpha_1 = \pi/2$ , obtemos

$$\sin\beta_1 = \left(\frac{E}{E+D_e}\right)^{1/2} \sin\frac{\pi}{2} \quad (17)$$

Substituindo a equação acima na equação (16) obtemos

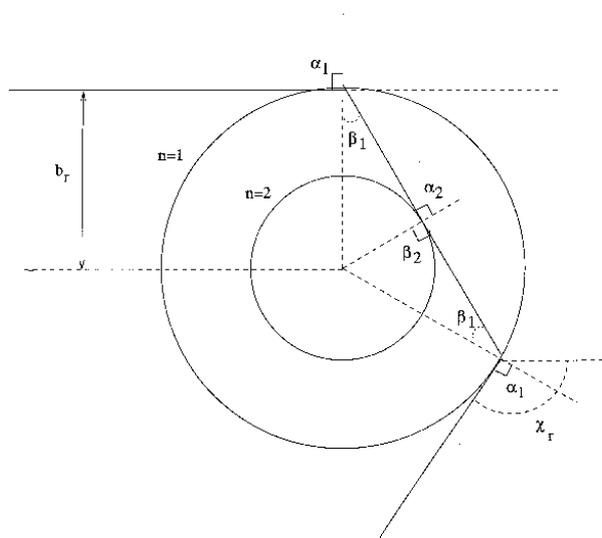


Figura 3. Condição para o efeito rainbow.

$$\chi_r = 2 \operatorname{sen}^{-1} \left( \frac{E}{E + D_e} \right)^{1/2} - \pi \quad (18)$$

e através de um rearranjo simples obtemos a expressão para a trajetória do *rainbow*

$$\sec^2(\chi_r / 2) = 1 + D_e / E. \quad (19)$$

No modelo geométrico, o parâmetro de impacto para a trajetória de *rainbow* é  $R_1$ , tal que,  $\alpha_1 = \pi/2$ , portanto,  $b_r(E) = R_1$ . Esta expressão mostra que a trajetória de *rainbow* depende do parâmetro  $D_e$  e  $R_1$  do potencial degrau utilizado. No limite de altas energias o ângulo de *rainbow* é aproximadamente zero, i.e., as trajetórias são todas praticamente retilíneas.

A figura 4 apresenta o resultado da  $\sec^2(\chi_r/2)$  em função da energia, comparado ao resultado obtido pela trajetória clássica para o sistema  $H_2$ . Podemos observar uma excelente concordância dos resultados para altas energias.

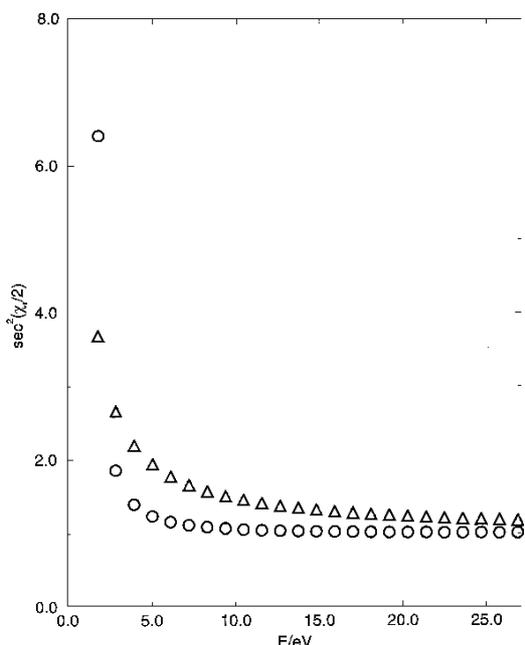


Figura 4. Dependência do ângulo de rainbow com a energia, usando trajetória clássica (m) e o modelo geométrico (Δ).

### UNIVERSALIDADE DO MODELO GEOMÉTRICO

O conceito de universalidade é bastante comum em termodinâmica. O segundo coeficiente do virial pode, por exemplo, ser escrito na forma universal para potenciais conformais<sup>10</sup>, i.e., potenciais da forma

$$V(R) = D_e f(R / \sigma). \quad (20)$$

como é o caso do potencial (4) utilizado na discussão do efeito *glory* e *rainbow*. Neste item iremos mostrar que o ângulo de espalhamento  $\chi$  também é uma quantidade universal para esta classe de potenciais. Esta universalidade é facilmente mostrada substituindo o potencial acima na equação (3), para obter<sup>11</sup>.

$$\chi^* = \pi - 2b^* \int_{R_e^*}^{\infty} \frac{dR^*}{R^{*2} \left( 1 - \frac{b^{*2}}{R^{*2}} - \frac{f(R^*)}{E^*} \right)^{1/2}}, \quad (21)$$

onde  $b^* = b/\sigma$ ,  $R^* = R/\sigma$  e  $E^* = E/D_e$ . Como podemos observar  $\chi^*$  depende somente das quantidades reduzidas  $b^*$  e  $E^*$  e é, portanto, universal nestas variáveis. Este resultado mostra que também as quantidades  $b_g^*$  e  $b_r^*$  são universais. Em particular, no caso do potencial degrau utilizado, equação (4),  $\sigma = R_0 = R_c$ .

O estudo da trajetória de *rainbow* e *glory*, pelo modelo geométrico, mostra de maneira muito simples a universalidade de  $\chi^*$  e para classe de potenciais degraus. Analisando o resultado analítico obtido para a trajetória de *glory* pelo modelo geométrico, equação (12), podemos observar que as quantidades reduzidas  $b_g^*/R_c$  e  $E/D_e$  aparecem nesta expressão e que portanto podemos escrevê-la de maneira universal como

$$b_g^* = (1 + 1/E^*)^{1/2}. \quad (22)$$

Isto significa que para esta classe de potenciais, o parâmetro de *glory*,  $b_g(E)$ , para um dado sistema de energia de dissociação  $D_e$  é dado por  $R_c b^*(E^*)$  tal que  $E^* = E/D_e$ . Este resultado aproximado da equação (22), para duas seções, sugere uma série perturbativa para a trajetória de *glory* apresentada abaixo em sua forma universal

$$b_g^{*2} = \sum_c c_n E^{*-n}. \quad (23)$$

A quantidade reduzida  $E/D_e$  também pode ser identificada na expressão analítica para a trajetória de *rainbow*, portanto, também podemos escrevê-la de maneira universal como

$$\sec^2(\chi_r^* / 2) = 1 + 1/E^*. \quad (24)$$

De fato, como provamos na equação (21), o ângulo de *rainbow* é universal para a classe de potenciais conformais, e isto é visto de maneira muito simples pelo modelo geométrico. Este resultado também sugere, de maneira similar ao caso do efeito *glory*, uma série perturbativa em  $1/E^*$ , dada por

$$f^*(1/E^*) = \sec^2(\chi_r^* / 2) = \sum_n c_n E^{*-n}. \quad (25)$$

O modelo geométrico mostra que esta série é adequada para descrever a trajetória de *rainbow* e tem significado físico.

Para ilustrar a universalidade sugerida pelo modelo geométrico, isto é, pelas equações (23) e (25) acima, é conveniente não trabalharmos com o potencial de Morse. Uma análise deste potencial nos mostra que

$$V^*(R^*) = \left( 1 - e^{-\left( R^* - \alpha R_e \right)} \right)^{1/2}, \quad (26)$$

onde vemos que  $b_g^*$  e  $\chi_r^*$  serão universais somente quando  $\alpha R_e$  for constante. Como esta restrição não possui significado físico e os sistemas a serem analisados teriam de ser artificiais, foi adequado trabalharmos com o potencial de Lennard-Jones

$$V(R) = 4D_e \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (27)$$

que pertence à classe de potenciais conformais. Os sistemas  $He_2$ ,  $Ne_2$ ,  $Ar_2$  e  $Xe_2$ , com parâmetros  $\sigma$  e  $D_e$  retirados da referência [12], serão usados para ilustrar a universalidade.

A universalidade para  $\sec^2(\chi_r^*/2)$ , sugerida pelo modelo geométrico, esta ilustrada na figura 5 para a série de moléculas diatômicas acima. Os coeficientes,  $c_n$ , da série apresentada na equação (25) são universais, e para a classe de potencial de Lennard-Jones, com um ajuste de grau 6 obtém-se uma boa correlação na faixa de  $0.1 \leq E^* \leq 0.8$ . Os coeficientes neste caso são:  $c_0 = 1,156$ ,  $c_1 = -3,598$ ,  $c_2 = 32,235$ ,  $c_3 = -132,787$ ,  $c_4 = 302,370$ ,  $c_5 = -349,863$  e  $c_6 = 168,424$ . Esta curva não pode ser extrapolada além do limite de  $1/E^* = 1,25$ , limite este de ocorrência do efeito *rainbow* nos potenciais de Lennard-Jones<sup>11</sup>. Uma análise semelhante foi feita para o efeito *glory* utilizando a equação (23). Um ajuste de grau 2 fornece uma excelente correlação para a faixa de  $0,1 \leq E^* \leq 1,5$ . Neste caso os coeficientes são  $c_0 = 1,009$ ,  $c_1 = 0,731$ ,  $c_2 = -0,134$ .

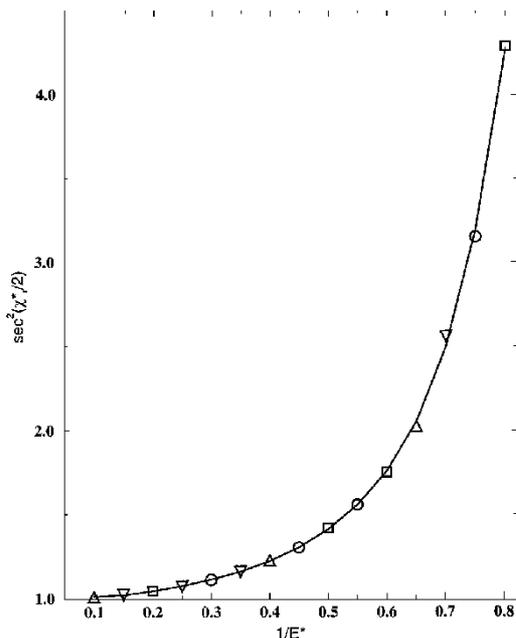


Figura 5. Universalidade para o ângulo de rainbow. Trajetória de rainbow para os sistemas (m)Ar<sub>2</sub>, (Δ)Ne<sub>2</sub>, (∇)Xe<sub>2</sub> e (o)He<sub>2</sub> em quantidades reduzidas.

## CONCLUSÃO

O modelo geométrico, desenvolvido anteriormente<sup>5,6</sup>, foi aplicado no presente trabalho para elucidar a estrutura da *glory*

e do *rainbow* no espalhamento atômico. Este modelo é simples e esclarecedor da natureza física destes efeitos. A correta dependência das trajetórias do *rainbow* e *glory* são influenciadas pelo potencial de interação e esta dependência fica clara quando o modelo geométrico é usado. As expressões são universais para a classe de potenciais conformais e dependentes da quantidade reduzida  $D_e/E$ .

O modelo geométrico sugere uma série perturbativa em  $D_e/E$  para as trajetórias de *rainbow* e *glory*, os coeficientes desta série são universais para a classe de potencial que foram determinados. Portanto, para qualquer sistema descrito por um potencial desta classe,  $\chi_r(E) = \chi_r^*$  e  $b_g(E) = b_g^*$ , tal que,  $E^* = D_e/E$  e  $b^* = b/R_c$ .

A universalidade da função  $f^*$  (equação (25)), para a classe de potenciais conformais, pode ser utilizada para estimar o valor de  $D_e$  a partir de dados experimentais. Se o valor de  $c_r$  é determinado experimentalmente, para uma determinada energia  $E$ , teremos  $\sec^2(\chi_r/2) = f^*(1/E^*)$ , e portanto,  $(1/E^*) = D_e/E$  ou  $D_e = E(1/E^*)$ . Este modelo nos possibilita então, a inversão de dados experimentais.

## REFERÊNCIAS

1. Landau, L. D. e Lifshitz, E. M.; *Mechanics*, Pergamon Press; New York 1982.
2. Child, M. S.; *Molecular Collision Theory*, Academic Press 1974.
3. Pliêgo Jr., J. R., Belchior, J. C. e Braga, J. P.; *Phys. Rev. A* **1996**, *54*, 2091.
4. Braga, J. P. e Varandas, A. J. C.; *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.* **1990**, *23*, 1132.
5. Braga, J. P.; *Um modelo geométrico para o cálculo do ângulo de espalhamento*, VI Simpósio Brasileiro de Química Teórica; Caxambú, Novembro de 1991.
6. Belchior, J. C. e Braga, J. P.; *Quím. Nova* **1996**, *19*, 408.
7. Abramowitz, M. e Stegun, I. A.; *Handbook of Mathematical Functions*, Dover; London 1965.
8. Gerald, C. F. e Wheatley, P. O.; *Applied Numerical Analysis*, Addison - Wesley 1984.
9. Radzig, A. A. e Smirnov, B. M.; *Reference Data on Atoms, Molecules and Ions*, Springer Verlag, 1985.
10. Braga, J. P.; *Notas de Termodinâmica*, não publicado.
11. Fluendy, M. A. D. e Lawley K. P.; *Chemical Applications of Molecular Beam Scattering*, Chapman and Hall; London, 1973.
12. Hirschfelder J. O., Curtis C. F. e Bird R. B.; *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons; New York, 1954.