

J. C. Belchior e J. P. Braga

Departamento de Química - ICEx - Universidade Federal de Minas Gerais - Pampulha - 31270-901 - Belo Horizonte - MG

Recebido em 12/9/95; aceito em 10/10/95

A SIMPLE ALGORITHM FOR CALCULATING THE SCATTERING ANGLE IN ATOMIC COLLISIONS. A geometric approach to calculate the classical atomic scattering angle is presented. The trajectory of the particle is divided into several straight-lines and changing in direction from one sector to the other is used to calculate the scattering angle. In this model, calculation of the scattering angle does not involve either the direct evaluation of integrals nor classical turning points.

Keywords: classical atomic collision; scattering angle; collision model.

INTRODUÇÃO

O cálculo do ângulo de espalhamento atômico clássico (χ) é um importante passo na dinâmica das colisões atômicas. A dependência deste ângulo em relação ao parâmetro de impacto b , isto é, a função $\chi(b)$, fornece informações sobre seções de choque e pode ser calculada de duas maneiras: a) Resolvendo-se um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem, ou em uma forma simplificada; b) Resolvendo-se a seguinte integral¹

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

onde R_c é o ponto de retorno clássico, E é a energia de colisão e $V(R)$ é o potencial de interação. O cálculo do ângulo de espalhamento usando-se a eq. (1) consequentemente envolve dois passos, ou seja, o cálculo numérico do ponto de retorno e em seguida a solução da integral imprópria (1) usando, por exemplo, o método de Gauss-Mehler².

Neste artigo apresentaremos uma aproximação geométrica para a obtenção do ângulo de espalhamento χ . Tal aproximação consiste em dividir o espaço de colisão em vários sub-espacos

onde cada sub-espaco é caracterizado por dois ângulos. Uma relação de recorrência de um ponto entre esses ângulos, mais as condições inicial e final, fornecerão de uma maneira direta o cálculo do ângulo de espalhamento.

Esse modelo geométrico pode também ser visto como composto de várias trajetórias lineares ligadas na discontinuidade. Nessa discontinuidade tal partícula mudará sua direção para conservar o momento linear. Essa mudança de direção pode ser acumulada para fornecer, no final da trajetória, o ângulo de espalhamento χ .

O MODELO GEOMÉTRICO

O modelo geométrico é ilustrado, numa forma didática, na figura 1. Para cada setor i ($i=1...n$) definimos um ângulo de incidência e um ângulo de refração denominados respectivamente por α_i e β_i . Da figura 1, que ilustra três setores (1, $n-1$, and n), pode-se facilmente escrever

$$\alpha_1 + \gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{n-1} + \gamma_n + \gamma_{n+1} + \dots + \theta = \pi \quad (2)$$

onde γ é definido como na figura 1. Por exemplo, para o setor 1 (linha AC) e o setor $n-1$ (linha BC), pode-se definir γ_1 . É facilmente verificado da figura 1 que,

$$\chi + \alpha_1 = \theta \quad (3)$$

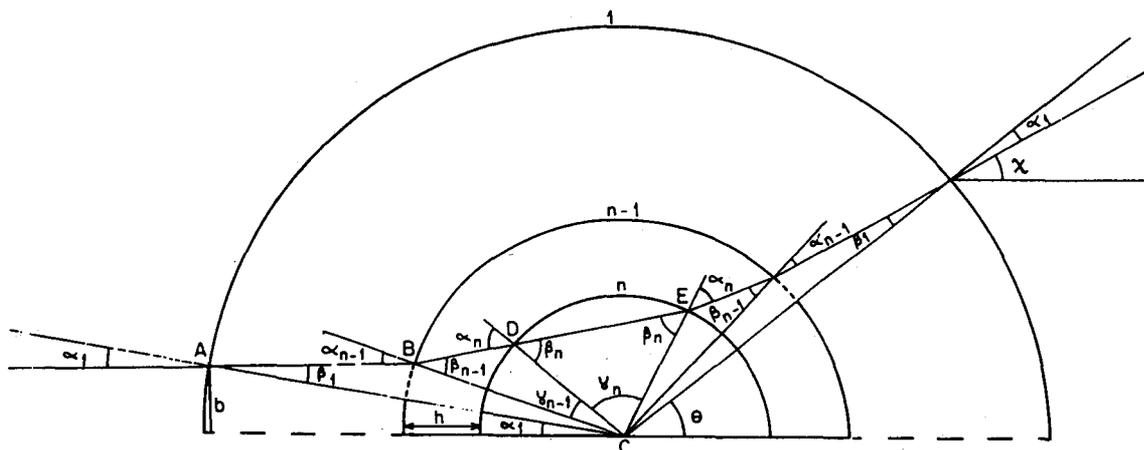


Figura 1. As considerações geométricas para a construção do ângulo de espalhamento, eq. (1).

e do triângulo *CDE* pode-se escrever,

$$2\beta_n + \gamma_n = \pi \quad (4)$$

Também de considerações geométricas (usando o triângulo *ABC* e a linha *CB*), podemos escrever,

$$\gamma_i = \alpha_{i+1} - \beta_i \quad (i = 1, \dots, n-1) \quad (5)$$

Para inicializarmos o cálculo é apenas necessário especificar o ângulo de incidência. Ele pode ser obtido pelas condições iniciais e é dado por,

$$\alpha_1 = \sin^{-1}(b/R_{\max}) \quad (6)$$

onde R_{\max} é a coordenada máxima de espalhamento. Pela conservação do momento na discontinuidade podemos obter o valor de β ,

$$\sin \beta_i = \left(\frac{E - V(R_{\max} - (i-1)h)}{E - V(R_{\max} - ih)} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \alpha_i \quad (7)$$

onde h é o tamanho do setor. É facilmente obtido da figura 1 o próximo valor do ângulo de incidência

$$\sin \alpha_{i+1} = \left(\frac{(R_{\max} - (i-1)h)}{(R_{\max} - ih)} \right) \sin \beta_i \quad (8)$$

Usando a eq. (6) podemos gerar α_1 e aplicando (7) e (8) pode-se propagar a trajetória. Usando novamente a simetria da trajetória essa iteração deve terminar no ângulo de refração (ou incidência) igual a $\pi/2$. Essa condição substitue portanto, numa maneira indireta, a necessidade do cálculo do ponto de retorno.

Reescrevendo (2) como

$$\alpha_1 + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \gamma_i + \gamma_n + \theta = \pi \quad (9)$$

e usando (3) para $i = 1$, obtém-se

$$\chi = 2\beta_n - 2\alpha_1 - 2 \sum_{i=1}^{n-1} \gamma_i \quad (10)$$

Substituindo (5) em (6) e rearranjando os resultados, obtemos finalmente

$$\chi = 2 \sum_{i=1}^n (\beta_i - \alpha_i) \quad (11)$$

da qual pode-se calcular o ângulo de espalhamento. Uma versão simplificada da eq. (11), ou seja, uma análise para apenas um setor, pode ser encontrada na literatura¹.

UM TESTE PARA O MODELO GEOMÉTRICO

Para um potencial repulsivo do tipo

$$V(R) = d/R^2 \quad (12)$$

onde d é uma constante positiva, o ângulo de espalhamento é dado analiticamente por

$$\chi = \pi(1 - 1/(1 + d^2 b/E))^{1/2} \quad (13)$$

A tabela 1 compara o ângulo de espalhamento analítico, eq. (13), com os resultados obtidos pelo modelo geométrico (eq. 11). Para este cálculo usamos $E=1\text{eV}$ e $b=1\text{\AA}$. O parâmetro d

Tabela 1. O ângulo do espalhamento χ calculado usando o modelo geométrico, eq. (11). O resultado exato obtido pela integração de (1) é 52.72° .

No. of Sector	$\chi(^{\circ})$	cpu time (seconds)
100	48.65	0.02
1000	50.65	0.13
10000	52.29	1.23
20000	52.58	4.06
50000	52.67	4.90

foi escolhido ser $1\text{eV}\text{\AA}^2$. Como pode ser visto, obtivemos uma convergência satisfatória com uma concordância excelente entre os resultados exatos e o modelo geométrico.

Na figura 2 mostramos o erro relativo para o potencial repulsivo (eq. 12). Como era esperado, para um pequeno número de setores, o erro no modelo geométrico é grande. Entretanto, com um número significativo de setores, geralmente maior do que 10^4 , resultados satisfatórios são obtidos com erros relativos que são aproximadamente 0.5%. As oscilações na figura 2 são devido ao fato de que o erro relativo é proporcional à diferença entre α 's e β 's. Em outras palavras, deveríamos esperar oscilações desde que estes ângulos dependem das funções trigonométricas inversas.

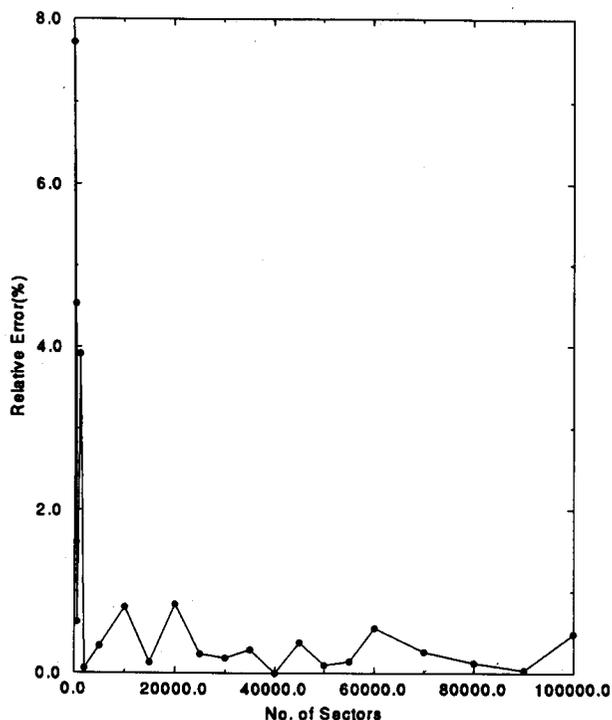


Figura 2. O erro relativo para a obtenção do ângulo de espalhamento para o potencial dado em (12).

O modelo geométrico foi também usado para calcular o ângulo de espalhamento para a colisão entre dois átomos de hidrogênio em seus respectivos estados eletrônicos fundamentais. A energia de colisão foi 2.0eV e o potencial de interação dado por

$$V(R) = D_e(1 - e^{-a_m(R-R_e)})^2 - D_e \quad (14)$$

com os parâmetros, $D_e=4.747\text{eV}$, $a_m=1.9945\text{\AA}$ e $R_e=0.7414\text{\AA}$. Para testar o ângulo de espalhamento calculado pelo modelo geométrico foi também resolvida a eq. (1) usando o método de Gauss-Mehler onde o ponto de retorno foi calculado usando o

procedimento de Newton-Raphson. Estes resultados, os quais foram convergidos com oito algarismos significativos, serão considerados como numericamente exatos. Para o potencial acima o ângulo que nos fornece o mínimo da curva $\chi(b)$, isto é, o ângulo de "rainbow"^{3,4}, obtido pelo modelo geométrico é igual a -118.32° ($b=1.97\text{\AA}$) para 60000 setores. O erro relativo considerando os resultados Gauss-Mehler como exatos é de 0.3% ($\chi=-118.64^\circ$).

Também não foi encontrado nenhum problema para cálculos de ressonância usando o modelo geométrico. Por exemplo, para o potencial de Morse, eq. (14), com uma energia de colisão de 0.1eV e $b=4.2\text{\AA}$ obtivemos $\chi=-526.74^\circ$. Esse resultado representa um erro relativo de 0.6% comparado com os resultados exatos.

CONCLUSÃO

O modelo geométrico para o espalhamento atômico apresentado neste trabalho é um método simples e portanto adequado para o entendimento e ensino dos principais pontos do espalhamento atômico clássico.

Do ponto de vista computacional não há nenhuma necessidade de se aprender uma técnica numérica adequada para o cálculo de integrais impróprias tais como na equação (1), nem de um método numérico para o cálculo de raízes de uma equação. Estas duas técnicas numéricas estão implícitas na fórmula de recorrência entre os α 's e β 's.

Este modelo geométrico, apesar de não ser competitivo com o método de Gauss-Mehler em termos de velocidade e processamento, tem o mérito de ser simples e fácil de ser implementado. O programa principal para o cálculo do ângulo de espalhamento usando o método geométrico requer somente cinco comandos, como ilustrado na figura 3. Para o método de Gauss-Mehler o mesmo programa teria, em média, 100 comandos.

AGRADECIMENTOS

Nós gostaríamos de agradecer ao Dr. Gastão de A. Braga pela troca de idéias e ao CNPq pelo suporte financeiro. Uma listagem do programa usando o método geométrico pode ser obtido com os autores pelo endereço eletrônico colisao@zeus.qui.ufmg.br ou jpbraga@zeus.qui.ufmg.br.

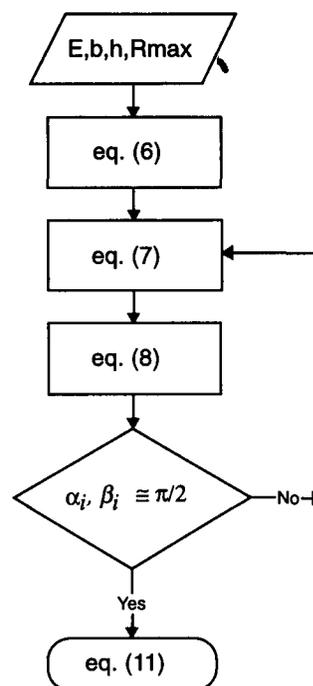


Figura 3. Diagrama mostrando o algoritmo para o cálculo do ângulo de espalhamento, eq. (11), usando o modelo geométrico. E , b , h , R_{\max} definem respectivamente a energia de colisão, o parâmetro de impacto, o tamanho do setor e a coordenada máxima de espalhamento.

REFERÊNCIAS

1. Landau, L. D.; Lifshitz, E. M.; *Mechanics*; Pergamon Press: New York, 1982.
2. Smith, F. J.; *Physica* **1964**, *30*, 497.
3. Johnson, E. R.; *Introduction to Atomic and Molecular Physics*; Plenum Press, 1982.
4. Murrell, J. N. e Bosanac, S. D.; *Introduction to the Theory of Atomic and Molecular Collisions*; John Wiley & Sons: New York, 1989.