

fica fixo entre dois dímeros de Si da superfície e ligado aos mesmos formando uma ponte TB (tight-bridge) entre os dímeros enquanto o outro anel fenil permanece afastado da superfície, temos então as configurações TBl Figura 24 e TBu Figura 25. Destacamos nas

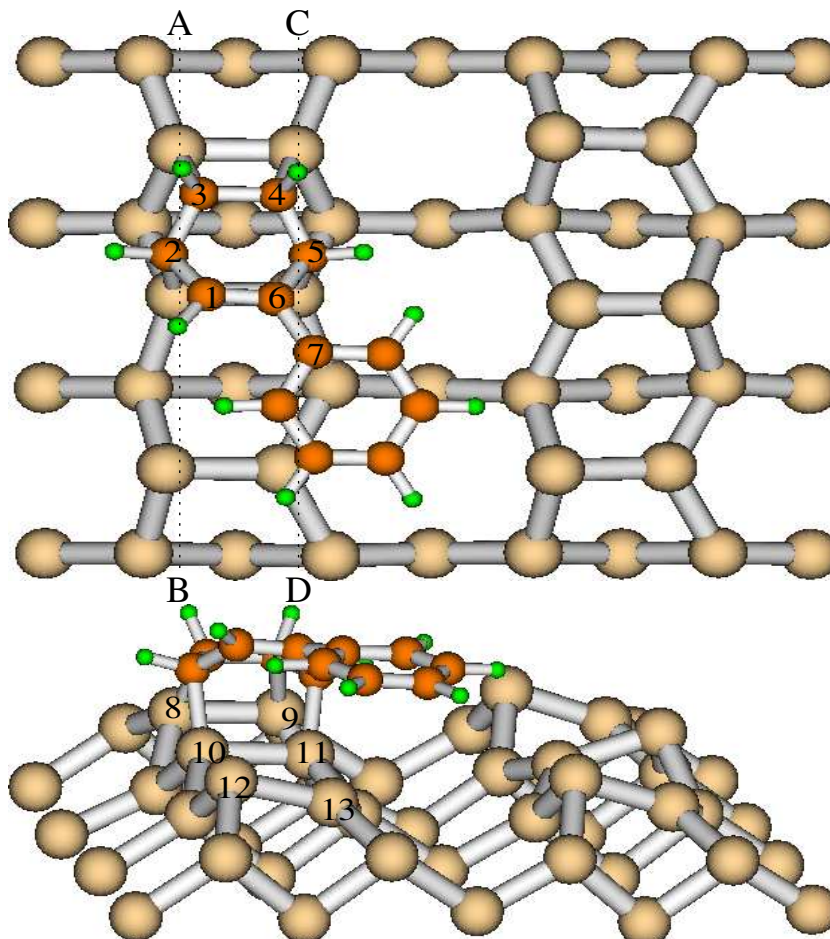


Figura 25: Configuração TBu da adsorção da molécula de bifenil propostas teoricamente destacando alguns átomos cujas distâncias interatômicas estão expressas na Tabela 8.

figuras já convergidas alguns planos (AB e CD) onde determinamos a densidade total de carga (Figura 26) e observamos que ocorre uma ligação forte, devido à intensidade do brilho ao longo da ligação molécula-superfície, observa-se também, que com a repetição de tais densidades na tentativa de gerar supercélulas vizinhas não verifica uma ligação entre as moléculas de supercélulas vizinhas.

Algumas distâncias de ligações interatômicas dessas configurações estão na Tabela 8. Observa-se que ocorre algumas distorções da molécula no ajuste das configurações e que ambas as configurações apresenta um anel fenil fazendo quatro ligações químicas com a superfície, ou seja, a molécula continua sendo quimicamente adsorvida e os cálculos com aproximação GGA deve descrever bem os resultados. Entretanto na configuração TBl os quatro átomos de carbono do anel fenil que liga à superfície são os que estão

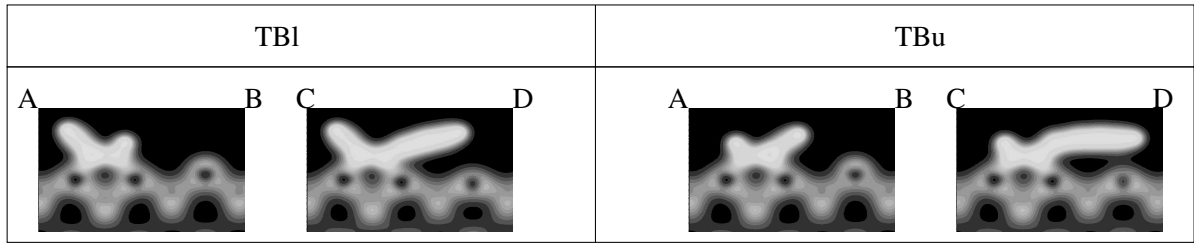


Figura 26: Densidade total de carga segundo os planos **AB** e **CD** para as configurações TBl e TBu das Figuras 24 e 25, respectivamente.

mais próximos ao segundo anel fenil da molécula que se encontra desligado da superfície (Figura 24). Já na configuração TBu os quatro átomos de carbono do anel fenil que liga à superfície são os mais afastados do segundo anel que se encontra desligado da mesma (Figura 25). Verificamos que a configuração TBu é mais estável que a TBl em 0.33 eV, em

Átomos	Configuração TBl		Átomos	Configuração TBu	
	Distâncias em Å	Deslocamento vertical em Å		Distâncias em Å	Deslocamento
1-2	1,58	0,05	1-2	1,50	0,86
2-3	1,51	1,04	2-3	1,56	0,07
3-4	1,36	0,02	3-4	1,57	0,03
4-5	1,51	1,02	4-5	1,57	0,04
5-6	1,57	0,16	5-6	1,52	0,89
6-1	1,57	0,07	6-1	1,38	0,11
6-7	1,53	0,68	6-7	1,50	0,28
1-10	2,04	-	2-10	2,02	-
2-8	1,99	-	3-8	2,06	-
5-9	2,00	-	4-9	2,03	-
6-11	2,06	-	5-11	1,97	-
8-9	2,39	0,03	8-9	2,36	0,03
10-11	2,36	0,17	10-11	2,40	0,10
12-13	2,35	0,65	12-13	2,38	0,56

Tabela 8: Distâncias entre alguns átomos da superfície Si(001)(4x3) com a molécula adsorvida, nas configurações TBl e TBu, usando aproximação GGA.

concordância com a referência [55], cujo valor é 0.35 eV. Porém as configuração Ba e a Bb, ainda apresentam maior estabilidade que a TBu em 0.12 eV e 0.05 eV, respectivamente, em desacordo com a referência [55], onde cita a configuração TBu como a mais estável possível para a adsorção da molécula de bifenil sobre a superfície de silício Si(001). Porém a referência citada não faz uso da superfície de Si de menor energia, eles consideram que as trilhas de dímeros de Si são iguais, além de utilizar bases de ondas planas. Já em nosso trabalho, uma trilha de dímeros de Si é a imagen da outra, como se houvesse um espelho entre as trilhas, formando uma superfície de menor energia e utilizamos bases localizadas.

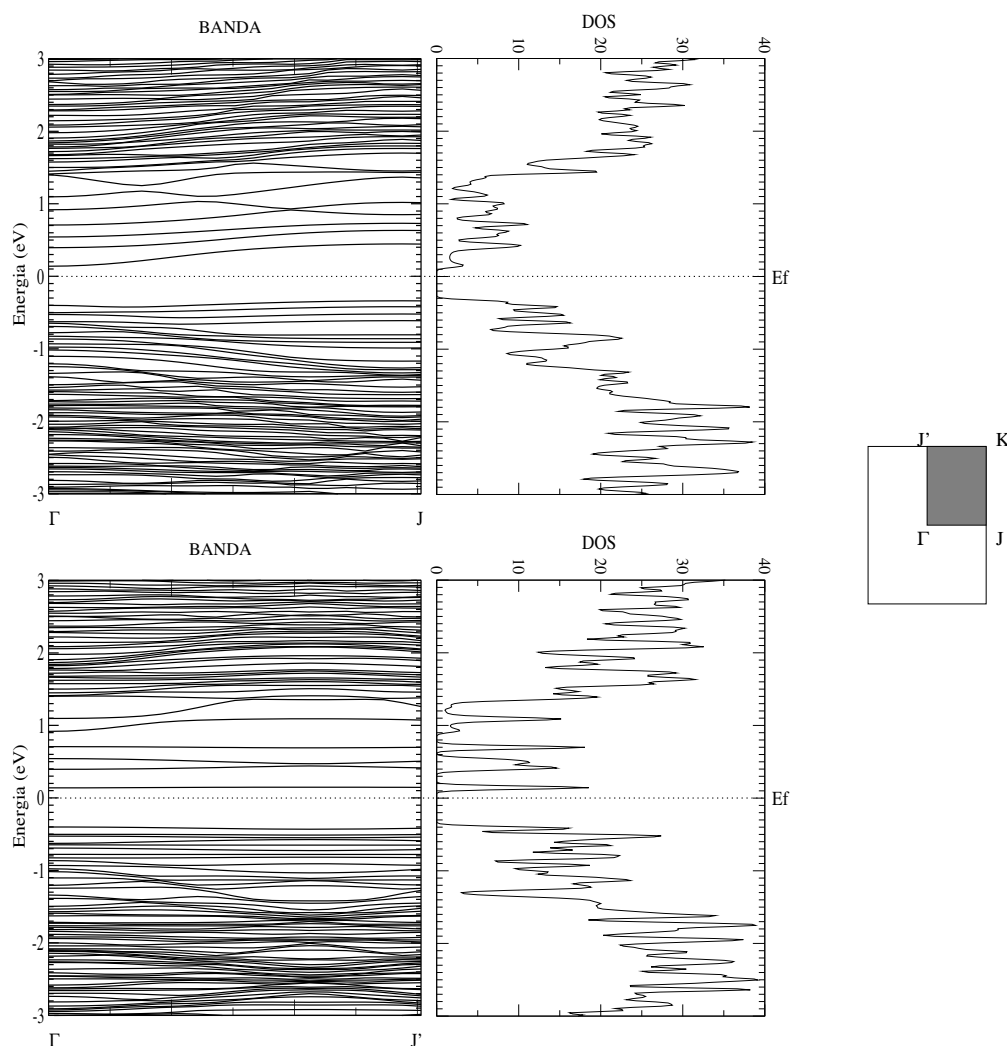


Figura 27: Banda e DOS da molécula de bifenil ligada à superfície de silício Si(001)(4x3) na configuração TBl.

Novamente verificamos através dos gráficos de estrutura de banda e da densidade de estados, Figuras 27 e 28 para as configurações TBl e TBu, respectivamente, que os estados da molécula não proporcionam alterações consideráveis na estrutura eletrônica da superfície de Si, quando comparados com os resultados obtidos para a superfície pura, Figura 14. Na configuração TBl o "gap" permanece praticamente inalterado na direção ΓJ , em torno de 0,46 eV e sofre uma pequena alteração na direção $\Gamma J'$, passando de 0,57 eV para 0,52 eV. Já a configuração TBu sofre uma pequena redução na direção ΓJ , passando de 0,46 eV para 0,42 eV e na direção $\Gamma J'$, permanece inalterado em torno de 0,57 eV.

As imagens STM das configurações TBl e TBu (Figura 29), assim como nas configurações Ba e Bb, induz a uma falsa idéia de que as moléculas de bifenil de duas supercélulas Si(001)(4x3) vizinhas estão ligadas entre si, formando uma trilha de bifenil. Podemos afir-

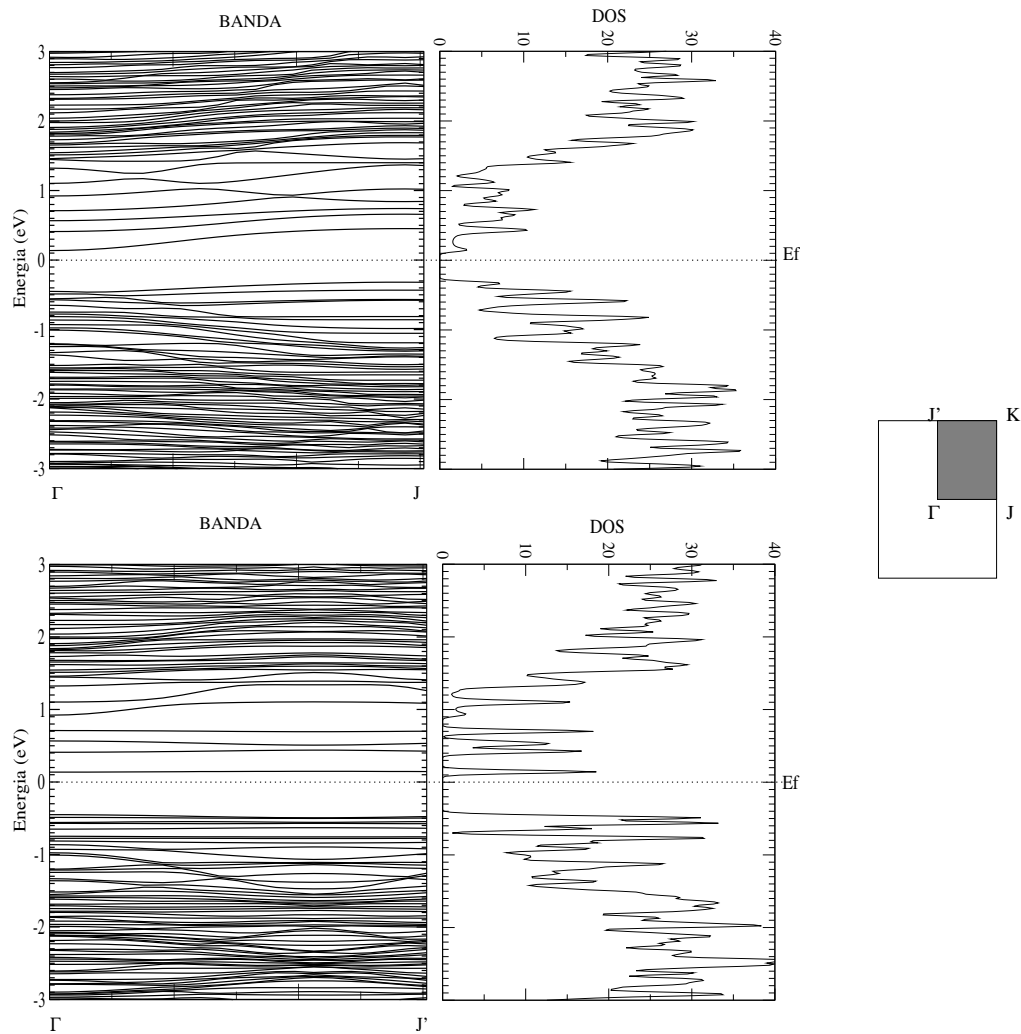


Figura 28: Banda e DOS da molécula de bifenil ligada à superfície de silício Si(001)(4x3) na configuração TBu.

mar que é uma falsa idéia, pois o gráfico da densidade total de carga nos planos de ligação molécula-superfície da Figura 26 não apresenta um contínuo de densidade de carga, apenas uma concentração de carga em torno da molécula de cada supercélula. As imagens de STM nesse caso particular de configuração gera uma suposição errônea que possa existir um canal condutor sobre a superfície, o que não é observado nos gráficos de estrutura de banda e densidade de estado do material.

Visto que as configurações Ba e Bb são mais estáveis que as configurações TBl e TBu, que as propriedades eletrônicas da superfície de Si numa supercélula Si(001)(4x3) são praticamente inalteradas com a adsorção da molécula de bifenil e que a ausência de algumas ligações da superfície de Si devido à formação de dímeros a torna bastante reativa, resolvemos passivar uma das trilhas de dímeros de Si com átomos de hidrogênio e analisar os resultados, tanto para a superfície pura com uma trilha passivada quanto para

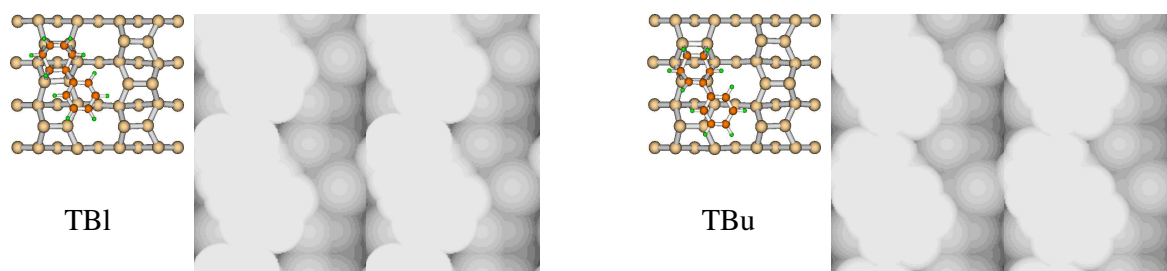


Figura 29: Imagens STM das configurações TBI e TBu numa supercélula $\text{Si}(001)(4 \times 3)$, insinuando uma possível ligação química entre as moléculas de bifeneil de duas supercélulas vizinhas.

as configurações Ba e Bb sobre essa mesma superfície com uma trilha passivada com H.

4.5 Passivando a Superfície de Si com Hidrogênio

Passivar a superfície de silício, consiste em saturar as ligações pendentes dos dímeros. Porém, a saturação não é aleatória, existe uma arbitrariedade em relação aos átomos que possivelmente podem passivar tal superfície. Imagine que a superfície em estudo está imersa na atmosfera, cuja composição consiste em nitrogênio, oxigênio, hidrogênio, gases nobres, etc. A superfície interage com o ar em busca de maior estabilidade. Cada dímero de Si da superfície possui dois átomos de Si, cada um com uma ligação pendente, como o H realiza uma ligação química é bem provável que possa ocorrer uma passivação da superfície de Si com átomos de H.

Partindo da supercélula $\text{Si}(001)(4 \times 3)$, onde já verificamos que ocorre a adsorção da molécula de bifeneil sobre uma trilha de dímeros de Si, formando uma ligação molécula-superfície, restando pois, uma trilha de dímeros de Si a qual passivamos com hidrogênio afim de induzir sobre a superfície um canal de adsorção molecular, Figura 30. Observa-se que com a passivação os dímeros se tornam planar, eliminando o ângulo de "buckling", relativo às ligações pendentes, também ocorre o afastamento entre os átomos do dímero, passando de uma distância média de $2,38 \text{ \AA}$ sem passivação para $2,43 \text{ \AA}$ com a passivação com H e a distância de ligação Si-H da superfície fica em torno de $1,53 \text{ \AA}$.

As imagens de STM da superfície (4×3) de Si pura e com uma trilha de dímeros passivada com H, Figura 31, são claramente distinguíveis, onde a superfície pura apresenta variação na tonalidade da imagem, referente à alternância do ângulo de "buckling" por toda a superfície, já a superfície com uma trilha de dímeros passivadas apresenta variação de tonalidade somente na região onde não ocorre a passivação, pois não ocorre "buckling" na região passivada.

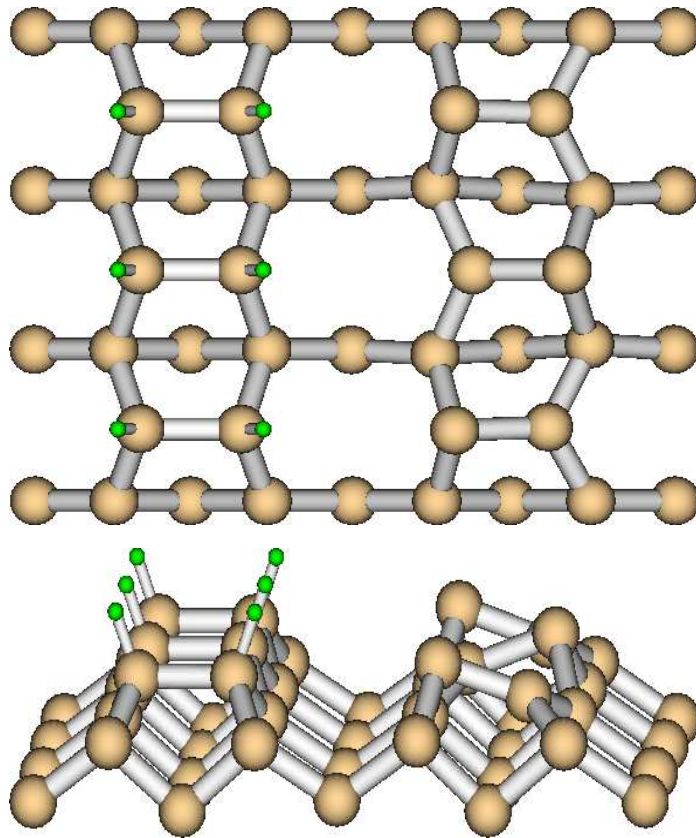


Figura 30: Supercélula Si(001)(4x3) com uma trilha de dímeros de Si passivada com átomos de H.

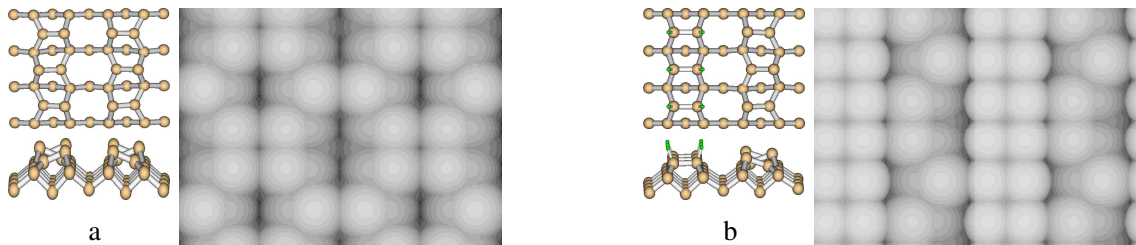


Figura 31: Imagens de STM. Em **a**, temos a superfície (4x3) de Si pura, com formação do ângulo de "buckling", determinados pela variação de tonalidade no brilho da imagem. Já em **b**, temos uma trilha de dímeros de Si passivada com átomos de H, representando uma região planar com brilho mais intenso e outra região não passivada com o ângulo de "buckling" alternado.

Os gráficos de estrutura de banda e densidade de estados, Figura 32, mostra que na direção da trilha de dímeros (ΓJ) não ocorre alterações na estrutura de banda com a passivação, quando comparada com a superfície pura o valor do "gap" continua em torno de 0,47 eV. O que é plausível, pois as ligações pendentes da trilha não passivada permanece, de forma que existe maior liberdade de movimento dos elétrons não ligados nessa direção. Porém na direção perpendicular à trilha de dímeros ($\Gamma J'$) cria pequena barreira para o movimento eletrônico devido à trilha passivada com H, de forma que ocorre

um aumento do "gap" nessa direção, passando de 0,57 eV (superfície pura) para 0,65 eV. Fizemos então, a adsorção da molécula de bifenil nas duas configurações mais estáveis (Ba

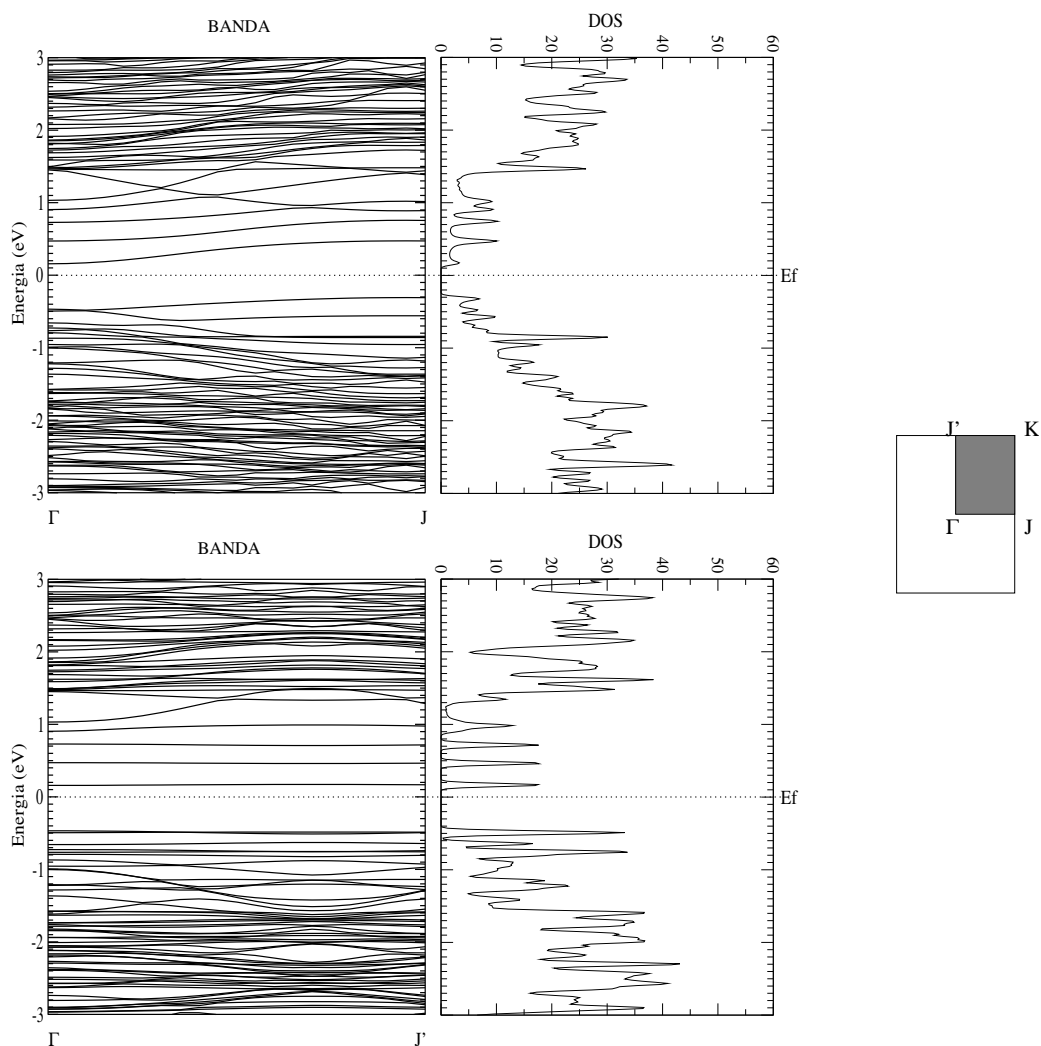


Figura 32: Estrutura de banda e DOS da supercélula Si(001)(4x3) com uma trilha de dímeros de Si passivada com átomos de H.

e Bb), sobre a superfície de Si numa supercélula Si(001)(4x3) com uma trilha de dímeros passivada com H, pois até agora, os cálculos nos mostram que a molécula de bifenil não cria nenhuma mudança eletrônica sobre a superfície de Si pura. Com o intuito de verificar se o mesmo ocorre com a superfície com uma trilha de dímeros passivada com H, atribuímos as abreviações BaP e BbP para as configurações Ba e Bb, respectivamente sobre tal superfície passivada, cujas geometrias convergidas estão representadas nas seguintes figuras: Figura 33 para a BaP e Figura 34 para a BbP. Novamente, observa-se que um anel fenil da molécula de bifenil não liga à superfície.

As distâncias interatômicas relevantes para a comparação de resultados, obtidos com as configurações Ba e Bb não passivadas da Tabela 6, estão expressas para as mesmas

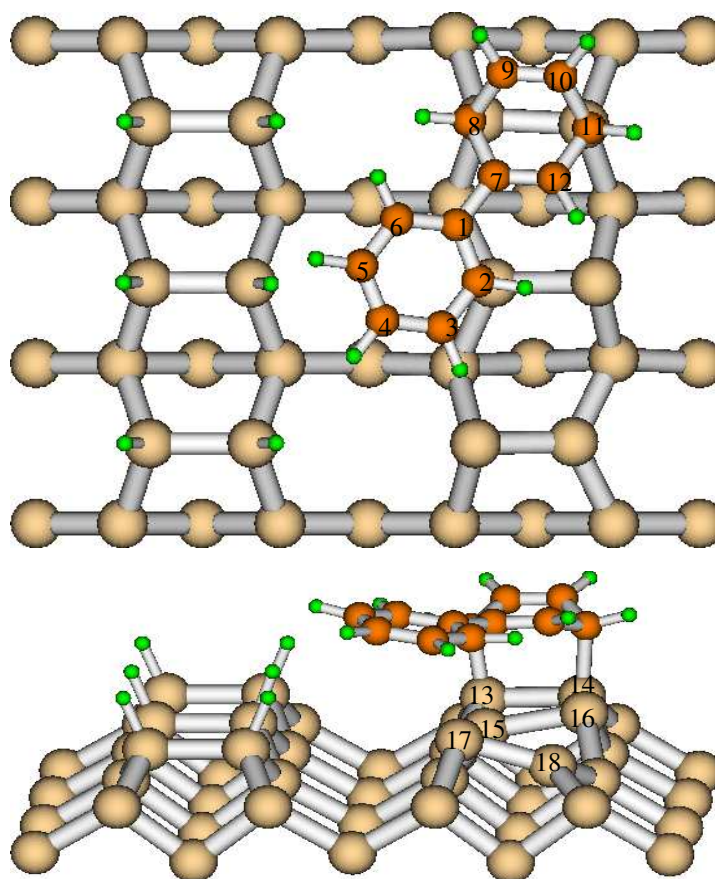


Figura 33: Configuração BaP, destacando determinados átomos para analisar algumas distâncias interatômicas. A trilha passivada possui um átomo de H ligado a cada átomos dos dímero de Si dessa trilha.

configurações passivadas com H na Tabela 9, segundo as Figuras 33 e 34. Observa-se que as variações nas distâncias interatômicas são mínimas, ou seja, a trilha passivada não influencia na configuração da molécula sobre a superfície. Entretanto, ocorre uma inversão de estabilidade, pois com a passivação, a configuração BbP é mais estável que a BaP em 0,06 eV, lembrando que para a superfície limpa (pura) a Ba é mais estável que a Bb em 0,08 eV. Portanto a passivação não influencia nas geometrias das configurações, mas sim, nas energias de formação dessas configurações. Observamos também, que a energia de adsorção da molécula permanece em torno de -2,40 eV para a configuração BbP, o mesmo valor obtido para a Bb ao passo que para a configuração BaP a energia de adsorção é maior que a Ba, -2,34 eV e -2,48 eV, respectivamente. Estabelecemos então, alguns planos da superfície para construir os gráficos de densidade total de carga, Figura 35. Verificamos pela densidade de carga, Figura 36, que existe uma pequena interação do anel fenil não ligado à superfície com um átomo de H da trilha de dímeros passivada, o que explica o fato da configuração BaP ser menos estável que a BbP, pois a interação anel-H é repulsiva, ambos se encontram saturados. Inclusive a distância média de ligação

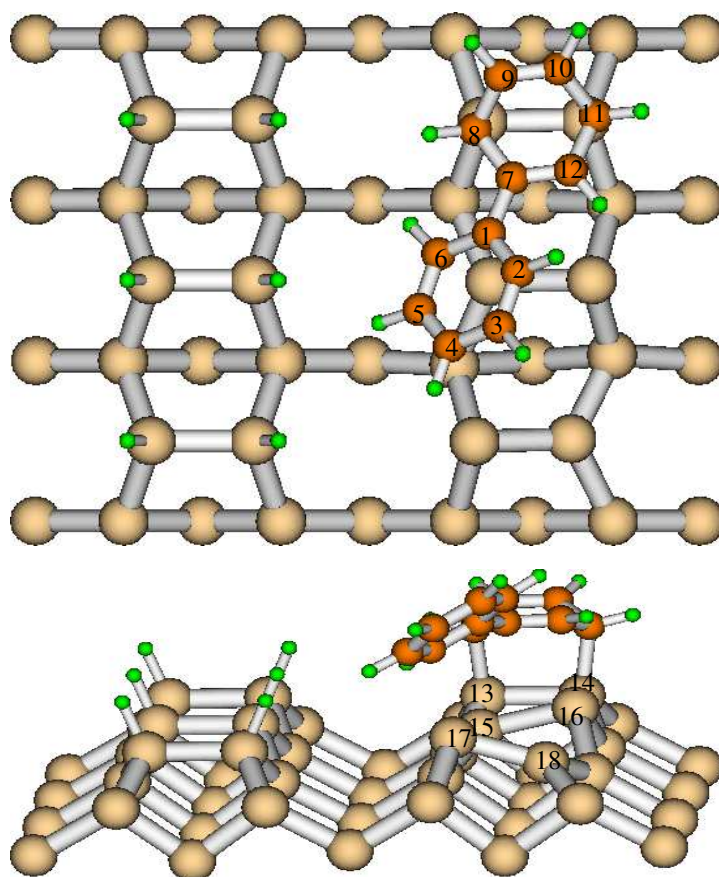


Figura 34: Configuração BbP, destacando determinados átomos para analisar algumas distâncias interatômicas. A trilha passivada possui um átomo de H ligado a cada átomos dos dímero de Si dessa trilha.

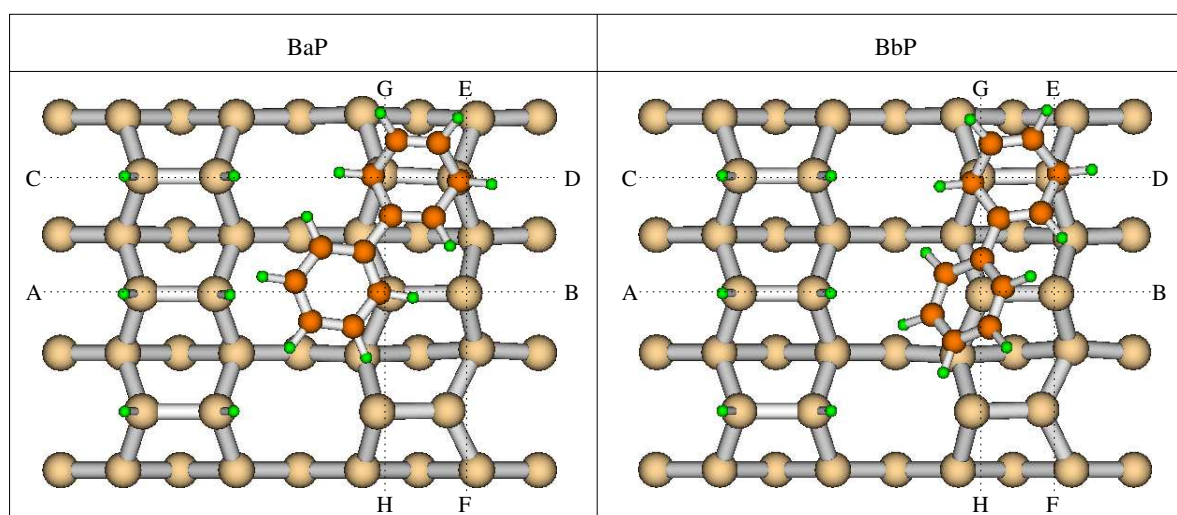


Figura 35: Superfície de Si com a molécula de bifenil adsorvida nas configurações BaP e BbP, destacando os planos de ligação molécula-superfície onde determinamos a densidade total de carga na Figura 36.

C-H da molécula é invariante, cerca de $1,11 \text{ \AA}$ nas duas configurações. Já a distância média de ligação Si-H da trilha passivada, cujo valor é $1,53 \text{ \AA}$, sofre uma única deformação

Átomos	Configuração BaP		Configuração BbP	
	Distâncias em Å	Deslocamento vertical em Å	Distâncias em Å	Deslocamento vertical em Å
1-2	1,44	0,09	1,42	0,85
2-3	1,42	0,15	1,41	0,18
2-5	2,81	0,50	2,82	1,31
2-15	-	2,53	-	3,69
3-4	1,41	-	1,41	-
1-4	2,89	-	2,88	-
1-7	1,48	0,18	1,48	0,27
7-8	1,52	0,39	1,53	0,41
7-10	2,87	0,22	2,85	0,08
8-9	1,51	0,57	-	0,51
8-11	2,81	0,11	2,83	0,01
8-13	1,97	-	1,98	-
11-14	2,00	-	1,99	-
13-14	2,41	0,07	2,41	0,02
15-16	2,46	0,47	2,44	0,58
17-18	2,38	0,72	2,38	0,75

Tabela 9: Distâncias entre alguns átomos da superfície Si(001)(4x3) com uma trilha de dímeros superficiais passivada com H e a molécula de bifenil adsorvida nas configurações BaP e BbP.

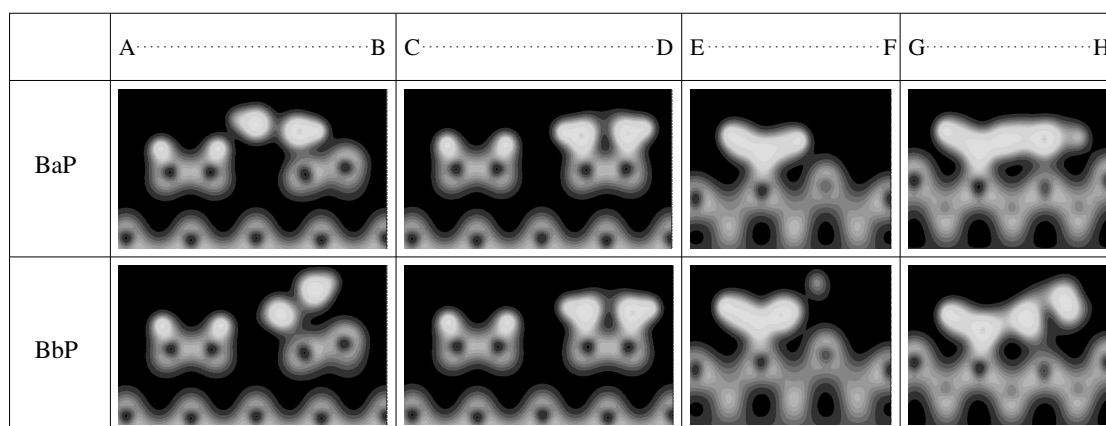


Figura 36: Gráficos da densidade total de carga nos planos indicados pela Figura 35, devido às configurações BaP e BbP.

na geometria da ligação Si-H, justamente na configuração BaP e no H que interage com o anel fenil mencionado.

Seguindo as mesmas análises adotadas anteriormente, determinamos as imagens de STM para as configurações BaP e BbP, Figura 37. As imagens não identificam a interação entre o anel fenil afastado da superfície e o H da trilha passivada. De acordo com a figura é fácil verificar que a trilha passivada é uniforme e novamente temos a impressão que as molécula de bifenil de supercélulas vizinhas estão ligadas, o que não é verificado pela

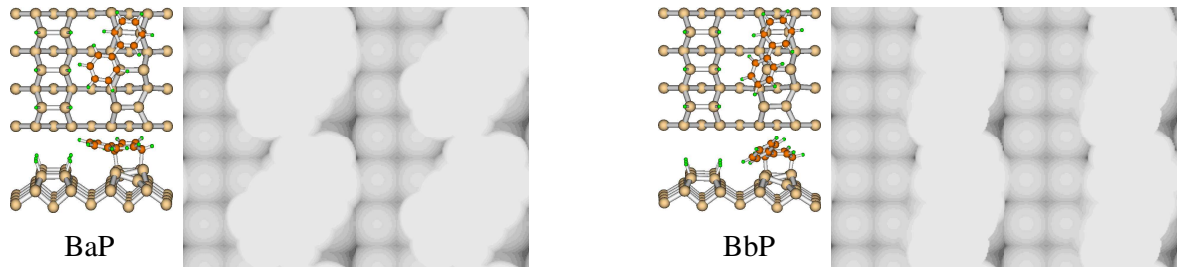


Figura 37: Imagens STM das configurações BaP e BbP, novamente dando a impressão de uma trilha de moléculas ligadas entre si sobre a superfície.

repetição geométrica da supercélula, observado pelos planos de densidade total de carga ao longo da trilha de moléculas, onde deveria ocorrer trocas de carga entre as moléculas caso estas estivessem ligadas entre supercélulas vizinhas. Os gráficos de estrutura de banda e densidade de estados para as configurações BaP e BbP, Figura 38 e Figura 39 são de

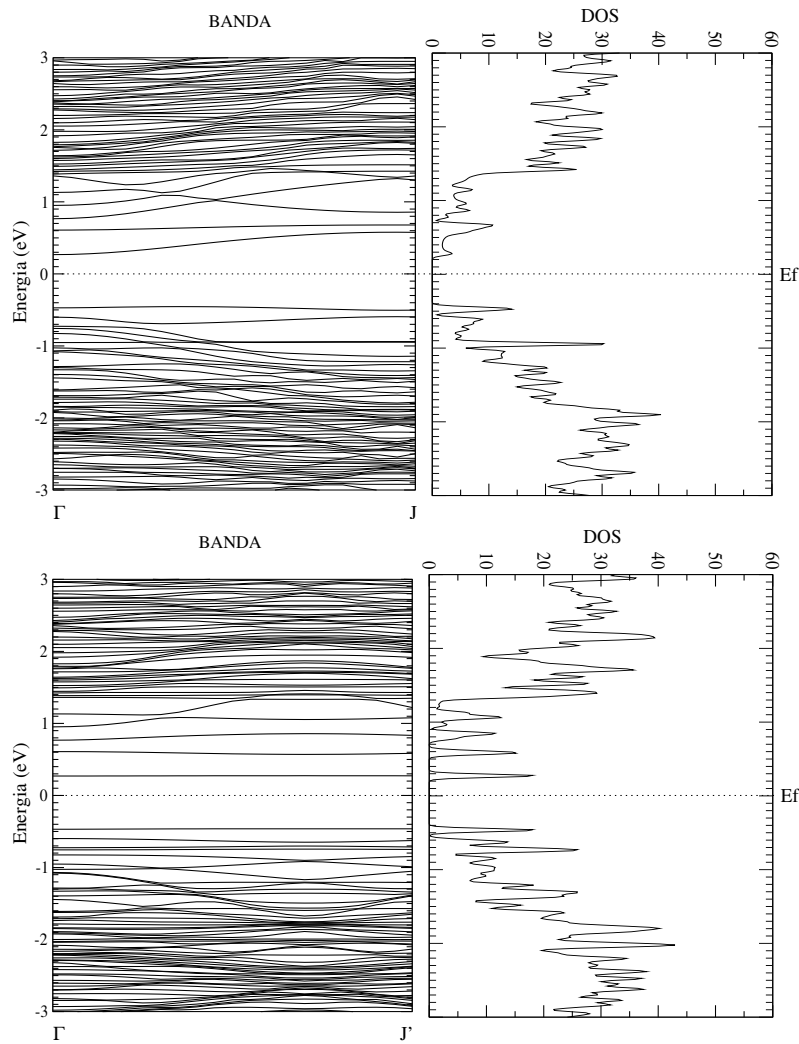


Figura 38: Gráficos de estrutura de banda e DOS da configuração BaP nas direções ΓJ e $\Gamma J'$.

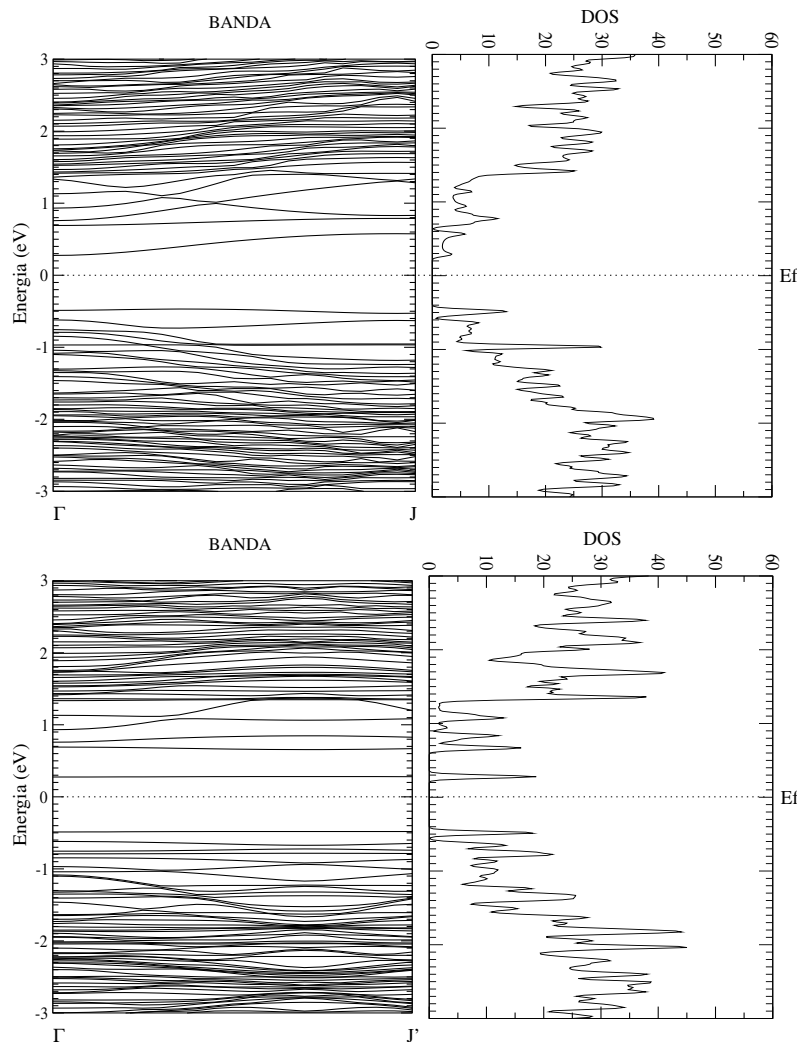


Figura 39: Gráficos de estrutura de banda e DOS da configuração BbP nas direções ΓJ e $\Gamma J'$.

grande importância para as considerações finais das propriedades eletrônicas da superfície de silício numa supercélula (4x3) com uma trilha de dímeros de Si passivada com H e com uma molécula de bifenil adsorvida sobre a mesma.

Os resultados obtidos com os gráficos de estruturas de banda das configurações BaP e BbP apresentam características diferentes das configurações anteriores, pois ocorre o alargamento do "gap" com a adsorção da molécula de bifenil, isto é, quando comparado ao "gap" da superfície limpa com uma trilha de dímeros de Si passivada com H. O "gap" BaP é 0,70 eV na direção ΓJ e 0,74 eV na $\Gamma J'$ e para a BbP é 0,73 eV na ΓJ e 0,78 eV na $\Gamma J'$. O que nos leva a crer que pelo menos para uma supercélula Si(001)(4x3) os estados da molécula não contribuem para a redução o "gap" e não é possível induzir a condução de corrente elétrica sobre a superfície de Si com a adsorção de moléculas de bifenil.

5 *Conclusão*

Nosso trabalho comprova que a molécula de bifenil é quimicamente adsorvida sobre a superfície de silício Si(001), devido a ocorrência da ligação molécula-superfície. Observamos as configurações propostas experimentalmente e confirmamos as duas configurações mais estáveis Ba e Bb, inclusive que a configuração Ba é mais estável que a Bb em cerca de 0,08 eV, um bom acordo entre teoria e experimento. Porém, não verificamos mudanças significativas na estrutura eletrônica da superfície devido a adsorção da molécula de bifenil, como propunham os experimentos, de forma que não há possibilidades de se criar conduções esporádicas de corrente elétrica sobre tal superfície.

Observamos também que, passivando uma trilha de dímeros de Si da superfície com H, cria-se uma trilha de moléculas, entretanto, essas moléculas não fazem ligações entre si, de forma que não existe um contínuo de moléculas ligadas sobre a superfície. Outro fato interessante é a inversão de estabilidade das configurações Ba e Bb, com a passivação da trilha de dímeros. Verificamos que a configuração Bb é mais estável que a Ba em 0,06 eV sobre a superfície passivada. Também é visto que, ocorre o alargamento do "gap" quando a molécula é adsorvida sobre a superfície passivada.

Os gráficos de imagens STM para uma supercélula Si(001)(4x3), indicam uma falsa ligação entre as moléculas de bifenil de supercélulas vizinhas, o que seria um canal molecular sobre a superfície e teria maior possibilidade de influenciar na estrutura eletrônica do material.

Apesar de haver uma forte ligação entre um dos anéis do bifenil e a superfície, não há significativa variação dos "gaps" de energias, o que nos leva a concluir que o bifenil não poderá alterar também de forma significativa as propriedades de transporte dessas estruturas.

Referências

- [1] Juliana Maria Alves da Silva Morbec, *Dissertação de Mestrado*, Infis-UFU (2005).
- [2] Cláudio Pereira Lima, *Monografia de Final de Curso*, Infis-UFU (2005).
- [3] J. M. Macleod, C. P. Lima, R. H. Miwa, G. P. Srivastava e A. B. Mclean, *Materials Science and Technology* **20**, 951 (2004).
- [4] R. H. Miwa, T. M. Schmidt e G. P. Srivastava, *Surf. Science* **507-510**, 368 (2002).
- [5] B. Borovsky, M. Krueger e E. Gauz, *Phys. Rev. B* **57**, R4269 (1998).
- [6] P. L. Silvestrelli, F. Ancilotto e F. Toigo, *Phys. Rev. B* **62**, 1596 (2000).
- [7] A. J. Mayne, M. Lastapis, G. Baffou, L. Soukiassian, G. Comtet, L. Hellner e G. Dujardin, *Phys. Rev. B* **69**, 045409 (2004).
- [8] A. J. Mayne, L. Soukiassian, N. Commaux, G. Comtet e G. Dujardin, *Appl. Phys. Lett.* **85**, (2004).
- [9] M. Lastapis, M. Martin, D. Riedel, L. Hellner, G. Comtet e G. Dujardin, *Science* **308**, (2005).
- [10] Richard Armiento, *Doctoral Thesis, KTH School of Engineering Sciences*, Stockholm-Sweden (2005).
- [11] João Batista de Oliveira, *Dissertação de Mestrado*, Infis-UFU (2004).
- [12] J. D. M. Vianna, A. Fazzio e S. Canuto, *Teoria Quântica de Sólidos e Moléculas*, Editora: Livraria da Física, São Paulo-SP (2004).
- [13] Roberto Hiroki Miwa, *Tese de Doutorado*, If-USP (1997).
- [14] C. J. J. Roothaan, *Reviews of Modern Physics* **23**, 69 (1951).
- [15] J. C. Slater, *Quantum Theory of Molecules and Solids*, MacGraw-Hill, New York (1963).
- [16] S. Huzinaga, J. Andzelm, M. Klobukowski, E. Radzio-Andzelm, Y. Sakai e H. Tatewaki, *Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations*, Elsevier Publ. Co., Amsterdam/New York (1984).
- [17] R. Poirier, R. Kari e R. Csizmadia, *Handbook of Gaussian Basis Sets*, Elsevier Publ. Co., Amsterdam/NewYork (1985).
- [18] J. Junquera, O. Paz, D. Sánchez-Portal e E. Artacho, *Phys. Rev. B* **64**, 235111 (2001).

- [19] D. R. Hartree, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **24**, 89 (1928).
- [20] V. Fock, *Zeits. f. Phys.* **61**, 126 (1930) e *Zeits. f. Phys.* **62**, 795 (1930).
- [21] D. Sánchez-Portal, E. Artacho, P. Ordejón e J. M. Soler, *J. Phys.: Condensed Matter* **8**, 3859 (1996).
- [22] G. Lippert, J. Hutter, P. Bellone e M. Parrinello, *J. Phys. Chem.* **100**, 6231 (1997).
- [23] S. Huzinaga, *Computer Physics Reports* **2**, 279 (1995).
- [24] A. Szabo e N. Ostlund, *Modern Quantum Chem.*, MacMillan, New York (1982).
- [25] J. Junquera, O. Paz, D. Sánchez-Portal e E. Artacho, *Phys. Rev. B* **64**, 235111 (2001).
- [26] D. Porezag, Th. Frauenheim, Th. Köhler, G. Seifert e R. Kaschner, *Phys. Rev. B* **51**, 4899 (1995).
- [27] O. F. Sankey e D. J. Niklewski, *Phys. Rev. B* **40**, 3979 (1989).
- [28] Andrew P. Horsfield, *Phys. Rev. B* **56**, 6594 (1997).
- [29] S. D. Kenny, A. P. Horsfield, Hideaki Fujitani, *Phys. Rev. B* **62**, 4899 (2000).
- [30] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **81**, 385 (1951).
- [31] P. Hohenberg e W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964).
- [32] W. Kohn e L. Sham, *Phys. Rev. A* **140**, 1133 (1965).
- [33] A palestra Nobel pode ser encontrada em <http://www.nobel.se/chemistry>
- [34] D. M. Ceperley e B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [35] J. P. Perdew e A. Zunger, *Phys. Rev.* **23**, 5048 (1981).
- [36] J. P. Perdew, K. Burke e M. Ernzenhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [37] C. Lee, W. Yang e R. G. Parr, *Phys. Rev. B* **37**, 785 (1988) e A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **98**, 5648 (1993).
- [38] J. P. Perdew e Wang, *Phys. Rev. B* **33**, 88001 (1986).
- [39] J. P. Perdew, *Phys. Rev. B* **33**, 8822 (1986).
- [40] A. D. Becke, *Phys. Rev. A* **38**, 3098 (1988).
- [41] J. White e D. Bird, *Phys. Rev. B* **50**, 4954 (1994).
- [42] S. F. Boys e F. Bernardi, *Mol. Phys.* **19**, 553 (1970).
- [43] H. Hellmann, *Einführung in Quantumchemie*, Deustsche, Leipizig (1937).
- [44] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **56**, 340 (1939).
- [45] C. Herring, *Phys. Rev.* **57**, 1169 (1940).

- [46] J. C. Phillips e L. Kleinman, *Phys. Rev.* **116**, 289 (1959); *Phys. Rev.* **116**, 880 (1959).
- [47] B. J. Austin, V. Heine e L. J. Sham, *Phys. Rev.* **127**, 276 (1962).
- [48] G. B. Bachelet, D. R. Hamann e M. Schlüter, *Phys. Rev. B* **26**, 4199 (1982).
- [49] N. Troullier e J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **18**, 5449 (1978).
- [50] A. Zunger e M. Cohen, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
- [51] J. Tersoff e D. R. Hamann *Phys. Rev. B* **31**, 805 (1985).
- [52] Charles Kittel, *Introdução à Física do Estado Sólido*, Guanabara Dois (1976).
- [53] S. C. A. Gay e G. P. Srivastava, *Phys. Rev. B* **60**, 1488 (1999).
- [54] A. Ramstad, G. Brocks e P. J. Kelly, *Phys. Rev. B* **51**, 14504 (1995).
- [55] M. Mamatkulov, L. Stauffer, C. Minot e Ph. Sonnet, *Phys. Rev. B* **73**, 035321 (2006).
- [56] Sundaram Arulmozhiraja e Toshihiro Fujii, *J. Chem. Phys.* **115**, 10589 (2001).
- [57] J. L. Brédas, G. B. Street, B. Thérans e J. M. André, *J. Chem. Phys.* **83**, 1323 (1985).