

Espalhamento elástico entre átomos de H e entre os seus isotopólogos no regime de baixas temperaturas

Felipe Oliveira Ventura^{1*}, Marcílio Nunes Guimarães¹, Frederico Vasconcellos Prudente¹, Antônio Francisco Cruz Arapiraca², Cristina Porto Gonçalves³, José Rachid Mohallem⁴

¹ Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, UFBA, Salvador, BA, Brasil.

² Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG, Brasil.

³ Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, UESB, Vitória da Conquista, BA, Brasil.

⁴ Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil.

Sinopse. Neste trabalho será apresentado um estudo teórico da colisão elástica fria entre os átomos H-H, H-D e D-D, interagindo via o potencial molecular do estado fundamental ($X^1\Sigma^+$). Serão obtidas curvas de energia potencial (CEP) com correção adiabática (FNMC) para os sistemas H_2 , HD e D_2 , no nível FCI e base aug-cc-pVQZ, e posteriormente, o comprimento de espalhamento da colisão. Para o comprimento de espalhamento será usado o método da Matriz R e a versão p do Método do Elemento Finito (p-MEF).

A técnica de aprisionamento de átomos frios (gases diluídos) em armadilhas magneto-ópticas (MOT) se tornou a principal ferramenta para a obtenção de condensados de Bose-Einstein (BEC) na matéria, rendendo em 1997 e em 2001 dois prêmios Nobel de Física [1,2]. Com o avanço nas técnicas de resfriamento e controle atômico, outras aplicações em átomos frios têm surgido [3].

Com isso, a descrição teórica do processo de colisão a baixas temperaturas tem ganhado cada vez mais atenção pelo fato de que nesse regime de temperatura (ultrafrio), os efeitos quânticos se tornam mais evidentes e também sensíveis, o que motiva a busca por cálculos precisos para as grandezas envolvidas.

Nesse trabalho será apresentado um estudo teórico da colisão elástica fria entre os átomos H-H, H-D e D-D, interagindo via o potencial molecular do estado fundamental ($X^1\Sigma^+$). O objetivo é investigar como a correção adiabática (*Correção de Massa Nuclear Finita – FNMC*) [4] influencia na descrição do potencial de interação (para curto e longo alcance) e consequentemente no comprimento de espalhamento.

A estratégia teórica é obter curvas de energia potencial (CEP) com correção adiabática (FNMC) [4] para as moléculas diatômicas H_2 , HD e D_2 no regime de baixas temperaturas, utilizando o método *full*-CI (FCI) e a base aug-cc-pVQZ. As CEP's serão ajustadas por uma função analítica de curto alcance precisa e todos os seus parâmetros serão determinados. Um potencial analítico de longo alcance que descreva a interação de Wan der Waals entre os átomos também será usado e então

interpolado ao potencial de curto alcance. Para resolver o problema de espalhamento e encontrar o comprimento de espalhamento, será utilizado o método da Matriz R combinado com a versão p do Método do Elemento Finito (p-MEF). A metodologia numérica empregada para resolver o problema de espalhamento (colisão) já foi testada por Guimarães e Prudente [5] e se mostrou satisfatória.

Os resultados encontrados serão comparados com dados da literatura [6,7,8]. Espera-se que a correção adiabática (FNMC) apresente uma melhor descrição do potencial de interação entre os átomos. Como perspectivas futuras, serão obtidas as curvas de energia potencial das moléculas ^7LiH , ^6LiH , ^7LiD e ^6LiD nos estados ($X^1\Sigma^+$) e ($a^3\Sigma^+$).

Agradecimentos: CAPES

Referências

- [1] V. S. Bagnato. *Rev. Bras. Ens. Fís.* **20**, 1-5 (1998).
- [2] Eric A. Cornell & Carl E. Wieman. *Scientific American*, **278**, 40-45 (1998).
- [3] Lincoln D. Carr¹, David DeMille, Roman V. Krems and Jun Ye. *New J. Phys.*, **11**, 1-82 (2009).
- [4] C. P. Gonçalves, J. R. Mohallem, *Theor. Chem. Acc.* **110** (2003) 367.
- [5] M. N. Guimarães, F. V. Prudente. *Eur. Phys. J. D*, **64**, 287-296 (2011).
- [6] M. J. Jamieson, A. S. C. Cheung, and H. Ouerdane. *Eur. Phys. J. D*, **56**, 181-188 (2010).
- [7] M. J. Jamieson and H. Ouerdane. *Eur. Phys. J. D*, **61**, 373-380 (2011).
- [8] X. Chu, M. J. Jamieson and A. Dalgarno. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 415-418 (2003).

*E-mail: felipeventura19@hotmail.com