

Determinação do comprimento de espalhamento para colisões H-H, H-D, H-T, D-D, D-T, T-T nos estados eletrônicos ($X^1\Sigma^+$) e ($b^3\Sigma^+$) usando um método variacional

Felipe O. Ventura¹, Marcílio N. Guimarães¹, Frederico V. Prudente¹, Antônio F. C. Arapiraca², Cristina P. Gonçalves³, José R. 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.

Palavras-chaves: Átomos ultrafrios. Cálculo eletrônico. Espalhamento quântico.

INTRODUÇÃO

O estudo de átomos ultrafrios tem proporcionado um grande avanço no domínio e controle de átomos, particularmente os alcalinos (família 1A) como Na, K, Rb e Cs, que são facilmente aprisionados e resfriados em armadilhas magneto-ópticas (MOT). Em anos recentes, várias técnicas experimentais e teóricas foram desenvolvidas para o seu estudo e novas descobertas além da condensação de Bose-Einstein (BEC) foram alcançadas (vórtices em BEC, turbulência quântica e topologia em transições de fase).

Com base nisso, abordaremos neste trabalho a colisão elástica fria entre os átomos H-H, H-D, H-T, D-D, D-T e T-T interagindo via os potenciais moleculares ($X^1\Sigma^+$) e ($b^3\Sigma^+$). Determinamos o comprimento de espalhamento (onda-s) para essas colisões atômicas fazendo uso de um

procedimento variacional para cálculos de espalhamento quântico, baseado na teoria da Matriz R e no Método do Elemento Finito (MEF).

METODOLOGIA

Os cálculos de estrutura eletrônica foram realizados no programa GAMESS com a inclusão de uma correção para a massa nuclear [1] e no nível *full-CI/aug-cc-pVQZ* para os estados fundamentais singlete ($X^1\Sigma^+$) e tripleto ($b^3\Sigma^+$). A correção adiabática utilizada se chama Correção de Massa Nuclear Finita (FNMC) [2]. Utilizamos os dados da literatura de L. Wolniewicz e colaboradores [3,4] e adicionamos a FNMC a esses dados, na tentativa de obter uma CEP com boa precisão. Utilizamos a correção counterpoise (CP) para estimar a influência do erro de superposição de bases (BSSE).

As CEP's foram obtidas numa configuração de 200 pontos e distâncias

XIX SBOQT

Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

interatômicas de 0.20 a 20.0 u.a para o ($X^1\Sigma^+$) e 105 pontos e distâncias interatômicas de 1.0 a 20.0 u.a para o ($b^3\Sigma^+$). Fizemos uma interpolação por spline cúbica para conectar o potencial de curto alcance (CEP) a um potencial de longo alcance (van der Waals + troca + correção adiabática).

Para o cálculo de espalhamento, utilizamos um procedimento variacional baseado na teoria da Matriz R e o Método do Elemento Finito (MEF) para expandir a função de onda nuclear em termos de funções de base locais [5]. Calculamos o deslocamento de fase (δ_0) e o comprimento de espalhamento para a onda parcial $l = 0$, usando o potencial com a inclusão da FNMC (puramente Born-Oppenheimer). A energia cinética relativa adotada nos cálculos foi de $E = 1.10^{-30}$ u.a. Fizemos um estudo da convergência do comprimento de espalhamento em função do $r_{\text{máx}}$ entre os átomos e também em função da ordem dos polinômios (k_i) para duas malhas diferentes, uma com $N_e = 210$ elementos e $k_i = 15$ e outra com $N_e = 420$ elementos e $k_i = 30$. Calculamos o deslocamento de fase (δ_0) para a faixa de energia 10^{-30} - 10^{-9} u.a e obtivemos, usando a teoria do alcance efetivo,

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}rk^2 + O(k^4)$$

de forma complementar, o comprimento de espalhamento (a) e o alcance efetivo (r) para as colisões H-H, H-D, H-T, D-D, D-T e T-T nos estados ($X^1\Sigma^+$) e ($b^3\Sigma^+$).

RESULTADOS

Figura 1: Curvas de energia potencial do H_2 nos estados ($X^1\Sigma^+$) e ($b^3\Sigma^+$).

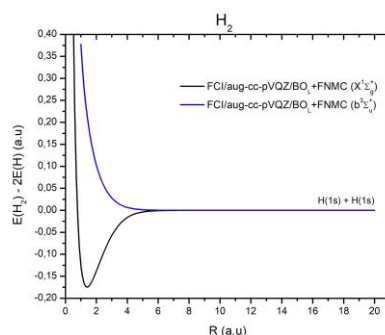


Tabela 1: Comprimento de espalhamento (em bohr) dos sistemas H-H, H-D, H-T, D-D, D-T e T-T nos estados ($X^1\Sigma^+$) e ($b^3\Sigma^+$) para a faixa de energia 10^{-30} - 10^{-9} u.a.

Sistemas	Comprimento de espalhamento			
	($X^1\Sigma^+$)		($b^3\Sigma^+$)	
	BO _{Lit.}	BO _{Lit.} + FNMC	BO _{Lit.}	BO _{Lit.} + FNMC
H-H	0,5549	0,2114	1,420	1,417
H-D	11,477	11,119	-0,297	-0,301
H-T	9,4064	9,1903	-1,379	-1,400
D-D	12,693	12,367	-6,350	-6,360
D-T	10,284	10,103	-14,18	-14,20
T-T	23,342	22,316	-64,29	-64,43

AGRADECIMENTOS

À CAPES

REFERÊNCIAS

- [1] C. P. Gonçalves, J. R. Mohallem, *J. Comput. Chem.*, **25** 1736-1739 (2004).
- [2] C. P. Gonçalves, J. R. Mohallem, *Theor Chem Acc.* **110**: 367–370 (2003).
- [3] L. Wolniewicz, *J. Chem. Phys.* **99** 1851-1868 (1993).
- [4] M. J. Jamieson, A. Dalgarno and L. Wolniewicz, *Phys. Rev. A*, **61** (2000).
- [5] M. N. Guimarães, F. V. Prudente, *Eur. Phys. J. D*, **64**, 287-296 (2011).