Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
Departamento de Física e Ciência dos Materiais

**PERDAS COLISIONAIS DEVIDO AO PROCESSO DE
MUDANÇA DE ESTRUTURA FINA EM UMA
ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA DE RUBÍDIO**

Marília Wellichan Mancini

Orientador: Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa

Dissertação apresentada ao Instituto de
Física de São Carlos, da Universidade
de São Paulo, para a obtenção do título
de Mestre em Ciências: Física básica.

OK
6/1

USP/IFSC/SBI

8-2-001275

São Carlos

1999

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA
INFORMAÇÃO

Mancini, Marília Wellichan

Perdas Colisionais devido ao processo de Mudança de Estrutura Fina em uma Armadilha Magneto-Óptica de Rubídio/ Marília Wellichan Mancini, São Carlos, 1999.

92p.

Dissertação (Mestrado) – Instituto de Física de São Carlos, 1999.

Orientador: Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa

1.Física Atômica e Molecular. 2. Aprisionamento de Átomos.

I. Título

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

E-mail: wladerez@if.sc.usp.br

Fone (016) 273-9333
Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE
MESTRADO DE MARÍLIA WELICHAN MANCINI APRESENTADA AO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE
SÃO PAULO, EM 23 DE JULHO DE 1999.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa/IFSC-USP

Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano/IFSC-USP

Prof. Dr. Cláudio Lenz Cesar/UFRJ

22/07/99 18:20

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Luis Gustavo Marcassa pela atenção, confiança demonstrada, pela presença sempre constante e amizade. É difícil agradecer somente por isso ou aquilo, de modo que preferirei aqui registrar, simplesmente, o meu muito obrigada!

Ao André Luís Oliveira, pelo auxílio na preparação e na realização dos experimentos, e sobretudo pelo companheirismo e amizade.

À Kílvia Magalhães pelo auxílio prestado na realização dos experimentos pela ajuda com o *laser* pulsado, e pelo coleguismo e amizade.

Ao Daniel Magalhães por ajudar na estabilização dos *lasers* de diodo.

Ao Ricardo Zanon, pela troca de informações e sugestões feitas.

Aos demais colegas do Grupo de Óptica, em especial aos colegas do laboratório de Física Atômica, pelo convívio e coleguismo.

Ao Prof. Reginaldo Napolitano pelos conhecimentos transmitidos, discussões esclarecedoras, e pelas valiosas sugestões e críticas. Agradeço enormemente sua colaboração.

À secretária do grupo de óptica, Isabel, e ao pessoal das oficinas mecânica e de óptica pelos auxílios prestados.

Ao meu pai, Prof. Eddie, e também a minha tia, Prof.^a Solange, principalmente pelo primeiro exemplo dado de dedicação ao trabalho científico.

À minha mãe, Daisy, e à minha avó Helena, à quem dedico este trabalho, pelo incentivo, carinho, confiança, e por tudo o que devo a vocês....

Ao Igor, pela criança iluminada que você é... Por tudo aquilo o que descobrimos e aprendemos juntos.

À Nivalda por ajudar a cuidar do Igor em muitos dos momentos em que não eu pude fazê-lo.

Ao Gustavo Telles pelo amor, carinho, companheirismo, e por ter estado ao meu lado em todos os momentos...

À Capes pelo apoio financeiro.

À minha avó, Helena Mancini, e à minha mãe,

Daisy Wellichan Mancini

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

RESUMO

ABSTRACT

I	INTRODUÇÃO	1
II	COLISÕES FRIAS	
II.1	<i>Características gerais das colisões frias e ultrafrias</i>	11
II.2	<i>Processos colisionais entre átomos aprisionados em um MOT</i>	18
II.3	<i>As interações atômicas e os estados moleculares</i>	25
II.4	<i>Os mecanismos de mudança de estrutura fina</i>	31
II.5	<i>Os potenciais de interação de longo alcance</i>	34
II.6	<i>O Modelo Gallagher - Prutchard</i>	40
III	OBSERVAÇÃO DE COLISÕES COM MUDANÇA DE ESTRUTURA FINA	48
III.1	<i>Dependência do coeficiente de taxa com a intensidade</i>	53
III.2	<i>Montagem e procedimento experimental</i>	53
III.3	<i>Resultados e Discussões</i>	59
III.4	<i>Dependência do coeficiente de taxa com a frequência</i>	63
III.5	<i>Montagem e procedimento experimental</i>	68
III.6	<i>Resultados e Discussões</i>	70
III.7	<i>Testes para comprovação da ionização a partir do estado $5P_{1/2}$</i>	76
IV	CONCLUSÕES	79
V	APÊNDICE	83
VI	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	87

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: Representação esquemática das curvas de potencial envolvidas nos processos de RE e FSC em Rb.	20
FIGURA 2: Esquema de ionização fotoassociativa em Rb.	23
FIGURA 3: Esquema de blindagem óptica de colisões inelásticas.	24
FIGURA 4: Orientação dos dipolos atômicos em misturas de estados S+P, e a classificação dos estados moleculares resultantes.	27
FIGURA 5: Curvas de potencial do dímero Rb ₂ , construídas a partir de dados químicos quânticos de Foucrault et al. para $R < 20$ ao, conectadas aos cálculos assintóticos de Marinescu e Dalgarno, correlacionadas ao limite de dissociação S+P	32
FIGURA 6: Esquema mostrando as possibilidades consideradas na probabilidade de cruzamento entre as curvas, considerando-se que o par encontra-se inicialmente no estado $S_{1/2}+P_{3/2}$, transicionando para o estado $S_{1/2}+P_{1/2}$ (a).	46
FIGURA 7: Diagrama esquemático mostrando os níveis atômicos e as transições acessadas pelos <i>lasers</i> no experimento; à esquerda temos representadas as transições de operação do MOT, e à direita as transições de detecção dos íons formados.	56
FIGURA 8: Sistema experimental utilizado na ionização dos fragmentos atômicos gerados por FSC, e também para o estudo da taxa de perdas com a intensidade do <i>laser</i> de aprisionamento.	58
FIGURA 9: Curva mostrando o perfil de densidade das amostras de átomos aprisionados.	59
Figura 10 : Evolução da taxa de perdas devido a mudança de estrutura fina com a intensidade do laser de aprisionamento.	60
FIGURA 11: Esquema de níveis envolvidos na dinâmica do número de átomos no estado $5P_{1/2}$, utilizada no cálculo da taxa de perdas por FSC.	62
FIGURA 12: Esquema do sistema experimental utilizado para o estudo da taxa de perdas por FSC como função da frequência do <i>laser</i> de catálise, em presença do <i>laser</i> pulsado.	69
FIGURA 13: Evolução da taxa de perdas devido a mudança de estrutura fina com a frequência	71
FIGURA 14: Visão expandida das curvas de potencial $3u$ do ^{85}Rb na região de acoplamento hiperfino do estado $S_{1/2}+P_{3/2}$.	74
FIGURA 15: Espectro de íons mostrando a região onde encontra-se o pico referente à transição de ionização dos átomos que sofreram FSC.	77
FIGURA 16: Gráfico mostrando a dependência do número de íons formados a partir de átomos que sofreram FSC com o quadrado da intensidade do <i>laser</i> pulsado.	77

RESUMO

Observamos neste trabalho o processo de mudança de estrutura fina em colisões entre átomos de ^{85}Rb resfriados e aprisionados em uma armadilha magneto-óptica. Medimos, através da fotoionização de fragmentos atômicos gerados nessas colisões, as taxas segundo as quais os átomos deixam a armadilha induzidos por esse processo colisional. Realizamos estudos das taxas de perda com relação à intensidade do *laser* de aprisionamento e com a frequência, utilizando para isso a técnica de catálise. Nossos resultados indicam que a contribuição do processo de mudança de estrutura fina para a taxa de perdas total não é dominante. Constatamos que a estrutura hiperfina desempenha um papel importante na dinâmica colisional e na determinação dos valores das taxas. Interpretamos nossos resultados através de um modelo semi-clássico, sendo que este foi incapaz de explicar todos os efeitos observados. Propusemos algumas explicações qualitativas para as discrepâncias observadas. Acreditamos que nossos resultados devam servir de estímulo para novos trabalhos teóricos nesta área.

ABSTRACT

We report the observation of trap-loss collisional rates due to fine structure changing collisions between cold and trapped ^{85}Rb atoms. We have measured, by photoionization of the atomic fragments in $5P_{1/2}$ state originated in these collisions, the rates through the atoms leave the trap induced by this loss mechanism. We carried out experiments to determine the rate dependence with the intensity of the trapping laser, and with the frequency, using the catalysis technique. We also measured the contribution of this process to the total trap-loss rate and determined that fine structure changing is not the dominant loss mechanism. It was also observed that the hyperfine structure plays an important role in the rate behavior. We compared our results with those given by a semiclassical theoretical approach, the Gallagher-Pritchard model, and some disagreements were observed. We proposed some arguments to explain these discrepancies. We believe that such results should stimulate theoretical work on this field..

CAPÍTULO I: INTRODUÇÃO

Colisões entre átomos neutros a muito baixas temperaturas tornou-se um fascinante objeto de estudo desde que passou a ser possível estudá-las sob condições controladas em armadilhas magneto-ópticas (MOTs). Devido aos avanços nas técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos neutros, ocorridos ao longo da última década, é possível obter-se amostras de átomos alcalinos em regiões de temperatura que podem ser definidas como frias ou mesmo ultrafrias. Além disso, as densidades atômicas obtidas nessas armadilhas são altas o suficiente para que colisões e outros efeitos de interação [1] entre os átomos tenham um efeito apreciável sobre observáveis experimentais. Nesse contexto, a armadilha magneto-óptica [2] tornou-se a principal ferramenta no estudo de colisões frias na presença de luz ou mesmo de colisões entre átomos no estado fundamental, que ocorrem no escuro em uma armadilha magnética, da qual a armadilha magneto-óptica é um passo necessário para sua obtenção.

Colisões frias em presença de campos de radiação começaram a chamar a atenção de pesquisadores quando tornou-se claro que os números de átomos e densidades que podem ser obtidos em armadilhas são afetadas pelas interações entre os átomos [3]. Dessa forma, num primeiro momento, a realização de experimentos nessa

área visava compreender os processos colisionais que limitavam a eficiência das armadilhas.

Os primeiros experimentos foram realizados em armadilhas obtidas através de feixes atômicos desacelerados [4,5,6,7]. As amostras oriundas de feixes desacelerados apresentam temperaturas da ordem de alguns milikelvins e densidades de aproximadamente 10^{9-10} átomos/cm³. Porém, o passo de desaceleração se faz necessário pois a armadilha só é capaz de aprisionar átomos com velocidades menores que 20m/s (caso do sódio), e um sistema de desaceleração impõem complicações adicionais à montagem experimental. Entretanto, após a implementação da armadilha magneto-óptica carregada a partir de uma célula de vapor (VCMOT)[8], experimentos na área de colisões frias tornaram-se mais difundidos, sendo esse o tipo de armadilha por nós utilizada nos experimentos realizados. Existem ainda outras modalidades de armadilhas, variações do MOT, específicas para distintos tipos de experimentos, como por exemplo o FORT [9], e o dark-spot MOT [10].

Outras motivações também levaram à desenvolvimentos significantes na recente área das colisões frias. Uma das mais interessantes aplicações de colisões atômicas em tal regime de temperatura é a espectroscopia fotoassociativa, proposta por Thorsheim *et al.* [11], onde essas colisões são estudadas em espectroscopia de alta resolução de estados moleculares de longo alcance, fracamente ligados, incluindo estudos de ionização fotoassociativa. Experimentos típicos envolvem o resfriamento e aprisionamento dos átomos em MOT's, ou em FORT's. Esta técnica tem sido usada com muito sucesso em medidas de precisão de parâmetros atômico-moleculares relacionados aos potenciais interatômicos de longo alcance, incluindo tempos de vida

radiativos [12–14] e comprimentos de espalhamento [15,16]. Os espectros fotoassociativos podem ser gerados através da utilização de duas principais técnicas, de detecção de *trap-loss* (*Na* [17], *Rb* [18], *K* [19]) e ionização de estados moleculares excitados utilizando uma, ou duas frequências (*Na*[20], e *Rb* [21]). A técnica de detecção de íons é particularmente eficiente na detecção dos estados de longo puro alcance[22,23]. Existe ainda uma terceira técnica para a detecção do espectro fotoassociativo, a espectroscopia de fragmentação de estados moleculares de longo alcance (*fragmentation spectroscopy of predissociating long-range molecular states*) [24]. Esta técnica foi utilizada na observação da predissociação do estados de longo alcance 0_u^+ e do estado de puro longo alcance 1_g do potássio por Wang, em 1998. A utilização de espectroscopia fotoassociativa na observação de colisões com mudança de estrutura fina deve ser provavelmente mais poderosa para espécies mais pesadas como *Rb* e *Cs*, uma vez que estes elementos possuem maiores taxas de predissociação devido às suas fortes interações spin-órbita.

Em espectroscopia fotoassociativa, a frequência de um *laser* de prova é varrida, e o sinal devido à formação molecular através da fotoassociação de dois átomos colidindo em seus estados fundamentais é detectado. A detecção do sinal “produto” *versus* a frequência determina as posições dos níveis ligados excitados rotacionais-vibracionais de estados moleculares correlacionados aos estados de um átomo no estado 2S e um átomo no estado 2P . Estes níveis são os estados intermediários no processo de espalhamento levando ao produto final, que pode ser um íon molecular, e no caso dos espectros de *trap-loss* espécies não-aprisionadas.

Em adição às motivações anteriores para o desenvolvimento do estudo de processos colisionais temos ainda uma questão, relevante ao regime ultrafrio, concernente ao papel desempenhado pelas colisões na obtenção e no comportamento de gases bosônicos e fermiônicos no regime quântico degenerado. Efeitos estatísticos quânticos foram observados e estudados nos fenômenos de superfluidez do ^4He líquido e na supercondutividade em ligas metálicas em altas temperaturas. Essas manifestações macroscópicas de efeitos quânticos coletivos são, porém, difíceis de serem estudadas em nível atômico devido à razão das partículas estarem condensadas e serem altamente interagentes. Observações e medidas realizados em gases diluídos fracamente interagentes entretanto, podem auxiliar na elaboração de modelos microscópicos capazes de explicar tais fenômenos. As diferenças entre um gás quântico “ideal” e gases quânticos “reais” começam com interações binárias entre as partículas; deste modo o estudo de colisões ultrafrias representa um papel singular neste contexto.

Um dos maiores fatores motivantes ao estudo de colisões entre átomos neutros ultrafrios no estado fundamental relaciona-se à obtenção da Condensação de Bose-Einstein (BEC), obtida primeiramente em amostras de átomos alcalinos [25 – 28], e mais recentemente, em um gás de hidrogênio polarizado [29], que constitui a melhor aproximação daquilo que podemos ter de um gás ideal de partículas idênticas não interagentes (átomos de hidrogênio de *spins* alinhados interagem, porém o fazem muito fracamente), que Bose e Einstein tinham em mente quando predisseram uma ocupação macroscópica, abaixo de certa temperatura, de um estado fundamental comum, com os átomos essencialmente em repouso.

Colisões envolvendo átomos no estado fundamental desempenham um papel crucial tanto na obtenção do condensado quanto na determinação de suas propriedades. Colisões elásticas são necessárias no processo de resfriamento evaporativo, e a estabilidade e outras propriedades dependem do sinal e da magnitude do comprimento de espalhamento.

Uma vez que se tenha átomos aprisionados, a diminuição da profundidade da armadilha permite que átomos mais quentes escapem, e aqueles que permaneceram aprisionados termalizem a temperaturas mais baixas via colisões. Esse é o princípio do resfriamento evaporativo, que requer um controle preciso e efetivo da variação da profundidade da armadilha, o que pode ser alcançado com o acoplamento de estados de spin com o uso de rádio-frequência (rf)[30]. A taxa de resfriamento evaporativo na obtenção do condensado depende da seção de choque de espalhamento elástico, a qual é proporcional ao quadrado da amplitude do comprimento de espalhamento da onda s ; o sinal do comprimento de espalhamento nos fornece informações acerca da estabilidade do condensado: comprimentos de espalhamento grandes e positivos levam a condensados estáveis, enquanto que negativos, como no caso do Li , apenas em situações especiais. O processo de evaporação depende da transferência de momento através das colisões elásticas para termalizar o gás de átomos aprisionados enquanto o potencial de aprisionamento é diminuído. Este tipo de colisões são denominadas "boas"[31]. Durante a evaporação a taxa de colisões inelásticas, que destroem os estados aprisionados e são consideradas "más", deve permanecer muito menor que a taxa de colisões elásticas. Vale ainda lembrar que o tempo de vida de um condensado também é determinado pelos processos colisionais.

O domínio das colisões ultrafrias foi recentemente atingido em vários experimentos. Porém, o tratamento teórico desta região é complicado devido ao momento do par colidindo ser extremamente baixo, e o recuo ocasionado pela absorção ou emissão de um fóton tornar-se importante. A dificuldade consiste em incluir esse efeito nos modelos semi-clássicos, e nos modelos totalmente quânticos o recuo não pode ser tratado adequadamente num sistema de coordenadas fixo à molécula. Para o recuo devido à absorção necessitamos conhecer a orientação do eixo molecular em relação ao *laser-field*. Outra dificuldade advém do fato de que à temperaturas muito baixas o comprimento de onda de de Broglie torna-se extremamente longo e os átomos não podem distinguir-se um dos outros, e assim não é possível definirmos uma colisão numa maneira semi-clássica, isto é, como um processo no qual os átomos encontram-se inicialmente separados, aproximam-se e tornam a se separar novamente.

Atualmente, também vêm sendo realizados estudos experimentais em amostras mistas, nas quais são observados processos colisionais binários envolvendo átomos de espécies alcalinas distintas [32,33].

Neste trabalho nos restringiremos ao estudo de processos colisionais de *trap-loss*, especificamente no mecanismo de perdas **mudança de estrutura fina**, resultante de transições não-adiabáticas que ocorrem durante uma colisão envolvendo um átomo no estado fundamental e outro no estado excitado quando estes encontram-se à pequenas distâncias internucleares.

Com o aumento da densidade de átomos aprisionados, colisões inelásticas tornam-se importantes na dinâmica da nuvem atômica, uma vez que restringem e limitam o número e a densidade das amostras de átomos alcalinos

aprisionados. Entre esses processos colisionais, podemos citar o **escape radiativo** (RE) e a **mudança de estrutura fina** (FSC) como os principais mecanismos de perdas de átomos no regime de altas intensidades do *laser* de aprisionamento, devido a colisões envolvendo um átomo no estado fundamental e outro no estado excitado. O *detuning* e a intensidade dos *lasers* de resfriamento e aprisionamento desempenham um papel crucial na eficiência do resfriamento e na profundidade da armadilha, assim como na população do estado excitado, portanto é interessante entender-se a dependência desses fenômenos com relação a esses dois parâmetros.

Em condições especiais de operação da armadilha (no regime de baixas intensidades do *laser* de aprisionamento), temos um terceiro mecanismo de perdas, a **mudança de estrutura hiperfina** (HCC), resultante de colisões entre dois átomos no estado fundamental, com transferência de energia cinética aos átomos numa forma similar à FSC.

O objetivo deste trabalho é estudar o comportamento das taxas de perdas referentes às colisões com mudança de estrutura fina, e também discriminar a contribuição desse processo frente a taxa de perdas total, da qual participam ambos os processos RE e FSC conjuntamente. A possibilidade de fazer-se uma distinção entre esses dois mecanismos é importante porque permitiria uma comparação mais precisa com a teoria, possibilitando um melhor entendimento das colisões frias exoérgicas.

Nosso grupo mediu recentemente a contribuição do processo de FSC em ^{85}Rb , utilizando um *laser* contínuo [34]. Um dos principais problemas neste experimento foi a relação sinal-ruído. Neste trabalho utilizamos uma técnica similar, porém muito mais eficiente, que consiste na fotoionização, por um *laser* pulsado, de fragmentos

atômicos no estado $5P_{1/2}$ gerados em colisões de FSC. Além disso, determinamos a contribuição desse mecanismo de *trap-loss* à taxa de perdas total. As vantagens da técnica por nós utilizada são discutidas no capítulo destinado ao estudo experimental das colisões de FSC.

Outros dois trabalhos possuindo o mesmo propósito, de observar diretamente o processo de FSC, foram realizados por dois outros grupos, que utilizam técnicas distintas entre si, e também com relação à nossa. No trabalho feito por Fioretti *et al.* [35], a perda de átomos de um MOT de *Cs* induzida por colisões de FSC é medida diretamente pela contagem dos fótons emitidos na linha D1, com os *lasers* de aprisionamento operando na linha D2. Em outro experimento, utilizando átomos de potássio, Wang e colaboradores [24], através da técnica de detecção de íons, mediram o espectro de *trap-loss* e utilizando espectroscopia de fragmentação estimaram o alargamento de linha devido à predissociação dos estados 1_g e 0_u^+ , de onde concluíram que esse segundo estado tem principal contribuição no processo de FSC. A técnica de detecção de íons, entretanto, é mais eficiente frente àquela que emprega a contagem de fótons pois apresenta uma eficiência próxima a 100%, enquanto que a detecção dos fótons emitidos pela nuvem atômica tem sua eficiência restringida pelo fator que incorpora o ângulo sólido disponível à fotomultiplicadora para a captação da fluorescência. Existe também um outro trabalho realizado recentemente por Bigelow *et al.* [36], ainda não publicado, onde foram medidas taxas, separadamente, atribuídas à RE e FSC.

No Capítulo II fazemos uma breve abordagem dos conceitos envolvidos no entendimento e tratamento das colisões entre átomos frios na presença de luz *laser*, e

das principais características apresentadas por essas colisões em regimes de baixas temperaturas. Neste capítulo discutiremos sobre os processos colisionais que podem ser estudados em um MOT, especialmente aqueles que levam a perdas de átomos (colisões exoérgicas), diferenciando-os entre si e dos eventos colisionais que não interferem na dinâmica do número de átomos contidos na amostra aprisionada (colisões inelásticas e elásticas, respectivamente). Ao final do capítulo é feita a apresentação do modelo teórico utilizado no tratamento e na interpretação dos resultados experimentais. Trata-se do modelo elaborado por Gallagher e Pritchard [37], que tem fornecido, até o momento, através de uma abordagem semi-clássica dos processos colisionais entre átomos, uma boa concordância qualitativa com os experimentos, sendo amplamente utilizado com a finalidade de tratar teoricamente os processos de perdas. Neste, o estudo das colisões exoérgicas ocorrendo entre um átomo no estado fundamental e outro no estado excitado é realizado através das taxas segundo as quais os átomos escapam da armadilha. Este modelo teórico, entretanto, mostrou-se incapaz de explicar certas peculiaridades dos resultados experimentais obtidos nesse trabalho. As limitações deste modelo semi-clássico simples serão discutidas e proporemos então possíveis explicações para as particularidades apresentadas pelas taxas de perdas medidas, não previstas pela teoria. Nossos resultados corroboram a predição feita à partir de resultados experimentais obtidos por Hoffmann *et al.* [38], sobre a importância desempenhada pela estrutura hiperfina no processo de excitação e nas perdas colisionais resultantes.

O Capítulo III destina-se ao estudo experimental das colisões com mudança de estrutura fina, incluindo a montagem e o procedimento experimental, passando antes por um breve histórico acerca de experimentos de *trap-loss* previamente

realizados, os quais destinavam-se a medir a taxa de perdas total, sem contudo fazer uma distinção entre a contribuição de cada um dos processos colisionais (RE e FSC).

As conclusões referentes aos resultados obtidos, assim como propostas para trabalhos futuros, são apresentadas no Capítulo IV.

CAPÍTULO II: COLISÕES FRIAS

II.1: Características gerais das colisões frias e ultrafrias

Para átomos com energias cinéticas abaixo de 1K, muitas idéias concernentes a colisões envolvendo partículas pesadas, ou mesmo colisões atômicas ocorrendo à altas temperaturas devem ser revistas. Colisões entre átomos frios, na presença ou ausência de campos de radiação, nos revelam uma nova física em domínios onde escalas de comprimento, tempo e largura de linha espectral apresentam-se diferentes de suas relações convencionais. Em tal regime de temperatura, o comprimento de onda de de Broglie torna-se ordens de magnitude maior que o alcance da força de ligação química; os tempos colisionais tornam-se longos se comparados aos tempos de vida radiativos, de modo que a emissão espontânea passe a desempenhar um papel proeminente na dinâmica colisional. Além disso, a largura de linha inhomogênea (largura Doppler) em temperaturas frias passa a ser comparável à largura de linha natural da transição atômica de dipolo, podendo em temperaturas ultrafrias estreitar-se para menos que a largura natural, permitindo a realização de espectroscopia de altíssima resolução.

As baixas energias colisionais determinam que os átomos sejam extremamente sensíveis aos potenciais de interação interatômicos e assim passem a enxergarem-se mesmo a longas distâncias, e desta forma as interações fracas de

longo alcance passam a controlar a probabilidade de eventos inelásticos. A frequência, a intensidade e a polarização do campo óptico podem modificar os potenciais de interação e alterar drasticamente os produtos finais de uma colisão.

Uma colisão atômica convencional, ocorrendo à temperatura ambiente, dura apenas poucas centenas de fentosegundos, tempo muito curto se comparado às dezenas de nanosegundos requeridos para que os átomos no regime ultrafrio completem o encontro colisional. Os longos tempos de colisão asseguram aos átomos interagentes tempo suficiente para que absorvam energia do campo de radiação aplicado e emitam por processos espontâneos ou estimulados. Por exemplo, o tempo característico de uma colisão entre dois átomos de Na , nos estados $3S_{1/2}$ e $3P_{1/2}$, à 1mK é de aproximadamente 30 ns, quatro vezes o tempo de vida da molécula de Na_2 correspondente.

A ocorrência de grandes seções de choque em temperaturas ultrafrias pode ser inferida de considerações clássicas ou quânticas. Obviamente, nenhuma teoria clássica pode levar em consideração a natureza ondulatória, efeitos de emissão espontânea e a influência dos estados vestidos pelo campo de radiação na dinâmica colisional. Estes novos aspectos do regime ultrafrio são melhores descritos por uma formulação quântica do problema.

A teoria de espalhamento usual nos fornece a seguinte expressão para a seção de choque [5]:

$$\sigma_{1,2}(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum (2\ell + 1) |S_{1,2}(E, \ell)|^2, \quad (1)$$

que toma a forma aproximada:

$$\sigma_{1,2}(E) \approx \pi \lambda^2 (\ell_{\max} + 1)^2 P_{1,2}, \quad (2)$$

onde a quantidade $|S_{12}|^2$ representa a probabilidade de espalhamento inelástico, $k=2\mu E/\hbar$, ℓ é o número quântico do momento angular orbital, λ é o comprimento de onda de de Broglie, e $P_{1,2}$ é a probabilidade inelástica média devido à contribuição de todas as ondas parciais até $\ell_{\text{máx}}$. Podemos observar, então, que a seção de choque varia com o quadrado do comprimento de onda de de Broglie, o que explica os altos valores em temperaturas ultrafrias.

Porém, ao invés de seção de choque, é usual atribuir-se um coeficiente de taxa ao processo colisional. O coeficiente de taxa relaciona-se diretamente ao número de eventos colisionais ocorrendo por unidade de tempo por unidade de volume, e relaciona-se com a seção de choque através da relação $K=\langle\sigma v\rangle$, onde os *braquets* implicam numa média sobre todas as velocidades colisionais possíveis.

A baixas temperaturas, apenas ondas parciais mais baixas contribuem para os processos de perdas, devido ao fato da barreira centrífuga evitar que ondas parciais mais altas alcancem a região de curto alcance. O papel do decréscimo de ondas parciais do movimento nuclear com a diminuição da energia colisional no regime ultrafrio, assim como no cálculo da probabilidade de ocorrência de mudança de estrutura fina em função do número de ondas parciais é discutido por Dulieu *et al.* [39].

Até bem pouco tempo, os termos frio e ultrafrio eram utilizados indistintamente, porém colisões ocorrendo em cada um desses regimes apresentam características e peculiaridades distintas, principalmente no que se relaciona ao tratamento teórico dessas colisões. De acordo com a classificação recentemente feita por Suominen [40], o regime de colisões frias estende-se de 1mk a 1 μ k, intervalo dentro do qual situam-se o resfriamento Doppler e *Optical Molasses* [41]. A maior

parte dos fenômenos nesse nível são estudados na presença de um ou mais campos de luz utilizados para confinar e resfriar os átomos, assim como provar suas interações. Os estados excitados quasimoleculares frequentemente desempenham um papel importante. Abaixo de 1 μK , onde o resfriamento evaporativo e a condensação de Bose-Einstein (BEC) tornam-se o foco das atenções, estados quânticos degenerados do *ensemble* atômico começam a aparecer. Neste regime, denominado ultrafrio, colisões entre átomos em seus estados fundamentais ocorrem apenas através de movimento radial, e são caracterizadas por uma grandeza denominada comprimento de espalhamento, relacionada ao *phase-shift* da função de onda do estado fundamental. Nossos experimentos situam-se no regime de colisões frias, uma vez que foram realizados em uma armadilha magneto-óptica, a temperaturas da ordem de 300 μK .

Duas principais temperaturas aparecem nos processos de *laser-cooling*. A temperatura T_D , característica do resfriamento *Doppler* [41], é dada por:

$$K_B T_D = \hbar \gamma_A / 2 \quad (3)$$

onde K_B é a constante de Boltzmann e a largura de linha, $\gamma = 1/(2 \pi \tau_A)$, é inversamente proporcional ao tempo de vida radiativo do estado excitado da transição de resfriamento T_D é da ordem de 100 μK para todos os alcalinos (141 μK para o ^{85}Rb).

Outra temperatura típica, denominada de temperatura de recuo (*recoil temperature*) T_R é dada por:

$$K_B T_R = \hbar^2 k_v^2 / 2m \quad (4)$$

onde k_v é o vetor de onda do fóton em ressonância com a transição atômica e m é a massa atômica.. Nessa temperatura o comprimento de onda de de Broglie torna-se

igual ao comprimento de onda da radiação usada no resfriamento. Esse limite de temperatura é o mais baixo atingível ($T_R = 0,18 \mu\text{K}$ para ^{85}Rb).

As colisões frias binárias podem ser classificadas de acordo com os estados dos átomos envolvidos, o que determinará o tipo de interação entre eles. A classificação do evento colisional pode também ser feita com relação aos estados iniciais e finais dos átomos, isto é, se estes tiverem seus estados alterados ou não pelo processo colisional. No caso em que ambos os átomos participantes têm seus estados inalterados pela colisão, esta será dita como sendo uma colisão elástica. Essas colisões são importantes no contexto da obtenção da condensação de Bose-Einstein, mais especificamente no processo de resfriamento evaporativo. As colisões frias elásticas são as que mais assemelham-se àquelas que ocorrem a altas temperaturas. Entretanto, colisões nas quais os átomos sofrem alterações em um ou mais de seus números quânticos, serão ditas inelásticas.

Existe uma classe de colisões que ocorrem em armadilhas atômicas e que são muito importantes devido ao fato de que podem levar a perdas de átomos. Estas colisões inelásticas são denominadas exoérgicas, e estamos interessados nesse trabalho em estudar um desses processos colisionais, a mudança de estrutura fina, que ocorre entre um par de átomos alcalinos estando inicialmente um deles no estado fundamental e o outro no estado excitado, e que é resultante de transições não adiabáticas ocorrendo através do cruzamento de curvas de potencial quando os átomos encontram-se a pequenas separações internucleares. O outro principal processo assistido em armadilhas é denominado de escape radiativo (também referido como redistribuição radiativa). Em ambos os processos ocorre transferência de energia interna (de excitação) em energia cinética, e dependendo da velocidade

ganha pelo par atômico durante a colisão, estes poderão vencer as forças de aprisionamento, deixando o volume de captura.

Estaremos utilizando em nosso estudo dessas colisões a representação da quasimolécula [40]. Devido às baixas temperaturas podemos considerar uma colisão binária fria como um processo adiabático, onde o movimento dos elétrons é quase instantâneo se comparado ao movimento nuclear. Em outras palavras, a nuvem eletrônica dos dois átomos colidindo tem um amplo tempo para ajustar-se a qualquer mudança nas posições relativas entre os dois átomos. Esta é a aproximação de Born-Oppenheimer (ou adiabática), e nela os átomos colidindo formam uma quasimolécula diatômica homonuclear, cujo movimento é governado pelos potenciais moleculares de Born-Oppenheimer, $V_n(R)$, que variam como função da distância interatômica R , os quais serão discutidos em uma secção subsequente nesse mesmo capítulo.

Uma colisão fria pode ser convenientemente “dividida” em três zonas características de comportamento físico distinto, denominadas de zonas externa, intermediária e interna. O bombeamento óptico que leva à preparação dos dois átomos para a colisão ocorre na região mais externa. O contorno entre as zonas externa e intermediária ocorre próximo à distância característica definida por:

$$R_v = 1/k = \lambda_v / 2\pi, \quad (5)$$

onde λ_v é o comprimento de onda da transição responsável pelo resfriamento. Essa distância é da ordem de 1000 Å para todos os átomos alcalinos. A zona intermediária estende-se de $R \approx R_v$ até curtas distâncias, onde efeitos decorrentes da superposição das funções de onda eletrônicas tornam-se importantes. O bombeamento óptico pode continuar até a parte mais externa dessa zona. Assim que os átomos começam a se aproximar, as interações moleculares levam o par atômico a sair de ressonância com o *laser* sintonizado próximo à transição atômica, e a população de átomos no estado

excitado começa a decair através da emissão espontânea de radiação, após ter sido alcançada a parte interna da zona intermediária. A terceira e mais interna zona estende-se até poucos ângstrons e é caracterizada por fortes interações moleculares, onde cruzamentos entre curvas de potencial e interações não adiabáticas ocasionam processos inelásticos de transferência de energia. Efeitos de retardo sobre os potenciais moleculares e tempos de vida radiativos ocorrem quando R é comparável ou maior que a distância dada pela equação (5)[42]. Suporemos que R seja menor do que R_v de modo que possamos trabalhar com os estados moleculares adiabáticos usuais quantizados em um referencial fixo à molécula.

A estrutura hiperfina também será desconsiderada no tratamento teórico por nós utilizado na análise dos dados obtidos, porém constatamos que a estrutura hiperfina do estado excitado desempenha um papel importante na dinâmica dos processos colisionais de mudança de estrutura fina, conforme poderá ser observado nos resultados experimentais para as taxas de perdas por nós observadas.

II.2: Processos colisionais entre átomos aprisionados em um MOT

Nesta secção discutiremos os principais mecanismos colisionais de perdas observados em armadilhas magneto-ópticas. Em seguida comentaremos brevemente um outro processo colisional bastante estudado em MOTs, a ionização fotoassociativa, e também uma técnica que permite a supressão dos processos colisionais discutidos nas subsecções anteriores.

Processos colisionais exoérgicos

Os principais processos colisionais de *trap-loss* que ocorrem em uma armadilha magneto-óptica, no regime de altas intensidades de operação do *laser* de aprisionamento, são a mudança de estrutura fina (FSC) e o escape radiativo (RE).

No processo de mudança de estrutura fina o par atômico formado na colisão iniciada com os átomos no estado fundamental $S_{1/2}+S_{1/2}$, é ressonantemente excitado em R_C , para um estado molecular com potencial atrativo $V(R) = -C_3/R^3$ correlacionado assintoticamente ao estado $S_{1/2}+P_{3/2}$, e os átomos são então fortemente acelerados pela ação deste potencial. R_C , denominado *Condon point*, é o ponto onde o par atômico encontra-se em ressonância com o *laser*, isto é, onde $V_e - V_g = \hbar\omega$ (V_e e V_g são os potenciais do estado excitado e fundamental, respectivamente).

À curtas distâncias internucleares, o estado molecular em que a quasimolécula encontra-se, o qual correlaciona-se ao estado atômico $S_{1/2}+P_{3/2}$, pode acoplar-se a outro estado molecular que relacione-se ao estado $S_{1/2}+P_{3/2}$, através do cruzamento entre as curvas de potencial desses estados. Nesse caso haverá transferência de população para o estado excitado de menor momento angular eletrônico ($J=L+S$), e

assim que os núcleos comecem a se distanciar, a quasimolécula terá ganho energia cinética numa quantidade correspondente à diferença entre a energia do fóton absorvido do *laser* e a energia do estado assintótico de menor estrutura fina (ΔE_{FS}). Para o rubídio, a energia $\Delta E_{FS}/K_B = 342.8K$, onde K_B é a constante de Boltzmann, é igualmente dividida entre os átomos que compõem o par, levando-os a escaparem da armadilha, que tem profundidade típica da ordem de $1K$.

No processo conhecido como escape radiativo, também consideraremos o potencial atrativo de longo alcance na forma $-C_3/R^3$. Novamente, a colisão inicia-se com ambos os átomos no estado fundamental. Na presença de um fóton de frequência ω , o par é levado ao estado excitado em R_C . O núcleo atômico é então acelerado pela ação do potencial fortemente atrativo, e em virtude do tempo de duração da colisão ser longo comparado ao tempo de vida do estado excitado, poderá ocorrer emissão espontânea e a quasimolécula emitirá um fóton de frequência ω' , para o vermelho com relação ao fóton absorvido, decaindo ao estado fundamental. A diferença de energia $\hbar(\omega - \omega')$ é então transformada para a forma cinética num processo conservativo e o par poderá deixar a armadilha. Entretanto, processos de decaimento começam a ocorrer logo após a excitação, e o principal efeito desse mecanismo é o aquecimento radiativo (RH). Se a velocidade ganha não for alta o suficiente, mecanismos dissipativos do MOT poderão ser suficientes para resfriar o aquecimento ocasionado aos átomos, permitindo que estes permaneçam aprisionados. Se a energia cinética transferida aos átomos for superior à habilidade de recaptura da armadilha, os átomos escaparão. Na Figura 1 encontram-se representados, de forma simplificada, os potenciais envolvidos nesses dois principais

processos de perdas. Uma figura apresentando as várias curvas do dímero Rb_2 encontra-se na secção subsequente.

Entre todos os alcalinos, o Li é a espécie que apresenta as menores taxas de perdas. Isto é devido ao fato do processo de FSC não contribuir se considerarmos armadilhas com profundidades típicas de 1K, devido ao pequeno *splitting* da estrutura fina do Li (0,25K). A probabilidade de RE é também intrinsicamente menor para esse alcalino, pois as transições moleculares são proibidas para o esquema de acoplamento molecular no *Hund's case* (a), que se aplica na região da trajetória que contribui para perdas por RE.

Figura 1: Representação esquemática das curvas de potencial envolvidas nos processos de RE e FSC em Rb ; A é o ponto de retorno e B é o ponto onde o par poderá sofrer uma transição para o potencial $S+P_{1/2}$.

Mudança de estrutura fina e escape radiativo são os principais processos colisionais inelásticos exoérgicos que ocorrem no regime de altas intensidades de operação da armadilha. Existe, entretanto, para átomos colidindo no estado fundamental, um mecanismo de perdas denominado *mudança de estrutura hiperfina* (HCC), onde os átomos podem deixar a armadilha após uma colisão inelástica. A longas distâncias, forças eletrostáticas dão origem a um potencial molecular variando com $-C_6/R^6$. Dois átomos no estado fundamental irão colidir nesse potencial e a curtas distâncias poderá haver uma eventual transferência de população para um nível hiperfino mais baixo como consequência de uma transição para um estado molecular hiperfino que tenha uma energia assintótica menor que a do estado inicial. Essa pequena diferença de energia é convertida para a forma cinética de maneira similar como ocorre no processo de mudança de estrutura fina. No caso da armadilha estar operando num regime de baixas intensidades, isto é, se a profundidade for rasa se comparada a ΔE_{HCC} , os átomos poderão deixá-la.

Ionização fotoassociativa

Outro processo colisional que pode ocorrer em MOTs, amplamente estudado para o sódio, é a ionização fotoassociativa (AI ou PAI) [20,43 – 46], onde o par atômico é excitado a partir do estado excitado S+P a um estado molecular excitado que se corresponde assintoticamente ao estado atômico duplamente excitado P+P, via um segundo fóton. Porém, em uma colisão fria ($T \leq 1\text{mK}$), o tempo de colisão é longo se comparado ao tempo de decaimento espontâneo, e consequentemente o par atômico deve ser excitado ao estado duplamente excitado a distâncias curtas o suficiente para que

não decaia espontaneamente antes de alcançar pequenas separações internucleares onde AI ocorre. A ionização associativa foi também estudada para o rubídio[21], e ocorre através de um único mecanismo, em contraposição ao caso do sódio.

Existem dois mecanismos que podem levar à formação de Na_2^+ : a fotoionização direta a partir de um estado molecular excitado, ou a autoionização (ionização colisional), a partir de estados duplamente excitados (P+P) que cruzem com o potencial da molécula ionizada. Para o rubídio, o processo de ionização associativa ocorre apenas através do primeiro mecanismo. Um par de *Rb* excitado não sofre ionização colisional, mas é diretamente fotoionizado para níveis vibracionais iônicos mais elevados. Essa ionização estimulada ocorre a longas distâncias internucleares, e assim a produção de íons não é severamente reduzida como no caso do sódio, em virtude da diminuição de pares atômicos para pequenas separações internucleares. Esse processo é mostrado na Figura 3, onde os potenciais envolvidos encontram-se ilustrados.

O processo de ionização associativa pode ser utilizado como ferramenta no estudo dos estados moleculares produzidos durante passos intermediários [20,21].

Figura 3: Esquema de ionização fotoassociativa em Rb. Os potenciais relevantes e as transições realizadas encontram-se esquematizados.

Com a finalidade de reduzir a ocorrência de processos colisionais inelásticos, podemos utilizar um *laser* sintonizado para o azul da transição atômica para excitar a quasimolécula, à longas distâncias internucleares, para um estado com potencial repulsivo que irá rapidamente refletir os átomos prevenindo que estes alcancem a região de curto alcance, onde processos de perdas podem ocorrer. Esse processo é conhecido como blindagem óptica (*Optical Shielding*) [47,48].

Através do uso desta técnica de blindagem óptica de colisões inelásticas, é obtida a situação descrita idealmente na figura abaixo:

Figura 2: Esquema de blindagem óptica de colisões frias: Quando os átomos movem-se um em direção ao outro (1), a quasimolécula é excitada pela absorção de um fóton de um laser sintonizado para o azul e vai para um estado com um potencial repulsivo (2). Os átomos são rapidamente refletidos (3) no ponto de retorno R_{tp} . Assim que os átomos aproximam-se de R_c , a interação com o laser os trazem de volta ao estado fundamental (4) após uma longa colisão elástica (a). Entretanto, se o campo não for forte o suficiente, existirá a possibilidade de a quarta etapa falhar e a quasimolécula permanecer no estado excitado e os átomos dividirem um ganho em energia cinética, induzindo assim algum aquecimento indesejável (b).

Esta técnica de blindagem de colisões que podem resultar em perdas de átomos de uma armadilha, embora tenha sido reportada apenas para o caso de colisões de mudança de estrutura hiperfina, e também para ionização fotoassociativa [49], pode ser utilizada com o propósito de suprimir qualquer tipo de evento colisional inelástico que possa levar a perdas.

II.3: As interações atômicas e os estados moleculares

A propriedade mais importante de uma interação do tipo descrita por $A^*(P_{3/2})+A(S_{1/2}) \rightarrow A^*(P_{1/2})+A(S_{1/2})+\Delta E$ é a sua dependência com o caráter de longo alcance do potencial descrito pela interação dipolo-dipolo ressonante entre uma mistura de estados S+P na qual é possível considerar-se uma orientação definida dos momentos de dipolo atômicos [50]. Todos os estados da molécula A^*A correlacionam-se assintoticamente com os estados atômicos $S_{1/2}+P_{3/2}$ ou com $S_{1/2}+P_{1/2}$. A energia desses estados, devido à essa interação, que é responsável pela transferência ressonante de energia de excitação que ocorre a J constante, é proporcional a $1/R^3$.

Podemos classificar as regiões das curvas de potencial de acordo com o tipo de interação entre os átomos que constituem a molécula diatômica formada durante o processo colisional que estamos considerando. Quando os átomos estão separados por longas distâncias, a energia de interação entre os dipolos atômicos, a energia potencial Coulombiana, é pequena se comparada ao *splitting* de energia devido à estrutura fina ΔE que caracteriza a interação spin-órbita. Essa região onde os átomos encontram-se livres é definida pela condição $V_d(R) \ll \Delta E$. Para distâncias um pouco menores, onde a desigualdade torna-se reversa, a interação eletrostática de Coulomb predomina. Nessa região, $V_{ex}(R) \ll \Delta E \ll V_d(R)$. Nessa a região de interação de dipolo-dipolo ressonante, as energias dos estados moleculares podem ser calculados em aproximação de zero ordem sem levar-se em conta o acoplamento spin-órbita e temos estados degenerados. Já na região anteriormente descrita, essa degenerescência é quebrada pelo acoplamento

LS. Finalmente, para distâncias internucleares muito pequenas (alguns ângstrons apenas) a principal contribuição advém da interação de troca, onde $\Delta E \ll V_{\text{ex}}(R)$.

Os estados moleculares resultantes dos estados atômicos S+P, são classificados então dependendo da magnitude da interação entre momenta angulares entre si e com relação ao eixo molecular. O acoplamento com o eixo molecular é uma função da distância internuclear R e tende a zero quando $R \rightarrow \infty$. Os estados são geralmente denotados por Ω_{ω}^{σ} (Hund's case (c)) onde Ω é a projeção do momento angular eletrônico total (angular mais de spin) sobre o eixo molecular; $\omega = g$ (*gerade*) ou u (*ungerade*) é a paridade do estado, referentemente à simetria com relação à troca de orbitais, e $\sigma = +$ ou $-$ nos revela qual a simetria com relação à reflexão da parte espacial das funções de onda dos estados $\Omega = 0$ (estados Σ) no plano contendo o eixo molecular. Nas regiões onde os átomos encontram-se mais próximos, e o acoplamento LS é mais fraco, o momento angular orbital eletrônico Λ passa a ser um bom número quântico. Nessas regiões os estados são denotados por $^{2S+1}\Lambda$, onde Λ é a projeção do momento angular orbital eletrônico ($J=L+S$) sobre o eixo molecular, e S é o spin eletrônico total (*Hund's case (a)*). Aqui σ será omitido para estados $\Lambda \neq 0$ devido ao fato das bases S e P darem origem a estados degenerados com relação à multiplicidade devido a spin (estados singletos e tripletos, $^{1,3}\Sigma_{u,g}$). Entretanto, na região de domínio da interação dipolo-dipolo ressonante, onde a troca de elétrons não ocorre, a energia depende apenas das combinações entre os números quânticos S e ω , que determinam as simetrias das funções de onda com relação à inversão dos orbitais atômicos mas não à troca de elétrons. Assim, nessa região, em aproximação de ordem zero, uma

degenerescência adicional pode ser observada. Na Figura 4 podemos observar as várias orientações dos dipolos atômicos para estados obtidos a partir de misturas de funções de onda S e P. Existem quatro estados Λ_v , que diferem pelos números Λ e v . Para a orientação simétrica dos dipolos com respeito à inversão do centro da molécula A^*A , $v=1$ para a orientação simétrica e $v = -1$ para a orientação anti-simétrica., onde v caracteriza a simetria da função de onda com respeito à troca de estados atômicos entre os átomos A e B, com o elétron 1 situado no átomo A e o elétron 2 localizado no átomo B. A multiplicidade e a paridade de uma função de onda são relevantes também na troca de elétrons (com orbitais fixos), ou na troca de ambos, elétrons e orbitais. Agora v depende do spin total S e da paridade do estado molecular correspondente, $v = (-1)^S \omega$.

<i>Estado Molecular</i>	Λ	v	<i>Orientação dos dipolos</i>	
			Átomo A	Átomo B
Σ_g	0	1	$\rightarrow$ ----- $\leftarrow$	
Π_u	1	-1	$\uparrow$ ----- $\uparrow$	
Π_g	1	1	$\uparrow$ ----- $\downarrow$	
Σ_u	0	-1	$\Rightarrow$ ----- $\Rightarrow$	

Figura 4: *Orientação dos dipolos atômicos dos átomos em misturas de estados S+P, e a classificação dos estados moleculares resultantes.*

Dois átomos no estado fundamental S+S não apresentam interação spin-órbita. Para distâncias internucleares muito grandes $(R>R_{HFS}=C_6/\Delta E_{HFS})^{1/6}$, onde o

splitting de energia ΔE_{HFS} devido à estrutura hiperfina torna-se comparável ao potencial eletrostático, as energias potenciais moleculares hiperfinas tornam-se importantes.

Para a interação entre dois átomos nos estados S+P, separados por uma longa distância internuclear, a magnitude da interação spin-órbita é comparável, ou maior que a energia de interação Coulombiana quando $R > R_{\text{FS}} = (C_3/\Delta E_{\text{FS}})^{1/3}$, onde ΔE_{FS} é o *splitting* de energia oriundo da estrutura fina e caracteriza a interação spin-órbita. Nesse caso é utilizada a representação do *Hund's case* (c). As interações hiperfinas para o potencial assintótico S+P são relevantes apenas para distâncias internucleares muitíssimo longas.

Entretanto, quando os dois átomos no estado S+P encontram-se separados por curtas distâncias ao longo do eixo molecular, a interação predominante é a eletrostática do tipo dipolo-dipolo ressonante, como já foi dito anteriormente. Esse potencial Coulombiano de longo alcance pode ser expresso como $V(R) = -\Sigma C_n/R^n$, onde o termo principal da expansão é determinado pelo tipo de interação dominante.

No caso S+S a interação é Van der Waals ($n=6$), para S+P a interação é a dipolo-dipolo ($n=3$), e para o estado duplamente excitado P+P, a interação é do tipo quadrupolo-quadrupolo ($n=5$). Isto para o caso de uma molécula diatômica homonuclear. No caso heteronuclear, $n=6$, 6 e 5, respectivamente.

Voltemos ao caso no qual estamos interessados, S+P, onde dois átomos de mesma espécie encontram-se próximos um do outro, considerando a situação onde a interação eletrostática prevalece. Aqui os estados moleculares são representados pelo *Hund's case* (a), cujas curvas de potencial são apresentadas na Figura 5(a). Existem

quatro estados de simetria g e quatro de simetria u, que correlacionam-se ao estado assintótico $S_{1/2}+P_{1/2}$, e oito estados com simetria u e oito com g correlacionados a $S_{1/2}+P_{3/2}$, dos quais quatro desses estados moleculares são atrativos, possuindo transições de dipolo permitidas conectando-os ao estado fundamental. O estado 2_u também é atrativo, sendo sua participação dominante no processo de FSC devido ao seu tempo de vida extremamente longo, por apresentar transição de dipolo proibida na região de longo alcance. Segundo Jullienne e Vigué [51], esses são os únicos canais através dos quais os processos RE ou FSC podem ocorrer à baixas temperaturas. Na Figura 5(b) apenas as curvas de potencial dos estados com simetria u encontram-se representadas, uma vez que, de acordo com Dashevskaya *et al.*, a contribuição de estados g às secções de choque é insignificante.

A transformação do caso (c) para o caso (a), assim como os potenciais no caso (c) são encontrados através da diagonalização do hamiltoniano H_0+V_{SO} expandido na base do caso (a); a matriz transformação corresponde aos auto-vetores e os potenciais aos auto-valores.

O operador spin-órbita, na região de longo alcance, independe de R e é dado por [44]:

$$V_{SO} = A (l_1 \cdot s_1 + l_2 \cdot s_2), \quad (6)$$

onde $A = \frac{2}{3} \Delta E$, $\Delta E = 238,2 \text{ cm}^{-1}$ [51] é o *splitting* de energia entre os estados $^2P_{1/2}$ e $^2P_{3/2}$ do rubídio, l e s são os operadores momento angular orbital e de spin, e o subscrito 1 ou 2 indica que estes operadores operam sobre os elétrons 1 e 2,

respectivamente. Reescrevemos o operador V_{SO} lembrando que $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2)$,

onde $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ é o momento angular total eletrônico do átomo.

Podemos construir auto-estados de $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$:

$$|l, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_s} \sum_{m_l} C(l, s, j; m_l, m_s, m_j) |l, m_l, s, m_s\rangle, \quad (7)$$

de modo que:

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} |l, s, j, m_j\rangle = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |l, s, j, m_j\rangle, \quad (8)$$

onde $|l, m_l, s, m_s\rangle$ são as funções de onda dos orbitais 2S ou 2P com spin eletrônico, e

C é o coeficiente de Clebsch-Gordan.

Para um elétron no estado P, $l=1$, $s=1/2$, $j=1/2$ ou $3/2$, $m=-1, 0$, ou 1 , e $m=-1/2$ ou $1/2$.

Devido à natureza da interação spin-órbita, apenas estados de mesmo Ω podem ser acoplados, onde $\Omega = \Lambda + \Sigma$ é a projeção do momento angular eletrônico total (orbital mais de spin, $J = L + S$) sobre o eixo molecular. Também não é permitido o acoplamento entre estados de diferentes paridades, g ou u [50].

Os pseudo-cruzamentos (ou cruzamentos evitados) entre estados de mesma simetria, e cruzamentos entre termos de simetrias distintas, são de particular interesse do ponto de vista da teoria de transições não-adiabáticas. Muitos cruzamentos entre as curvas de potencial são obtidos, porém apenas aqueles cujas transições são permitidas pelas regras de seleção são considerados. As transições entre estados de mesma simetria são induzidas pelo movimento radial dos átomos participando da colisão, através do acoplamento spin-órbita, e transições entre estados

de simetrias diferentes são causadas pela rotação do eixo molecular, induzidas pela interação de Coriolis. Estas regras de seleção, para ambos os movimentos radial e angular dos átomos colidindo, são as seguintes[50]:

1. Para movimento radial: $g \leftrightarrow u, 0^+ \leftrightarrow 0^-, \Delta\Omega = 0$;
2. Para o movimento angular: $g \leftrightarrow u, 0^+ \leftrightarrow 0^-, \Delta\Omega = \pm 1$.

Para a região de átomos livres temos a regra de seleção $\Delta J = \pm 1$.

Alguns dos potenciais de longo alcance (*Hund's case (c)*) são mostrados, para o rubídio, na figura 5(b); as oito curvas de potencial não relativísticas, que correlacionam-se ao estado assintótico S+P dos átomos separados, são qualitativamente similares para todas as moléculas alcalinas diatômicas homonuclear

II.4: Os mecanismos de mudança de estrutura fina

Existem três mecanismos básicos responsáveis por transições de FSC:

- (i) A interação spin-órbita levando à transição entre os estados $A^1\Sigma_u^+$ e $b^3\Pi_u$, que ocorre em torno do ponto de cruzamento das curvas de potencial desses estados a curto alcance (observe a Figura 5(a)), (ii) Mistura dos três componentes do estado $b^3\Pi_u$ através da interação de Coriolis, e (iii) O acoplamento de Coriolis entre os estados 0_u^+ e 1_u , em seu cruzamento à longo alcance. O primeiro mecanismo é dominante para dímeros pesados, Cs_2 e Rb_2 , enquanto que o acoplamento de Coriolis (ii e iii) fornece maior contribuição para as moléculas diatômicas de espécies alcalinas mais leves, Na_2 e K_2 .

De acordo com Dashevskaya *et al.*, e Julienne e Vigué, para o caso da quasimolécula Rb_2 é esperado que o processo de mudança de estrutura fina ocorra principalmente a curtas separações internucleares, onde a interação de *exchange* domina as demais (dipolo-dipolo, acoplamento rotacional, spin-órbita). No presente caso, a principal contribuição para o processo advém da transição que ocorre a curtas separações internucleares através do acoplamento radial entre os dois estados atrativos $0_u^+(A^1\Sigma_u^+)$ e $0_u^+(b^3\Pi_u)$ da molécula Rb_2 , ambos correlacionados ao limite de dissociação $5S+5P$. Outro cruzamento; observe a figura 5(b), ocorre entre as curvas de potencial dos estados $0_u^+(S_{1/2}+P_{3/2})$ e o estado 1_u atrativo, correlacionado ao estado $S_{1/2}+P_{1/2}$, a longo alcance em $R \approx 23,5a_0$.

Figura 5(a): Curvas de potencial adiabáticas do dímero Rb_2 construídas a partir de dados químicos quânticos de Foucrault *et al.* [52] para $R < 20a_0$, conectadas aos cálculos assintóticos de Marinescu e Dalgarno [53], correlacionadas ao limite de dissociação $S+P$; podemos observar o cruzamento entre os estados $A^1\Sigma_u^+$ e $b^3\Pi_u$ em $R \approx 9,5 a_0$.

Figura 5(b): Curvas de potencial de longo alcance do Rb_2 incluindo a estrutura fina. O cruzamento entre as curvas dos estados 0_u^+ e 1_u^+ ocorre em $R \sim 20 a_0$. (As curvas mostradas nas figuras 5(a) e 5(b) foram gentilmente cedidas por O. Dulieu, da Universidade Paris-Sud).

II.5: Os potenciais de interação de longo alcance

Estamos interessados, aqui, em inferir a dependência assintótica dos potenciais de interação entre dois átomos alcalinos com a distância, isto é, quando estes encontram-se afastados por distâncias longas o suficiente para que não tenhamos que considerar as interações de *exchange* que ocorrem a curto alcance, decorrentes da troca de elétrons que se dá quando os átomos encontram-se muito próximos um ao outro, à apenas poucos ângstrons de distância, na região onde ocorre um *overlap* das funções de onda e as propriedades de simetrização das funções de onda não podem ser desprezadas; porém não longas o bastante para que possamos desprezar, também, efeitos de retardo.

Interação entre dois átomos no estado fundamental

A energia potencial de interação entre dois átomos alcalinos neutros de mesma espécie, com ambos no estado fundamental, é descrita através da interação de Van der Waals $V(R) = -C_6/R^6$, a qual dá origem à uma força cuja magnitude decresce com o aumento da distância entre os átomos muito mais lentamente que as forças de ligações químicas, sendo assim muito importantes a longas distâncias.

O hamiltoniano do sistema é dado por $H = H_1(\mathbf{r}_1) + H_2(\mathbf{r}_2) + V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, R)$, onde $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$ são os vetores posição dos elétrons relativos ao centro de seus respectivos átomos, e R é a separação entre estes.

Consideremos dois átomos situados ao longo do eixo z , separados por uma distância R . O operador que representa a interação entre eles corresponde ao

operador de interação entre dois dipolos elétricos, formados pelos elétrons de valência e os respectivos núcleos:

$$V_d(R) = \frac{e^2}{R^3} \left[(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) - 3 \left(\mathbf{r}_1 \cdot \hat{\mathbf{R}} \right) \left(\mathbf{r}_2 \cdot \hat{\mathbf{R}} \right) \right]. \quad (9)$$

Escolhendo o eixo z ao longo da linha conectando os dois átomos (eixo molecular), podemos escrever:

$$V_d = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2), \quad (10)$$

onde $x_1, x_2, y_1, y_2, z_1, z_2$ são operadores posição dos elétrons de valência dos átomos 1 e 2.

Denotemos por $|S^A(1)S^B(2)\rangle = |00\rangle$ o estado do sistema no qual ambos os átomos encontram-se em seus estados fundamentais ($\ell=0$), com o átomo 1 localizado no ponto A e o átomo 2 no ponto B. Para átomos neutros no estado fundamental, com momento de dipolo constante, a correção na energia em primeira ordem de teoria de perturbação é nula:

$$\langle 00 | V_d(R) | 00 \rangle = 0. \quad (11)$$

Em segunda ordem, a correção na energia é dada por:

$$\Delta E = \frac{e^2}{R^6} \sum_{n_1 n_2} \frac{\left| \langle 00 | W | n_1 n_2 \rangle \right|^2}{E_{00} - E_{n_1 n_2}}, \quad (12)$$

onde todos os termos serão negativos uma vez que $E_{00} < E_{n_1 n_2}$, e teremos apenas estados atrativos.

Na aproximação adiabática, a correção na energia dos elétrons como função das coordenadas é a energia potencial que determinará o movimento nuclear, e

$$A = -e^4 \sum_{n_1 n_2} \frac{|\langle 00 | W | n_1 n_2 \rangle|^2}{E_{00} - E_{n_1 n_2}} > 0. \quad (13)$$

Dois átomos no estado fundamental podem colidir em ambos os estados eletrônicos moleculares fundamentais, $X^1 \Sigma_g^+$ ou $a^3 \Sigma_u^+$.

Interação entre um átomo no estado fundamental e outro no estado excitado

Consideremos agora os potenciais de interação entre dois átomos alcalinos homonucleares colidindo, estando inicialmente um no estado fundamental e o outro no estado excitado, separados por uma distância inicial R . Novamente, o operador que representa a interação entre eles será:

$$V_d(R) = \frac{e^2}{R^3} \left[(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) - \frac{3(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right] \quad (14)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\mu(1) \cdot \mu(2)}{R^3} - \frac{3(\mathbf{R} \cdot \mu(1))(\mathbf{R} \cdot \mu(2))}{R^5} \\ &= \sum_{i=1}^3 \frac{\mu_i(1)\mu_i(2)}{R^3} - 3 \sum_{i,j} \frac{x_i x_j \mu_i(1)\mu_j(2)}{R^5} \\ &= \sum_{i,j} \frac{\delta_{ij} \mu_i(1)\mu_j(2)}{R^3} - 3 \sum_{i,j} \frac{x_i x_j \mu_i(1)\mu_j(2)}{R^5} \end{aligned} \quad (15)$$

Finalmente,

$$V_d(R) = \sum_{i,j} \frac{(\delta_{ij} R^2 - 3x_i x_j) \mu_i(1)\mu_j(2)}{R^5} = \sum_{i,j} q_{ij} \mu_i(1)\mu_j(2), \quad (16)$$

onde q_{ij} é o tensor dipolo elétrico.

A base não perturbada de H_0 , constituída por estados unicamente excitados, será denotada por:

$$\{\psi_1^{(0)}, \psi_2^{(0)}\} = \{|S(1)P(2)\rangle, |P(1)S(2)\rangle\}, \quad (17)$$

onde ainda não estamos levando em consideração a degenerescência do estado P. Assim, a fim de encontrarmos a dependência com a distância internuclear do potencial de interação entre um átomo em seu estado fundamental e outro no estado excitado, devemos diagonalizar a perturbação, fazendo:

$$\begin{vmatrix} \langle \psi_1^{(0)} | V_d | \psi_2^{(0)} \rangle - \lambda & \langle \psi_1^{(0)} | V_d | \psi_2^{(0)} \rangle \\ \langle \psi_2^{(0)} | V_d | \psi_1^{(0)} \rangle & \langle \psi_2^{(0)} | V_d | \psi_2^{(0)} \rangle - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (18)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle \psi_1^{(0)} | V_d | \psi_1^{(0)} \rangle &= \langle S(1)^A P(2)^B | \mu_i \mu_j | S(1)^A P(2)^B \rangle \\ &= \langle S^A(1) | \mu_i(1) | S^A(1) \rangle \langle P^B(2) | \mu_j(2) | P^B(2) \rangle = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

por argumentos de simetria, e

$$\begin{aligned} \langle \psi_1^{(0)} | V_d | \psi_2^{(0)} \rangle &= \langle S^A(1) P^B(2) | \mu_i(1) \mu_j(2) | P^A(1) S^B(2) \rangle \\ &= \langle S(1) | \mu_i(1) | P(1) \rangle \langle P(2) | \mu_j(2) | S(2) \rangle = d_i d_j^* = d^2. \end{aligned} \quad (20)$$

Então, de

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \sum_{ij} q_{ij} d_i d_j \\ \sum_{ij} q_{ij} d_i d_j & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \lambda = \pm f, \quad (21)$$

onde

$$f = \sum_{ij} q_{ij} d_i d_j = \sum_{ij} \frac{\delta_{ij} R^2 - 3x_i x_j}{R^3} d_i d_j \quad (22)$$

$$= \frac{d^2}{R^3} - 3 \frac{(\hat{R} \cdot d)}{R^3} = \frac{D(\hat{R}, d)}{R^3}. \quad (23)$$

Portanto,

$$\Delta E = \pm \frac{D(\hat{R}, d)}{R^3}, \quad (24)$$

onde $\hat{R} = \hat{z}$ define a orientação do eixo molecular.

Assim, utilizando teoria de perturbação degenerada, pudemos obter a correção na energia em primeira ordem, a qual nos dá a dependência do potencial de interação com a distância internuclear. Agora, para encontrarmos os estados moleculares, fazemos:

$$\begin{pmatrix} 0 & f \\ f & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (25)$$

e encontramos os auto-estados de $H_0 + V_d$:

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{|S(1)P_0(2)\rangle \pm |P_0(1)S(2)\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (26)$$

que correspondem aos estados com projeção do momento angular total nula ao longo do eixo molecular ($\Lambda = 0$), $\Sigma_{u,g}$.

Considerando a tripla degenerescência do estado P introduzida pelo momento angular orbital $\ell=1$ (correspondente ao número quântico $m_{\ell} = 0, \pm 1$), teremos seis estados:

$$\{\psi_1^{(0)}, \psi_2^{(0)}\} = \{|S(1)P_{\Lambda}(2)\rangle, |P_{\Lambda}(1)S(2)\rangle\}, \quad (27)$$

onde $\Lambda=0, \pm 1$.

Para $\Lambda=0$ (ℓ paralelo ao eixo molecular), teremos estados Σ atrativos, enquanto que para $\Lambda=\pm 1$, obtemos estados Π , atrativos ou repulsivos, e

$$V_{\Lambda}(R) = \langle S^A(1)P_{\Lambda}^B(2) | V_d | S^B(2)P_{\Lambda}^A(1) \rangle \quad (28)$$

$$= \begin{cases} \frac{d^2}{R^3}, & \text{se } \Lambda = \pm 1, \text{ ou} \\ -\frac{2d^2}{R^3}, & \text{se } \Lambda = 0 \end{cases} \quad (29)$$

Os chamados coeficientes de dispersão da expansão dos potenciais de interação de longo alcance entre átomos alcalinos em potências de R , são calculados por Marinescu e Dalgarno e listados em [53], para diversos estados fundamentais e excitados. Os potenciais de interação são calculados nas referências [54,55].

Este tipo de interação, que ocorre entre um par de átomos alcalinos de mesma espécie, estando inicialmente um deles no estado fundamental e o outro no estado excitado, é denominada de interação dipolo-dipolo ressonante. Devido aos dois átomos serem de mesma espécie, e portanto idênticos, não podemos prever qual dos dois carrega a excitação, e além disso, com o decorrer da colisão irá ocorrer trocas de excitação, em um processo denominado de troca virtual de fótons.

II.6: O Modelo Gallagher-Pritchard

Esta seção apresenta o modelo proposto por Gallagher e Pritchard para tratar processos colisionais que podem levar átomos alcalinos a escaparem de uma armadilha magneto-óptica. O tratamento utilizado para descrever colisões ocorrendo entre um átomo no estado fundamental e outro no excitado é semiclássico, onde o movimento da quasimolécula formada pelo par atômico através dos potenciais moleculares é tratado classicamente.

O processo colisional de mudança de estrutura fina envolve um par de átomos de rubídio, estando um dos átomos no estado fundamental $5S_{1/2}$ e o outro no estado excitado $5P_{3/2}$. A interação entre eles é atrativa, e dá origem a um potencial que irá acelerá-los fortemente um contra o outro e o par mover-se-á sobre a curva de potencial $-C_3/R^3$ até alcançar a região de curto alcance, onde o átomo no estado $P_{3/2}$ poderá sofrer a perda de uma unidade de momentum angular total através do processo de mudança fina.

A interação molecular dominante é a interação de longo alcance dipolo-dipolo ressonante, C_3/R^3 , para estados repulsivos e atrativos, onde $C_3 = 18,4$ u.a. [53] é o coeficiente médio para todas as curvas de potencial que dissociam-se no limite assintótico $5S_{1/2}+5P_{3/2}$. As múltiplas curvas são substituídas por um único potencial efetivo, devido ao tratamento ignorar as estruturas fina e hiperfina do estado excitado. Para a região R menor que $500 \text{ \AA}$, C_3/R^3 excede a interação hiperfina, o que justifica o fato de estarmos desprezando as complicações da estrutura hiperfina impostas aos potenciais moleculares.

As taxas de perdas derivadas pelo modelo são fatoradas em dois termos: o primeiro descrevendo a probabilidade de excitação a longas distâncias e

sobrevivência do par no potencial atrativo; o outro expressa a probabilidade de ocorrência dos processos de *trap-loss* (FSC ou RE) na região de curto alcance.

O processo de mudança de estrutura fina (FSC) pode ser representado da seguinte maneira:

com a energia $\Delta E_{FS}/K_B \cong 342$ K sendo dividida por ambos os átomos, levando-os a escapar da armadilha. Na equação (30), ω_L é a frequência do fóton absorvido por um dos dois átomos do par, do *laser* de aprisionamento, e Rb_2^* representa a quasimolécula formada durante o processo colisional fotoassistido.

Consideremos a colisão iniciando-se a uma grande separação internuclear R_0 , com ambos os átomos no estado fundamental. Se o par absorver um fóton do *laser* de aprisionamento, de frequência ω_L e intensidade I , a taxa de excitação semiclássica segundo a qual o par será promovido ao estado molecular excitado, $-C_3/R^3$, será dada por:

$$\mathfrak{R}(R_0, \omega_L, I) = \frac{I}{\hbar \omega_L} \frac{\lambda^2}{2\pi} \left[\frac{(\Gamma_M/2)^2}{(\Delta_M)^2 + (\Gamma_M/2)^2} \right] \quad (31)$$

$$= \varepsilon(\omega_L, R_0) \frac{I}{\hbar \omega_L} \frac{\lambda^2}{2\pi}, \quad (32)$$

onde Γ_M é a taxa de decaimento, $\Delta_M = \omega_L - \omega(R_0)$, onde $\omega(R_0) = \omega_0 - C_3/\hbar R^3$ é a frequência de absorção para o estado excitado (frequência de ressonância em R_0), e ω_0 é a frequência de ressonância atômica. Para o potencial molecular excitado C_3/R^3 a seção de choque de absorção é dada por $\lambda^2/2\pi$ para todos os estados moleculares atrativos (metade do valor atômico da correspondente seção de choque).

As expressões para as taxas de perdas obtidas pelo modelo são derivadas de uma representação “quase-estática” da interação radiação-matéria. A idéia é que os átomos aproximam-se um do outro suficientemente devagar, tal que para cada separação internuclear, o acoplamento campo-quasimolécula estabeleça uma distribuição de população num estado estacionário em R_0 obedecendo uma função forma de linha lorentziana, $(\Gamma_M/2)^2/[(\Delta_M)^2+(\Gamma_M/2)^2]$, para a probabilidade de população do estado excitado. Esta forma de linha permite uma excitação fora do *Condon point* R_0 , onde $\Delta_M=0$. Para distâncias típicas onde se dá a excitação, para o estado fundamental $V_g = 0$, e para o estado excitado $V_e = C_3/R^3$, e o *detuning* é dado por $\Delta=C_3/\hbar R^3$. Para *detunings* relativamente grandes (muitas larguras de linha), a forma de linha é ainda mais estreita e a excitação é razoavelmente bem confinada em torno de R_0 . Após a excitação em R_0 , o par é rapidamente acelerado devido à ação do potencial fortemente atrativo $-C_3/R^3$, alcançando então a região de curto alcance do potencial, onde **mudança de estrutura fina - ou escape radiativo**, poderá ocorrer. Consideremos o tempo necessário para a quasimolécula atingir essa região como sendo essencialmente o mesmo para alcançar $R=0$. Este tempo é facilmente obtido através da integração da equação de movimento da quasimolécula. Para tanto, escrevemos a equação de conservação de energia:

$$\frac{\mu v^2}{2} = C_3 \left(\frac{1}{R^3} - \frac{1}{R_0^3} \right), \quad (33)$$

onde μ é a massa reduzida do par atômico. Desse modo,

$$v = \frac{dR}{dt} = \left(\frac{2C_3}{\mu} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{R^3} - \frac{1}{R_0^3} \right)^{1/2}. \quad (34)$$

Integrando a equação de movimento (34), obtemos:

$$T(R_0) = \int_0^T dt = \int_0^{R_0} \left(\frac{\mu}{2C_3} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{R^3} - \frac{1}{R_0^3} \right)^{-1/2} dR. \quad (35)$$

Fazendo a substituição $S=1-R^3/R_0^3$,

$$R = R_0 (1-S)^{1/3}, \text{ e } dR = -\frac{R_0}{3} (1-S)^{-2/3}, \quad (36)$$

$$T(R_0) = \frac{1}{3} \left(\frac{\mu R_0^5}{2C_3} \right)^{1/2} \int_0^1 S^{1/2} (1-S)^{-1/6} dS. \quad (37)$$

Podemos resolver a integral na variável S em termos da função Gama:

$$\int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} ; \quad x, y > 0, \quad (38)$$

$$\text{onde } \Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt, \quad 0 < x < \infty. \quad (39)$$

Portanto,

$$\int_0^1 S^{1/2} (1-S)^{-1/6} dS = \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(5/6)}{\Gamma(4/3)}. \quad (40)$$

E assim, obtemos:

$$T(R_0) \cong \frac{2,24}{3} \sqrt{\frac{\mu R_0^5}{2C_3}}. \quad (42)$$

Podemos, entretanto, reescrever a expressão para o tempo gasto pela quasimolécula para alcançar a região de curto alcance, como função do *detuning* do *laser* de aprisionamento, utilizando para isto a seguinte relação:

$$\hbar\Delta_0 = \frac{C_3}{R_0^3}. \quad (43)$$

Substituindo o valor de R_0 na equação (42), obtemos:

$$T(\Delta_0) = \frac{1}{\Gamma_M} \left(\frac{\Delta_\tau}{\Delta_0} \right)^{5/6} = \frac{2,24}{3} \left(\frac{\mu^3 C_3^2}{8\hbar^5 \Delta_0} \right), \quad (44)$$

onde

$$\Delta_\tau = \left[\left(\frac{2,24\Gamma_M}{3} \right)^6 \left(\frac{\mu^3 C_3}{8\hbar^5} \right) \right]^{1/5}. \quad (45)$$

No cálculo de $T(R_0)$, consideramos que o par de Rb que é excitado em R_0 não possui velocidade inicial. Esta é uma boa aproximação para $T < 10$ mK porque o fator $e^{-\gamma T}$ irá limitar a região efetiva (de importância) de R_0 para a região $R < 500$ Å, onde $V(R) \gg K_B T$, isto é, a energia cinética é muito menor que a energia de interação. Além disso, alguma velocidade inicial irá alterar muito pouco o resultado final e será ignorada aqui (os átomos aprisionados movem-se com velocidades da ordem de 25 cm/s, em contraste às velocidades com as quais se movem à temperatura ambiente, ≈ 500 m/s).

A probabilidade de sobrevivência do par no estado molecular excitado, ou seja, a probabilidade da quasimolécula alcançar a região de curto alcance antes de decair espontaneamente será:

$$\gamma = \exp[-\Gamma_M T(R_0)] = \exp\left[-\left(\frac{\Delta_\tau}{\Delta_0}\right)^{5/6}\right]. \quad (46)$$

O movimento do par $Rb^* - Rb$ é expandido em superposições coerentes de estados nucleares estacionários, com cada superposição representando um pacote de onda inicialmente estacionário em R_0 , que é idêntico ao pacote de onda que é ressonantemente excitado em R_0 e mover-se-á classicamente em $V(R)$. Este pacote é

bem localizado ($\Delta R/R < 0.1$) e comporta-se classicamente para valores importantes de R_0 , apesar do grande valor do comprimento de onda de de Broglie do par de Rb inicial. Ou seja, embora λ_D seja longo ($\approx 50 \text{ \AA}$ para 1mK), a absorção semiclássica seguida pelo movimento clássico pode ser justificada pelo fato de que na região significativa de R_0 (que varia de 300 a 500 $\text{\AA}$) muitas ondas parciais são requeridas para descrever o movimento. Os níveis vibracionais importantes estão separados por energias menores que $\hbar \Gamma_M$ tal que uma superposição coerente é excitada, produzindo um pacote de onda que se move em direção à $R=0$ e que cuja extensão espacial ($\approx 0.1R$) é menor do que o λ_D do estado fundamental. A escolha de tais pacotes de onda como base para se tratar o movimento nuclear obviamente não é única. Porém, esta representação descreve corretamente a competição entre o movimento nuclear e a emissão espontânea, fornecendo as vantagens conceituais e calculacionais de um análogo clássico.

Na região de importância, $R \leq 500 \text{ \AA}$, o par estará movendo-se no potencial atrativo $-C_3/R^3$ indo de $R=R_0$ até $R=0$ repetidas vezes antes de sofrer uma transição ΔJ . A probabilidade de um par Rb^*-Rb sofrer uma transição ΔJ , uma vez que tenha alcançado a região $R \approx 10 \text{ \AA}$ será:

$$P_{\Delta J}(R_0) = n_J \gamma + n_J(1-n_J)\gamma^3 + n_J(1-n_J)\gamma^5 + \dots = \frac{n_J \gamma}{1 - (1-n_J)\gamma^2}, \quad (47)$$

onde $n_J = 2P(1-P)$ é a probabilidade de que o par sofra mudança de estrutura fina, segundo a teoria de Landau-Zener [56] em cuja fórmula, usada para estimar probabilidades de transições não adiabáticas, $P = e^{-A}$, na qual o argumento da exponencial, chamado parâmetro de adiabaticidade, é dado por:

$$A = \frac{2\pi\Omega^2}{\hbar v \left| \frac{dV_2}{dR} - \frac{dV_1}{dR} \right|_{R=R_c}}, \quad (48)$$

onde Ω^2 fornece uma medida do acoplamento entre os estados através do operador spin-órbita, v é a velocidade relativa dos dois núcleos no ponto do cruzamento, e o termo $dV_2/dr - dV_1/dr$ é a diferença das inclinações das curvas, determinada no ponto de cruzamento.

Figura 6: Esquema mostrando as possibilidades consideradas na probabilidade de cruzamento entre as curvas, considerando-se que inicialmente o par encontra-se no estado $S_{1/2}+P_{3/2}$, transicionando para o estado $S_{1/2}+P_{1/2}$ (a). Em (b) observamos a região de cruzamento (na realidade, um cruzamento evitado). Em presença de interação entre os dois estados, as curvas de potencial destes não se cruzam.

No caso do rubídio, $\Omega = 81 \text{ cm}^{-1}$ [51], e os outros parâmetros necessários no cálculo da probabilidade de ocorrência de mudança de estrutura fina, são obtidos a partir das curvas de potencial que foram apresentadas anteriormente. O parâmetro A foi determinado e vale 0,248, e assim obtivemos $n_J = 0,34$, com uma boa concordância com a referência [51] ($n_J = 0,36$).

A taxa de perdas por unidade de volume finalmente é obtida, integrando-se sobre toda a região possível de excitação, a multiplicação das probabilidades relativas à excitação em R_0 e sobrevivência do par no estado excitado

e à mudança de estrutura fina, considerando-se a densidade de pares $Rb-Rb$ (ambos no estado fundamental) com separação $R \rightarrow R + dR$, $\frac{[Rb]^2}{2} (4\pi R_0^2 dR_0)$:

$$R_{\Delta} = \frac{[Rb]^2}{2} \int_0^{\infty} dR_0 4\pi R_0^2 \Re(R_0, \omega_L, I) P_{\Delta}(R_0). \quad (49)$$

A taxa de perdas por volume, R , obtida, relaciona-se com o coeficiente de taxa β , da seguinte forma: $\beta=R/n^2$. Entretanto, denominaremos a taxa de perdas β , como é tradicionalmente feito.

CAPÍTULO III: OBSERVAÇÃO DE COLISÕES COM MUDANÇA DE ESTRUTURA FINA

Colisões inelásticas exoérgicas são importantes uma vez que limitam o número de átomos e portanto as densidades obtidas em MOTs, e também pelo papel que desempenham na obtenção de condensados bosônicos. Além disso, o estudo das taxas de perdas devido à colisões inelásticas ocorrendo entre átomos alcalinos neutros aprisionados, pode fornecer informações detalhadas sobre a interação de longo alcance entre os átomos, e também sobre aspectos importantes da dinâmica colisional.

Conforme já vimos, os processos de *trap-loss*, no regime de altas intensidades do *laser* de aprisionamento, envolvem um átomo no estado fundamental e outro no excitado. Investigações experimentais prévias neste campo exploraram a dependência da taxa de perdas (resultante dos processos RE e FSC conjuntamente) com a intensidade do *laser* de aprisionamento [57], e como função da frequência através da técnica de catálise [58 – 61].

Em um primeiro experimento realizado nessa área, por Prentiss *et al.* [4] para átomos de sódio, foi estabelecida a independência, errônea, do coeficiente de taxa com a intensidade do *laser* de aprisionamento. Porém, foram realizados outros experimentos [57], que vieram a confirmar o equívoco dessas primeiras conclusões. O

infortúnio daquele procedimento reside principalmente no fato de que as medidas foram realizadas num intervalo muito estreito de intensidades, entre outras possíveis razões.

Com o intuito de determinar a dependência dos processos de *trap-loss* com a frequência, foi proposta uma técnica por Sesko *et al.* [58], realizada pela primeira vez em átomos de césio, onde utiliza-se um *laser* adicional, responsável em aumentar as perdas colisionais. Neste tipo de experimento faz-se necessária a introdução de um *laser* extra, denominado *laser* de catálise (ou prova), capaz de varrer um intervalo de frequência maior, sem contudo prejudicar a operação da armadilha, uma vez que o *laser* de aprisionamento não pode ter sua frequência variada em um grande intervalo sem que a operação da armadilha não seja comprometida. Estes experimentos são mais facilmente realizados em armadilhas de *Na*; para *Rb* e *Cs* são introduzidas dificuldades na interpretação dos resultados pela estrutura hiperfina dos estados desses alcalinos, que apresentam separações da ordem de centenas de MHz [45].

Para que pudéssemos distinguir a participação dos processos colisionais de mudança de estrutura fina mediante a contribuição conjunta de ambos os mecanismos de perdas de átomos de nossa armadilha (RE e FSC), estudamos as taxas de perdas devido às transições não-adiabáticas discutidas no capítulo anterior, isoladamente, como função da intensidade do *laser* utilizado no aprisionamento. Em seguida, estudamos as taxas de perdas por colisões com FSC como função da frequência, onde utilizamos uma técnica similar à de catálise.

A equação de taxa que governa o número de átomos (N) em uma armadilha é:

$$\frac{dN}{dt} = L - \gamma N - \beta \int n^2(\mathbf{r}, t) d^3r, \quad (50)$$

onde L (átomos/s) é a taxa de carga da armadilha a partir dos átomos de rubídio mais lentos da distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann à temperatura ambiente presentes no vapor; depende de parâmetros da armadilha (pressão de vapor do alcalino em questão, dos diâmetros dos feixes de aprisionamento e do volume da intersecção formada por eles, da temperatura da célula, e principalmente da intensidade e *detuning* do *laser*, e do gradiente do campo magnético [8], $n(\mathbf{r}, t) = n_0 e^{-(\mathbf{r}/w)^2}$ é a distribuição de densidade atômica proposta, γN é a taxa de colisões entre os átomos frios e os átomos quentes, presentes no vapor de fundo, onde o fator γ depende basicamente da pressão parcial, sendo relativamente insensível aos parâmetros da armadilha, β é o coeficiente de taxa atribuído às colisões frias.

Nossos experimentos foram realizados no regime de *radiation trapping* [6] e o comportamento temporal de nossa armadilha poderia então ser ajustado teoricamente por uma lei exponencial simples.

No início do processo de carga, o volume da amostra é praticamente constante, e com o aumento do número de átomos aprisionados, e portanto da densidade, os fótons espalhados pelos átomos passam a ser reabsorvidos pelos seus vizinhos fazendo com que sintam forças repulsivas, num processo conhecido como espalhamento secundário de fótons. Sob estas circunstâncias a densidade mantém-se constante e o volume da amostra passa a aumentar para acompanhar o incremento no número de átomos. Podemos então reescrever a equação (50) como:

$$\frac{dN}{dt} = L - (\gamma + \beta n_c)N. \quad (51)$$

No estado estacionário, da eq.(51) temos que o número de átomos aprisionados é governado por:

$$N(t) = N_0 \left(1 - e^{-(\gamma + \beta n_c)t}\right), \quad (52)$$

onde N é o número de átomos aprisionados. A taxa de perdas total, β , é determinada a partir de um gráfico semilog de $1-N/N_0$ *versus* tempo, que determina a inclinação $-(\gamma + \beta n_c)$, e a partir daí a taxa de perdas devido à colisões envolvendo estados excitados ocorrendo entre os átomos aprisionados, uma vez que γ é facilmente determinável.

A detecção dos átomos que sofreram mudança de estrutura fina foi realizada através da ionização destes, a qual foi feita via uma transição de dois fótons, de mesmo comprimento de onda, $\lambda \cong 607$ nm, gerados por um *laser* de corante pulsado. Após o par colidindo no potencial $5S_{1/2} + 5P_{3/2}$ ter transicionado para o potencial $5S_{1/2} + 5P_{1/2}$, é então levado ao estado molecular correlacionado aos estados atômicos $5S_{1/2} + 8S_{1/2}$, e subsequentemente promovido por um segundo fóton ao potencial $Rb + Rb^+ + e^-$, que leva a quasimolécula ao contínuo. Na realidade apenas o átomo no estado $P_{1/2}$ que a compõe é ionizado, e assim podemos prontamente detectar e contar os átomos que passaram por FSC.

Nossas medidas serão baseadas na observação do número dos íons formados como função do tempo. O número de íons é diretamente proporcional ao número de átomos no estado $5P_{1/2}$, e que portanto sofreram FSC. A dinâmica desse processo é descrita pela seguinte equação:

$$\frac{dI}{dt} \propto \frac{dN_{P_{1/2}}}{dt} = \frac{1}{2} \beta_{FSC} n_c N_T, \quad (53)$$

onde o fator 1/2 é devido ao fato que dos dois átomos que compõem a quasimolécula, apenas aquele no estado P é ionizado, n_c é a densidade da amostra, N_T o número total de átomos na armadilha, e I é o número de íons detectados.

Em um experimento similar previamente realizado em nosso grupo, a ionização foi feita por um *laser* contínuo (*laser* de corante mais *laser* de Kriptônio), e era necessário lançar-se mão de um modelo de equações de taxa que fornecesse qual a parcela dos átomos em $5P_{1/2}$ (e que portanto sofreram FSC) haviam sido ionizados, pois existe a probabilidade dos átomos em 8S decaírem espontaneamente, populando os níveis 7P, 6P, 5P e por cascata, 7S, 6S, 5S, 5D e 4D. No presente caso, mesmo que isso ocorra, o campo pulsado é intenso o suficiente para ionizar fragmentos atômicos em níveis próximos ao 8S, além disso a probabilidade de decaimento é muito baixa, uma vez que o esse mesmo *laser* que faz a transição $5P \rightarrow 8S$ é responsável pela transição de 8S para o contínuo é “rápido” o bastante. Assim, temos um método de detecção dos átomos que passaram por mudança de estrutura fina altamente eficiente, através da detecção de íons coletados por um *Channeltron particle multiplier* (CPM).

As principais vantagens desse experimento com relação ao anterior, entretanto, são a relação sinal/ruído, e também a maior taxa de produção de íons, que no primeiro experimento era muito baixa. O fato do *laser* pulsado ser largo espectralmente (pois os pulsos são temporalmente estreitos) faz com que todos os átomos da distribuição de velocidades sejam acessados, o que não acontece se usamos um *laser* *cw*, estreito.

Os átomos que passaram pelo processo de mudança de estrutura fina deixam o MOT com $v = 129,8$ m/s em todas as direções do espaço. Esta velocidade adquirida pelos átomos é determinada pela equação $\frac{\Delta E_{FS}}{2} = \frac{1}{2}mv^2$, onde m é a massa atômica do *Rb*.

Desta forma, o efeito *Doppler* exerce um papel importante na excitação do estado $5P_{1/2}$ para o $8S_{1/2}$ (largura *Doppler* ~ 600 MHz); usando-se um *laser* estreito, poucos átomos são acessados nesta transição. Por outro lado, o *laser* pulsado, devido à sua largura espectral (6 GHz), interage com todos os átomos, pertencentes a diferentes classes de velocidade. Para o passo de ionização, o efeito *Doppler* não é importante, pois o segundo fóton estará conectando o estado $8S_{1/2}$ ao contínuo.

III.1: Dependência do coeficiente de taxa com a intensidade

Inicialmente, iremos estudar os processos colisionais ocorrendo entre os átomos frios aprisionados, verificando a sua dependência com a intensidade do *laser* responsável pelo aprisionamento, através de medidas do coeficiente de taxa atribuído à colisões com mudança de estrutura fina com relação a este parâmetro, na presença do *laser* pulsado.

III.2: Montagem e procedimento experimental

Nossa armadilha magneto-óptica (VCMOT) opera em uma célula fechada, e é carregada com os átomos mais lentos da distribuição de velocidades de

Maxwell-Boltzmann presentes no vapor. A célula consiste em uma câmara de aço inoxidável contendo vapor de rubídio à uma pressão de 10^{-9} torr. Para isso são utilizadas uma bomba mecânica, uma turbo molecular e uma bomba iônica. Três pares de feixes *laser* circularmente polarizados retrorefletidos, sintonizados a aproximadamente 5 MHz para o vermelho da transição atômica, são alinhados de modo a interceptarem-se ortogonalmente no centro da célula, onde um campo magnético quadrupolar gerado por um par de bobinas na configuração anti-Helmholtz é nulo, crescendo linearmente em todas as direções. A separação Zeeman dos níveis atômicos e o uso de polarizações apropriadas dos feixes produzem uma força com dependência espacial, que tem o efeito de restaurar a posição dos átomos ao centro da armadilha, onde $B=0$. Em adição, o *detuning* para o vermelho produz uma força amortecedora viscosa, que resfria os átomos a aproximadamente 250 μ K. As bobinas responsáveis pelo campo localizam-se externamente à câmara e conduzem uma corrente da ordem de 10 A, produzindo um gradiente de campo axial de 10 gauss/cm (direção z) e 5 gauss/cm nas direções x e y. Polarizações convenientes (os feixes contra-propagantes têm polarizações circulares ortogonais) são conseguidas com o uso de lâminas $\lambda/4$ dispostas diante de cada uma das janelas da armadilha.

Um *laser* de diodo (mestre) de baixa potência (SDL), cuja largura de linha é menor que 1 MHz, é utilizado para bombear um segundo *laser* de diodo (escravo), cuja potência de saída é de aproximadamente 50 mW, responsável pelo aprisionamento. Um terceiro *laser*, também de diodo (SDL), cuja largura é de 30 MHz, fornece a frequência de rebombeio. Devido a existência da estrutura hiperfina do estado fundamental, durante o processo cíclico de absorção e emissão de fótons o átomo pode

sofrer uma transição indesejada para o nível fundamental hiperfino de menor energia, permitida pelas regras de seleção, saindo de ressonância e abandonando então a armadilha. Portanto, o feixe de rebombeio é necessário para evitar o bombeamento óptico do átomo para estados hiperfinos não ressonantes com a frequência do *laser* de aprisionamento. Ambos os feixes, provenientes dos *lasers* de aprisionamento e de rebombeio, são divididos em três feixes, ao longo dos eixos de aprisionamento. O *laser* de aprisionamento é sintonizado próximo à transição atômica $5S_{1/2} (F=3) \Rightarrow 5P_{3/2} (F'=4)$, e o rebombeio próximo à transição $5S_{1/2} (F=2) \Rightarrow 5P_{3/2} (F'=3)$, utilizando-se uma célula de absorção saturada para cada um deles.

A luz de um *laser* de corante pulsado, bombeado pelo segundo harmônico de um *laser* Q-switched Nd:YAG (CONTINUUM - Surelite I), composta por pulsos de 4ns de largura, 1 mJ/pulso, com taxa de repetição de 10 Hz, e largura espectral de aproximadamente $0,2 \text{ cm}^{-1}$, é responsável pela transferência de população dos átomos no estado $5P_{1/2}$ para o $8S_{1/2}$, e por sua subsequente ionização. O *laser* é sintonizável e foi calibrado usando-se um monocromador, e então pudemos encontrar a frequência da transição. Na Figura 7, abaixo, apresentamos um esquema dos níveis acessados no experimento.

Figura 7: Diagrama esquemático mostrando os níveis atômicos e as transições acessadas pelos lasers no experimento; à esquerda temos representadas as transições de operação do MOT, e à direita as transições de detecção dos íons formados.

O número de átomos contidos na amostra é determinado através do monitoramento da fluorescência captada por uma câmara fotomultiplicadora (PMT) calibrada, cujo sinal é adquirido por um osciloscópio. Conhecendo-se a taxa de fluorescência f e o ângulo sólido subentendido, determinamos o número total de átomos através da seguinte relação:

$$f = GN \frac{h\nu}{2\tau \Delta^2 + (\Gamma/2)^2 + (\Omega^2/2)}, \quad (54)$$

onde o fator geométrico G incorpora o ângulo sólido disponível à absorção de fótons emitidos pela amostra e coletados pela PMT, N é o número total de átomos presentes na armadilha, Ω é a frequência de Rabi ($\Omega \propto \sqrt{I}$), oriunda do tratamento do átomo como um sistema de dois níveis em presença de radiação; Δ o *detuning*; τ e Γ são o tempo de

vida radiativo, e a largura de linha natural do estado excitado da transição usada no aprisionamento, respectivamente.

A medida do volume é realizada através das imagens da amostra adquiridas por uma câmera de vídeo (CCD) calibrada, conectada a um *line grabber* e a um monitor de vídeo. O uso de filtros diante da câmera era necessário devido à alta intensidade do *laser* pulsado, e para separar a luz proveniente da amostra, da luz espalhada do *laser* de prova. Na Figura 9 podemos observar o perfil espacial gaussiano de intensidade de nossas amostras. Pelos dados obtidos do ajuste teórico das curvas aquisicionadas para cada intensidade, podemos calcular o volume ocupado pela amostra, considerada como tendo uma forma aproximadamente esférica. A partir dos valores obtidos para o número e o volume temos a densidade de átomos em nossas armadilhas.

Para cada intensidade do *laser* de aprisionamento, a qual era variada com o auxílio de um cubo polarizador, esse procedimento era realizado, e os íons detectados pelo CPM, eram discriminados por um contador de íons. Na Figura 8 temos a representação esquemática da montagem experimental utilizada. O discriminador foi ajustado para aquisicionar os dados, e para cada intensidade os picos de produção de íons, eram registrados.

Para variar a intensidade do *laser* procedíamos da seguinte forma: primeiramente o feixe era bloqueado e o cubo polarizador era girado por um certo ângulo até obtermos um valor de potência desejado, lido por um medidor de baixa potência posicionado diante do cubo. O feixe era então desbloqueado e tínhamos que

realinhar a óptica pois o *trap* perdia sua forma anterior quando a posição angular do polarizador era modificada.

Figura 8: Sistema experimental utilizado na ionização dos fragmentos atômicos gerados por FSC , e também para o estudo da taxa de perdas com a intensidade do laser de aprisionamento.

Figura 9: Curva mostrando o perfil de densidade das amostras de átomos aprisionados. A curva sólida corresponde ao ajuste teórico (fitting), do qual retiramos as informações necessárias para o cálculo do volume da amostra aprisionada.

III.3: Resultados e discussão

As amostras apresentaram números característicos da ordem de 10^7 átomos, e densidades típicas de 10^{10} átomos/cm³, correspondentemente às cinturas gaussianas dos perfis de densidade entre $w \approx 0,01 - 0,06$ cm. O número médio de íons registrados pelo contador variou entre 1 e 96 unidades arbitrárias, para o menor e o maior valor da intensidade do *laser* de aprisionamento.

Podemos observar na figura abaixo a variação da taxa de perdas de átomos que deixam a armadilha devido à transições de FSC, para diversas intensidades do *laser* de aprisionamento.

Figura 10: Evolução da taxa de perdas devido a mudança de estrutura fina com a intensidade do laser de aprisionamento. A linha sólida representa o comportamento de β_{FSC} previsto pelo modelo teórico.

O comportamento qualitativo da taxa de perdas já era previsto, pois com o aumento da intensidade é esperado que haja um aumento na população de átomos no estado excitado ($S_{1/2}+P_{3/2}$), e consequentemente na taxa de colisões exoérgicas, as quais envolvem um átomo no estado fundamental e outro no estado excitado. A evolução para a taxa segundo o modelo GP foi obtida pela integração da expressão (49).

O decréscimo na curva teórica com a diminuição da intensidade está exclusivamente relacionado com a diminuição de população do estado excitado. Nosso resultado mostra um decréscimo muito mais rápido do que o teórico; resultado similar também foi obtido para o césio [36]. Uma possível explicação para esta discrepância é a distribuição de população nos dois diferentes estados fundamentais hiperfinos.

No experimento realizado com *laser* contínuo foi observado que a taxa de colisões com mudança de estrutura fina mais que dobrava quando o par atômico

iniciava a colisão no estado $5P_{3/2} + 5S_{1/2}(F=2)$, do que no estado $5P_{3/2} + 5S_{1/2}(F=3)$. Isto deve-se ao fato que o estado 0_u^+ (o qual é favorável à FSC) conecta-se assintoticamente ao estado hiperfino fundamental de mais baixa energia.

Em nosso experimento a intensidade do *laser* de aprisionamento foi variada, enquanto que a intensidade do *laser* de rebombeio foi mantida constante. O efeito disso é que a fração de população no estado fundamental hiperfino de mais alta energia aumentará, pois o forte rebombeio impede que o estado fundamental hiperfino de mais baixa energia seja populado. Deste modo, o que observamos no gráfico da Figura 10 é resultado de uma combinação da população no estado excitado e das populações nos estados fundamentais hiperfinos.

Contudo, estamos interessados, também, em inferir a contribuição de β_{FSC} à taxa total de perdas, β . O coeficiente de taxa referente às perdas por escape radiativo e mudança de estrutura fina pode ser medido experimentalmente à partir da curva de carga da armadilha, conforme foi previamente explicado. Nossos resultados experimentais fornecem valores de β_{FSC} em unidades arbitrárias. Porém, esta deve estar nas mesmas unidades que a taxa total, dada em cm^3/s , a fim de que possamos compará-las.

Podemos inferir o valor da taxa de perdas por mudança de estrutura fina através da dinâmica do número de átomos em $P_{1/2}$, a qual é representada por uma equação de taxa, representando o balanço entre a transferência dos átomos do estado $P_{3/2}$ para o estado de menor momentum angular total, $J=1/2$, e o decaimento deste

estado através de emissão espontânea para o estado $5S_{1/2}$, conforme mostra a figura abaixo:

Figura 11: Esquema de níveis envolvidos na dinâmica do número de átomos no estado $5P_{1/2}$, utilizada no cálculo da taxa de perda por FSC.

A equação de taxa à qual estamos nos referindo é a seguinte:

$$\frac{dN_{P_{1/2}}}{dt} = \frac{1}{2}\beta n_e N_T - \Gamma N_{P_{1/2}}. \quad (55)$$

Logo, a população de átomos no estado $P_{1/2}$, no estado estacionário, será dada por:

$$N_{P_{1/2}} = \frac{1}{2} \frac{\beta n_e}{\Gamma} N_T. \quad (56)$$

Considerando o fato de que cada íon detectado corresponde a um átomo no estado $P_{1/2}$, e que a cada 200 pulsos do *laser*, 37 íons foram contados para a intensidade $I = 35\text{mW/cm}^2$ do *laser* de aprisionamento, e sabendo que a largura de linha desse estado é 5,89 MHz, obtemos o valor da taxa $\beta_{FSC} = 1,78 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{s}$. Comparando esse valor à taxa total correspondente, $\beta = 5,0 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{s}$, determinamos que a taxa de perdas devido à mudança de estrutura fina corresponde a aproximadamente 35% da taxa total ($\beta_{FSC} \cong (0,35 \pm 0,09) \beta$). No experimento anterior, usando *laser* contínuo no passo de ionização, β_{FSC} foi determinado como sendo $\sim 9\%$ da taxa total.

III.4: Dependência do coeficiente de taxa com a frequência- Técnica de Catálise

Consideremos o coeficiente de taxa obtido pela teoria GP, que nos permite escrever:

$$\beta \propto \int 4\pi R_o^2 dR_o \epsilon(\omega_L, R_o) P(R_o). \quad (57)$$

A forma do potencial excitado é importante em duas partes da equação acima, determinando: (i) à que distância interatômica a excitação ocorre, e (ii) o tempo necessário ao par para alcançar a região de curtas separações onde os fenômenos de *trap-loss* acontecem. Para a situação onde o *laser* é sintonizado várias larguras de linha para o vermelho da ressonância, isto é, para grandes valores de Δ comparados com a largura natural da transição, a lorentziana $\epsilon(\omega_L, R_o)$ é acentuadamente centrada em $R = R_0$, e $\omega_L - \omega_0 = -C_3 / \hbar R_L^3$. Sob estas condições, podemos reescrever :

$$\beta \propto \left(\frac{\Delta_t}{\Delta_L} \right)^2 \exp \left[- \left(\frac{\Delta_t}{\Delta_L} \right)^{5/6} \right], \quad (58)$$

onde Δ_t é uma escala de frequência característica, e para o *Rb* é igual a 115 MHz [61].

No caso do par de átomos colidindo ser excitado ao potencial $S_{1/2} + P_{1/2}$, temos que levar em conta apenas o escape radiativo como mecanismo de perdas [62]. Porém, se os átomos colidindo forem excitados ao potencial $S_{1/2} + P_{3/2}$, a taxa de perdas dependerá de ambos os processos (RE e FSC) e o coeficiente de taxa referente ao processo de mudança de estrutura fina pode ser escrito como:

$$\beta \propto \frac{n_J e^{-(\Delta_\tau / \Delta_L)^{5/6}}}{\Delta_L^2 [1 - (1 - n_J) e^{-2(\Delta_\tau / \Delta_L)^{5/6}}]}, \quad (59)$$

onde n_J é a probabilidade do par sofrer mudança de estrutura fina na região de curtas separações internucleares, ($n_J = 0,34$) calculada através da fórmula de Landau-Zener apresentada no capítulo anterior.

O regime do *laser* de catálise, descrito por Sesko *et al.*, ocorre no intervalo de transição entre pequenos e grandes *detunings*. Se a densidade de estados ligados excitados rovibracionais é larga o suficiente próximo ao limite de dissociação de um potencial atrativo $1/R^3$, então a quantização do estado excitado pode ser ignorada e o espectro é aproximadamente contínuo. Esta é a representação quase-estática utilizada por Gallagher e Pritchard para *detunings* negativos. O critério para utilizar-se tal representação é que o espaçamento entre os níveis seja menor que a largura do nível [51].

O papel do *laser* de catálise é provocar um aumento na taxa de colisões envolvendo estados excitados, sem afetar a operação da armadilha. Esta técnica nos revela, principalmente, informações sobre os aspectos dinâmicos das colisões, em especial sobre o movimento dos átomos à longas separações, antes que estes alcancem a região de transferência de energia à curtas distâncias internucleares. Este movimento é afetado pelo processo de excitação, pela subsequente aceleração dos átomos sob ação dos potenciais atrativos dos estados moleculares excitados, e principalmente pelo processo de emissão espontânea. Porém, a aceleração poderá não ocorrer, em virtude que na região de *detunings* situados dentro da estrutura hiperfina o espectro é muito congestionado, e muitos cruzamentos evitados ocorrem entre as curvas, podendo fazer

com que o processo de aceleração seja interrompido, de modo que os átomos jamais atinjam a região de transferência de energia.

Na técnica de catálise entretanto, a adição desse *laser* extra pode ocasionar problemas de bombeamento óptico se este estiver sintonizado próximo a um dos níveis hiperfinos do estado excitado. Experimentos realizados próximos as linhas D2 do *Cs* e do *Rb* apresentam dificuldades referentes a comparação com a teoria, pois a magnitude de Δ_{τ} é muito próxima a dos níveis hiperfinos dos estados excitados próximos à essa linha. Entretanto experimentos realizados na linha D1 não apresenta tais problemas, pois nessa linha temos apenas dois estados excitados e estes encontram-se bem separados. O caso do *Na* é bem mais simples, para ambas as linhas D1 e D2, pois $\Delta_{\tau} = 240\text{MHz}$ para esse alcalino e a sua estrutura hiperfina do estado excitado é menor. Porém a utilização dessa linha não nos é conveniente, pois nela não há mudança de estrutura fina.

A adição do *laser* de catálise induz uma perda adicional de átomos aprisionados devido ao fato deste provocar um aumento das colisões envolvendo átomos nos estados fundamental e excitado. Desta forma, escrevemos o coeficiente de taxa como:

$$\beta = \beta_i + \beta_c, \quad (60)$$

onde β_i representa as perdas quando estão presentes apenas os feixes de aprisionamento, e β_c é a contribuição advinda do *laser* de catálise.

Dois tipos de processos colisionais contribuem para o último termo na equação (60). Além de colisões entre átomos nos estados fundamental e excitado, que

são as de interesse nesse trabalho, existe também a contribuição de colisões ocorrendo entre átomos estando ambos no estado fundamental, com a eventual liberação de energia correspondente à separação entre os níveis hiperfinos para a forma cinética. Esse tipo de colisão não apresenta nenhuma dependência com a intensidade do *laser* de catálise, entretanto as colisões envolvendo estados excitados têm a característica peculiar de sua dependência linear com o *laser* responsável pela excitação dos átomos[58]. Dessa forma, a adição desse *laser* de catálise seleciona, inerentemente, apenas esse tipo de colisão.

Em nosso experimento de catálise utilizamos um *laser* adicional, Ti:Saphira (Coherent 899-*Ring Laser*), à montagem experimental, cuja intensidade pôde ser variável no intervalo de 50 – 60 mW/cm e sintonizável no intervalo de frequências – $1200 \text{ MHz} < \Delta < -50 \text{ MHz}$, abaixo da transição atômica que estávamos considerando $5S_{1/2}(F=3) \Rightarrow 5P_{3/2}(F'=4)$. Novamente, assim como no experimento realizado para estudar-se a dependência da taxa de perdas com a intensidade, o *laser* de corante pulsado era responsável pela ionização dos átomos que sofressem FSC e a formação dos íons era monitorada.

Esse experimento, cujo propósito é medir a dependência da taxa de perdas devido à FSC com a frequência, é um pouco distinto de experimentos de catálise tradicionais, nos quais a intensidade do *laser* de prova (I_c) é variada de modo a garantir que o número de átomos permaneça constante assim que a frequência do *laser* for variada. Em nosso procedimento a intensidade foi mantida constante, sendo apenas a frequência variada no intervalo já mencionado.

Considerando-se então uma dependência linear para β_c , a dependência das colisões envolvendo estados excitados com a frequência (espectro de *trap-loss*) pode ser obtida diretamente do comportamento da eq. (51) para o estado estacionário:

$$N = \frac{L}{\gamma + \beta n_c}. \quad (61)$$

Na proposta original, a intensidade do *laser* é ajustada sempre que a frequência é variada, pois mudanças no *detuning* Δ_c , afetam β e também a distribuição de densidade, e ajustando-se a intensidade $I_c(\Delta_c)$, o número de átomos pode ser mantido constante assim que se varia Δ_c , de modo a densidade ser mantida constante. Assim,

$$\beta = \beta_t + \beta_c(\Delta_c) I_c(\Delta_c) / I_{ref} \quad (62)$$

é independente de Δ_c e $\beta(\Delta_c)$ é inversamente proporcional à $I_c(\Delta_c)$. Manter-se a intensidade do *laser* de catálise fixa oferece algumas vantagens. Seriam evitadas medidas da densidade para cada um dos *detunings* do *laser* de catálise, que envolvem medidas de número e volume, de onde provêm as principais fontes de erro nas medidas das taxas.

Entretanto, em nosso experimento foi necessário que a intensidade do *laser* de prova fosse mantida em um valor fixo, no caso $I_c = 4,35 \text{ mW/cm}^2$. As variações da distribuição dos átomos não sofreu grandes desvios, de modo que esta alteração na técnica original não nos causou maiores complicações no que se refere aos erros sistemáticos inerentes às medidas, situados dentro de padrões aceitáveis.

Nos experimentos tradicionais não precisamos saber o número de átomos na ausência do *laser* de catálise, e nem β_t , pois obtemos direto a dependência de β_c com a frequência através de I_c . Em nosso caso, quando medimos o número de íons com o

laser de catálise, estamos também medindo a contribuição devido ao *laser* de aprisionamento. Para separar a contribuição deste, temos que medi-la na ausência do *laser* de catálise. Desta forma não é conveniente variarmos a intensidade do *laser* de catálise (pois esta seria uma variável a mais), sendo preferível determinarmos os números de átomos e densidades nas duas situações, para com e sem o *laser* de prova.

III.5: Montagem e procedimento experimental

O arranjo experimental que utilizamos neste experimento consistiu na montagem usada no experimento relatado previamente, com a adição do *laser* Ti:Saphira, bombeado por um *laser* de argônio (Coherent Innova- *Sabre Ion Laser*), conforme podemos observar na Figura 12. Um cubo polarizador foi inserido diante do feixe do *laser* Ti:Saphira antes da entrada deste por um dos braços da armadilha, para que a intensidade pudesse ser ajustada num valor para o qual o número de átomos foi mantido aproximadamente constante.

Figura 12: Esquema do sistema experimental utilizado para o estudo da taxa de perdas por FSC como função da frequência do laser de catálise, em presença do laser pulsado.

A frequência foi variada no intervalo já mencionado, e o procedimento de aquisição das imagens do *trap*, determinação do número de átomos contidos na amostra e de contagem de íons foi realizado para um total de doze frequências distintas, para a intensidade fixa em $4,35 \text{ mW/cm}^2$, na presença e ausência do *laser* de catálise. Esse procedimento foi tomado para que pudéssemos nos assegurar de que a variação (diminuição) no número de átomos ocasionada por esse *laser* não ultrapassasse 20%. Para valores muito próximos da ressonância, o *trap* era altamente perturbado pelo intenso *laser* de prova, razão pela qual não puderam ser feitas medidas acima de -50 MHz.

III.6: Resultados e discussão

Consideramos anteriormente que o número de íons formados a partir dos átomos no estado $5P_{1/2}$ é dado por:

$$\frac{dI}{dt} = \frac{1}{2} \beta_{FSC} n_c N_T, \quad (63)$$

então, na presença do *laser* de catálise o número de íons passa a ser governado pela equação

$$\frac{dI'}{dt} = \frac{1}{2} (\beta_{FSC} + \beta_c) n_c 'N_T', \quad (64)$$

onde β_{FSC} é determinado através da equação anterior, para o caso onde temos apenas a contribuição do *laser* de aprisionamento. Assim determinamos, diretamente, a contribuição adicional do *laser* de catálise à taxa de perdas especificamente por FSC. Nas equações acima, n, n' ; N, N' , e I, I' são as densidades, número de átomos presentes na amostra e número de íons, na ausência e presença do *laser* de catálise, respectivamente. A evolução da taxa obtida como função da frequência pode ser observada na figura abaixo (Figura13).

Figura 13: *Evolução da taxa de perdas devido a mudança de estrutura fina com a frequência. A dependência com o detuning (pontos discretos) foram obtidos pela técnica de catálise; a linha sólida representa o comportamento previsto teóricamente.*

Observando o resultado experimental obtido para o comportamento de β_{FSC} com a frequência na figura acima, constatamos que existem sérias e agudas discordâncias com a evolução para a mesma prevista pelo modelo Gallagher-Pritchard, incapaz de explicar todos os detalhes do espectro.

À princípio, estas discordâncias são originadas em virtude do modelo teórico padecer de limitações por fazer considerações restritivas; uma delas, e a mais importante a ser lembrada, é que não é considerada a existência da estrutura hiperfina nos cálculos. Lembremo-nos que o modelo assume um único canal de perdas, representado por uma curva de potencial atrativo da forma $-C_3/R^3$, onde C_3 é um coeficiente médio. Sabemos entretanto, que na realidade temos várias curvas, as quais podem ser acessadas experimentalmente, com diferentes valores para C_3 e que na região

de pequenos *detunings* (ou correspondentemente, grandes distâncias internucleares) a interação hiperfina é responsável por causar complicações consideráveis nessas curvas de potencial na região de longo alcance, originando um número muito grande de estados moleculares hiperfinos [62,63].

Uma das características do espectro experimental, esta prevista pelo modelo GP, é o máximo observado próximo à ressonância. Quanto mais próximo da ressonância, mais curvas atrativas são disponíveis a serem excitadas, e portanto a taxa de perdas aumenta. Para isso também contribui o fato de que nessa região existe um número grande de pares atômicos para ser acessado.

No espectro, o primeiro mínimo, a partir da frequência de ressonância, em ~ -150 MHz, corresponde à excitação dos pares atômicos ao estado excitado $5S_{1/2}+5P_{3/2}$ na região de *detunings* situados dentro da estrutura hiperfina deste estado, e acreditamos que deve-se ou à excitação direta da quasimolécula pelo *laser* a um estado hiperfino repulsivo, ou então pelo acoplamento da curva atrativa a um potencial repulsivo através de um pseudo-cruzamento entre elas (observe a Figura 14), daí uma consequente diminuição na taxa de perdas à pequenos *detunings*. Entretanto, não podemos prever, com certeza, qual desses mecanismos seria responsável pela diminuição da taxa para essa determinada frequência.

A análise do espectro nessa região torna-se um tanto dificultada, pois não são disponíveis, até o momento, as curvas de potencial do rubídio incluindo as curvas originadas pela interação hiperfina, disponíveis apenas para o sódio [62]. Então não podemos identificar claramente os estados moleculares hiperfinos específicos que

estariam sendo acessados pelo *laser* no experimento, nem mesmo o acoplamento destes com os estados na região de curto alcance, e os cruzamentos evitados que seriam responsáveis em interromper o movimento do par no potencial atrativo, evitando que os átomos alcançassem a região de transferência de energia, suprimindo assim a perda de átomos.

Quanto ao segundo mínimo observado à partir da ressonância atômica, aproximadamente em -300 MHz, indagamos sobre a plausibilidade de ser uma consequência da existência de estados ligados do potencial excitado [64]. Nessa região de longo alcance a densidade de estados vibracionais é alta. A quasimolécula, uma vez que tenha se ligado em um estado rotacional-vibracional de um potencial de longo alcance, “preferirá” nele permanecer, do qual após um certo tempo irá decair espontaneamente, a continuar oscilando – indo e vindo, no potencial, até que sofra mudança de estrutura fina. Uma vez que isso tivesse ocorrido observaríamos uma diminuição na taxa de perdas atribuída à FSC, e um aumento na taxa devida ao processo de escape radiativo, considerando a realização de um experimento que ao mesmo tempo detectasse átomos passando por mudança de estrutura fina e por exemplo, medisse também a fluorescência emitida por aqueles que deixassem a armadilha por escape radiativo. Porém a realização de tal experimento não seria simples. De qualquer modo, o mínimo na taxa devida à FSC foi observado, e uma hipótese feita com o propósito de explicar esse ponto especial do nosso espectro de *trap-loss*, que nos parece razoável, é a influência dos estados ligados de longo alcance.

Na Figura 14 observamos curvas de potencial adiabáticas correlacionadas ao limite $5S_{1/2}+5P_{3/2}$, calculadas por Walker e Pritchard [65], correspondentes a

distâncias onde a interação dipolo-dipolo é comparável às separações hiperfinas, o que ocorre a longas separações internucleares.

Figura 14: Visão expandida das curvas de potencial $3u$ do ^{85}Rb , na região de acoplamento hiperfino do estado excitado $S_{1/2}+P_{3/2}$. Os valores numéricos de $F=J+I$, relativo ao átomo no estado $P_{3/2}$ são denotados por um índice linha, enquanto os valores $F=3$ correspondem ao átomo em $S_{1/2}$.

Finalmente, na região de grandes *detunings* (abaixo de -700 MHz, onde os dados voltam a concordar com o modelo teórico), a diminuição apresentada pela taxa ocorre pois o número de pares atômicos que podem ser acessados pelo *laser* de catálise é muito pequeno, em virtude das perdas já ocorridas.

A importância do papel desempenhado pela estrutura hiperfina do estado excitado nos processos colisionais de *trap-loss* estimulou o desenvolvimento dos modelos propostos por Walker e Pritchard [65] e por Lett *et al.* [66]. Essencialmente, esses modelos estendem a representação do único estado excitado atrativo do modelo Gallagher-Pritchard para múltiplos estados excitados, apresentando ambos os ramos, atrativo e repulsivo. Porém, esses modelos fazem uma série de simplificações, como por exemplo considerar que todas as curvas de potencial hiperfinas possuem o mesmo

coeficiente C_3 , o que esta longe de ser realidade. Além disso, o modelo de Lett *et al.* não aborda diretamente o processo de FSC, enquanto o proposto por Walker e Pritchard desconsidera a probabilidade de ocorrência de mudança de estrutura fina, considerando-a muito pequena.

III.7: Testes para comprovação da ionização a partir do estado $5P_{1/2}$

Procedemos à realização de testes para comprovar que os íons medidos eram devidos aos átomos que haviam sofrido mudança de estrutura fina, e que esses íons não estariam tendo a contribuição do estado fundamental $5S_{1/2}$, e nem do estado $5P_{3/2}$, à partir da ionização direta de átomos nesses estados. Na Figura 15 observamos um pico na produção de íons devido à transição de detecção de átomos que passaram por FSC.

Observando a Figura 16 podemos constatar que o número de íons é proporcional ao quadrado da intensidade do *laser* de prova, e que portanto a ionização é decorrente de uma transição de dois fótons à partir do estado $5P_{1/2}$; se os átomos estivessem sendo ionizados à partir do estado $5S_{1/2}$, teríamos uma transição de três fótons, e portanto o número de íons deveria ser proporcional à terceira potência da intensidade.

Outro teste que realizamos, com o propósito de nos certificar que os íons detectados eram de fato produto de uma transição de FSC, foi a técnica da medida do tempo de voo, e pudemos observar que estavam sendo formadas íons atômicos Rb^+ . Para que haja a formação de Rb_2^+ , deve haver um tempo suficiente para que se complete o encontro colisional através do qual ocorre a formação desse tipo de molécula, oriunda do cruzamento entre os potenciais dos estados $5S_{1/2}+8S_{1/2}$ e Rb_2^+ , que ocorre a curto alcance. Entretanto a produção de Rb^+ ocorre através da ionização direta à partir do estado $5P_{1/2}$, à longas distâncias interatômicas, via uma transição de dois fótons (de mesma frequência), e não por colisão. Portanto, comprovadamente os íons detectados em nossos experimentos são devidos ao processo de mudança de estrutura fina, apenas. A cogitação de que poderiam estar sendo formados íons à partir da excitação de átomos no estado fundamental é explicada da seguinte forma: existe uma probabilidade de um fóton que acopla o estado

Figura 15: Espectro de íons mostrando a região onde encontra-se o pico referente à transição de ionização dos átomos que sofreram FSC.

Figura 16: Gráfico mostrando a dependência do número de íons formados a partir de átomos que sofreram FSC com o quadrado da intensidade do laser pulsado. O expoente determinado pela inclinação da reta evidencia a ionização como sendo um processo de dois fótons.

fundamental $5S_{1/2}$ ao estado $5P_{3/2}$ estar excitando o átomo ao estado $5P_{1/2}$, devido ao princípio de incerteza, $\Delta E \Delta t \approx \hbar$, e à partir desse estado o átomo seria subsequentemente excitado ao estado $8S_{1/2}$ e daí ionizado, com todas as transições sendo realizadas pelo mesmo fóton.

IV CONCLUSÕES

Medimos neste trabalho a taxa de perdas de átomos de uma armadilha magneto-óptica devido à colisões com mudança de estrutura fina diretamente, através de uma técnica que consiste na ionização de fragmentos atômicos gerados nessas colisões. Além disso determinamos a contribuição desse mecanismo colisional na taxa de perdas total, para a qual contribui também o escape radiativo. Nossos resultados determinam de forma categórica que a mudança de estrutura fina participa de forma secundária, sendo o escape radiativo o principal mecanismo colisional responsável em retirar átomos aprisionados de uma armadilha. O comportamento da taxa de perdas devido ao processo de mudança de estrutura fina foi estudado com relação a intensidade do *laser* de aprisionamento, e também com frequência, através da técnica de catálise.

No caso da dependência com a intensidade, obtivemos evidências que o processo depende não somente da população de átomos no estado excitado, como também das populações dos estados hiperfinos fundamentais. Para a dependência da taxa de perdas com a frequência, observamos a manifestação dos níveis hiperfinos do estado excitado. Constatamos também uma possível proeminência dos estados ligados dos potenciais moleculares excitados de longo alcance na dependência da mesma também com relação à frequência.

Conjecturas apontavam o escape radiativo como o principal contribuinte à taxa de *trap-loss*. Escape radiativo pode, em princípio, ocorrer para qualquer curva de potencial atrativo, enquanto que colisões com mudança de estrutura fina apresentam uma dependência em J , e poucos estados podem levar a perdas através deste mecanismo. Os processos de perdas até então só haviam sido pesquisados sem que uma distinção efetiva entre eles fosse realizada, de modo que pudessem ser estudados de forma mais detalhada.

Uma possível explicação para o fato da contribuição da mudança de estrutura fina ser maior neste experimento quando comparada àquela determinada pelo experimento que utilizou *laser* contínuo, está relacionada com a largura espectral da luz. No caso do *laser* contínuo estamos detectando os átomos no estado $5P_{1/2}$ quando estes já encontram-se à uma longa distância de seus parceiros de colisão. Neste regime, as equações do nosso modelo proposto para calcular a taxa a partir dos dados experimentais, são válidas. No caso em que se usa *laser* pulsado, podemos estar ionizando o par atômico quando este ainda está sob influência do potencial $1/R^3$. É sabido que nesta região intermediária as taxas de decaimento e fotoionização são modificadas por esta interação. Até o momento esta influência não é possível de ser calculada ou estimada.

Comparamos nossos dados com os obtidos através do modelo Gallagher-Pritchard e constatamos que este é incapaz de explicar os resultados para o comportamento das taxas com a frequência, notadamente na região de pequenos *detunings*. Nenhuma teoria ainda existe que seja totalmente quantitativa. Nesta região a estrutura molecular hiperfina introduz grande complexidade às curvas de potencial de longo alcance; uma densidade muito alta de estados origina uma grande

quantidade de cruzamentos evitados, mistura de estados e um espectro congestionado. Nenhum tratamento teórico até o presente momento leva em consideração a multiplicidade de potenciais que podem ser excitados experimentalmente, devido à intratabilidade computacional do problema (existem mais de mil potenciais hiperfinos). No entanto, nossos resultados confirmam que a estrutura hiperfina desempenha um papel fundamental na determinação das taxas de perdas. Além disso, todas as teorias de *trap-loss* existentes padecem da limitação de restringirem-se a poucos canais de espalhamento. Devemos salientar, entretanto, que os modelos semi-clássicos com suas representações quase-estáticas fornecem uma representação bastante útil para a interpretação dos processos de perdas, servindo como um guia qualitativo no tratamento das colisões exoérgicas; o modelo GP fornece resultados bastantes razoáveis no regime de grandes *detunings*, isto é, grandes comparados à largura de linha natural, onde observamos uma boa concordância com os experimentos.

Persiste entretanto a necessidade de desenvolvimento de um modelo que leve em conta a complexa estrutura molecular hiperfina, incorporando potenciais realísticos, atrativos e repulsivos, e não apenas uma curva de potencial efetiva como no caso do modelo GP, entre outros. Esperamos que nossos resultados devam servir de estímulo a novos trabalhos teóricos nessa área, ainda recente.

Do ponto de vista experimental, ainda há algumas possibilidades que podem ser exploradas. Uma delas seria o estudo deste processo em um feixe atômico desacelerado. Neste caso, o eixo de colisão é bem determinado e coincide com o do feixe. Em tal sistema poderíamos estudar a dependência do processo de FSC com a polarização do feixe *laser* que popula o estado excitado. Tal dependência já foi observada no processo de supressão óptica e poderia ser estendida para a mudança de

estrutura fina. Isto nos forneceria mais informações sobre os potenciais envolvidos neste mecanismo de perdas.

APÊNDICE

O princípio de funcionamento da armadilha magneto-óptica

A fim de compreendermos o princípio básico de funcionamento de uma armadilha magneto-óptica consideremos, inicialmente, o caso unidimensional. Imaginemos um átomo hipotético de dois níveis, de estado fundamental com spin $S=0$ ($m_s=0$) e estado excitado $S=1$ ($m_s=-1,0,+1$) sujeito a um fraco campo magnético, variando linearmente com a posição, iluminado por um par de feixes *laser* contra-propagantes ao longo do eixo z , sintonizados abaixo da frequência de ressonância atômica e com polarizações circulares ortogonais, de modo que o feixe propagando-se na direção $+z$ produzirá transições segundo a regra de transição $\Delta m = +1$, e aquele que se propaga na direção $-z$, transições obedecendo $\Delta m = -1$. Na presença do campo magnético, a degenerescência do estado excitado é quebrada e os níveis de energia eletrônicos irão se abrir pela separação Zeeman dada por $\Delta E = \mu m_s B$. Assim, um átomo deslocando-se na direção $+z$ ($z > 0$) será “colocado”, pelo campo e as regras de seleção, conjuntamente ao fato do *laser* estar sintonizado abaixo da transição, mais em ressonância com o *laser* que se propaga na direção $-z$, absorvendo mais fótons σ^+ do que σ^- , de modo que este irá sentir uma força resultante em direção à posição de mínimo do campo magnético. Similarmente, o mesmo ocorre para um átomo em $z < 0$, o qual absorverá mais fótons σ^- , do feixe que se propaga na direção contrária ao seu movimento, e sentirá uma força restauradora em direção à origem (observe a Figura 1). Desse modo podemos confinar um átomo usando a força espontânea exercida pela radiação, ocasionada pela transferência de *momentum* entre os fótons e o átomo durante a interação entre estes. Além disso, a frequência do *laser*, sintonizada abaixo da ressonância

produz uma força viscosa, responsável por remover energia do átomo, resfriando-o, conforme ocorre no melaço óptico[41].

Figura 1: Diagrama de um átomo de dois níveis, onde observamos os níveis Zeeman originados pela aplicação de um campo magnético linear com a coordenada z .

Este esquema pode ser estendido ao caso tridimensional, de forma a obtermos a real configuração do MOT, através do uso de um campo magnético quadrupolar, gerado por um par de bobinas na configuração anti-Helmoltz, e da adição de feixes *laser* ao longo das direções perpendiculares restantes, $\pm x$ e $\pm y$, conforme podemos observar na Figura 2.

Figura 2: Esquema tridimensional da armadilha magneto-óptica, no qual podemos observar as bobinas anti-Helmholtz (carregando correntes em direções opostas), e os três feixes laser contra-propagantes, apresentando polarizações circulares ortogonais.

Uma amostra de átomos sujeita a essas circunstâncias estará submetida a uma força do tipo oscilador harmônico amortecido, capaz de resfriá-los e aprisioná-los. Temos um oscilador, entretanto, anisotrópico, com constantes de mola $k_z=2k_x=2k_y$, em decorrência dessas constantes dependerem diretamente das amplitudes do campo, e em virtude do divergente do campo ser nulo.

Pudemos então, através de considerações oriundas de um tratamento do átomo como um sistema de dois níveis, explicar o funcionamento de um MOT. Sabemos entretanto, que nem mesmo o mais simples dos átomos possui uma estrutura tão simplificada. Na realidade os átomos apresentam níveis de energia finos e também hiperfinos, o que pode ocasionar durante o resfriamento e aprisionamento, um processo denominado bombeamento óptico, no qual o átomo pode sofrer, após vários ciclos de absorção-emissão de radiação, uma transição permitida pelas regras de seleção para um determinado nível hiperfino não ressonante, fazendo com que esse átomo deixe de interagir com o *laser* de aprisionamento, sendo por essa razão, geralmente referido como um estado escuro.

Uma armadilha de átomos de rubídio opera na transição de resfriamento entre os estados hiperfinos $5S_{1/2}(F=3) \Rightarrow 5P_{3/2}(F=4)$, sendo necessária a inserção de um *laser* extra, denominado *laser* de rebombeio, que “recoloque” na transição de resfriamento os átomos que eventualmente tenham transicionado para um nível hiperfino não aprisionável. Os níveis de energia do rubídio (linha D2), empregados no aprisionamento, encontram-se esquematizados abaixo. A linha D1 não é encontrada no esquema pois essas linhas encontram-se muito distantes entre si e ambas não podem ser sintonizadas pelo mesmo *laser* de diodo, que é o tipo de *laser* utilizado por operar em uma região do infra-

vermelho onde o átomo de rubídio absorve radiação (780 nm). Poder-se-ia, para o aprisionamento, utilizar um *laser* de Ti:Saphira, porém os *lasers* de diodo são muito mais baratos.

Figura 3: Níveis de energia hiperfinos do primeiro estado excitado do átomo de ^{85}Rb ; as transições de aprisionamento e de rebombeio encontram-se indicadas. Nesta figura apenas a linha D2 encontra-se esquematizada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. SESKO, D.W.; WALKER T.G.; WIEMAN, C. *Behavior of Neutral Atoms in a Spontaneous Force Trap*, J. Opt. Soc. Am. B, v.8, n.5, p. p.946-58, 1991.
2. RAAB, E.L.; PRENTISS, M.; CABLE, A.; CHU, S.; PRITCHARD, D.E. *Trapping of Neutral Sodium Atoms with Radiation Pressure*, Phys. Rev. Lett., v.59, n.23, p.2631-4, 1987.
3. VIGUÉ, J. *Possibility of applying laser-cooling techniques to the observation of collective quantum effects*, Phys. Rev. A, v.34, n.5, p.4476-9, 1986.
4. PRENTISS, M.; CABLE, A.; BJORKHOLM, J.E.; CHU, S. *Atomic-density-dependent losses in an optical trap*, Opt. Lett., v.13, n.6, p.452-4, 1988.
5. WEINER, J. *Experiments in cold and ultracold collisions*, J. Opt. Soc. Am. B, v.6, n.11, p.2270-8, 1989.
6. WALKER, T.; SESKO, D.; WIEMAN, C. *Colletive Behavior of Optically Trapped Neutral Atoms*, Phys. Rev. Lett. v.64, n. 4, p.408-11, 1990.
7. GOULD, P. L.; LETT, P.D.; JULIENNE, P.S.; PHILLIPS, W.D.; THORSHEIM, H. R.; WEINER, J. *Observation of Associative Ionization of ultracold Laser-Trapped Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett., v.60, n.9, p.788-91,1988.
8. MONROE, C.; SWANN, W.; ROBINSON, H.; WIEMAN, C. *Very Cold Trapped Atoms in a Vapor Cell*, Phys. Rev. Lett., v.65, n.13, p.1571-4, 1990.
9. MILLER, J.D.; CLINE, R.A; HEINZEN, D.J. *Photoassociation Spectrum of ultracold Rb Atoms*, Phys. Rev. Lett., v.71, n.14, p.2204-7, 1993.
10. KETTERLE, W.; DAVIS, K.B.; JOFFE, M.A.; MARTIN, A.; PRITCHARD, D.E. *High Densities of Cold Atoms in a Dark Spontaneous-Force Optical Trap*, Phys. Rev. Lett., v.70, n.15, p.2253-6, 1993.
11. THORSHEIM, H.R.; WEINER, J.; JULIENNE,P.S. *Laser-Induced Photoassociation of Ultracold Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett., v.58, n. , p.2420-23, 1987.
12. JONES, K.M.; JULIENNE, P.S.; LETT, P.D.; PHILLIPS, W.D.; TIESINGA, E.; WILLIAMS, C.J. *Measurement of the atomic Na(3P) lifetime and of retardation*

in the interaction between two atoms bound in a molecule, *Europhys. Lett.*, v.35, n.2, p.85-90, 1996.

13. McALEXANDER, W.I.; ABRAHAM, R.I, HULET,R.G. *Radiative lifetime of the 2P state of lithium*, *Phys. Rev. A*, v.54, n.1, p.5-8, 1996.
14. WANG, H.; LI, J.; WANG, X.T.; WILLIAMS, C.J.; GOULD, P.L.; STWALLEY, W.C. *Precise determination of the matrix element and radiative lifetime of the K_2 4p state by photoassociative spectroscopy*, *Phys. Rev. A*, v.55, n.3, p.1569-72, 1997.
15. ABRAHAM, E.R.; Mc.ALEXANDER, W.I.; SACKET, C.A; HULET, R.G. *Spectroscopy Determination of the S-Wave Scattering Length of Lithium*, *Phys. Rev. Lett.*, v.74, p.1315-18, 1995.
16. GARDNER, J.R.; CLINE, MILLER, J. D.; HEINZEN, D.J.;BOESTEN, H.M.J.M.; VERHAAR, B.J *Colisions of Doubly Spin-Polarized, Ultracold ^{85}Rb Atoms*, *Phys. Rev. Lett.*, v.74, n.19, p.3764-67, 1995.
17. RATFLIFF, L.; WAGSHUL, M.E.; LETT, P.D.; ROLSTON, S.L.; PHILLIPS, W.D. *Photoassociative Spectroscopy of the 1_g , 0_u^+ , and 0_g^- states of Na_2* , *J. Chem. Phys.* v.101,p.2638-41, 1994.
18. WANG, H.; GOULD, P.L.; STWALLEY, W.C. *Long-range interaction of the $^{39}\text{K}(4s) + ^{39}\text{K}(4p)$ Asymptote by Photoassociative Spectroscopy. I. The 0_g^- Pure Long-range State and the Long-range Potential Constants*, *J. Chem. Phys.* v.106, p.7899-912, 1997.
19. CLINE, R.A.; MILLER, J.D.; HEINZEN, D.J. *Study of Rb_2 Long-Range States by High Resolution Photoassociation Spectroscopy*, *Phys. Rev. Lett.* v.73,n.5, p.632-6, 1994.
20. LETT, P.D.; HELMERSON, K.; PHILLIPS, W.D.; RATLIFF, L.P.; ROLSTON, S.L.; WAGSHUL, M.E. *Spectroscopy of Na_2 by Photoassociation of Laser-Cooled Na*, *Phys. Rev. Lett.*, v.71, n.14, p.2200-3, 1993.
21. LEONHARDT, D.; WEINER, J. *Direct two-color ionization in a rubidium magneto-optical trap*, *Phys. Rev. A*, v.52, n.6, p.44332-5, 1995.
22. STWALLEY, W. C.; UANG Y-H. *Pure Long-Range Molecules*, *Phys. Rev. Lett.*, v.41, n.17, p.1164-7, 1978.
23. BAGNATO, V.S.; WEINER, J.; JULIENNE, P.S.; WILLIAMS, C.J. *Long-Range Molecular States and Ultracold Photoassociative Ionization Collisions*, *Laser Physics*, v.4, n.5, p.1062-5, 1994.
24. WANG, H.; GOULD, P.L.; STWALLEY, W.C. *Fine-Structure Predissociation of Ultracold Photoassociated $^{39}\text{K}_2$ Molecules Observed by Fragmentation Spectroscopy*, *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, n.3, p.476-9, 1998.

25. ANDERSON, M.H.; ENSHER, J.R.; MATTHEWS, M.R.; WIEMAN, C.E.; CORNELL, E.A. *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science, v.269, p.198-201, 14/07/1995.
26. DAVIS, K.B.; MEWES, M.-O.; ANDREWS, M.R.; van DRUTEN, N.J.; DURFEE, D.S.; KURN, D.M.; KETTERLE, W. *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. v.75, n.22, p.3969-73, 1995.
27. BRADLEY, C.C.; SACKETT, C.A.; HULET, R.G. *Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number*, Phys. Rev. Lett., v.78, n.6, p.985-9, 1997.
28. MEWES, M.-O.; ANDREWS, M.R.; KURN, D.M.; DURFEE, D.S.; TOWNSEND, C.G.; KETTERLE, W. *Output Coupler for Bose-Einstein Condensed Atoms*, Phys. Rev. Lett., v.78, n.4, p.582-5, 1997.
29. FRIED, D.G.; KILLIAN, T.C.; WILLMANN, L.; LANDHUIS, D.; MOSS, S.C.; KLEPPNER, D.; GREYTAK, T. J. *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen*, Phys. Rev. Lett. v.81, n.2, p.3811-14, 1998.
30. VITANOV, N.V.; K.-A. SUOMINEN, *Time-dependent control of ultracold atoms in magnetic traps*, Phys. Rev. A, v. 56, n.6, p.4377-80, 1997.
31. *Collisions of Cooled and Trapped Atoms: 3 lectures- curso ministrado pelo professor Paul Julienne, durante a Escola de Verão Jorge A. Swieca, 5-16 de janeiro de 1998, São Carlos.*
32. TELLES, G.D.; MARCASSA, L.G.; MUNIZ, S.R.; MIRANDA, S.G.; ANTUNES, A.; WESTBROOK, C.; BAGNATO, V.S. *Inelastic cold collisions of a Na/Rb mixture in a magneto-optical trap*, Phys. Rev. A, v.59, n.1, p.R23-6, 1999.
33. SHAFFERR, J.P.; CHALUPCZAK, W.; BIGUELOW, N.P. *Photoassociative Ionization in a Novel Two-Species Magneto-optical Trap*, Phys. Rev. Lett.v.82, n.6, p.1124-7, 1999.
34. MARCASSA, L.G.; ZANON, A. De S.; DUTTA, S.; WEINER, J.; BAGNATO, V.S., *Direct measurement of Fine Structure Changing Collision in Ultracold ^{85}Rb* – a ser publicado no Europ. Journ. of Phys. D.
35. FIORETTI, A.; MÜLLER, J.H.; VERKERK, P.; ALLEGRI, M.; ARIMONDO, E.; JULIENNE, P.S. *Direct measurements of Fine-Structure Collisional Losses from a Cs Magneto-Optical Trap*, Phys. Rev.A., v.55, n.6, p.3999-4002, 1997.
36. SHAFFER, J.P.; CHALUPCZAK, W.; BIGELOW, N.P., *Differential Measurement of the Ultracold Cs Radiative Escape and Fine Structure Changing Collision Rates*- a ser publicado.
37. GALLAGHER, A.; PRITCHARD, D. *Exoergic Collisions of Cold Na^*-Na* , Phys. Rev. Lett., v.63, n.9, p.957-60, 1989.

38. HOFFMANN, D.; FENG, P.; WALKER, T. *Measurements of Rb trap-loss spectra*, J. Opt. Soc. Am. B, v.11, n.5, p.712-20, 1994.
39. DULIEU, O.; JULIENNE, P.S.; WEINER, J. *Accuracy of molecular data in the understanding of ultracold collisions*, Phys. Rev. A, v.49,n.1, p607-10, 1994.
40. SUOMINEN, K.-A. *Theories for cold atomic collisions in light fields*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., v.29, p.5981-6007, 1996, *Topical Review*.
41. LETT, P.D.; PHILLIPS, W.D.; ROLSTON, S.L.; TANNER, C.E.; WATTS, R.N.; WESTBROOK, C.I. *Optical molasses*, J. Opt. Soc. Am. B, v.6, n.11, p.2084-107, 1989.
42. MEATH, W.J. *Retarded interaction energies between like atoms in different energy states*, J. Chem. Phys. v.48, p.227-35, 1968.
43. HEATHER, R. W.; JULIENNE, P.S. *Theory of laser-induced associative ionization of ultracold Na*, Phys. Rev. A, v.57,n.3, p.1887-1906, 1993.
44. GALLAGHER, A. *Associative ionization in collisions of slowed and trapped sodium*, Phys. Rev. A, v.44, n.7, p.4249-59, 1991.
45. MARCASSA, Luis Gustavo. FOTOIONIZAÇÃO ASSOCIATIVA: UM PROTÓTIPO PARA O ESTUDO DE COLISÕES COM ÁTOMOS DE SÓDIO ULTRAFRIOS. São Carlos, 1995. 94p. Tese (Doutorado) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo.
46. DARRIN, LEONHARDT. PHOTOASSOCIATIVE IONIZATION OF ULTRACOLD RUBIDIUM IN A MAGNETO-OPTIC TRAP. MARYLAND, 1995. 121P. TESE (DOUTORADO) -UNIVERSITY OF MARYLAND.
47. MUNIZ, S.R.; MARCASSA, L.G.; NAPOLITANO, R.; TELLES, G.; WEINER, J.; ZILIO, S.C.; BAGNATO, V.S. *Optical suppression of hyperfine-changing collisions in a sample of ultracold sodium atoms*, Phys. Rev. A, v.55, n.6, p.4407-11, 1997.
48. SUOMINEN, K.-A.; HOLLAND, M.J.; BURNETT, K.; JULIENNE, P.S. *OPTICAL SHIELDING OF COLD COLLISIONS*, Phys. Rev. A, v.51, n.2, p.1446-57, 1995.
49. MARCASSA, L.; MUNIZ, S.; de QUEIROZ, e.; ZILIO,S.; BAGNATO, V.; WEINER, J.; JULIENNE, P.S.; SUOMINEN, K.-A. *Optical Supression of Photoassociative Ionization in a Magneto-Optical Trap*, Phys. Rev. Lett. v.73, n.14, p.1911-4, 1994.
50. DASHEVSKAYA, E.I.; VORONIN , A. I.; NIKITIN, E.E. *Theory of Excitation Transfer in Collisions between Alkali Atoms. I. Identical partners*, Canadian Journal of Phys, v.47, n.12, p.1237-48, 1969.
51. JULIENNE, P.S.; VIGUÉ, J. *Cold collisions of ground- and excited-state alkali-metal atoms*, Phys. Rev. A, v.44, n.7, p.4464-85, 1991.

52. FOUCRAULT, M.; MILLIE, PH. *Nonperturbative method for core-valence correlation in pseudopotential calculations: Application to the Rb₂ e Cs₂ molecules*, J. Chem. Phys. v.96, n.2, p.1257-64, 1992.
53. MARINESCU, M.; DALGARNO, A. *Dispersion forces and long-range electronic transition dipole moments of alkali-metal dimer excited states*, Phys. Rev. A, v.52, n.1, p.311-28, 1995.
54. MOVRE, M.; PICHLER, G. *Ressonance interaction and self-broadening of alkali resonance lines I. Adiabatic potential curves*, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., v.10, n.13, p.2631-38, 1997.
55. BUSSERY, B.; AUBERT-FRÉCON M. *Multipolar long-range electrostatic, dispersion, and induction energy terms for the interactions between two identical identical alkali atoms Li, Na, K, Rb and Cs*, J. Chem. Phys., v.82, n.7, p.3224-34, 1985.
56. ZENER, C., *Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels*, Proc. R. Soc. London Ser. A, 696-702 (1932).
57. MARCASSA, L.; BAGNATO, V.; WANG, Y.; TSAO, C.; WEINER, J.; DULIEU, O.; BAND, Y.B.; JULIENNE, P.S. *Collisional loss rate in a magneto-optical trap for sodium atoms: Light-intensity dependence*, Phys. Rev. A, v.47, n.6, p.R4563-6, 1993.
58. SESKO, D.; WALKER, T.; GALLAGHER, A.; WIEMAN, C. *Collisional Losses from a Light-Force Atom Trap*, Phys. Rev. Lett. v.63, n.9, p.961-64, 1989.
59. PETERS, M.G.; HOFFMANN, D.; TOBIASON, J.D.; WALKER, T. *Laser – Induced ultracold Rb(5S_{1/2})+Rb(5P_{1/2}) collisions*, Phys. Rev. A, v.50, n.2, p.R906-9, 1994.
60. HOFFMANN, D.; FENG, P.; WILLIANSON III, R.S.; WALKER, T. *Excited-State Collisions of Trapped ⁸⁵Rb Atoms*, Phys. Rev. Lett., v.69, n.5, p.753-6, 1992.
61. MARCASSA, L.G.; MUNIZ, S.R.; FLEMMING, J., *Optical Catalysis in a Sodium Vapor Cell MOT*, Braz. Journal of Physics, v.27, n.2, p.238-42, 1997.
62. WILLIANS, C.; JULIENNE *Molecular hyperfine structure in the photoassociation spectroscopy of laser cooled atoms*, J. Chem. Phys. v.101, n.3, p.2634-37, 1994.
63. WILLIANS, C.; TIESINGA, E.; JULIENNE, P.S. *Hyperfine structure of the Na₂ 0_g⁻ long-range molecular state*, Phys. Rev. A, v.53, n.4, p.1939-42, 1996.
64. REGINALDO NAPOLITANO: comunicação pessoal.
65. WALKER, T.; PRITCHARD, D. *Effects of Hyperfine Structure on Alkali Trap-Loss Collisions*, Laser Phys. v.4, n.5, p.1085-92, 1994.

66. LETT, P.D.; MOLMER, K.; GENSEMER, S.D.; TAN, K.Y.N.; KUMARAKRISHNAN, A.; WALLACE, C.D.; GOULD, P.L. *Hyperfine structure modification of losses from light-force atom traps*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., v.28, p.65-81, 1995.