

# Trabalho de Conclusão de Curso

*Curso de Graduação em Física*

**Controle e Caos na formação de moléculas com pulso de laser**

Larissa de Oliveira Figueira

Rio Claro (SP)

2011

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**  
**Instituto de Geociências e Ciências Exatas**  
**Câmpus de Rio Claro**

Larissa de Oliveira Figueira  
Orientador: Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima

*Controle e Caos na formação de moléculas com pulso de laser.*

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Campus de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de Bacharel em Física.

Rio Claro - SP  
2011

*Dedicado aos meus pais*

Larissa de Oliveira Figueira

*Controle e Caos na formação de moléculas com pulso de laser.*

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Campus de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de Bacharel em Física.

Comissão Examinadora:

---

Prof.Dr. Emanuel Fernandes de Lima

---

Prof.Adj. Ricardo Egydio de Carvalho

---

Prof. Dr. Edson Denis Leonel

Rio Claro, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_.

---

Larissa de Oliveira Figueira

---

Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima

## Agradecimentos

A meus pais, por cada momento de apoio e incentivo, por sempre estarem ao meu lado acreditando e me fazendo acreditar que tudo sempre pode ser melhor e que sempre vale à pena lutar. Gostaria agradecê-los por cada gota do amor que me deram e por cada sorriso que fizeram com que eu tivesse certeza que o mundo e as pessoas valiam à pena. Obrigada por ser quem vocês são e por me fazer ser quem eu sou. Amo vocês.

A minha avó que com cada abraço e com cada incentivo me ajudou a chegar até aqui.

A minha irmã por ser quem ela é e por estar sempre ao meu lado fazendo com que tudo valesse à pena.

Ao Prof.Dr. Emanuel Fernandes de Lima, que me orientou com toda a paciência e carinho, fazendo com que eu compreendesse cada conceito e rotina computacional. Sempre me incentivando e mostrando que sempre vale à pena darmos o máximo de nós.

A Sabrina, Kelly, Thais e Carol que sempre estiveram ao meu lado, em cada sorriso e em cada lágrima, me ajudando a perceber que família não é formada apenas pelos laços de sangue, mas também pelos amigos que conquistamos pela vida. Obrigada por toda a paciência, carinho, brigas, puxões de orelha e por cada momento que passamos juntas nesses anos.

Ao Rodrigo, Jorge e Mateus por cada momento de alegria e amizade no decorrer desses quatro anos.

E a todos os amigos e familiares que sempre estiveram me apoiando e dando força para que este projeto chegasse ao fim.

A todos meu grande Obrigada!

*“A mente que se abre a uma nova idéia jamais voltará ao seu tamanho original.”*

*Albert Einstein*

## **Resumo**

Investigamos a formação de moléculas sob a ação de campos externos atuando durante a colisão atômica. Para descrever tal processo, colisão de dois átomos, utilizamos o modelo do oscilador de Morse forçado. O estudo foi desenvolvido do ponto de vista da mecânica clássica através da análise da sensibilidade do sistema em relação às condições iniciais, da verificação da dinâmica caótica associada ao processo de formação de moléculas com laser e da análise da dinâmica do sistema e da probabilidade de fotoassociação em resposta aos parâmetros do campo externo.

Palavra chave: Fotoassociação, Potencial de Morse, Caos

## **Abstract**

We investigate the formation of molecules under the action of external field acting during the atomic collision. To describe this process, the collision of atomic pairs, we use the Morse oscillator model driven. The study was developed from the standpoint of classical mechanics by analyzing the sensitivity of the system with respect to initial conditions, the verification of chaotic dynamics associated with the process of formation of molecules with laser and analysis of system dynamics and the likelihood of photoassociation in response to the external field parameters.

Keyword: photoassociation, Morse potential, Chaos



# Sumário

<b><u>1.INTRODUÇÃO .....</u></b>	<b><u>10</u></b>
1.1 INTRODUÇÃO GERAL.....	10
1.2 INTRODUÇÃO TEÓRICA .....	11
1.2.1 Teoria do Caos.....	11
1.2.2 Equações de Hamilton.....	12
1.2.3 Molécula Diatômica .....	14
1.2.4 Potencial de Morse .....	15
<b><u>2.MODELO E MÉTODOS.....</u></b>	<b><u>17</u></b>
2.1 POTENCIAL DE MORSE LIVRE.....	17
2.2 POTENCIAL DE MORSE FORÇADO .....	28
<b><u>3.RESULTADOS.....</u></b>	<b><u>33</u></b>
<b><u>4.CONCLUSÕES .....</u></b>	<b><u>49</u></b>
<b><u>5.REFERÊNCIA BIBLIOGRAFICA .....</u></b>	<b><u>50</u></b>

## **1.Introdução**

### **1.1 Geral**

O controle do processo de fotoassociação, no qual dois átomos em colisão absorvem um fóton (cedido pelo campo externo) para criar uma molécula, é um tema de grande interesse científico [1, 2]. Uma das razões para esse interesse é que a fotoassociação é um fenômeno fundamental para o controle de reações químicas com laser [3] juntamente com a fotodissociação. Outro motivo de interesse nesse processo é que ele constitui uma das rotas possíveis para a formação de amostras de moléculas ultra-frias e de condensados de Bose-Einstein moleculares [4].

Para descrever processo de fotoassociação utilizamos o modelo do potencial de Morse que consiste em uma análise fundamental para o estudo da dinâmica molecular, pois reproduz de forma realista a anarmonicidade das vibrações moleculares e possui um contínuo de energias que permite o estudo da dissociação e da fotoassociação [5]. Além disso, o oscilador de Morse forçado é um paradigma para as comparações clássico-quânticas [6-9].

Apesar de sua grande importância teórica e prática, existem até poucos trabalhos que aplicam o potencial de Morse em uma abordagem clássica do problema da fotoassociação. A identificação apropriada dos campos externos e de mecanismos físicos relacionados é imprescindível para a eficiência do processo de fotoassociação. Por outro lado, a dinâmica clássica associada a átomos e moléculas sujeitos a ação de campos externos é em geral não-integrável [10]. Esse fato levanta a possibilidade de estudo da dinâmica caótica dos sistemas moleculares clássicos.

O objetivo do trabalho consiste em estudar a dinâmica do controle da fotoassociação entre os átomos através da aplicação de um campo externo dependente do tempo. Investigamos inicialmente o comportamento caótico da dinâmica da formação de moléculas com o campo externo dependente do tempo e em seguida analisamos os parâmetros do campo externos.

Utilizamos como modelo o oscilador de Morse sob a ação de campos externos dependentes do tempo [11]. Esse sistema representa uma molécula diatômica em um estado eletrônico submetido a um laser. As moléculas pertencentes aos estados de energias maiores que zero podem representar uma molécula dissociada ou um par de átomos em colisão. A

fotoassociação corresponde à transição entre estados ligados e não ligados do potencial. A dinâmica do sistema foi investigada através das trajetórias clássicas do sistema.

## 1.2. Teoria

### 1.2.1 Teoria do Caos

Nenhuma definição do termo caos é universalmente aceita ainda, mas quase todos concordam sobre os três ingredientes utilizados na definição de trabalho:

*“Caos é o comportamento aperiódico em um sistema determinístico que exibe dependência sensível as condições iniciais”*

1. *“O comportamento aperiódico”* significa que existem trajetórias que não se estabelecem em pontos fixos, órbitas periódicas, ou órbitas quase-periódicas.

2. *“Determinístico”* significa que o sistema não tem entradas aleatórias. O comportamento irregular surge da não-linearidade do sistema.

3. *“Dependência sensível das condições iniciais”* indica que qualquer pequena diferença é ampliada ao longo das iterações.

Definição de caos dada pelo livro *Nonlinear Dynamics And Chaos* (Perseus, 1994) PNC. Strogatz S.H.

A dinâmica caótica é caracterizada por comportamentos irregulares e pela dependência sensível nas condições iniciais. É um regime típico nos sistemas não lineares.

No regime caótico, qualquer pequena diferença é ampliada ao longo da iteração. Quanto mais próximas estiverem as condições iniciais escolhidas, mais tempo esta divergência demora a manifestar-se e difere de um regime regular devido ao fato de que para um regime regular duas condições iniciais diferentes têm evoluções semelhantes.

Uma das conseqüências mais importantes é a imposição de limites à nossa capacidade de previsão, mesmo num cenário ideal onde conhecemos exatamente a lei que rege a evolução do

sistema, pois só se conhece o estado deste com a precisão permitida pelos instrumentos de medida. Quando o sistema é caótico, o pequeno erro que afeta o conhecimento da condição inicial faz com que, ao fim de certo intervalo de tempo, o comportamento previsto pelo modelo e o comportamento do sistema real possam estar completamente descorrelacionados.

As idéias mais importantes num sistema caótico básico dentro deste trabalho são:

- Espaço de fase
- Fractais

### *Fractais*

Os fractais podem apresentar uma infinidade de formas diferentes, não existindo uma aparência consensual. Contudo, existem duas características muito freqüentes nesta geometria: auto-semelhança e complexidade.

Distante do rigor e do formalismo matemático, pode-se, definir fractais, como sendo: "Objetos que apresentam auto-semelhança e complexidade, ou seja, têm sempre cópias aproximadas de si mesmo em seu interior."

### *Espaço de Fase*

Espaço de fase é a representação das variáveis dinâmicas relevantes de um sistema. Uma trajetória no espaço de fase representa a evolução temporal do sistema através da evolução temporal de suas variáveis relevantes. O espaço de fase é uma ferramenta útil na compreensão do comportamento dos sistemas.

Quando o sistema é não-integrável podemos simular sua evolução temporal com o auxílio do computador, realizando uma integração numérica, e representar essa evolução no espaço de fase.

## **1.2.2 Equações de Hamilton**

Mecânica hamiltoniana é uma reformulação da mecânica clássica que foi elaborada em 1833, pelo matemático irlandês William Rowan Hamilton. Originou-se da mecânica lagrangiana,

outra reformulação da mecânica clássica, introduzida por Joseph Louis Lagrange em 1788. Ela pode, entretanto ser formulada sem recorrer à mecânica lagrangiana, usando espaços simpléticos. O método hamiltoniano difere do lagrangiano em que ao invés de expressar confinamentos diferenciais de segunda ordem sobre um espaço coordenado n-dimensional, ela expressa confinamentos de primeira ordem sobre um espaço de fases 2n-dimensional.[1].

Como com a mecânica lagrangiana, as equações de Hamilton fornecem uma maneira nova e equivalente de olhar mecanismos clássicos. Geralmente, estas equações não fornecem uma maneira mais conveniente de resolver um problema particular. Entretanto, fornecem introspecções mais profundas na estrutura geral de mecanismos clássicos e em sua conexão aos mecânicos quânticos como compreendidos através dos mecânicos hamiltonianos, assim como suas conexões a outras áreas da ciência.

Hamiltonianos podem ser usados para descrever tais sistemas simples como uma bola quicando, um pêndulo ou uma mola oscilante na qual as mudanças de energia de cinética para potencial e *vice versa* alternam-se no tempo. Hamiltonianos podem também ser empregados para modelar a energia de outros sistemas dinâmicos mais complexos tais como órbitas planetárias e na mecânica quântica.

As equações de Hamilton são escritas como segue:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad (1.1)$$

e

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \dot{p}_i \quad (1.2)$$

Estas são as chamadas equações de Hamilton e são governadas por uma equação escalar conhecida como função de Hamilton ou Hamiltoniana:  $H = H(q, p, t)$ , onde a Hamiltoniana do nosso problema sem a ação do campo externo é

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (1.3)$$

### 1.2.3 Molécula Diatômica

Analisando dois átomos ligados (molécula estável) como um problema de dois corpos, sendo duas partículas de massa  $m_1$  e massa  $m_2$  e coordenadas de posição  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  em relação à origem do sistema. A massa reduzida do sistema é dada por

$$m_x = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (1.4)$$

a coordenada do centro de massa é expressa como

$$\vec{x}_{cm} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad (1.5)$$

e a coordenada relativa entre o átomo 1 e o átomo 2 por

$$\vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2. \quad (1.6)$$

A posição do centro de massa no nosso sistema não é importante, mas sim à distância internuclear. Desse modo neste trabalho as coordenadas do centro de massa não serão de importância significativa podendo levar em consideração apenas as coordenadas relativas, assim teremos um problema de dois corpos transformado em um problema de um único corpo.

Dessa maneira, a energia do nosso sistema será dada

$$E = \frac{p^2}{2m_r} + V(x). \quad (1.7)$$

### 1.2.4 Potencial de Morse

O Potencial de Morse leva esse nome devido ao físico Philip M. Morse e tem grande utilidade para tratar vibrações em moléculas diatômicas já que este reproduz de forma realista a anarmonicidade das vibrações moleculares e possui um contínuo de energia [13]. Esse potencial tem sido amplamente utilizado em física molecular.

O potencial de Morse é dado por

$$V(x) = D(e^{-2a(x-xe)} - 2e^{-a(x-xe)}) \quad (1.8)$$

Onde

$a$  – alcance do potencial (largura do poço potencial),

$x_e$  – posição de equilíbrio (Ponto no eixo  $x$  onde o potencial tem o seu menor valor),

$D$ - energia de dissociação (profundidade do poço),

$x$  – é a distância internuclear.

Um exemplo da forma geral do potencial de Morse para os parâmetros  $x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$  é a figura 1. Podemos evidenciar que quando a partícula possuir energia positiva e estiver fora do poço potencial, está representada a situação na qual a molécula não está formada e os átomos podem se afastar indefinidamente. Já quando esta partícula possuir energia negativa, ou seja, quando a partícula estiver confinada dentro do poço podemos dizer que houve a formação da molécula e os átomos estão ligados formando uma molécula estável.

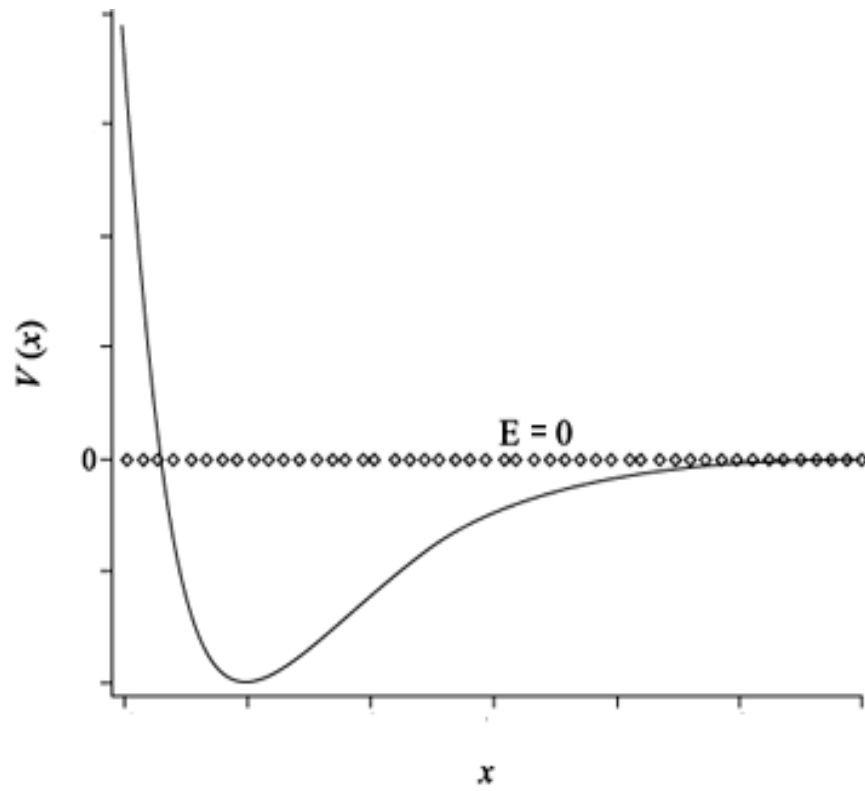


Figura 1- Representação gráfica do potencial de Morse.



## 2. Modelo e Métodos

O movimento relativo de um par de átomos em colisão é análogo a uma partícula sujeita ao potencial de Morse. Dessa forma, as propriedades do oscilador de Morse foram estudadas analiticamente na ausência de campo externo, ou seja, o caso livre. Em seguida utilizamos de métodos numéricos para a investigação tanto do caso livre quanto do caso forçado.

### 2.1 Potencial de Morse Livre

A partir do potencial de Morse é possível calcular a força que atuará sobre a molécula diatômica do sistema através de sua derivada em relação à posição.

$$\begin{aligned} F &= -\frac{dV_m(x)}{dx} = -\frac{d\left(D(1 - e^{-a(x-x_0)})^2 - D\right)}{dx}, \\ &= -\frac{d\left(D - 2De^{-a(x-x_0)} + De^{-2a(x-x_0)} - D\right)}{dx}, \\ &= -\frac{d\left(-2De^{-a(x-x_0)} + De^{-2a(x-x_0)}\right)}{dx}, \\ F &= -2Da \sum_{n=1}^2 (-1)^n e^{-a(3-n)(x-x_0)}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Podemos obter a equação de movimento de uma partícula sujeita ao potencial de Morse pela segunda lei de Newton

$$F = m \frac{d^2 x}{dt^2}, \quad (1.10)$$

desse modo

$$-2Da(e^{-a(x-x_0)} - e^{-2a(x-x_0)}) = m \frac{d^2 x}{dt^2},$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{2Da}{m} (e^{-a(x-x_0)} - e^{-2a(x-x_0)}) = 0,$$

substituindo a exponencial pela série respectiva e rearranjando os termos temos

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sum_{n=1}^2 \frac{4Da}{2m} (-1)^n e^{-a(3-n)(x-x_0)} = 0. \quad (1.11)$$

Definindo

$$\alpha = \frac{4Da}{m}, \quad (1.12)$$

teremos que

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha}{2} (-1)^n e^{-a(3-n)(x-x_0)} = 0, \quad (1.13)$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{dx}{dt} \right) + \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha}{2} (-1)^n e^{-a(3-n)(x-x_0)} = 0, \quad (1.14)$$

integrando ambos os lados temos que

$$\frac{1}{2} \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 - \sum_{n=1}^2 \frac{\alpha (-1)^n}{2a(3-n)} e^{-a(3-n)(x-x_0)} = \varepsilon. \quad (1.15)$$

Onde  $\varepsilon$  é uma constante de integração e pode ser relacionada diretamente com a energia do sistema (essa relação pode ser obtida lembrando que a energia do sistema é dada pela soma da energia cinética com a energia potencial), onde

$$E = \frac{m}{2} \varepsilon. \quad (1.16)$$

Reescrevendo as equações temos

$$\left( \frac{dx}{dt} \right)^2 = \varepsilon - \frac{\alpha}{2a} e^{-2a(x-x_0)} + \frac{\alpha}{a} e^{-a(x-x_0)}. \quad (1.17)$$

declarando como nova variável

$$y = e^{-a(x-x_0)} \quad e \quad dy = ae^{-a(x-x_0)} dx, \quad (1.18)$$

temos que

$$\left(\frac{dy}{dt}\right)^2 = \varepsilon - \frac{\alpha}{2ay^2} + \frac{\alpha}{ay}, \quad (1.19)$$

$$\frac{dy}{\left(\varepsilon - \frac{\alpha}{2ay^2} + \frac{\alpha}{ay}\right)^{1/2}} = dt, \quad (1.20)$$

$$\frac{dy}{ay\left(\varepsilon - \frac{\alpha}{2ay^2} + \frac{\alpha}{ay}\right)^{1/2}} = dt, \quad (1.21)$$

$$\frac{1}{a} \frac{dy}{\left(\varepsilon y^2 - \frac{\alpha}{2a} + \frac{\alpha y}{a}\right)^{1/2}} = dt, \quad (1.22)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\varepsilon y^2 + \frac{\alpha y}{a} - \frac{\alpha}{2a}\right)^{1/2}} = \int_{t_i}^t dt. \quad (1.23)$$

Assim obtemos

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\varepsilon y^2 + \frac{\alpha}{a}y - \frac{\alpha}{2a}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.24)$$

A solução de tal equação depende do coeficiente  $y^2$  no denominador do integrando. De acordo com o valor dado a  $\varepsilon$  encontra-se soluções diferentes para tal equação. Como já foi dito anteriormente o valor de  $\varepsilon$  depende diretamente do valor da energia  $E$  e será calculada separadamente de tal forma que seja dada uma solução para os três casos de energia (maior, menor e igual a zero). Foi realizada uma comparação da solução analítica com a solução

numérica onde a solução numérica foi obtida através da rotina de Runge Kutta de quarta ordem.

Quando a energia for igual a zero teremos  $\varepsilon = 0$ , pois  $\varepsilon = \frac{2E}{m}$  e  $m$  tem de ser diferente de zero desse modo

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\frac{\alpha}{a}y - \frac{\alpha}{2a}\right)^{1/2}} = t - t_i. \quad (1.25)$$

Fazendo uma substituição simples para resolver à integral

$$u = \frac{\alpha}{a}y - \frac{\alpha}{2a} \text{ e } du = \frac{\alpha}{a} dy, \quad (1.26)$$

assim

$$\frac{1}{\alpha} \int \frac{du}{u^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.27)$$

$$\frac{1}{\alpha} 2u^{1/2} = t - t_i, \quad (1.28)$$

substituindo novamente temos

$$\frac{4}{\alpha^2} \left( \frac{\alpha}{a} e^{a(x-x_0)} - \frac{\alpha}{2a} \right) = (t - t_i)^2, \quad (1.29)$$

$$(t - t_i)^2 \frac{2a}{4} + \frac{1}{2} = e^{a(x-x_0)}, \quad (1.30)$$

aplicando o logaritmo natural temos que

$$a(x - x_0) = \ln \left( (t - t_i)^2 \frac{Da^2}{m} + \frac{1}{2} \right), \quad (1.31)$$

$$x = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left( \frac{(t - t_i)^2 \cdot \frac{2Da^2}{m} + 1}{2} \right). \quad (1.32)$$

Declarando

$$\omega_0^2 = \frac{2Da^2}{m}. \quad (1.33)$$

Desse modo temos

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left( \frac{1 + \omega_0^2 (t - t_i)^2}{2} \right). \quad (1.34)$$

Para um conjunto fixo de parâmetros:  $E = 0, x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$  podemos obter analítica e numericamente o comportamento da posição em função do tempo para a partícula,  $x(t)$  versus  $t$ , evidenciando que ocorre um aumento da posição em função do tempo e que há convergência entre os resultados, figura 2.

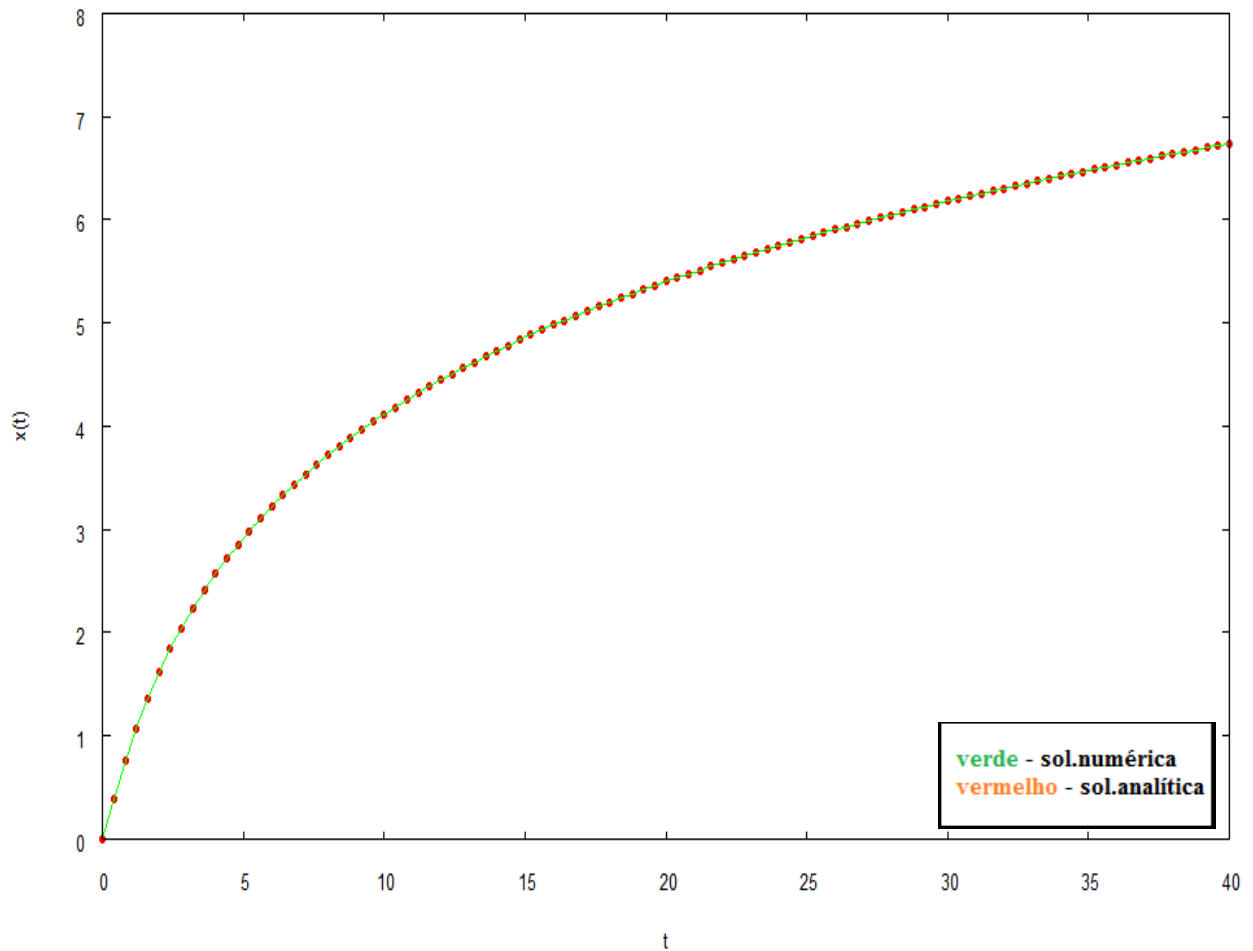


Figura 2- Comparação da solução numérica com a solução analítica para a partícula sujeita ao potencial de

Morse, utilizando  $E = 0, x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$ .

Analisando o caso em que a molécula estará dissociada, ou seja, para energias maiores que zero.

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\varepsilon y^2 + \frac{\alpha}{a} y - \frac{\alpha}{2a}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.35)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\frac{2E}{m} y^2 + \frac{4Da}{ma} y - \frac{4Da}{2ma}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.36)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\frac{2E}{m} y^2 + \frac{4D}{m} y - \frac{2D}{m}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.37)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\frac{m}{2E}\right)^{1/2} \left(\frac{2E}{m} y^2 + \frac{4D}{m} y - \frac{2D}{m}\right)^{1/2}} = \frac{t - t_i}{\left(\frac{m}{2E}\right)^{1/2}}. \quad (1.38)$$

Organizando os termos chegamos em

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(y^2 + \frac{2D}{E} y - \frac{D}{E}\right)^{1/2}} = \frac{t - t_i}{\left(\frac{m}{2E}\right)^{1/2}} \left(\frac{E}{D}\right)^{1/2} a, \quad (1.39)$$

tomando novamente a equação (1.33) temos que

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{(y - y_1)(y - y_2)} = \omega_0(t - t_i) \left(\frac{E}{D}\right)^{1/2}, \quad (1.40)$$

sendo

$$y_1 = \frac{-D}{E} + \frac{D}{E} \left( \frac{D+E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ e } y_2 = \frac{-D}{E} - \frac{D}{E} \left( \frac{D+E}{D} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.50)$$

Resolvendo pelo método de integração de frações parciais

$$\frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_2}{y - y_1} \right) dy - \frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left( \frac{y - y_1}{y - y_2} \right) dy = \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t_i), \quad (1.51)$$

Declarando  $\omega^2 = y - y_2$  e sendo  $u^2 = \frac{\omega^2}{(y_1 - y_2)}$ .

Temos que

$$\int_{y_i}^y \frac{u^2}{(y - y_1)} dy - \frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \frac{(y - y_1)}{\omega^2} dy = \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t_i), \quad (1.52)$$

e resulta em

$$\operatorname{arccosh} \left[ \left( \frac{y - y_2}{y_1 - y_2} \right)^{1/2} \right] = \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i), \quad (1.53)$$

onde

$$t'_i = t_i - \frac{2}{\left( \frac{E}{D} \right)^{1/2} \omega_0} \operatorname{arccosh} \left[ \left( \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} \right)^{1/2} \right]. \quad (1.54)$$

Organizando os termos

$$y = y_2 + (y_1 - y_2) \cosh^2 \left[ \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i) \right], \quad (1.55)$$

relembrando a relação

$$\cosh^2(a) = \frac{\cosh(2a) + 1}{2},$$

substituindo os valores de  $y, y_1$  e  $y_2$  e utilizando o logaritmo natural temos que

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left[ \frac{D}{E} \left( \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cosh \left( \left( \frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t'_i) \right) - 1 \right) \right] \quad (1.56)$$

Observando o comportamento gráfico da equação (1.56) para um conjunto fixo de parâmetros:  $E = 0, x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$  podemos obter a solução analítica e numérica para o comportamento da posição em função do tempo para a partícula,  $x(t)$  versus  $t$ , evidenciando que ocorre um aumento da posição em função do tempo quase que linear e que há convergência entre os resultados, figura 3.

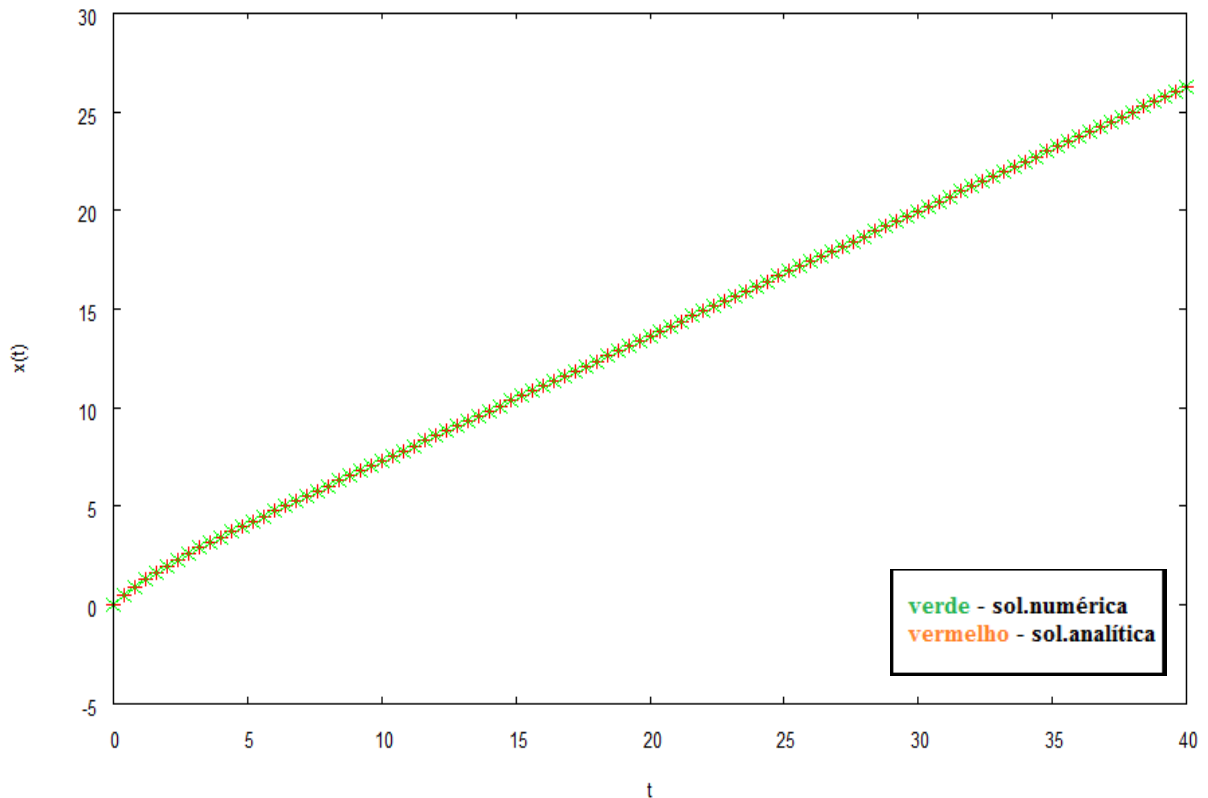


Figura 3 - Comparação da solução analítica com a solução numérica para o potencial de Morse livre  $E > 0, x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$ .



Após isso analisamos o caso em que a energia é menor que zero.

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(\varepsilon y^2 + \frac{\alpha}{a} y - \frac{\alpha}{2a}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.57)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(-\frac{2E}{m} y^2 + \frac{4Da}{ma} y - \frac{4Da}{2ma}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.58)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(-\frac{2E}{m} y^2 + \frac{4D}{m} y - \frac{2D}{m}\right)^{1/2}} = t - t_i, \quad (1.59)$$

$$\frac{1}{a} \int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2} \left(-\frac{2E}{m} y^2 + \frac{4D}{m} y - \frac{2D}{m}\right)^{1/2}} = \frac{t - t_i}{\left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2}}, \quad (1.60)$$

organizando os termos chegamos em

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(y^2 - \frac{2D}{E} y + \frac{D}{E}\right)^{1/2}} = \frac{t - t_i}{\left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2}} \left(\frac{E}{D}\right)^{1/2} a, \quad (1.61)$$

utilizando novamente a equação (1.33) temos que

$$\int_{y_i}^y \frac{dy}{\left(y^2 - \frac{2D}{E} y + \frac{D}{E}\right)^{1/2}} = i\omega_0(t - t_i) \left(-\frac{E}{D}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.62)$$

Reescrevendo

$$\frac{1}{(y_1 - y_2)} \int_{y_i}^y \left[ \left(\frac{y - y_2}{y - y_1}\right)^{1/2} - \left(\frac{y - y_1}{y - y_2}\right)^{1/2} \right] dy = i \left(\frac{-E}{D}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_0(t - t_i), \quad (1.63)$$

não esquecendo que  $y_1$  e  $y_2$  são raízes do polinômio presente na integral

$$y_1 = \frac{D}{|E|} + \frac{D}{|E|} \left( \frac{D+E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ e } y_2 = \frac{D}{|E|} - \frac{D}{|E|} \left( \frac{D+E}{D} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.64)$$

Definindo  $\omega^2 = y - y_1$  e sendo  $u^2 = \frac{\omega^2}{(y_1 - y_2)}$ ,

temos que,

$$\arccos \left[ \left( \frac{y_1 - y}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] - \arccos \left[ \left( \frac{y - y_i}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = - \left( -\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i), \quad (1.65)$$

ou ainda ,

$$\arccos \left[ \left( \frac{y_1 - y}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = - \left( -\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i), \quad (1.66)$$

tal que,

$$t'_i = t_i + \frac{2}{\left( -\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0} \arccos \left[ \left( \frac{y_1 - y_i}{y_1 - y_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right], \quad (1.67)$$

organizando os termos

$$y = y_1 + (y_1 - y_2) \cos^2 \left[ \left( -\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_0}{2} (t - t'_i) \right], \quad (1.68)$$

relembrando a relação

$$\cos^2(a) + \sin^2(a) = 1.$$

E substituindo os valores de  $y$  ( $y = e^{a(x-x_0)}$ ),  $y_1$  e  $y_2$  aplicando o logaritmo natural temos que

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{a} \ln \left[ -\frac{D}{E} \left( 1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}} \cos \left( \left( -\frac{E}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \omega_0 (t - t'_i) \right) \right) \right]. \quad (1.69)$$

Desse modo podemos observar o comportamento da equação (1.69) através da figura 4 para os valores de parâmetro  $E < 0, x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$ , ou seja, podemos ver como a posição se comporta no decorrer do tempo e também evidencia o comportamento oscilatório da partícula confinada no poço, ou seja, provando a periodicidade.

Dessa maneira conseguimos comprovar que há convergência entre a solução analítica e a solução numérica.

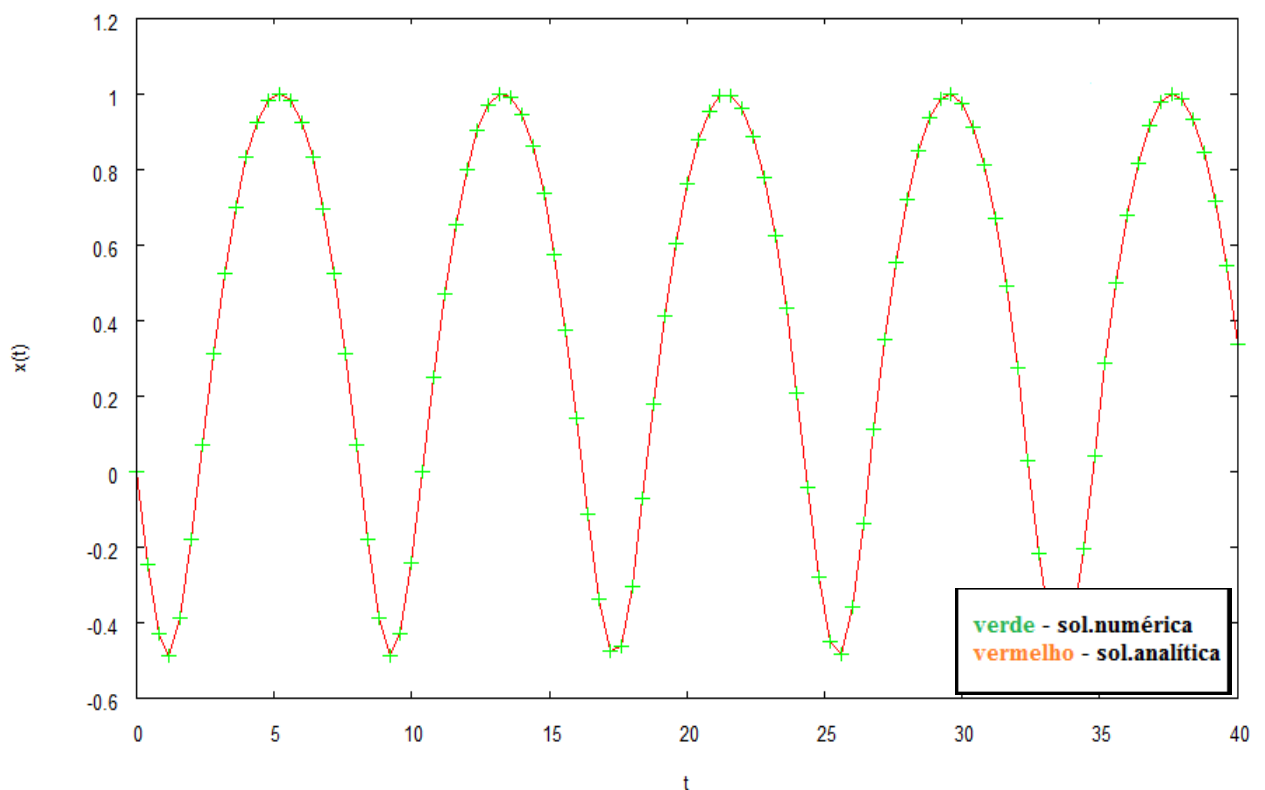


Figura 4- Comparação da solução analítica com a solução numérica para o potencial de Morse livre  $E > 0, x_0 = 0, a = 1, \omega_0^2 = 1, m = 1, D = \frac{1}{2}$

Uma vez identificados a posição e o momentum inicial, é possível construir as trajetórias do espaço de fase para os parâmetros usados. Podemos observar trajetórias fechadas quando temos a energia menor que zero (isso indica que a partícula está confinada no poço) e órbitas abertas para o caso da energia ser maior que zero ou, seja, para energias positivas o sistema consiste de estados não ligados, figura 5.

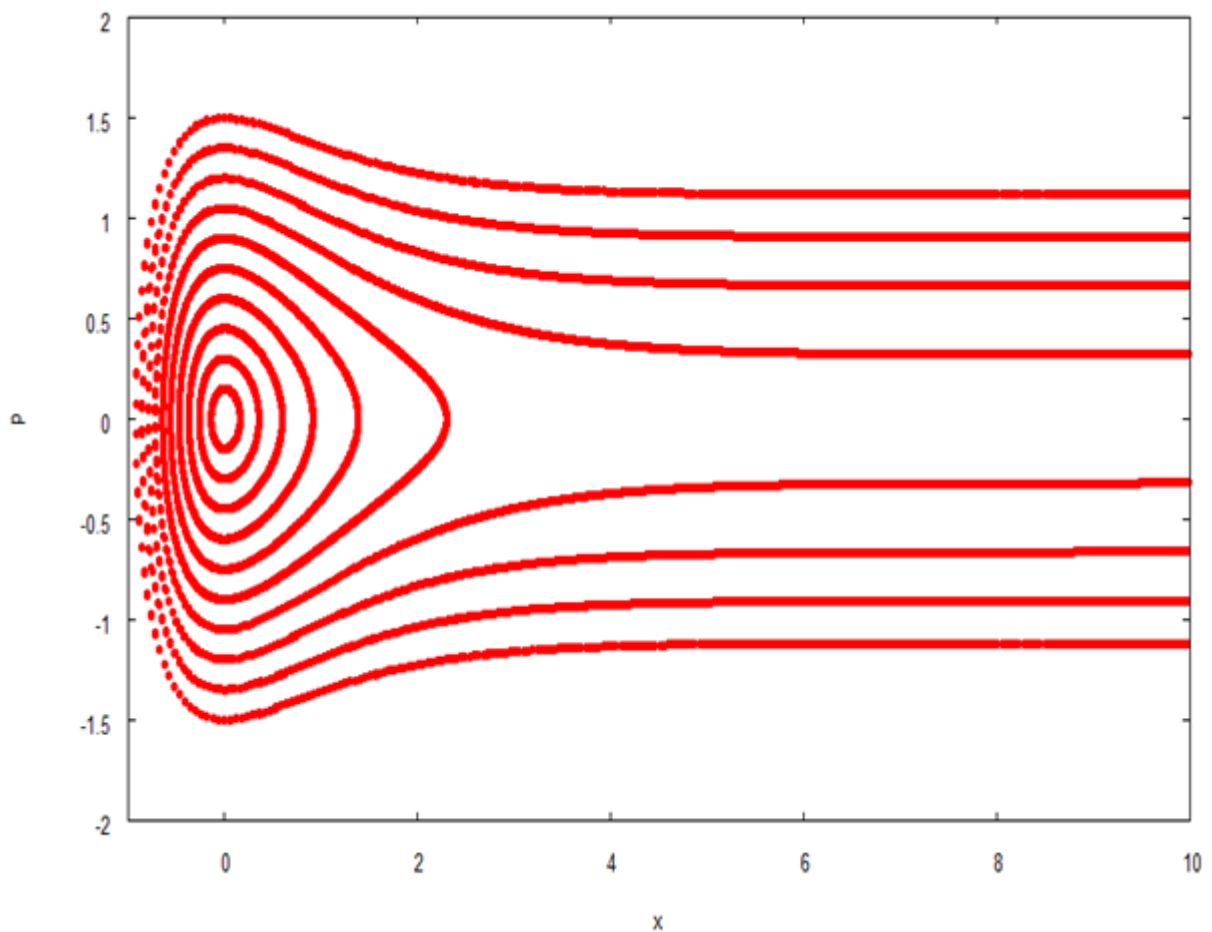


Figura 5- Momentum pela posição (Espaço de fase do potencial de Morse)

## 2.2 Potencial de Morse Forçado (sob a ação do campo externo)

Para descrever a associação de pares atômicos na presença de campo externo utilizaremos a seguinte Hamiltoniana

$$H = \frac{P^2}{2m_r} + V_m(x) - \mu(x)\varepsilon(t). \quad (1.70)$$

Em que  $x$  é a distância internuclear,  $m_r$  é a massa reduzida do par de átomos,  $\mu(x)$  é o momento de dipolo,  $\varepsilon(t)$  é o campo elétrico do laser. O potencial de interação entre os átomos é dado pelo potencial de Morse (equação 1.5).

Tomamos como momento de dipolo

$$\mu(x) = Ax e^{-\xi x^4}. \quad (1.71)$$

E o campo externo do laser terá a seguinte forma

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \sin(\Omega t). \quad (1.72)$$

Na realização dos cálculos computacionais é conveniente trabalhar com variáveis adimensionais, para tanto consideraremos a seguinte mudança de variáveis

posição

$$q = a(x - x_e), \quad (1.73)$$

momentum

$$p = \frac{P}{\sqrt{2mD}}, \quad (1.74)$$

tempo

$$\tau = \omega_0 t, \quad (1.75)$$

onde  $\omega_0$  é dado pela equação (1.33). Assim reescrevendo as equações de Hamilton

$$H = \frac{P^2}{2m} + D(e^{-2a(x-x_e)} - 2e^{-a(x-x_e)}) - \mu(x)\varepsilon(t). \quad (1.76)$$

Sabendo

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt}, \quad (1.77)$$

temos que

$$\frac{q}{a} = (x - x_e) \quad (1.78)$$

$$x = \frac{q}{a} + x_e, \quad (1.79)$$

$$dx = \frac{1}{a} dq, \quad (1.80)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{a} \frac{dq}{dt}, \quad (1.81)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{a} \frac{d\tau}{dt} \frac{dq}{d\tau}, \quad (1.82)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega_0}{a} \dot{q}. \quad (1.83)$$

Sendo a equação de Hamilton (1.1) temos que

$$\frac{\omega_0}{a} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (1.84)$$

$$\frac{\omega_0}{a} \dot{q} = \frac{P}{m}, \quad (1.85)$$

$$\frac{\omega_0}{a} \dot{q} = \frac{p\sqrt{2mD}}{m}, \quad (1.86)$$

$$\sqrt{\frac{2D}{m}} \dot{q} = \frac{p\sqrt{2mD}}{m}, \quad (1.87)$$

$$\dot{q} = p. \quad (1.88)$$

Agora analisando o momentum

$$\dot{P} = \frac{dP}{dt}, \quad (1.89)$$

temos que

$$dP = \sqrt{2mD} dp, \quad (1.90)$$

$$\dot{P} = \sqrt{2mD} \frac{dp}{dt}, \quad (1.91)$$

$$\dot{P} = \sqrt{2mD} \frac{d\tau}{dt} \frac{dp}{d\tau}, \quad (1.92)$$

$$\dot{P} = \sqrt{2mD} \omega_0 \frac{dp}{d\tau}. \quad (1.93)$$

Utilizando a equação (1.2)

$$\dot{p} = -(2aD(e^{-2a(x-x_e)} - e^{-a(x-x_e)})) + (Ae^{-\xi x^4} \varepsilon(t))(1 - 4\xi x^4), \quad (1.94)$$

$$\sqrt{2mD} \omega_0 \dot{p} = (-2aD(e^{-2q} - e^{-q})) + \left( A e^{-\xi \left(\frac{q}{\alpha} + x_e\right)^4} \varepsilon(t) \right) \left( 1 - 4\xi \left(\frac{q}{\alpha} + x_e\right)^4 \right), \quad (1.95)$$

$$\dot{p} = (e^{-2q} - e^{-q}) + \left( \frac{A}{2\alpha D} e^{-\xi \left(\frac{q}{\alpha} + x_e\right)^4} \varepsilon(t) \right) \left( 1 - 4\xi \left(\frac{q}{\alpha} + x_e\right)^4 \right). \quad (1.96)$$

Declarando

$$\frac{\varepsilon(t)A}{2\alpha D} = \tilde{\varepsilon}(t), \quad \frac{\xi}{\alpha^4} = \tilde{\xi}, \quad \alpha x_e = q_e, \quad (1.97)$$

temos que

$$\dot{p} = (e^{-2q} - e^{-q}) + \tilde{\varepsilon}(t)e^{-\tilde{\xi}(q-q_e)^4}(1 - 4\tilde{\xi}(q - q_e)^4). \quad (1.98)$$

Desse modo aplicaremos a equação (1.73) e (1.74) no método Runge-Kutta de quarta ordem. Todo o nosso problema será estudado em variáveis adimensionais.



### 3. Resultados

Para resolver numericamente as equações de movimento da partícula sujeita ao potencial de Morse forçado, equação (1.70), utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem com passo adaptável.

Em um primeiro momento posicionamos a partícula longe da região de interação com o potencial e sem a ação do campo externo e em cada simulação foi escolhido um momento linear diferente para a partícula. Calculamos o tempo necessário para que a partícula retorne ao ponto de partida após a colisão com o potencial. A este intervalo de tempo damos o nome de tempo de colisão ( $\tau_c$ ).

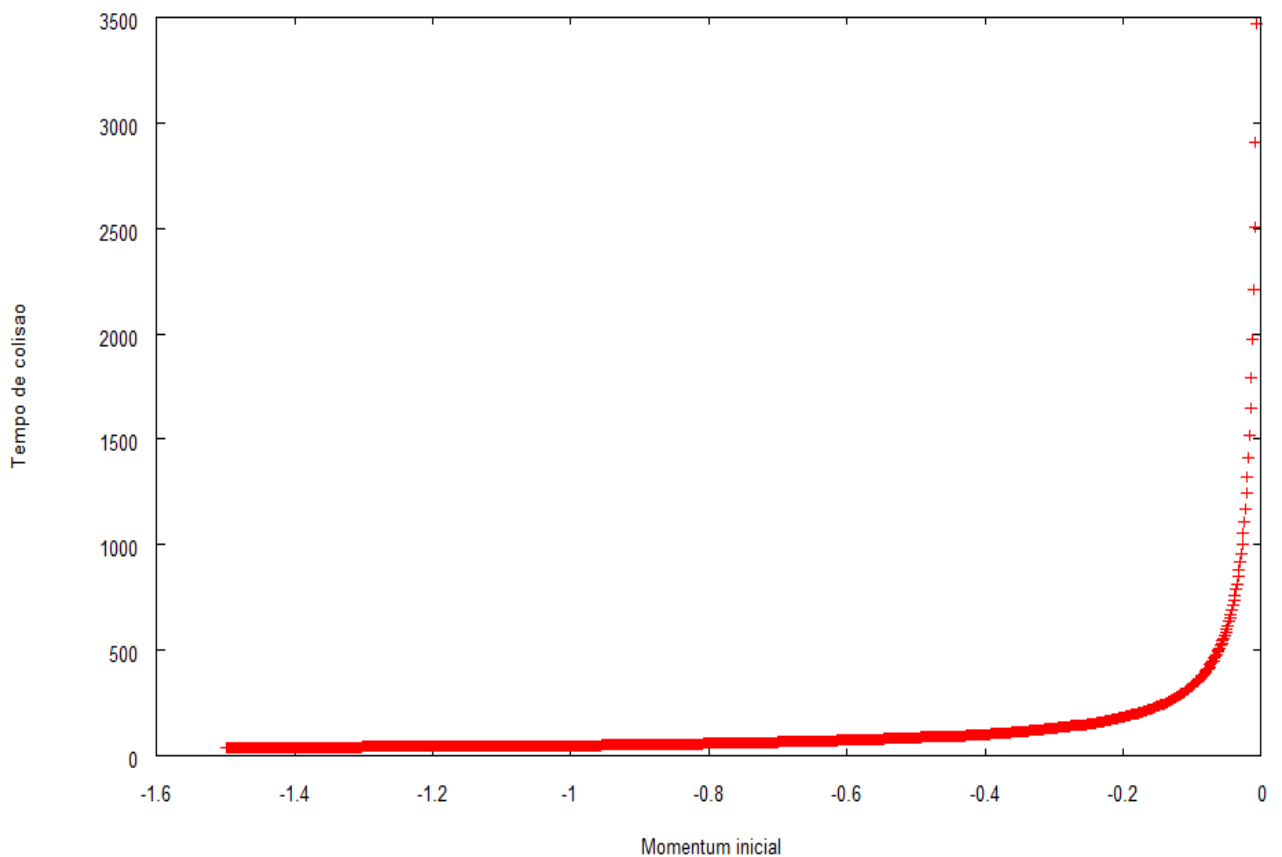


Figura 6 – Tempo de colisão versus o momento inicial da partícula sem a ação do campo externo.

Podemos perceber através da análise da figura 6 que quando o problema não está sob a ação do campo externo apresenta um comportamento exponencial, pois, quanto mais próximo de zero esta o valor do momento inicial maior é o valor do tempo de colisão.

Após esse procedimento ligamos o campo externo

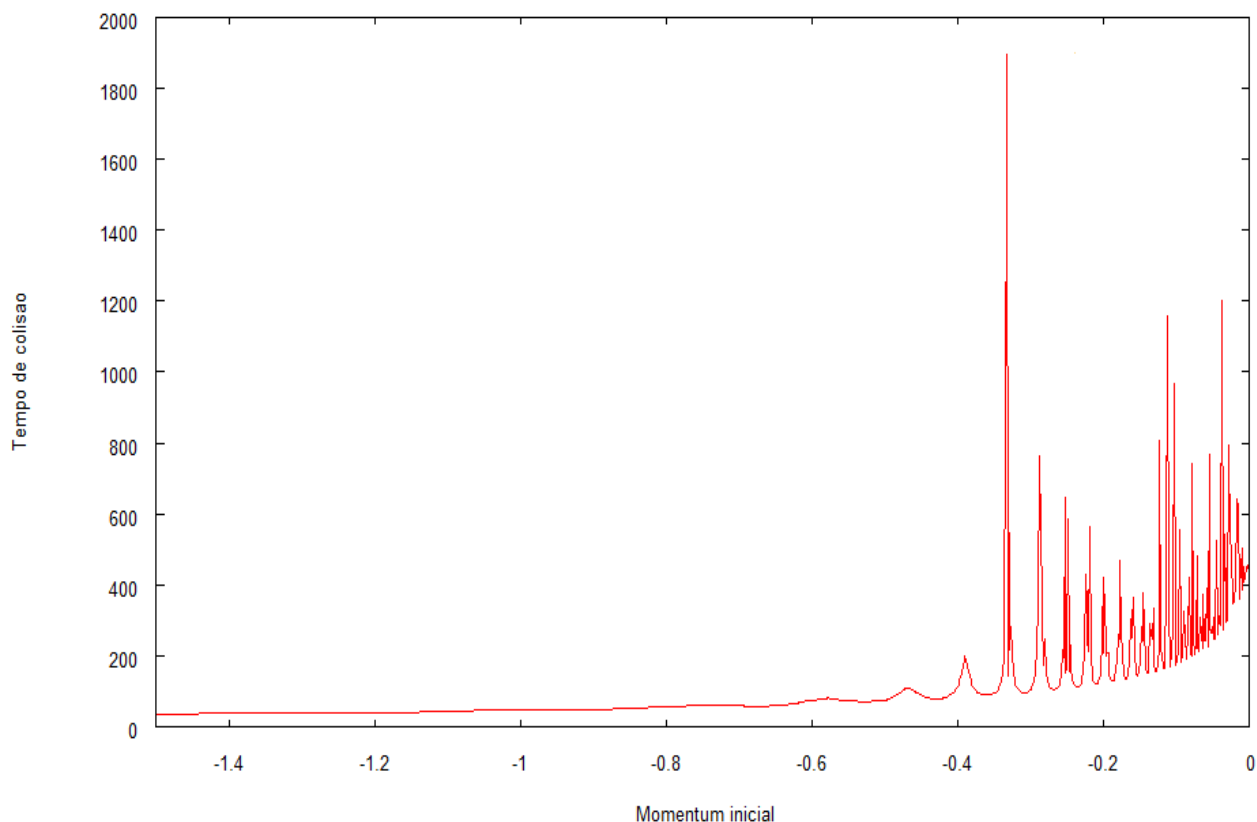


Figura 7 - Tempo de colisão versus o momento inicial da partícula sob a ação do campo externo

A figura 7 mostra o tempo de colisão para a partícula inicialmente em  $x=20$  e com momentos variando de  $-1,5$  a  $-0,0$ . Observamos que o tempo de colisão possui diversos picos para certos momentos iniciais da partícula. Nesses picos, o tempo de colisão chega a ter uma ordem de magnitude maior do que o tempo de colisão da base da curva.

Também é possível observar que para valores de momento próximo a zero há um aumento no número de picos assim podemos evidenciar que para estes valores temos maiores chances de fotoassociar.

A análise do tempo de colisão versus momento inicial revela uma grande sensibilidade do sistema às condições iniciais. Verificamos que pequenas variações no momento inicial da partícula podem causar mudanças de mais de uma ordem de magnitude no tempo de colisão com o potencial. Esse fato evidencia a existência de caos no processo de espalhamento. Na figura 8 este fato fica evidenciado, pois, quando analisamos certa faixa do momento inicial

conseguimos perceber a presença de uma estrutura fractal ,ou seja, têm sempre cópias aproximadas de si mesmo em seu interior.

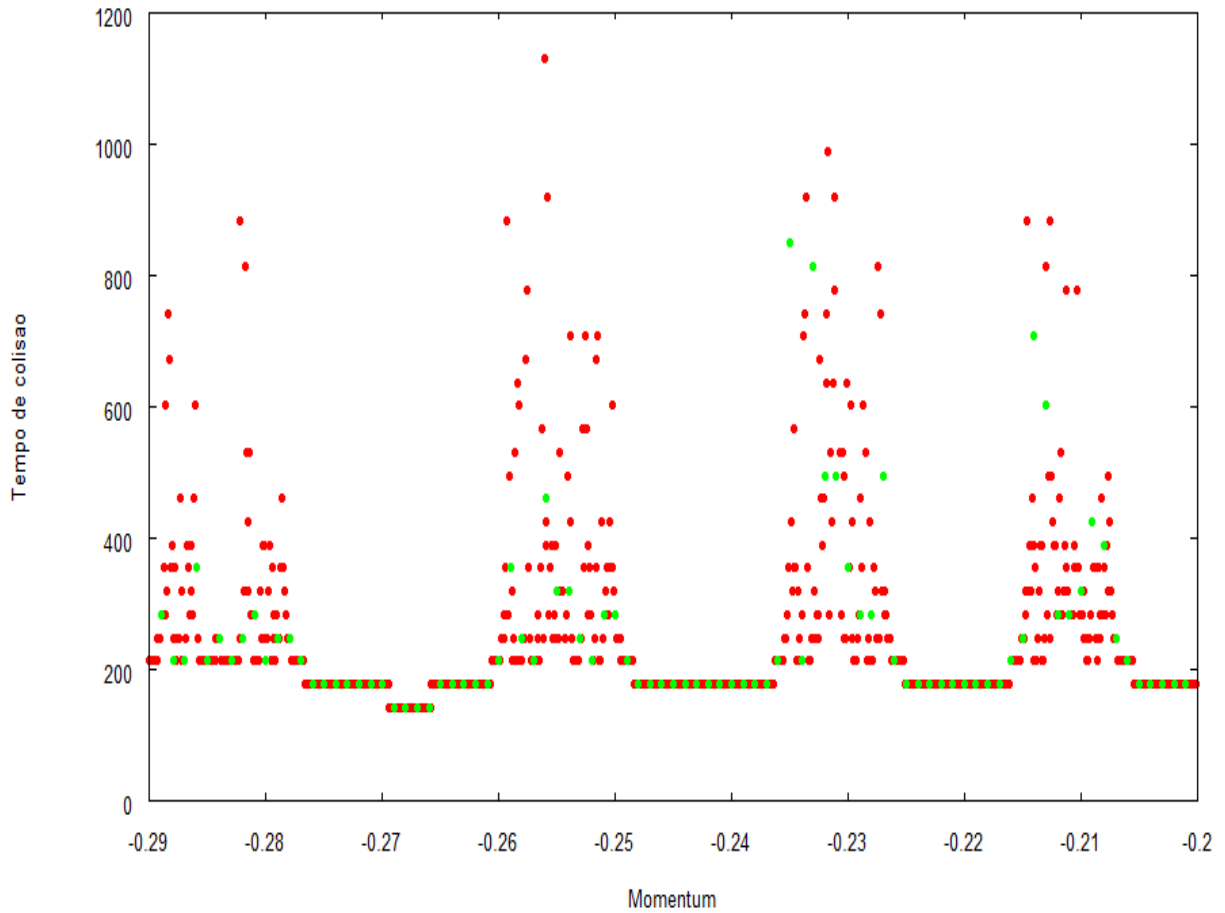


Figura 8 – Intervalo [-0,3;-0,2] do momento inicial, os pontos vermelhos representam esse intervalo de momentum variando com um passo de 0,0001, já nos pontos em verde o passo foi de 0,001

Após isso começamos uma análise dos parâmetros do campo externo, variando os valores da frequência e mantendo a amplitude constante com o valor de 200.

Primeiramente definimos  $\omega = 0,45\omega_0$

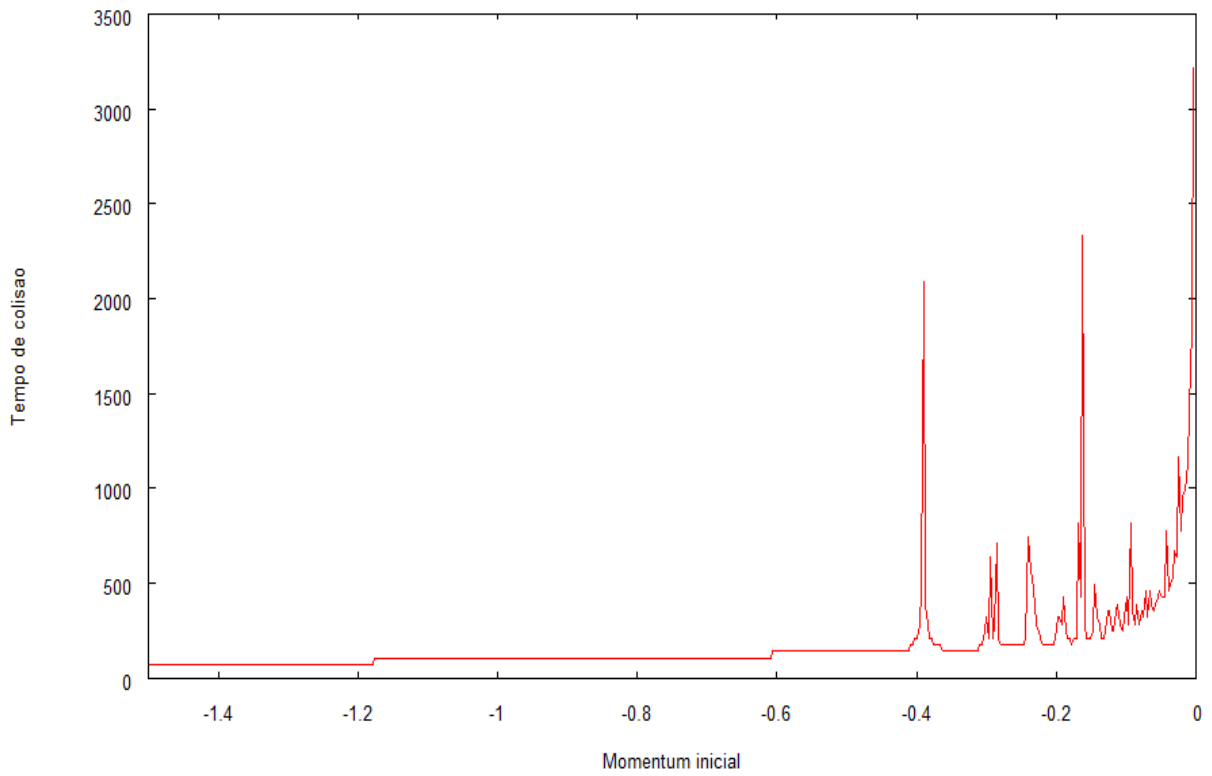


Figura 9 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $\omega = 0,45\omega_0$

Para  $\omega = \omega_0$

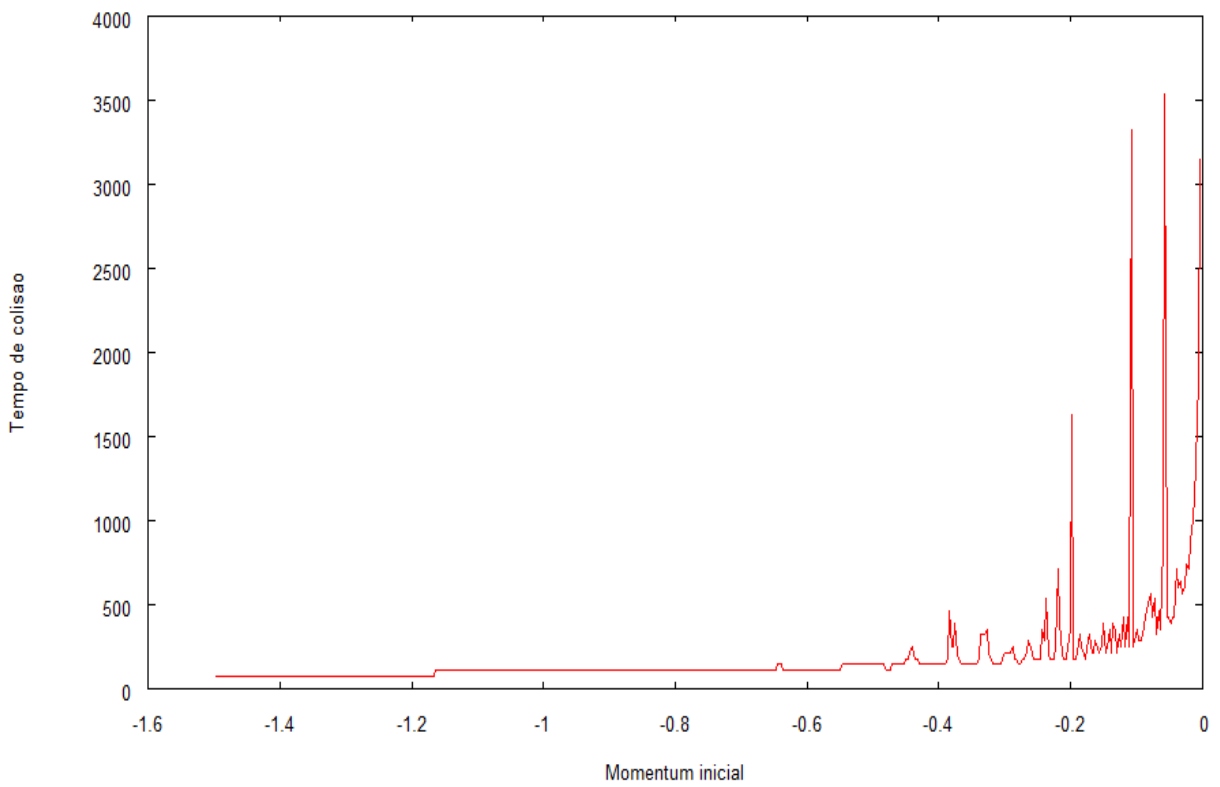


Figura 10 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $\omega = \omega_0$

Com  $\omega = 1,5 \omega_0$

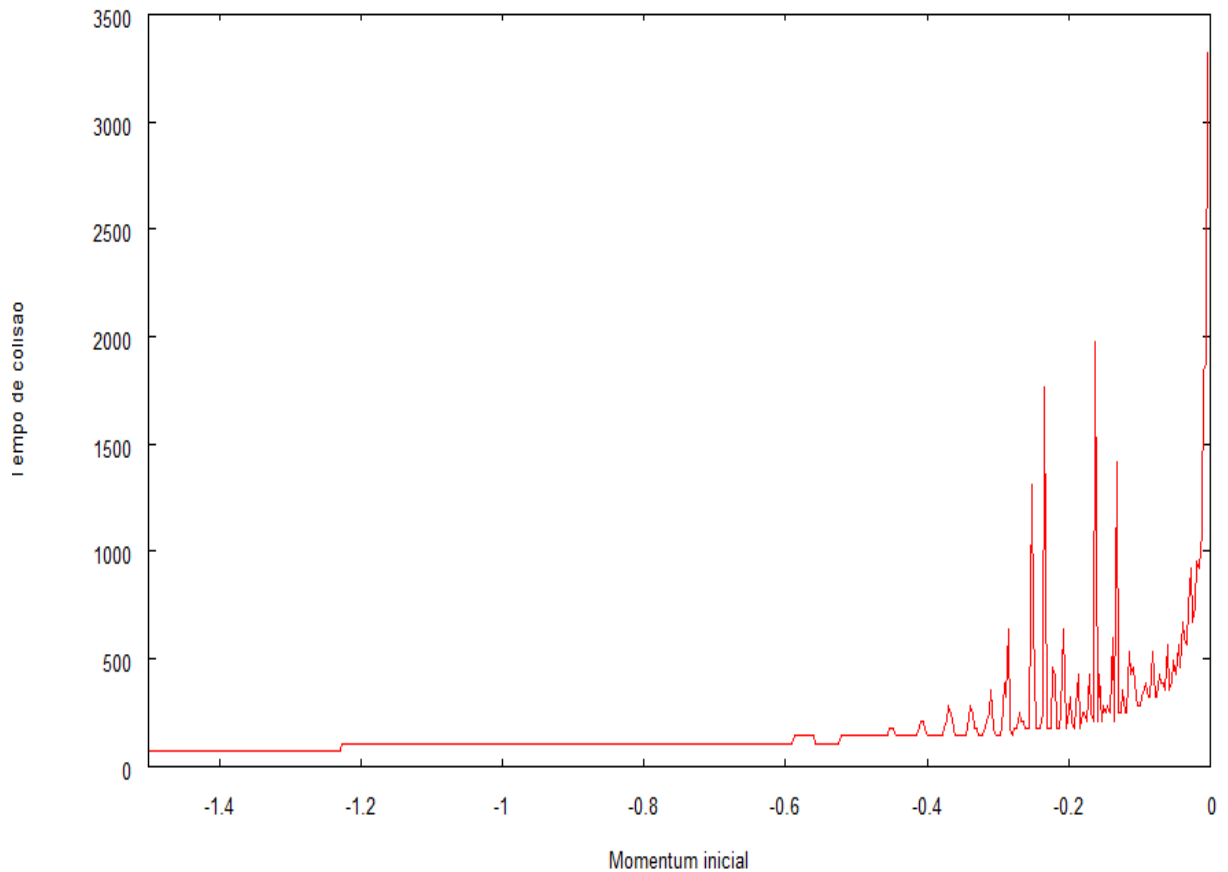


Figura 11 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $\omega = 1,5\omega_0$

Dessa maneira a figura 12 mostra o comportamento gráfico dos três valores de frequência onde a curva verde representa  $\omega = \omega_0$ , curva vermelha representa para  $\omega = 0,45\omega_0$  e a curva azul para  $\omega = 1,5\omega_0$ .

Através da figura 12 também conseguimos verificar que o comportamento geral do gráfico não se altera para diversos valores de momentos e que a diferença consiste nos máximos valores de tempo de colisão, ou seja, no tempo que a partícula permaneceu confinada poço. Desse modo definimos como melhor valor de frequência 1,0 já que fornece mais de uma ordem de magnitude de máximos.

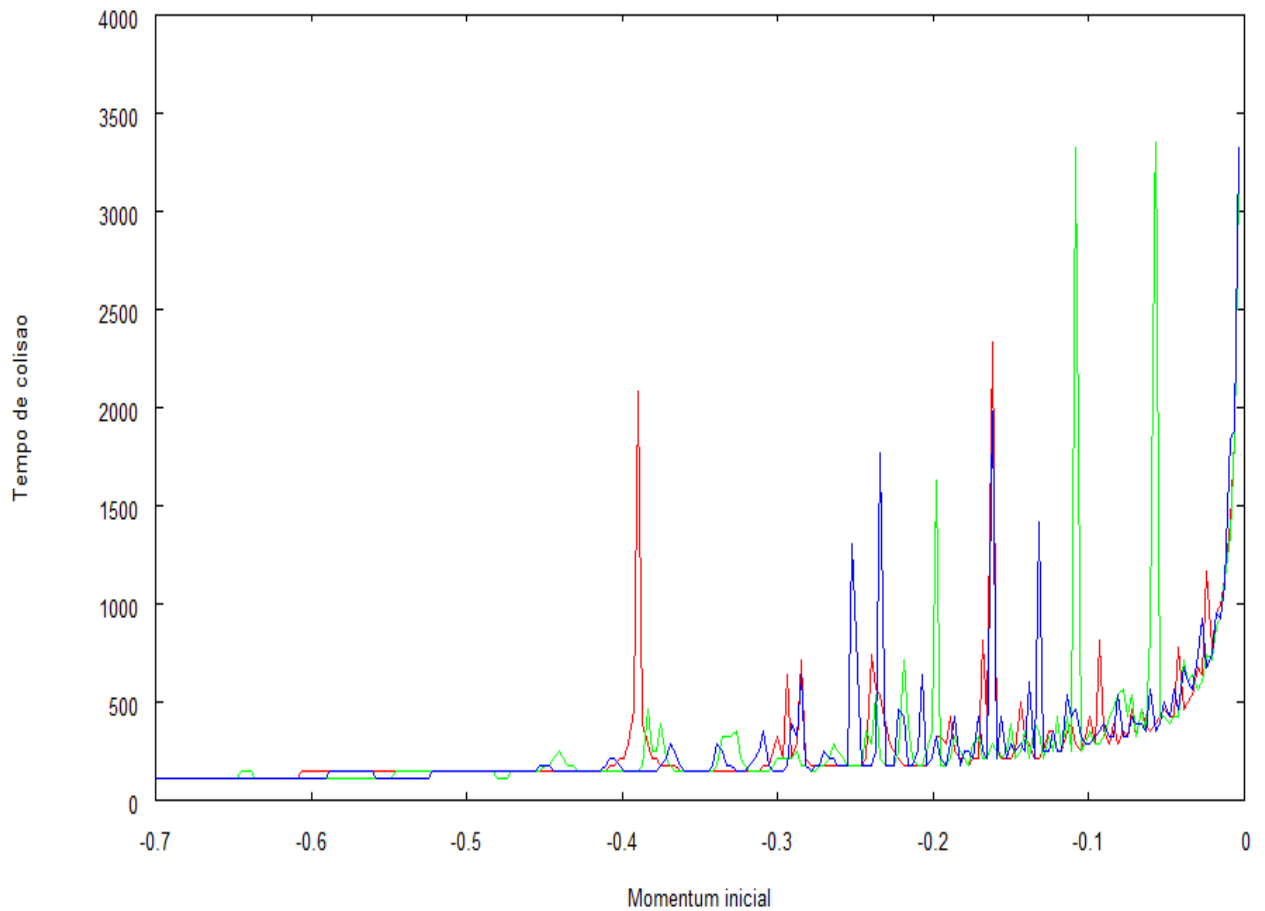


Figura 12 – Diversos valores de frequência para o problema onde a curva vermelha representa  $\omega = \omega_0$ , a curva verde para  $\omega = 0,45\omega_0$  e a curva azul para  $\omega = 1,5\omega_0$

Após a comparação dos valores da frequência começamos uma análise a respeito da amplitude promovendo a sua variação e fixando a frequência em  $1,0\omega_0$  e obtivemos os gráficos abaixo:

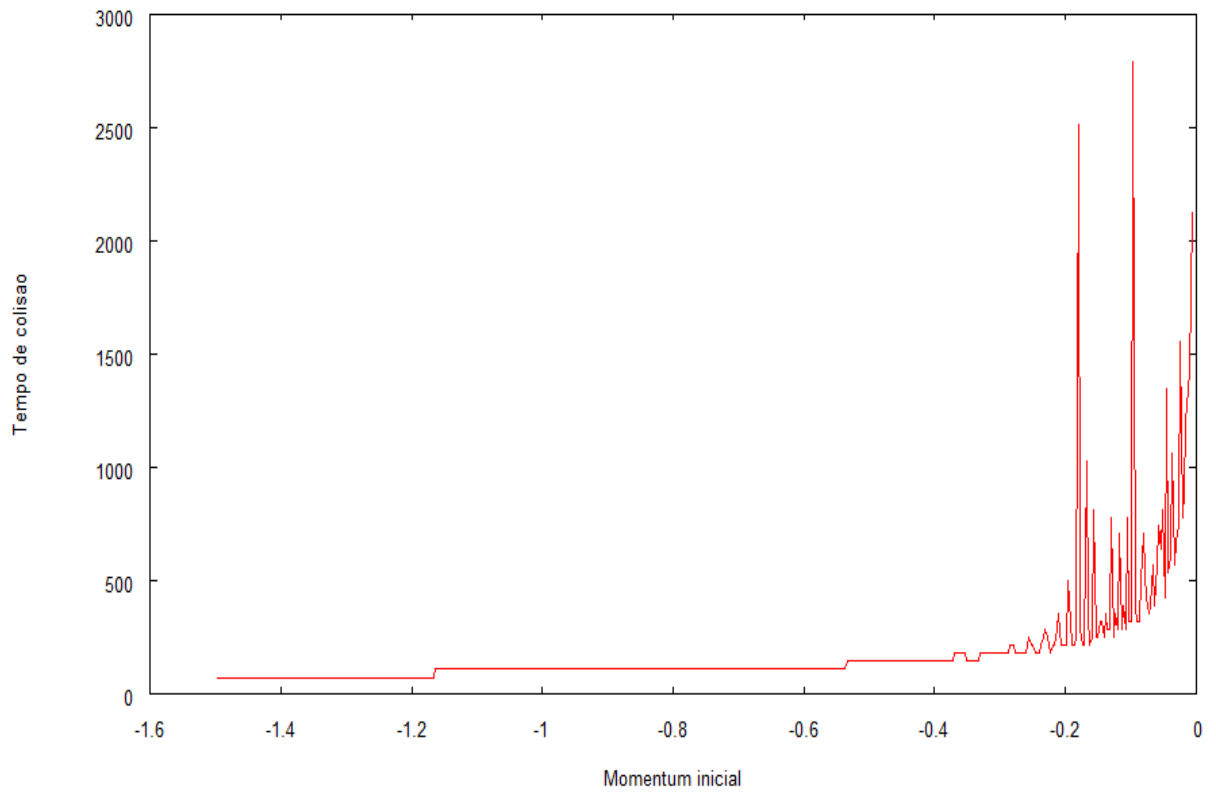


Figura 13 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $E_0 = 50$

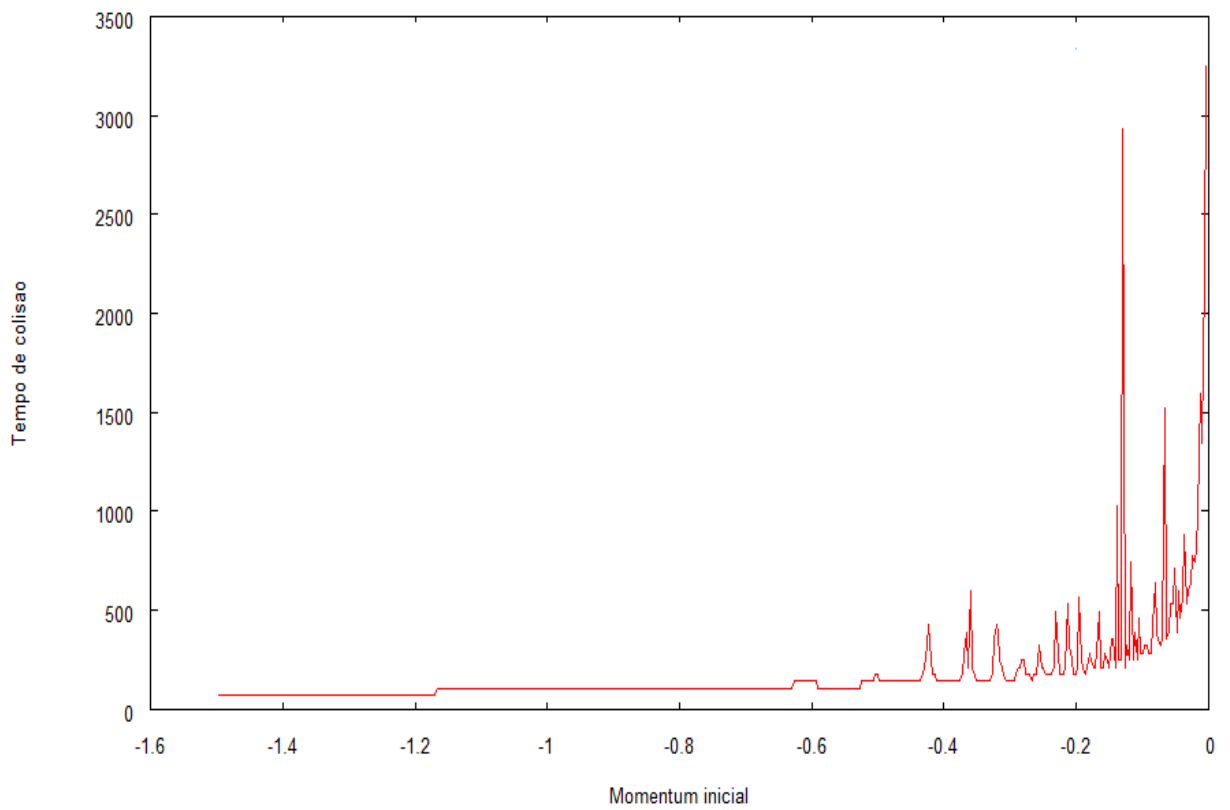


Figura 14 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $E_0 = 200$

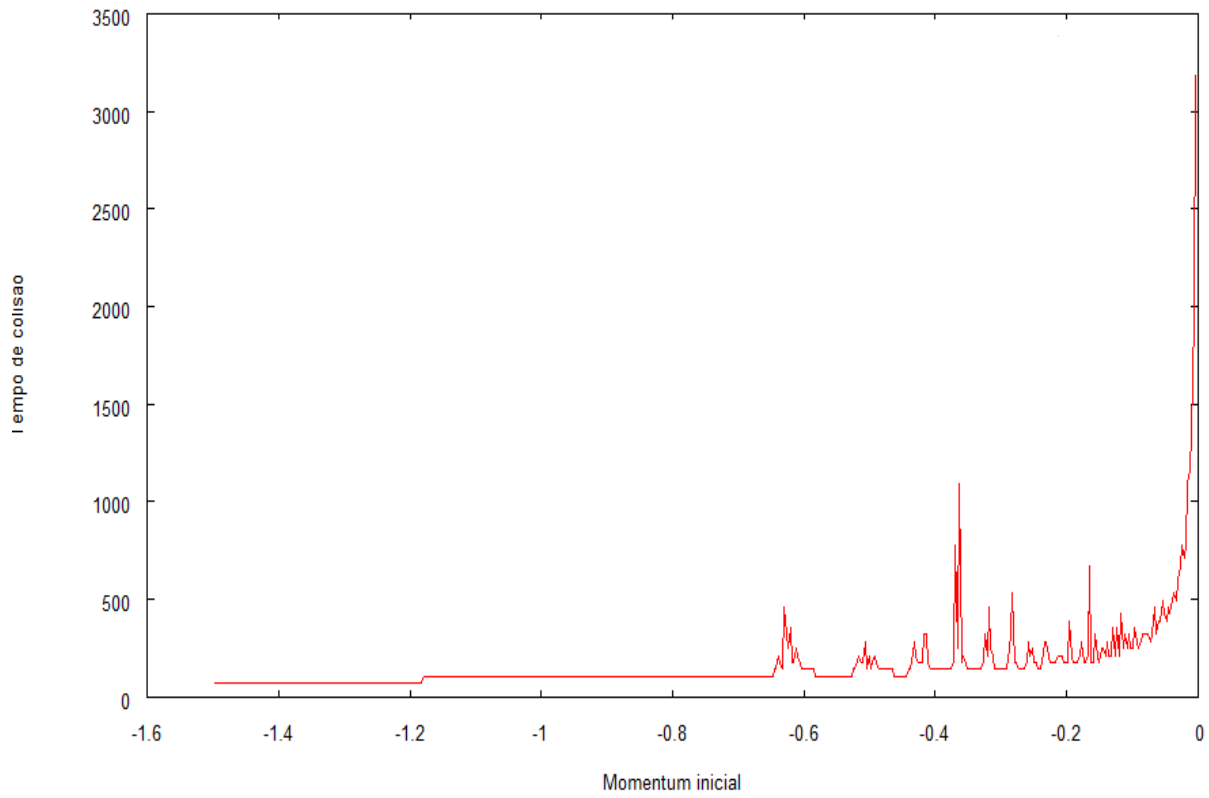


Figura 15 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $E_0 = 500$

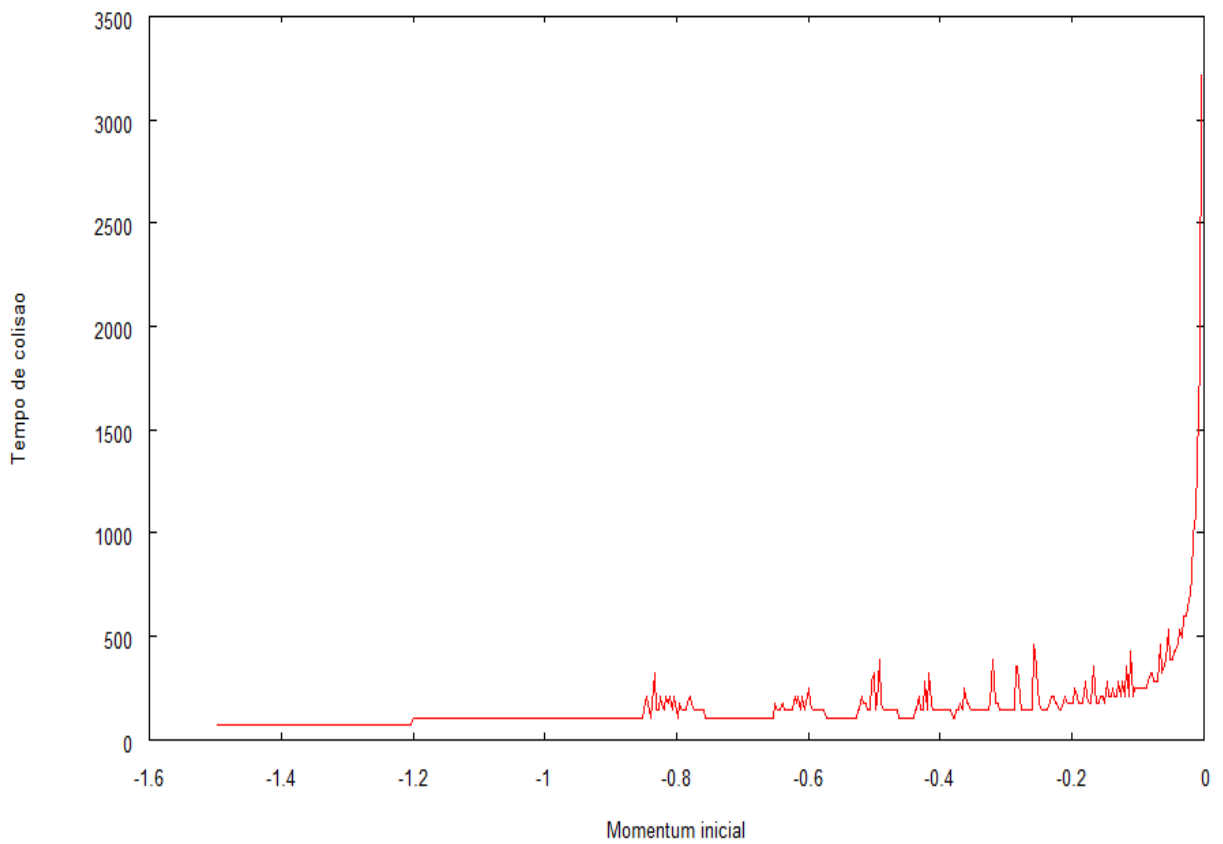


Figura 16 – Tempo de colisão em função do momento inicial para  $E_0 = 1000$



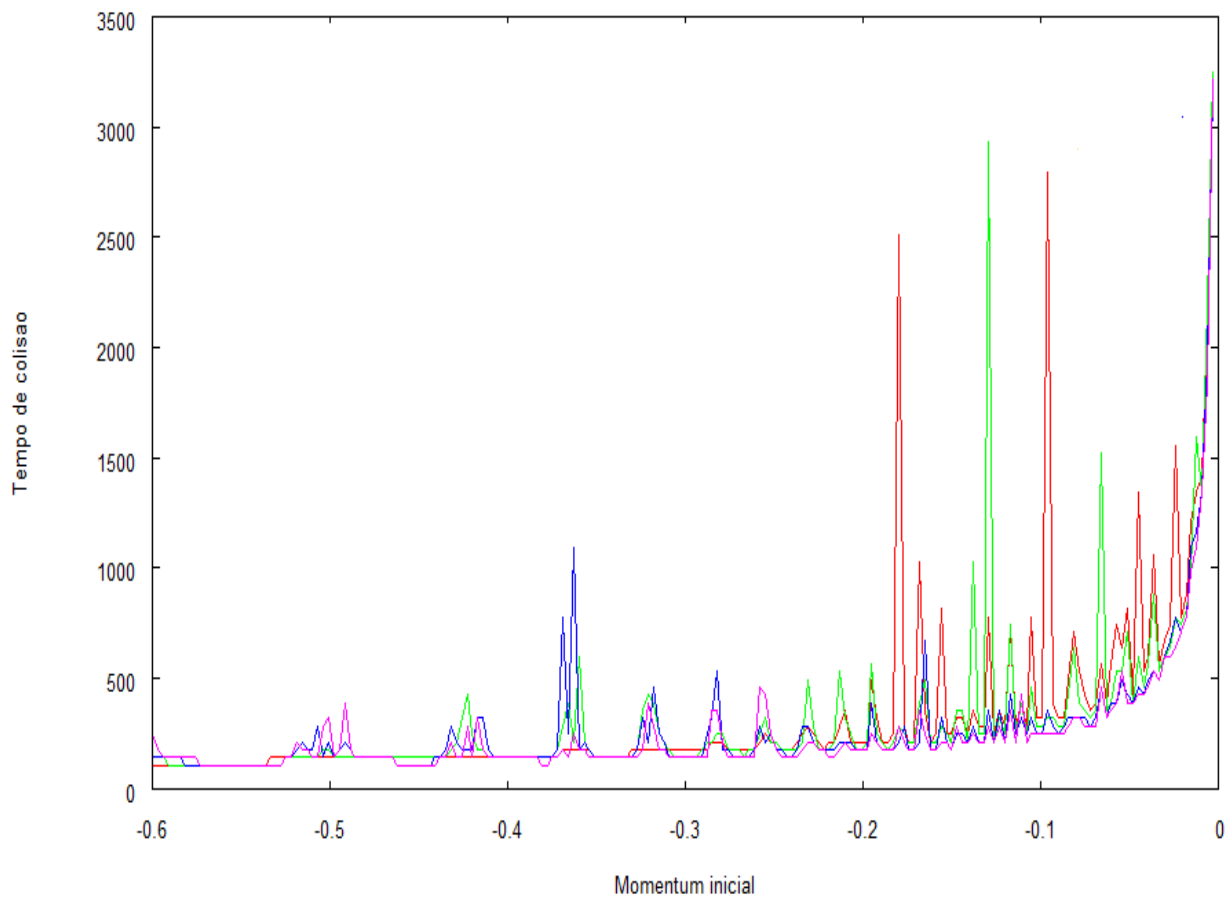


Figura 17 – Curva vermelha representa  $E_0 = 50$ , curva verde representa  $E_0 = 200$ , curva azul representa  $E_0 = 500$  e a curva rosa  $E_0 = 1000$ .

Conseguimos verificar que altos valores de amplitude fazem com que apareça um maior número de picos, mas também faz com que eles tenham uma magnitude menor, ou seja, mais partículas entram no poço, mas permanecem lá por um período de tempo pequeno.

Desse modo escolhemos valores para  $E_0$  e  $\omega$  que apresentam um razoável número de picos e um intervalo de tempo considerável dentro do poço.

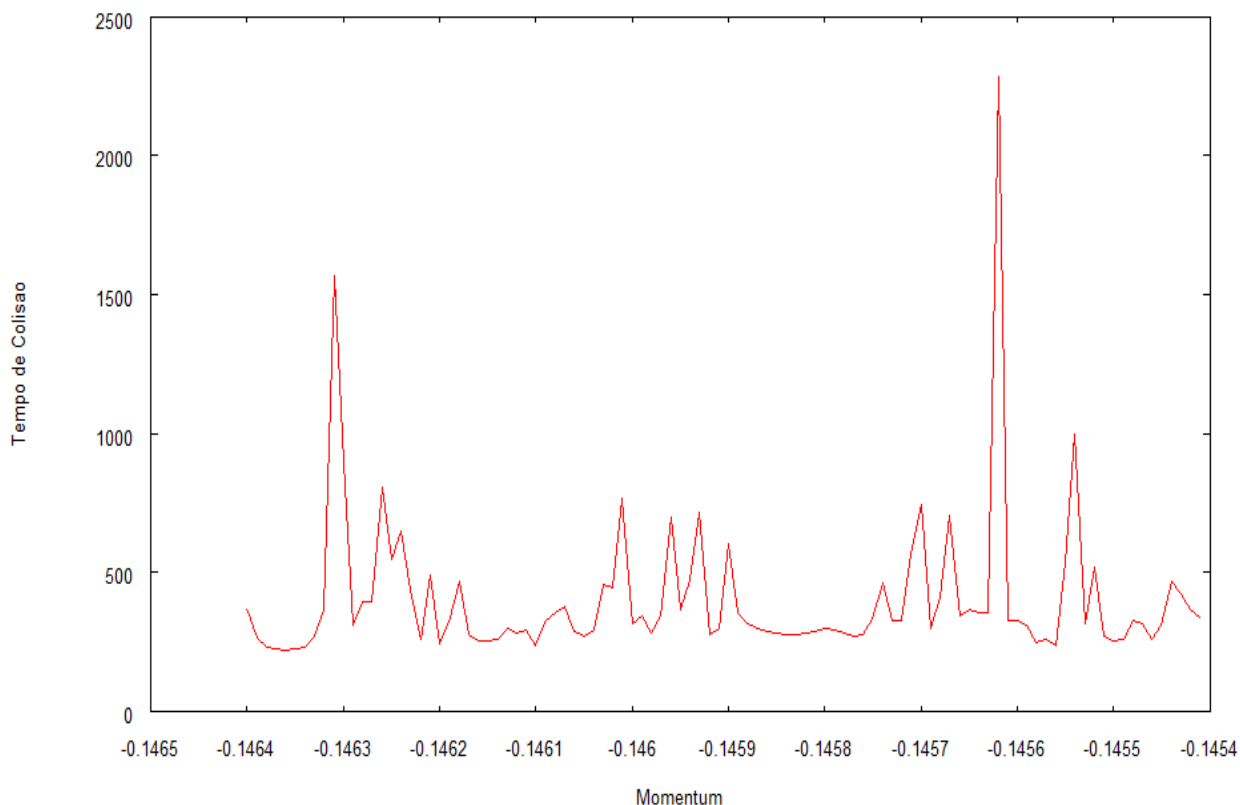


Figura 18-Tempo de colisão em função do momentum para determinada faixa de momentum [-0,1464:-0,1454].

Novamente com o auxílio da figura 18 podemos evidenciar a presença de caos no nosso sistema e que supõe a possível presença de uma estrutura fractal assim como também podemos observar na figura 8, já que para um curto intervalo de momentum continuamos tendo o mesmo comportamento que ocorria quando analisávamos um amplo intervalo.

Até este momento o campo externo estava ligado constantemente, ou seja, ao mesmo tempo em que ele agia sobre os átomos fazendo com que eles formassem uma molécula (ocorria fotoassociação), ele continuava agindo sobre eles fazendo com que a ligação molecular rompesse (ocorria fotodissociação).

Assim através da análise da figura 7 escolhemos certo período de tempo onde era verificado um grande número de picos e determinamos que o campo externo fosse desligado naquele momento (duração do laser), dessa maneira fazendo com que aumentasse os números de picos e que obtíssemos um aumento no número de partículas fotoassociadas.

Podemos assim calcular a probabilidade de fotoassociação para um determinado intervalo de tempo (duração do laser) através da variação de um intervalo de momentum. Essa probabilidade de fotoassociar consiste na razão entre o número de partículas que fotoassociam pelo número total delas.

$$\text{Probabilidade de Fotoassociação} = \frac{N_p}{N_t} \quad (1.29)$$

Dessa maneira obtivemos distintos gráficos para distintas faixas momentos e um intervalo fixo para o tempo do laser.

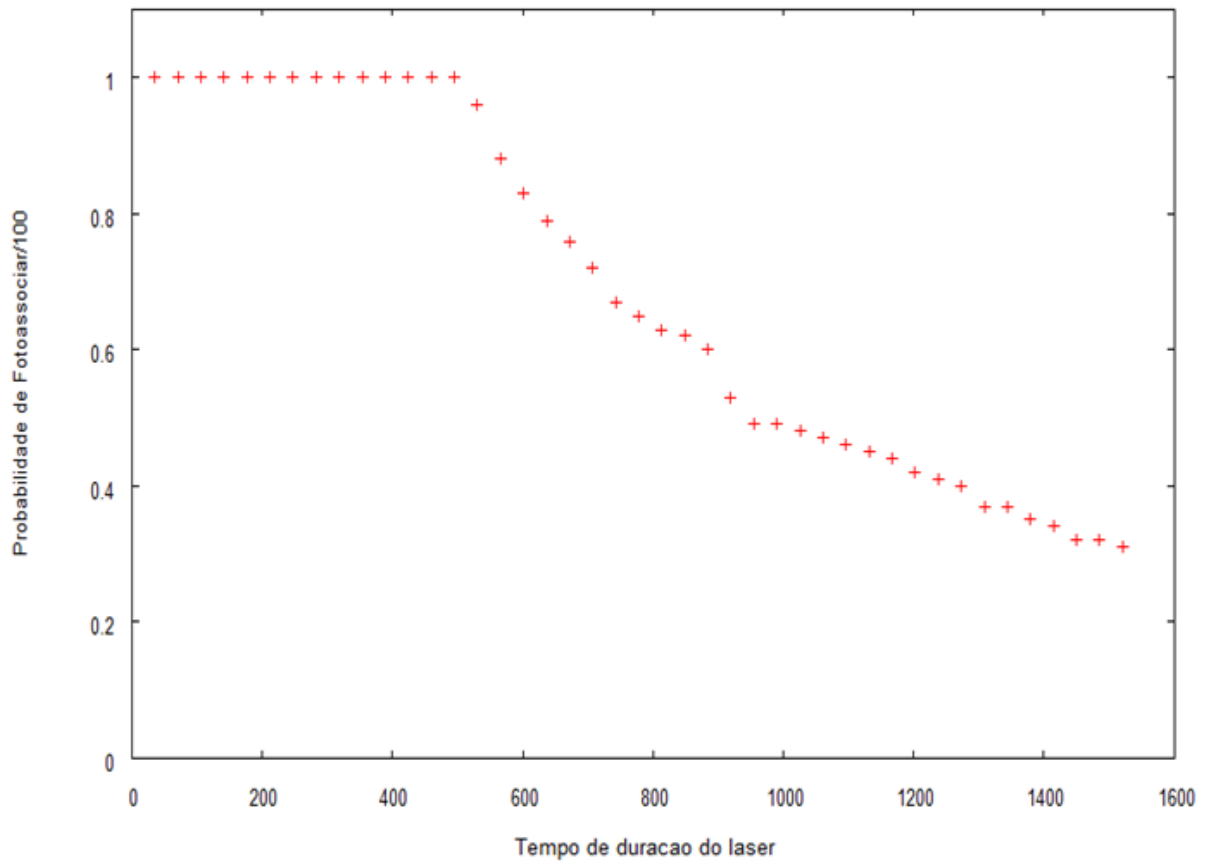


Figura 19- Probabilidade de Fotoassociar em certo período de duração do laser. O intervalo de momento consiste em [-0,4: -0,2].

Analisando o intervalo de momento [-0,4:-0,2], figura 19, observamos que todas as partículas estão fotoassociadas até duração de laser igual a 600. Para duração do laser maior que 600 a probabilidade de encontrar partículas confinadas no poço cai até atingir um valor mínimo de

30%. Isso evidencia que o intervalo de duração do laser acima de 600 não é ideal para a fotoassociação nesse intervalo de momento.

Para a faixa de momento  $[-0,2;-0,1]$  podemos evidenciar que com o aumento da exposição das partículas

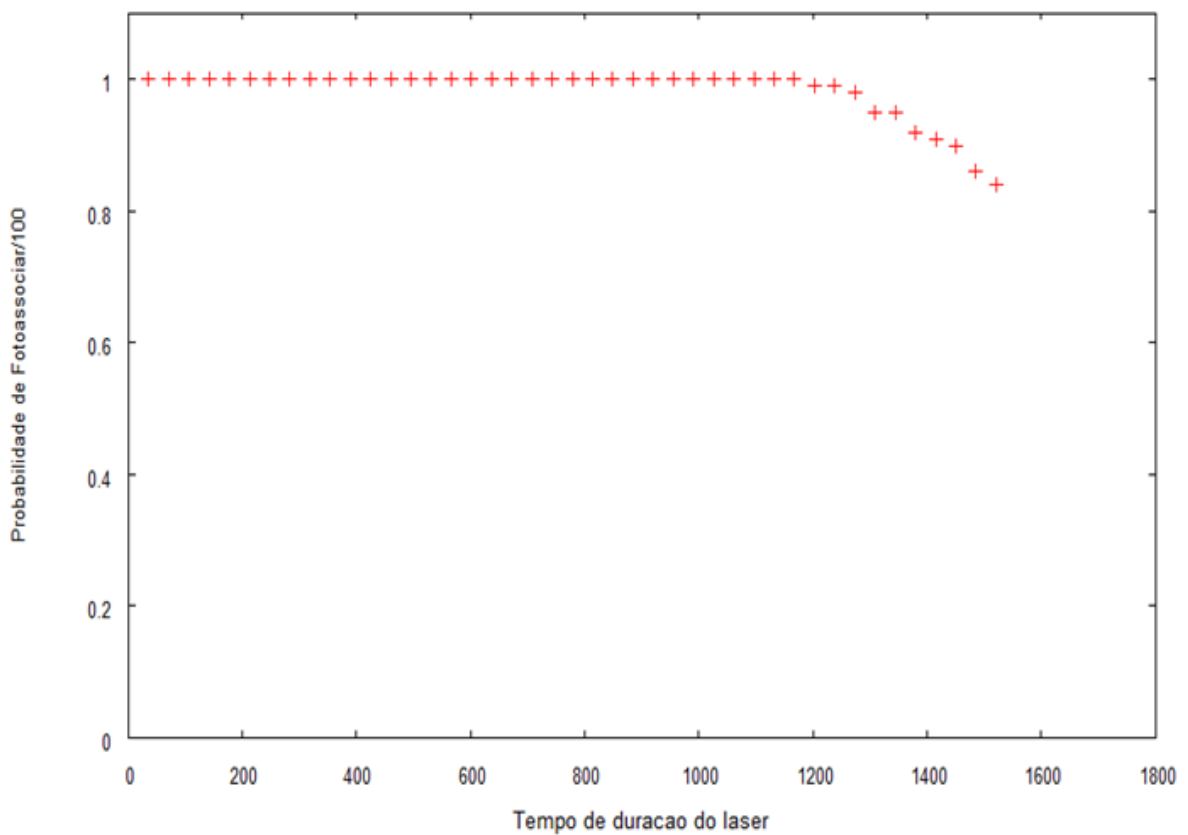


Figura 20- Probabilidade de Fotoassociar em certo período de duração do laser. O intervalo de momento consiste em  $[-0,2;-0,1]$

A figura 20 evidencia o mesmo que a figura 19, pois, parte das partículas permanecem confinadas no poço, mas como a duração do laser é maior que 1200(o tempo essencial para essa faixa de momento) a probabilidade de encontrar alguma partícula confinada no poço começa a cair até atingir um valor mínimo de 84% das partículas no poço.

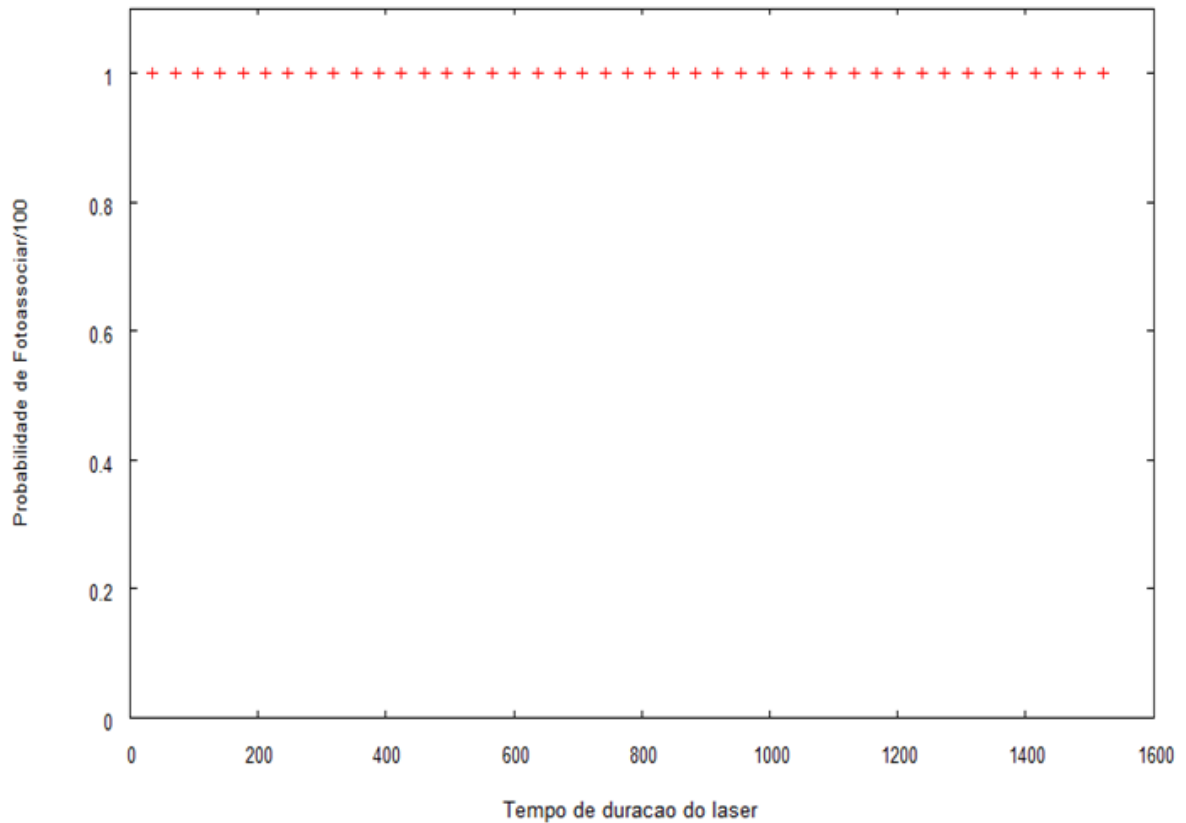


Figura 21- Probabilidade de Fotoassociar em certo período de duração do laser. O intervalo de momento consiste em [-0,1454: -0,1464]

Obtivemos a probabilidade de 100% quando foi escolhido um valor de momentum de pico [-0,1454: -0,1464], ou seja, um pequeno intervalo de momentum correspondente a um pico, comprovando assim que realmente os picos correspondem a partículas confinadas dentro do poço.

Uma forma útil de se apresentar os resultados numéricos é via a estroboscópica *seção de Poincaré*, que consiste no registro da posição e o momentum do sistema a cada período da onda ( $T = n \frac{2\pi}{\omega}$ , onde n é um inteiro positivo). Este mapeamento simplifica o reconhecimento de movimentos ordenados ou caóticos do sistema: os primeiros aparecem sobre curvas bem definidas no plano ((x,p) ou seja posição, momentum), enquanto os últimos preenchem de forma irregular regiões mais extensas do espaço de fase

O espaço de fase para quando desligamos o pulso de laser evidencia o comportamento ordenado de uma partícula para certos valores de momento em função de certos valores de posição, figura 22.

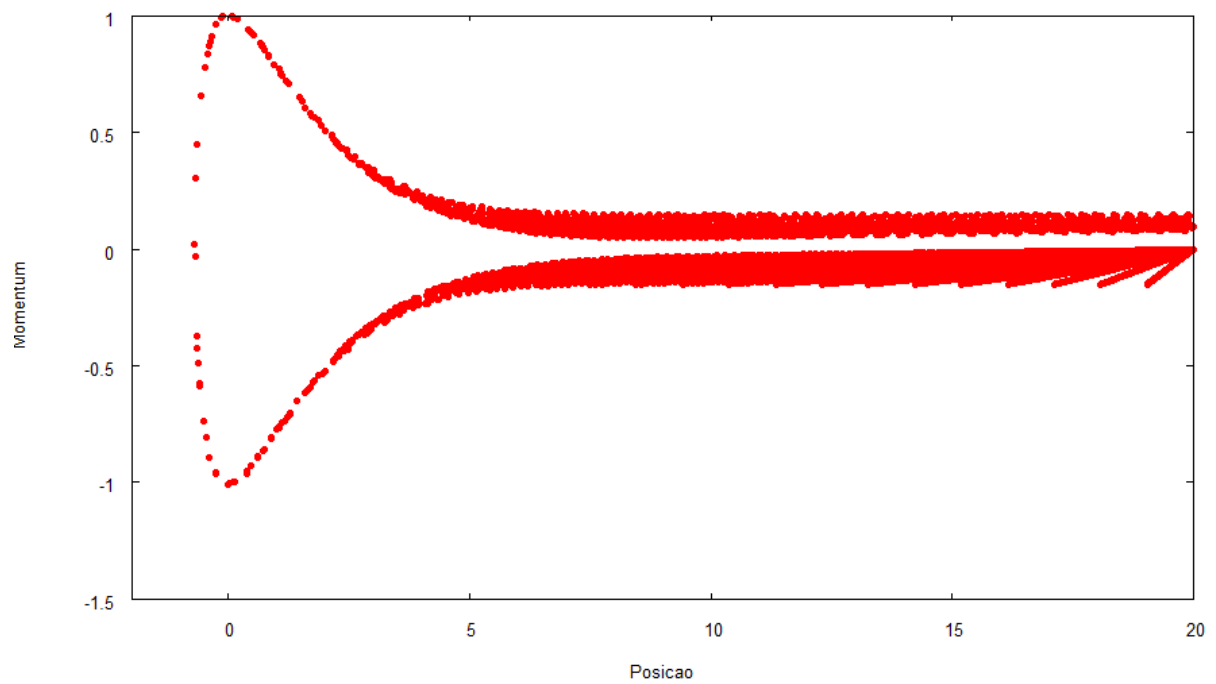


Figura 22 – Seção de Poincaré para a Hamiltoniana sem a ação do campo externo

Feito isso traçamos o espaço de fase para o mesmo intervalo de momento, contudo neste caso o laser permanecerá ligado durante todo o percurso da partícula, figura 23.

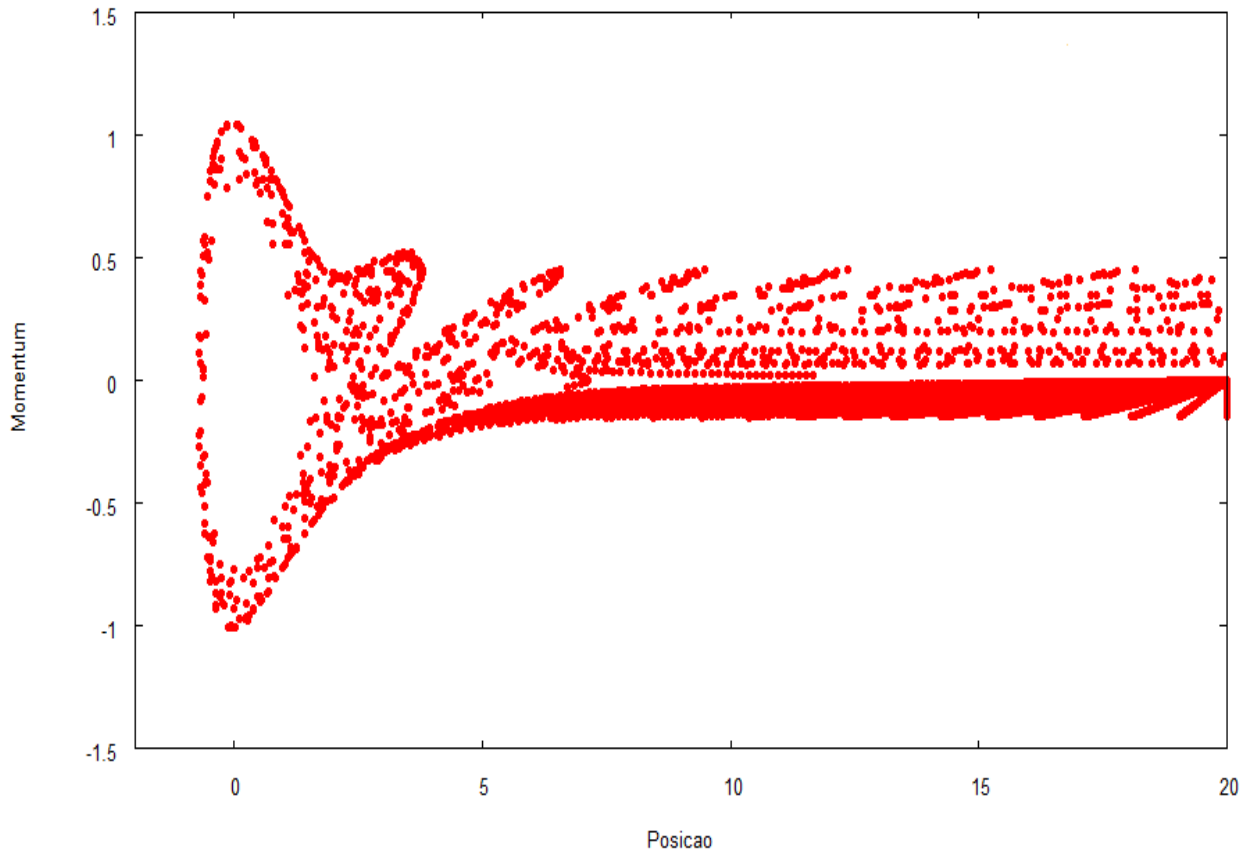


Figura 23- Sessão de Poincaré para a partícula sob a ação do campo externo

Conseguimos evidenciar que o pulso de laser ligado causa perturbações na trajetória da partícula (figura 23), mas que ainda se mantém muito semelhante à trajetória original, podendo evidenciar assim o comportamento caótico do sistema.

Essa semelhança mantida entre as trajetórias pode ser evidenciada na figura 24 e também conseguimos notar que o espaço de fase que esta sobre a ação do campo externo apresenta algumas cristas onde estas são justificadas devido ao valor do momento estar próximo a região limiar, ou seja, a região próxima de zero.

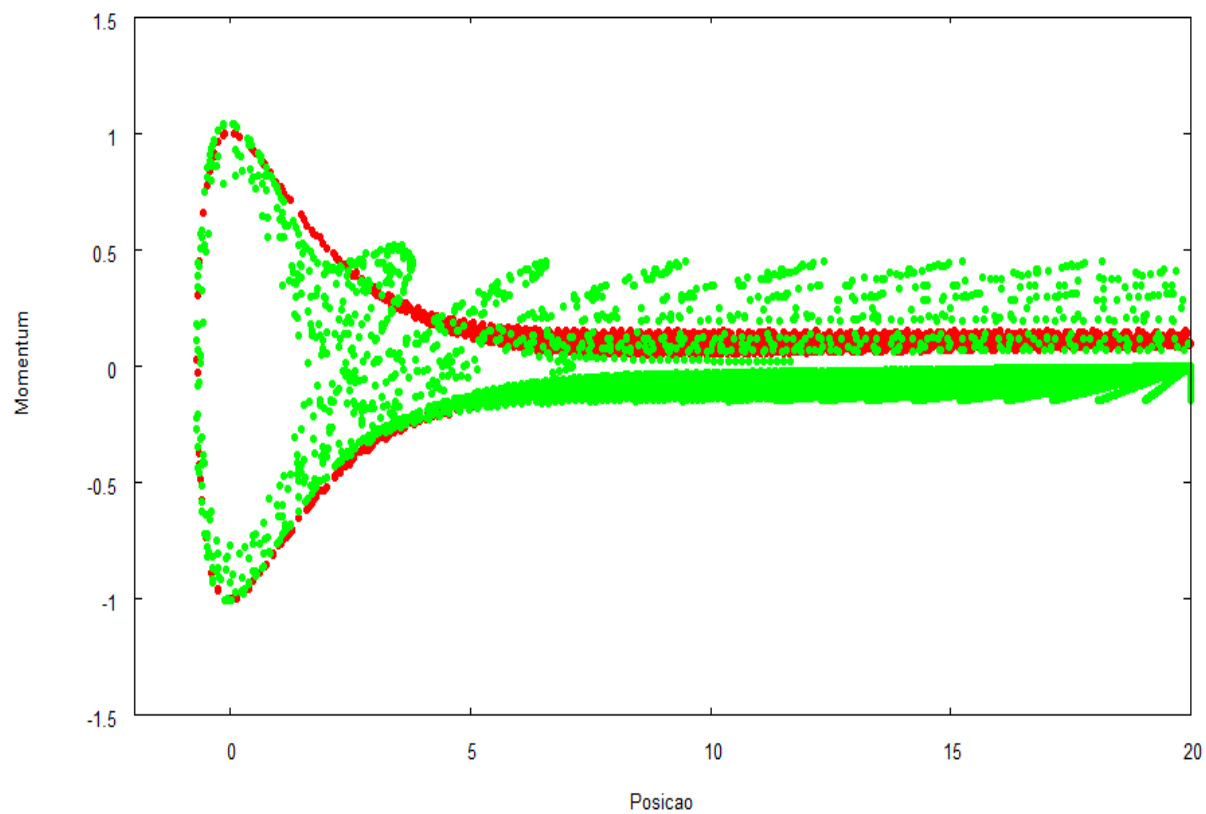


Figura 24- Comparação entre a figura 22 e 23, ou seja, a comparação entre a seção de Poincaré para a partícula estando ou não sob a ação do campo externo onde os pontos em verde representam a partícula sob a ação do campo e os pontos vermelhos para quando o campo externo é desligado.



#### 4. Conclusões

Neste trabalho estudamos a dinâmica do controle da fotoassociação entre os átomos através da aplicação de um campo externo dependente do tempo. Também evidenciamos o comportamento caótico da dinâmica de formação de moléculas na presença de um campo externo. Tal processo foi realizado utilizando o modelo do potencial de Morse sob a ação de campos externos dependentes do tempo. Este sistema pode ser utilizado para modelar moléculas diatômicas em um estado eletrônico sujeito a um laser.

Através deste trabalho conseguimos verificar e comprovar que o sistema possui uma sensibilidade em relação às condições iniciais. Essa sensibilidade nada mais é que do que a marca que o caos deixa presente, já que para pequenas mudanças nas condições iniciais conseguimos notar uma ampla mudança na dinâmica do problema.

Foi verificado também que o tempo de colisão é dependente dos parâmetros do campo externo e também conseguimos evidenciar que a duração do pulso de laser faz com que haja alterações no número de partículas que são aprisionadas no poço potencial.

## 5. Referencias Bibliográficas

- [1] E. F. Lima and J. E. M. Hornos, *Chem. Phys. Lett* (2006).
- [2] K. M. Jones, E. Tiesinga, P. D. Lett, and P. S. Julienne, *Rev. Mod. Phys.* 78, 483 (2006).
- [3] R. N. Zare, *Science* 279, 1875 (1998).
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* 269, 198 (1995).
- [5] P. M. Morse, *Phys. Rev.* 34, 57 (1929).
- [6] M. E. Goggin and P. W. Milonni, *Phys. Rev. A* 37, 796 (1988).
- [7] J.-M. Yuan and W.-K. Liu, *Phys. Rev. A* 57, 1992 (1998).
- [8] R. Graham and M. H'ohnerbach, *Phys. Rev. A* 43, 3966 (1991).
- [9] R. B. Walker and R. K. Preston, *J. Chem. Phys.* 67, 2017 (1977).
- [10] H. Rabitz, R. Vivie-Riedle, M. Motzkus, and K. Kompa, *Science* 288, 824 (2000).
- [11] A. Sethi and S. Keshvamurthy, *Phys. Rev. A* 79, 033416 (2009).
- [12] E. F. Lima and J. E. M. Hornos, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 38, 815 (2005).