



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

KAIO FELIPE RAMOS NASCIMENTO

**Simulação de Monte Carlo do transporte da luz em vapor atômico
ressonante**

João Pessoa
2023

KAIO FELIPE RAMOS NASCIMENTO

Simulação de Monte Carlo do transporte da luz em vapor atômico
ressonante

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Física, do Departamento de Física, do Centro de Ciências Exatas e da Natureza, da Universidade Federal da Paraíba, como requisito para obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Thierry Marcelino
Passerat de Silans

João Pessoa
2023

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

N244s Nascimento, Kaio Felipe Ramos.

Simulação de Monte Carlo do transporte da luz em
vapor atômico ressonante / Kaio Felipe Ramos

Nascimento. - João Pessoa, 2023.

44 p. : il.

Orientação: Thierry Marcelino Passerat de Silans.

TCC (Curso de Bacharelado em Física) - UFPB/CCEN.

1. Simulação de Monte Carlo. 2. Aprisionamento de
radiação. 3. Fluorescência perpendicular. 4.

Espalhamento Rayleigh. I. Silans, Thierry Marcelino
Passerat de. II. Título.

UFPB/CCEN

CDU 53(043.2)

FOLHA DE APROVAÇÃO

Kaio Felipe Ramos Nascimento

Simulação de Monte Carlo do transporte da luz em vapor atômico ressonante

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Física, do Departamento de Física, do Centro de Ciências Exatas e da Natureza, da Universidade Federal da Paraíba, como requisito para obtenção do título de Bacharel em Física.

Aprovado em: __25__ / __05__ / __2023__.

Banca Examinadora



Documento assinado digitalmente

THIERRY MARCELINO PASSERAT DE SILAN

Data: 05/06/2023 11:52:12-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Doutor Thierry Marcelino Passerat de Silans

Orientador

(UFPB/CCEN/Departamento de Física)



Documento assinado digitalmente

JESUS PAVON LOPEZ

Data: 05/06/2023 12:40:32-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Doutor Jesús Pavón Lopez

Membro Interno

(UFPB/CCEN/Departamento de Física)



Documento assinado digitalmente

ALEXANDRE DA SILVA ROSAS

Data: 05/06/2023 13:00:41-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Doutor Alexandre da Silva Rosas

Membro Interno

(UFPB/CCEN/Departamento de Física)

Dedico este trabalho ao Sr. Inácio Alves de Souza, um homem extraordinário que tive o imenso prazer de conhecer por cinco anos, durante os quais, este foi fonte constante de conhecimento e alegria na minha vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Renato Nascimento da Silva e Adriana Ramos Dias Nascimento, por terem me proporcionado as oportunidades e a estabilidade necessária para que eu possa seguir os meus sonhos.

Agradeço aos meus demais familiares, entre eles meu irmão, Atila Kevin, pelo seu apoio e companheirismo durante minha formação pessoal.

Agradeço meu orientador, Prof. Dr. Thierry Marcelino Passerat de Silans, pelo seu apoio, atenção, paciência e tranquilidade ao longo do projeto de pesquisa que deu fruto a este trabalho e também pela sua ajuda na escrita deste texto.

Agradeço à minha colega de pesquisa, Gessineide Sousa, por sua contribuição durante o projeto de pesquisa, principalmente na parte experimental do trabalho.

Agradeço à minha companheira, Emanuela Milena, que enriqueceu minha vida no decurso de toda minha jornada de graduação.

Agradeço, por fim, à UFPB e ao CNPQ pelo apoio financeiro na forma de bolsas de iniciação científica.

“The work may be hard, and the discipline severe; but the interest never fails, and great is the privilege of achievement.”

(John William Strutt)

RESUMO

O transporte da luz através de um vapor atômico ressonante pode ser entendido como uma caminhada aleatória, caracterizada por múltiplos eventos de espalhamento, onde durante cada evento de espalhamento, tanto a direção quanto a frequência dos fótons é redistribuída. Neste trabalho, detalhamos o desenvolvimento de uma simulação de Monte Carlo para investigar os efeitos da redistribuição de frequência durante o transporte da luz através de um vapor atômico ressonante. Realizamos simulações de Monte Carlo com o objetivo de evidenciar o espalhamento Rayleigh para dessintonias incidentes em regiões próximas à transição atômica. Comparamos espectros de fluorescência perpendicular gerados pela simulação com espectros de fluorescência perpendicular experimentais, ambos para um vapor de césio excitado em torno da linha D_1 . Ademais, comparamos espectros de fluorescência experimentais e espectros de fluorescência gerados pela simulação, considerando um coeficiente de absorção fixo, eliminando, portanto, efeitos geométricos provenientes da distribuição espacial de átomos excitados dentro do vapor. A simulação desenvolvida foi capaz de reproduzir fenômenos físicos conhecidos como seleção de velocidade e curvas de redistribuição de frequência parcial conhecidas na literatura. Além disto, conseguimos evidenciar o espalhamento Rayleigh para frequências incidentes próximas à transição atômica.

Palavras-chave: simulação de Monte Carlo; aprisionamento de radiação; fluorescência perpendicular; espalhamento Rayleigh.

ABSTRACT

The transport of light through a resonant atomic vapor can be understood as a random walk characterized by multiple scattering events, where during each scattering event both the direction and the frequency of the photons are redistributed. In this work, we detail the development of a Monte Carlo simulation to study the effects of frequency redistribution during the transport of light through a resonant atomic vapor. We perform Monte Carlo simulations to find evidence of Rayleigh scattering for incident detuning near resonance. We compare perpendicular fluorescence spectra generated by the simulation with experimental perpendicular fluorescence spectra, both for cesium vapor excited around the D_1 line. We also compare perpendicular fluorescence spectra generated by the simulation with experimental perpendicular fluorescence, considering a fixed absorption coefficient, and thus eliminating geometrical effects due to the spatial distribution of excited atoms in the vapor. The simulation was able to reproduce known physical phenomena such as velocity selection and partial redistribution curves found in the literature. We were also able to present evidence of Rayleigh scattering near the atomic transition.

Keywords: Monte Carlo simulation; radiation trapping; perpendicular fluorescence; Rayleigh scattering.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Ilustração da transição D_1 do cério.....	16
Figura 2 – Arranjo experimental para detecção de fluorescência perpendicular.....	16
Figura 3 – Visão simplificada do sistema físico e da geometria da célula.....	18
Figura 4 – Diagrama do algoritmo para simular a trajetória do fóton.....	19
Figura 5 – Gráfico do coeficiente de absorção versus dessintonia.....	21
Figura 6 – Gráfico da expressão analítica da lei de Beer-Lambert justaposta com histograma gerado pela simulação.....	22
Figura 7 – Ilustração do evento de absorção.....	23
Figura 8 – Distribuição de probabilidade da velocidade paralela justaposta com histograma gerado pela simulação.....	25
Figura 9 – Ilustração do plano de espalhamento.....	26
Figura 10 – Visão aproximada do plano de espalhamento.....	27
Figura 11 – Distribuição de probabilidade da dessintonia emitida após ocorrência de colisão atômica justaposta com histograma de valores gerados pela simulação.....	28
Figura 12 – Ilustração da geometria da célula e do processo de checagem na simulação.....	29
Figura 13 – Gráfico do espectro de emissão em todas direções após um único espalhamento..	30
Figura 14 – Perfil espectral de emissão em direção perpendicular à excitação.....	31
Figura 15 – Perfil espectral de emissão em direção perpendicular à excitação, considerando várias densidades atômicas.....	32
Figura 16 – Comparação de espectros de fluorescência experimentais e computacionais, considerando baixa densidade atômica.....	33
Figura 17 – Comparação de espectros de fluorescência experimentais e computacionais, considerando densidade atômica maior.....	34
Figura 18 – Comparação de espectros de fluorescência experimentais e computacionais, considerando alta densidade atômica.....	34
Figura 19 – Comparação de espectros de fluorescência experimentais e computacionais, para um coeficiente de absorção fixo.....	36
Figura 20 – Espectro de emissão obtido com integração numérica, para dessintonia incidente da ordem da largura Doppler.....	42
Figura 21 – Espectro de emissão obtido com integração numérica, para dessintonia incidente próxima à transição atômica.....	42

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tempo necessário para realizar 10^8 integrações numéricas da eq. (5.3) utilizando o método de Gauss-Legendre.....	41
--	----

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRIA E METODOLOGIA.....	15
2.1 DESENVOLVIMENTO INTRODUTÓRIO.....	15
2.1.1 <i>Fluorescência Perpendicular</i>	15
2.1.2 <i>Aparato Experimental</i>	15
2.1.3 <i>Simulação de Monte Carlo</i>	17
2.1.4 <i>Visão Geral do Problema</i>	17
2.2 ALGORITMO DA SIMULAÇÃO	20
2.2.1 <i>Transmissão</i>	20
2.2.1.1 <i>Método da Transformação Inversa</i>	20
2.2.1.2 <i>Distribuição de Tamanho do Passo</i>	20
2.2.1.3 <i>Checagem da Transmissão</i>	22
2.2.2 <i>Evento de Absorção</i>	22
2.2.2.1 <i>Transições Atômicas</i>	22
2.2.3.1 <i>Seleção de Velocidade</i>	23
2.2.3.2 <i>Colisões Atômicas</i>	25
2.2.3 <i>Evento de Emissão</i>	26
2.2.4 <i>Checagem</i>	28
3 RESULTADOS.....	30
3.1 REDISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIA	30
3.2 ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA PERPENDICULAR	33
3.3 RESULTADOS PARA COEFICIENTE DE ABSORÇÃO FIXO	35
4 CONCLUSÃO	37
REFERÊNCIAS	39
APÊNDICE A – MÉTODO ALTERNATIVO PARA CÁLCULO DA REDISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIA.....	41

1 INTRODUÇÃO

O transporte da luz através de um vapor ressonante pode ser entendido como sendo uma caminhada aleatória realizada pelos fótons dentro do volume do vapor. Este fenômeno leva o nome de *aprisionamento de radiação* e é caracterizado por sucessivos eventos de absorção e emissão espontânea dos fótons pelos átomos que constituem o vapor. Chamamos de espalhamento cada sequência de absorção e emissão, e chamamos de passo da caminhada aleatória a distância percorrida pelo fóton entre dois espalhamentos.

O aprisionamento de radiação foi amplamente estudado historicamente em áreas como a astrofísica [1], no desenvolvimento de lâmpadas de vapor [2] e recentemente tornou-se de interesse em estudos acerca da superdifusão de fótons [3, 4].

Uma característica importante do aprisionamento de radiação é a redistribuição de frequência no espalhamento de um fóton pelo vapor. Após um evento de espalhamento, a dessintonia do fóton emitido, no referencial do laboratório, pode ser diferente da dessintonia absorvida. Em particular, a dessintonia do fóton emitido passa a seguir distribuição de probabilidade que depende tanto da dessintonia incidente quanto das características do vapor, ou seja, ocorre uma redistribuição de frequência.

O fenômeno de redistribuição de frequência se deve ao efeito Doppler. Consequentemente, o espectro de dessintonias emitidas depende da velocidade dos átomos que compõem o vapor. No fenômeno da absorção, a dessintonia do fóton incidente é diferente no referencial atômico. Deste modo, para determinada dessintonia incidente, a absorção é feita preferencialmente por átomos com uma velocidade tal que, devido ao efeito Doppler, a dessintonia incidente no referencial atômico esteja na ressonância. Este fenômeno leva o nome de *seleção de velocidade*.

Quando temos um vapor com baixa densidade atômica, podemos considerar que estamos em um regime de ausência de colisões atômicas. Na ausência de colisões atômicas, as colisões entre átomos e fótons são elásticas e, no referencial atômico, a emissão ocorre na mesma dessintonia que a absorção. Em vapores atômicos diluídos, então, para uma dessintonia incidente em torno da ressonância, o perfil espectral de emissão é centrado na ressonância e alargado devido ao efeito Doppler.

Se considerarmos uma dessintonia incidente longe da ressonância, a probabilidade de se encontrar um átomo com uma velocidade alta o suficiente para fazer com que, no referencial atômico, a dessintonia incidente esteja na ressonância, é muito pequena. Neste caso, a absorção ocorre fora da ressonância no referencial atômico, não há seleção de velocidade, e a emissão acontece em torno da dessintonia incidente, fora da ressonância. Nesta situação existe então uma correlação entre dessintonia incidente e dessintonia emitida [5].

Este tipo de espalhamento onde não há seleção de velocidade e o espectro de emissão é centrado em torno da dessintonia de absorção é chamado de *espalhamento Rayleigh*. O espalhamento Rayleigh por um vapor atômico foi verificado para excitações muito longe da ressonância [6]. Há uma escassez de evidências para o espalhamento Rayleigh por um vapor atômico, para dessintonias incidentes próximos à ressonância.

Ademais, a redistribuição da frequência pode resultar em voo de Lèvy dos fótons, diretamente afetando as propriedades do transporte da luz através do vapor e transformando a sua propagação em um processo superdifusivo [7, 8].

Em vista disto, foi realizada uma montagem experimental que consiste na excitação de um vapor atômico ressonante de césio por um laser de 894 nm, em ressonância com a transição D_1 do césio. Com este experimento, foi possível obter informações sobre a redistribuição da

frequência no espalhamento de um fóton por um vapor atômico, através de medidas experimentais de fluorescência em uma direção perpendicular à direção de excitação.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma simulação computacional que modelasse o transporte da luz através de um vapor atômico. Utilizamos o método de Monte Carlo para simular a caminhada aleatória dos fótons que permeiam o volume do vapor, tanto em um regime de baixa densidade atômica e, portanto, ausência de colisões entre os átomos, quanto considerando colisões atômicas.

Com esta simulação, pretendemos evidenciar fenômenos como a redistribuição de frequência, seleção de velocidade e espalhamento Rayleigh por meio de espectros de fluorescência, perpendicular à direção da excitação, gerados pela simulação. Mais especificamente, propomos utilizar os espectros de fluorescência gerados computacionalmente para corroborar os espectros de fluorescência obtidos experimentalmente. E assim, pretende-se evidenciar o fenômeno de espalhamento Rayleigh numa região mais próxima à transição atômica. Ademais, uma das vantagens da simulação é o fato de que temos acesso a informações sobre a velocidade dos átomos excitados e também sobre as frequências dos fótons emitidos, informações estas que não são obtidas pelo experimento.

Segmentamos este trabalho em quatro capítulos. No primeiro capítulo, “Introdução”, discutimos a importância do estudo do transporte da luz através de vapores atômicos, contextualizando historicamente algumas de suas aplicações em diversas áreas da física. Neste capítulo também apresentamos a motivação e os objetivos do trabalho.

No segundo capítulo, titulado de “Fundamentação Teórica e Metodologia”, explicamos mais a fundo o sistema físico que estamos simulando computacionalmente e delineamos passo a passo o algoritmo da nossa simulação, explicitando a física de cada passo e os métodos computacionais e matemáticos empregados a cada passo.

No capítulo 3, “Resultados”, apresentamos os dados que obtivemos com nossa simulação e nossa interpretação dos mesmos com base nos modelos teóricos utilizados.

Por fim, no capítulo 4, “Conclusão”, discutimos os resultados do trabalho em comparação com os objetivos inicialmente propostos. Fazemos também uma discussão acerca dos desafios no desenvolvimento da simulação e apresentamos nossa perspectiva acerca de possíveis aprimoramentos.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRIA E METODOLOGIA

2.1 DESENVOLVIMENTO INTRODUTÓRIO

2.1.1 *Fluorescência Perpendicular*

Para um fóton com dessintonia incidente δ , a distância média percorrida por este, antes de ser absorvido pelo vapor, é dada por [7]:

$$L_m = \frac{1}{N\sigma(\delta)}, \quad (2.1)$$

onde N é a densidade atômica e $\sigma(\delta)$ é a seção de choque da colisão fóton-átomo. Podemos controlar a temperatura do vapor no experimento e podemos definir diretamente a densidade do vapor na simulação. Portanto, é possível impor que $L_m = L/2$, onde L é a espessura da célula.

Consideramos uma janela posicionada numa parede lateral da célula, perpendicular à direção de excitação, centrada em $L/2$. Caso ocorra correlação entre dessintonia emitida δ' e dessintonia incidente δ , teremos $\sigma(\delta) \approx \sigma(\delta')$ e o fóton terá uma boa probabilidade de escapar da célula, teremos então uma alta intensidade de fluorescência perpendicular. Caso contrário, ocorrendo redistribuição de frequência próximo do centro da linha, $\delta' < \delta$ e temos $\sigma(\delta') \gg \sigma(\delta)$, o fóton, portanto, tem uma probabilidade muito pequena de escapar da célula, resultando em uma baixa intensidade de fluorescência [5].

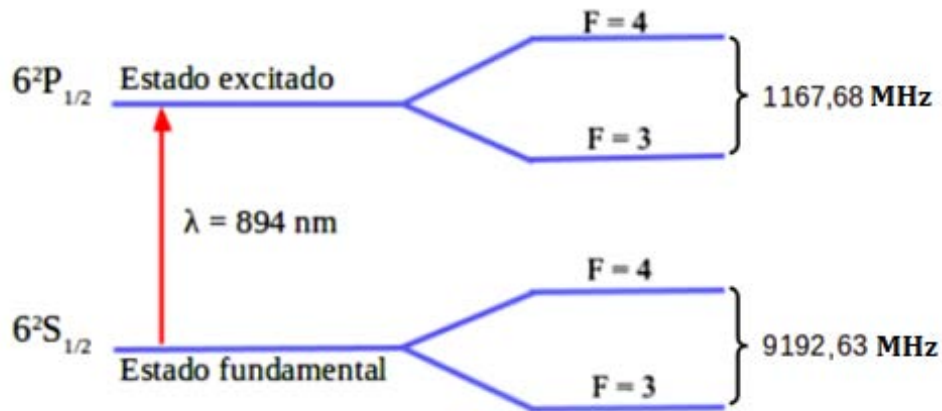
Quando átomos excitados sofrem colisão atômica, há uma eliminação da correlação entre dessintonias absorvidas e emitidas e o fóton é emitido com dessintonia em torno da ressonância de transição atômica seguindo uma Lorentziana.

Em um experimento onde detectamos a fluorescência perpendicular à excitação, esperamos, então, observar um sinal que carregue informação tanto sobre a possível correlação entre dessintonias incidentes e dessintonias absorvidas, quanto sobre colisões atômicas no vapor. Espera-se observar um sinal de fluorescência forte para excitações longe da ressonância e um sinal menos intenso para excitações em torno do centro da linha.

2.1.2 *Aparato Experimental*

O experimento abordado neste texto, consiste em excitar um vapor atômico ressonante de cério, contido numa célula com espessura de 1 cm, com um Laser de diodo, com comprimento de onda 894 nm (transição D1 do cério), conectado a um sistema de controle temperatura e corrente ajustados em 21° C e 66.30 mA. A finalidade do arranjo experimental é detectar o espectro de fluorescência perpendicular à direção de excitação. A varredura da frequência do feixe laser é feita em torno das transições $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3,4)$, com o pico da transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$ centrado no zero e o pico da transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3)$ centrado em -1168 MHz (ver Fig. 1).

Figura 1: Estrutura de níveis correspondendo à transição D1 do cério.

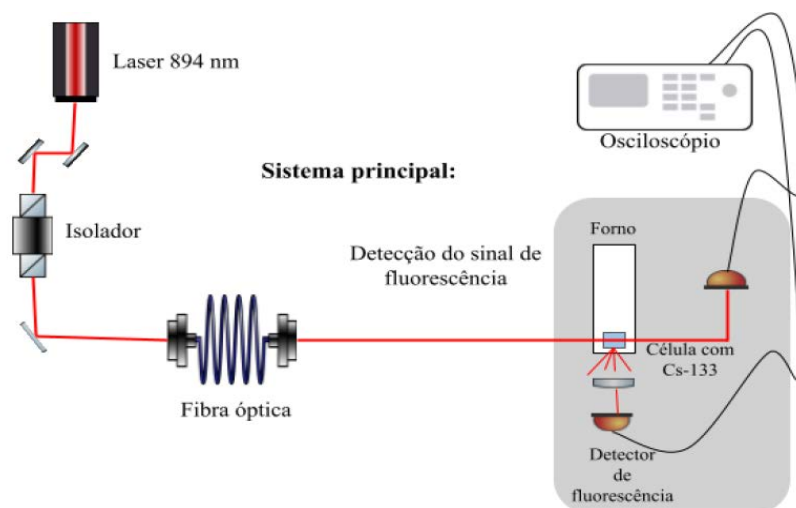


Após sair da fonte (ver Fig. 2), o laser passa por um isolador, para impedir que ocorra realimentação do laser. Uma parte do feixe é desviada para um sistema auxiliar, composto por um interferômetro Fabry-Pérot e de uma absorção saturada, que serve para fazer calibrações necessárias acerca da dessintonia do laser. A outra parte do laser é enviada ao sistema principal, de nosso interesse, através de uma fibra óptica, que é usada para obter um feixe monomodo e bem colimado.

Depois de sair da fibra óptica, o feixe laser passa pela célula que contém o vapor de cério. A célula contendo o vapor de cério é posicionada dentro de um forno com dois sistemas de aquecimento, um para a janela da célula e outro para o reservatório, com o propósito de evitar inversão térmica. Assim, obtemos um vapor de cério, cuja densidade atômica podemos controlar, controlando a temperatura do reservatório.

O laser excita o vapor confinado na célula com uma potência fixa em $0.47 \mu\text{W}$ e uma intensidade de 1.49 mW/cm^2 , abaixo da intensidade de saturação da linha D1, e, portanto, temos um regime linear para o perfil de absorção do vapor. Fazemos então uma série de medidas da fluorescência na direção perpendicular à excitação, para várias densidades atômicas e dessintonias incidentes.

Figura 2: Arranjo Experimental para detectar fluorescência perpendicular após a excitação do vapor atômico de cério.



2.1.3 Simulação de Monte Carlo

A simulação de Monte Carlo é uma técnica onde tenta-se seguir a “dependência temporal” de um sistema cuja evolução não procede de maneira determinística, mas sim de maneira estocástica, dependente de uma sequência de números aleatórios que são gerados durante a simulação. Os resultados de duas simulações do mesmo sistema, utilizando uma sequência de números aleatórios diferentes não serão idênticos, porém originarão valores que concordam entre si, dentro de uma margem de erro estatístico [9].

Simulações de Monte Carlo podem ser aplicadas no tratamento de diversos problemas. Desde o fim da segunda guerra mundial a versatilidade desta técnica foi notada por cientistas como Ulam e Metropolis, que enfatizavam as possíveis aplicações desta técnica em campos como mecânica estatística, transporte de radiação, transferência de calor, etc. [10, 11, 12]. O transporte de radiação em geral, o que inclui, portanto, o fenômeno de aprisionamento de radiação, é um processo estocástico passível a ser tratado por método de Monte Carlo. Podemos delinear, de maneira geral, os passos a serem tomados para realizar uma simulação de Monte Carlo acerca do transporte de radiação, da seguinte forma [13]:

1 – Descrever a fonte de radiação. Utilizar esta descrição para especificar os valores iniciais e as coordenadas iniciais da simulação.

2 – Formular a trajetória da radiação e as interações entre a radiação e o meio através de amostras da função de distribuição de probabilidade da distância percorrida pela radiação e as demais distribuições de probabilidades que regem as interações entre a radiação e o meio.

3 – Repetir o passo 2 até que a radiação não seja mais de nosso interesse.

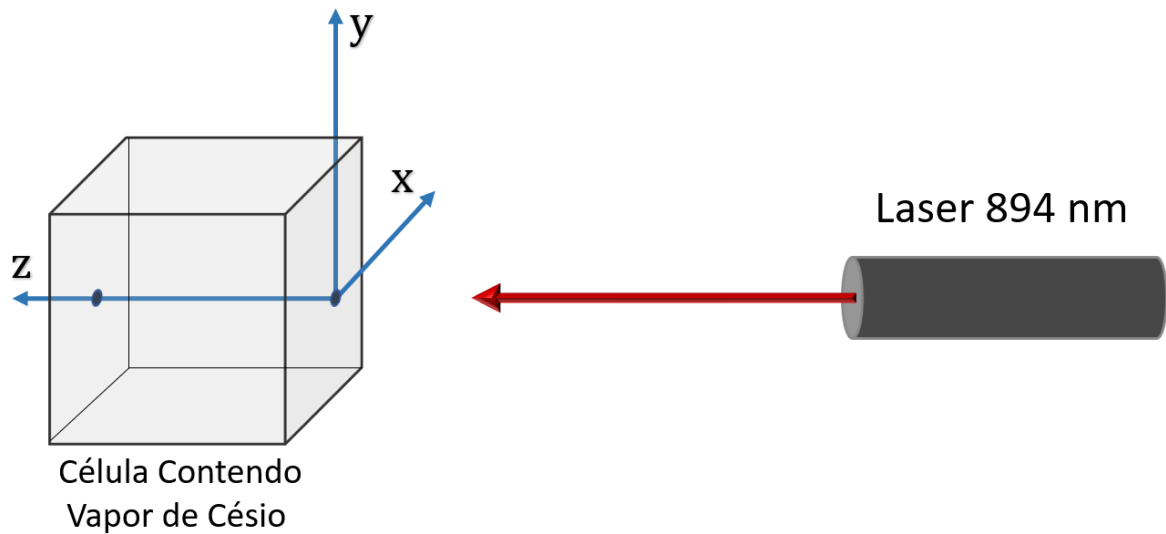
4 – Durante as iterações do passo dois, realizar contagens de todas as grandezas/eventos de nosso interesse.

2.1.4 Visão Geral do Problema

O sistema físico descrito pelo arranjo experimental exposto anteriormente foi tratado computacionalmente, com o uso da técnica de Monte Carlo, da seguinte maneira: Consideramos uma célula finita na forma de um cubo, de lado L , contendo vapor de césio a uma densidade atômica N (ver Fig. 3).

Consideramos que existe uma janela quadrada transparente, com lado L_j e centrada em uma parede da célula, perpendicular ao eixo de excitação. Quando um fóton escapa da célula através desta janela perpendicular, contamos isto como uma ocorrência de fluorescência perpendicular e guardamos informações relevantes sobre o fóton que escapou. Após simular a trajetória dos fótons, utilizamos estes dados para gerar um espectro de fluorescência perpendicular.

Figura 3: Visão geral do problema e geometria da célula



O feixe laser excita a célula, incidindo em uma abertura localizada na origem do sistema de coordenadas e se propaga na direção paralela ao eixo de excitação. Consideramos o eixo de excitação como sendo o eixo z em coordenadas cartesianas e consideramos que a parede da célula que contém a janela está no plano $x = L/2$.

O feixe laser que excita o vapor confinado no volume da célula é de baixa intensidade, portanto, pode ser tratado como um feixe de fótons não-interagentes. Consequentemente, estes são tratados individualmente na simulação. Calculamos a caminhada aleatória de cada fóton sucessivamente em coordenadas esféricas.

Na simulação, consideramos que um número finito de fótons será lançado em direção à célula. A caminhada aleatória de um fóton acaba quando este escapa da célula ou é absorvido por uma de suas paredes. Como apenas ocorrências de fluorescência perpendicular são de nosso interesse, tanto os fótons que escapam da célula por meio de transmissão ao longo do eixo longitudinal sem sofrer espalhamento, quanto os fótons que são absorvidos por alguma outra parede da célula são descartados. Quando um fóton é descartado ou sofre fluorescência perpendicular, paramos de acompanhar sua trajetória e então consideramos que outro fóton é lançado na célula. Este processo se repete até que as trajetórias de todos os fótons inicialmente considerados pela simulação sejam calculadas.

Em luz do que foi apresentado sobre o problema, podemos formular um algoritmo para a simulação do sistema físico do arranjo experimental. A fonte de radiação é formulada da seguinte maneira: é um laser com comprimento de onda 894 nm, que consideramos como um canhão de fótons contendo um número finito de fótons a serem lançados, tratados individualmente dentro do vapor, que incidem na célula com uma dessintonia incidente δ_i . Para descrever a trajetória destes fótons no vapor e sua interação com os átomos que compõem o vapor podemos segmentar este processo em 4 etapas sucessivas: Transmissão, Absorção, Emissão e Checagem.

A etapa de transmissão será elaborada na seção 2.2.1. Nesta etapa, conferimos a possibilidade de o fóton ter sido transmitido pela célula, sem sofrer nenhum evento de absorção. Neste caso o fóton é imediatamente descartado. Caso contrário, o fóton é absorvido por algum átomo que compõe o vapor e partimos para a etapa de absorção.

A etapa de absorção será elaborada na seção 2.2.2. Nesta etapa, sorteamos em qual das transições hiperfinas da linha D1 do césio o fóton será absorvido, utilizamos uma distribuição

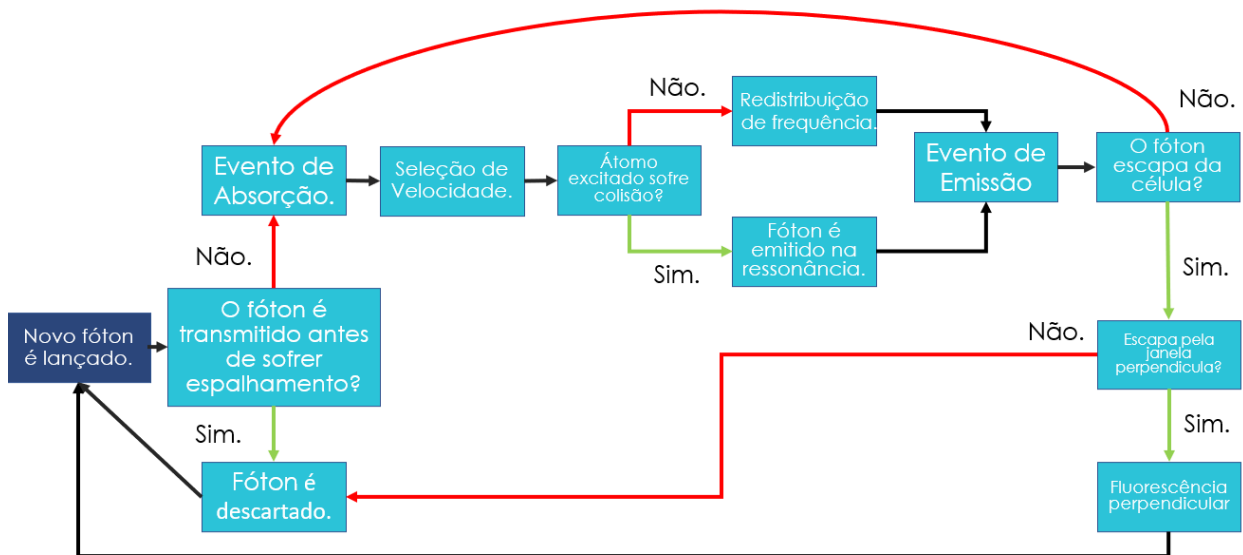
de probabilidade para sortear a velocidade do átomo que absorve o fóton, levando em consideração o fenômeno de seleção de velocidade. Ao final desta etapa, seguimos para a etapa de emissão.

A etapa da emissão será elaborada na seção 2.2.3. Nesta etapa, caso tenha ocorrido colisão atômica, julgamos que o fóton tem sua dessintonia redistribuída seguindo um perfil Lorentziano com alargamento colisional e há uma eliminação de qualquer possível efeito de correlação entre dessintonia absorvida e emitida. Na ausência de colisões, utilizamos a velocidade do átomo excitado para calcular o efeito de redistribuição de frequência do fóton emitido devido ao efeito Doppler. Em ambos casos, sorteamos a nova direção do fóton emitido, considerando que o vapor é um meio isotrópico.

A etapa final, elaborada na seção 2.2.4, é a de checagem. Nesta etapa checamos se o fóton escapa ou não da célula. Caso escape, checamos se este escapou através da janela perpendicular. Caso não escape, isto significa que o fóton foi absorvido novamente e retornamos à etapa de absorção. Quando o fóton escapa através da janela perpendicular, guardamos isto na simulação como um evento de fluorescência perpendicular. Quando o fóton escapa do volume da célula, porém sua trajetória não passa pela janela perpendicular, dizemos que o fóton foi absorvido por alguma parede da célula e o descartamos.

Neste algoritmo, ilustrado na figura 4, as etapas de absorção e emissão se repetem em sequência até que um fóton escape pela janela perpendicular ou seja descartado. A rotina inteira é executada N_f vezes, onde N_f é número de fótons cuja trajetória ao longo do vapor desejamos simular. À medida que N_f aumenta, a precisão estatística da simulação melhora.

Figura 4: Diagrama ilustrando algoritmo da simulação da trajetória do fóton ao longo do vapor



2.2 ALGORITMO DA SIMULAÇÃO

2.2.1 Transmissão

2.2.1.1 Método da Transformação Inversa

O método da transformação inversa, as vezes chamado de transformada de Smirnov, é um método para gerar números pseudoaleatórios que seguem uma determinada distribuição de probabilidade, a partir do inverso de sua função de distribuição acumulada [14].

Seja $F(x)$, $x \in \mathbb{R}$ uma função de distribuição acumulada arbitrária, sabemos que $F : \mathbb{R} \rightarrow [0,1]$ é, por definição, monótona e positiva. Seja $F^{-1} : [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$ o inverso de F . Temos então $F(F^{-1}(x)) = x$. Devido ao fato de F ser monótona, em geral, se verifica que $F^{-1}(F(x)) \leq x$ e que, para algum $y \in [0,1]$, $F(F^{-1}(y)) \geq y$.

Agora, seja U uma variável aleatória contínua e uniformemente distribuída no intervalo $[0,1]$ e seja X uma variável aleatória tal que

$$X = F^{-1}(U), \quad (2.2)$$

então sua função de distribuição acumulada $F_X(x)$ é dada por:

$$F_X(x) = \Pr(X \leq x) = \Pr(F^{-1}(U) \leq x), \quad (2.3)$$

podemos escrever $U = F(F^{-1}(U))$ e, portanto, se $F^{-1}(U) \leq x$, então $U \leq F(x)$. Similarmente, escrevemos $x = F^{-1}(F(x))$ e, portanto, se $U \leq F(x)$, então $F^{-1}(U) \leq x$. Daí concluímos, que:

$$\Pr(F^{-1}(U) \leq x) = \Pr(U \leq F(x)), \quad (2.4)$$

$$F_X(x) = \Pr(U \leq F(x)), \quad (2.5)$$

$$F_X(x) = F(x). \quad (2.6)$$

Ou seja, dada uma distribuição de probabilidade contínua e invertível, podemos sortear números aleatórios que seguem esta distribuição de probabilidade.

2.2.1.2 Distribuição de Tamanho do Passo

A probabilidade de que um fóton com dessintonia δ tome um passo de tamanho l é dado por uma lei de Beer-Lambert [15].

$$P(l) \propto \exp(-\alpha(\delta)l), \quad (2.7)$$

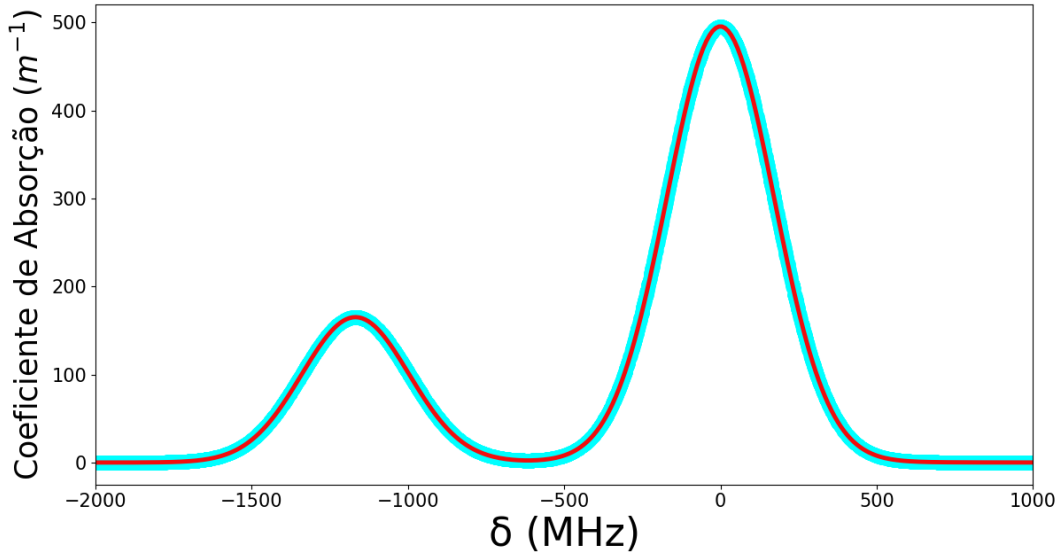
onde $\alpha(\delta)$ é o coeficiente de absorção do vapor para uma dessintonia δ . Esta grandeza é proporcional à densidade do vapor através da relação:

$$\alpha(\delta) = N\sigma(\delta). \quad (2.8)$$

Através do experimento, obtivemos curvas experimentais de coeficiente de absorção versus dessintonia para várias densidades atômicas. Os valores de $\alpha(\delta)$ obtidos com essas

curvas são discretizadas, porém o intervalo entre os valores é pequeno o suficiente para que possamos, por meio de interpolação, obter um regime contínuo de coeficientes de absorção (ver Fig. 5).

Figura 5: Gráfico do coeficiente de absorção versus dessintonia, considerando densidade atômica $N = 3.1 \cdot 10^{11}$ átomos/cm³. A linha sólida interna representa os dados experimentais. O contorno azul representa os valores calculados, através da interpolação dos dados experimentais.



Sendo assim, temos então uma distribuição de probabilidade contínua e invertível, o que significa que podemos aplicar o método de transformação inversa e obter uma maneira de gerar números aleatórios que sigam esta distribuição de probabilidade de tamanho de passo, nos permitindo sortear o tamanho de cada passo dado pelos fótons com dessintonia δ .

Seja $F_l(\rho)$ a distribuição acumulada que dá a probabilidade do fóton tomar um passo de tamanho entre 0 e ρ , temos:

$$F_l(\rho) = \int_0^\rho \exp(-\alpha(\delta)l) dl,$$

$$F_l(\rho) = \frac{1 - e^{-\alpha\rho}}{\alpha},$$

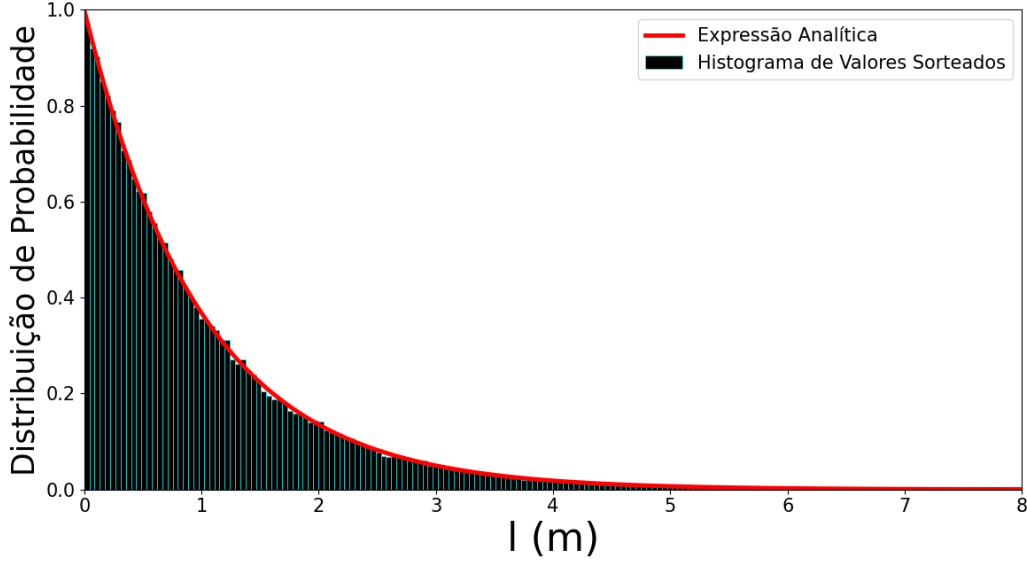
invertendo esta distribuição acumulada, temos então:

$$\rho = -\frac{\ln(1 - F_l(\rho))}{\alpha}. \quad (2.9)$$

Podemos então, com o uso de algum gerador de números pseudoaleatórios, sortear uma variável aleatória uniformemente distribuída $F_l(\rho)$ entre 0 e 1 e a partir da equação (2.9), obter um tamanho de passo que segue a distribuição de probabilidade dada na equação (2.7) (ver Fig. 6). Notamos que há uma singularidade em ρ quando $F_l(\rho)$ é exatamente 1. Porém, com um

bom gerador de números pseudo-aleatórios, a chance de obtermos o exatamente 1 quando sorteamos uma variável contínua entre 0 e 1 com distribuição uniforme é desprezível.

Figura 6: Distribuição de probabilidade descrita pela lei de Beer-Lambert (linha vermelha) justaposta com histograma de tamanhos de passo sorteados pela simulação, considerando coeficiente de absorção $a = 1 \text{ m}^{-1}$.



2.2.1.3 Checagem da Transmissão

Na primeira etapa do algoritmo, consideramos que o laser lança um fóton com dessintonia incidente no referencial do laboratório δ , em direção a célula, ao longo do eixo z . Utilizamos a equação (2.9) para sortear o tamanho ρ do passo, de acordo com a distribuição de probabilidade expressa na equação (2.7).

Nós verificamos então se o tamanho do passo é maior do que o comprimento longitudinal L da célula. Se este for o caso, dizemos que o fóton é transmitido pela célula sem sofrer espalhamento. Descartamos o fóton e lançamos um fóton novo em direção à célula. Caso $\rho < L$, isto significa dizer que o fóton foi absorvido por algum átomo do vapor no ponto $(0, 0, \rho)$ em coordenadas cartesianas e passamos para próxima etapa do algoritmo.

2.2.2 Evento de Absorção

2.2.2.1 Transições Atômicas

Neste trabalho, consideramos apenas as transições $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3,4)$ pois a distância entre elas, de 1168 MHz, é relativamente baixa quando comparada à distância de 9192 MHz entre os estados hiperfinos fundamentais (ver na Fig. 1 a estrutura de níveis). Isto significa que um fóton emitido nas transições $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3,4)$ não tem chance de ser absorvido nas transições $6S_{1/2}(F = 4) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3,4)$, portanto, não são incluídas na simulação.

Calculamos em qual transição determinado fóton será absorvido a partir de medidas experimentais do coeficiente de absorção do vapor. Em nosso sistema o coeficiente de absorção total a_T pode ser escrito como

$$a_T = a_{34} + a_{33}, \quad (2.10)$$

onde a_{3i} é a contribuição ao coeficiente de absorção total devido à transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = i)$. O coeficiente de absorção de um meio está relacionado com a taxa de probabilidade de absorção. Logo, a probabilidade de absorção pode ser escrita como

$$P = P_{34} + P_{33}. \quad (2.11)$$

Após um evento de absorção, calculamos qual o coeficiente de absorção total para a frequência em que o fóton foi absorvido. Feito isso, calculamos a probabilidade de o fóton ter sido absorvido em determinada transição atômica a partir da contribuição desta para o coeficiente de absorção total:

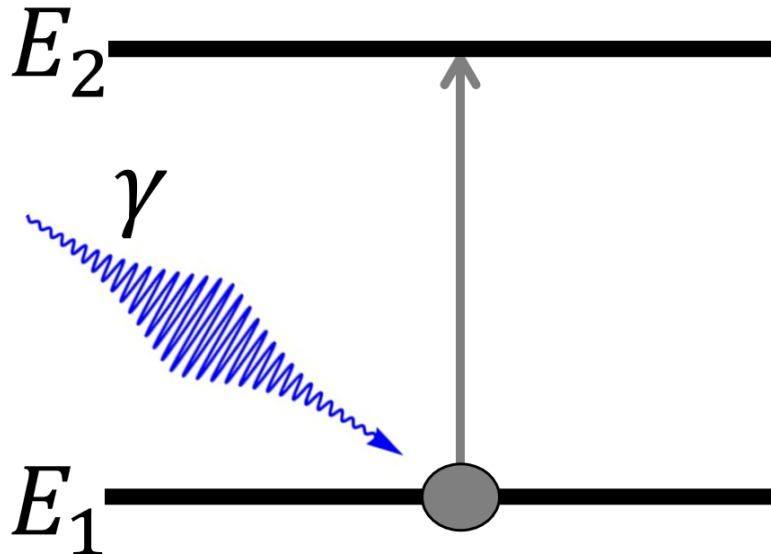
$$P_{3i} = \frac{a_{3i}}{a_T}, \quad (2.12)$$

sorteamos então em qual transição atômica o fóton foi absorvido. A transição em qual o fóton é absorvido nos dá a frequência de transição δ_T , parâmetro que é utilizado ao longo da simulação. Quando o fóton é absorvido na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$, temos $\delta_T = 0$ e para a transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3)$, $\delta_T = -1168$ MHz.

2.2.3.1 Seleção de Velocidade

O processo de absorção ocorre da seguinte forma: Um átomo em um certo estado de energia absorve um fóton com dessintonia δ e passa para um estado excitado, como ilustrado na figura 7, onde a letra γ denota o fóton.

Figura 7: Ilustração do evento de absorção.



Porém, nem todos os átomos do vapor têm a mesma probabilidade de serem excitados. Os átomos que, em seu referencial, veem os fótons em ressonância com a transição atômica, têm uma probabilidade maior de serem excitados. Isto significa que, para um determinado átomo excitado, o componente da sua velocidade paralelo à trajetória do fóton $v_{\parallel}$ depende da dessintonia incidente no referencial do laboratório δ .

Em geral, a distribuição de probabilidade de $v_{\parallel}$ é definida pela dessintonia incidente pela seguinte expressão [16, 17].

$$P(v_{\parallel}) \propto \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4(\delta - \delta_T - v_{\parallel}/\lambda)^2} \exp(-v_{\parallel}^2/u^2), \quad (2.13)$$

aqui δ_T é a frequência de transição atômica, u é a velocidade mais provável de um átomo do vapor e o fator Γ é a largura homogênea, definida da seguinte forma:

$$\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_c, \quad (2.14)$$

onde Γ_c é o alargamento colisional e Γ_n é a largura natural, dada por:

$$\Gamma_n = \frac{1}{2\pi\tau}, \quad (2.15)$$

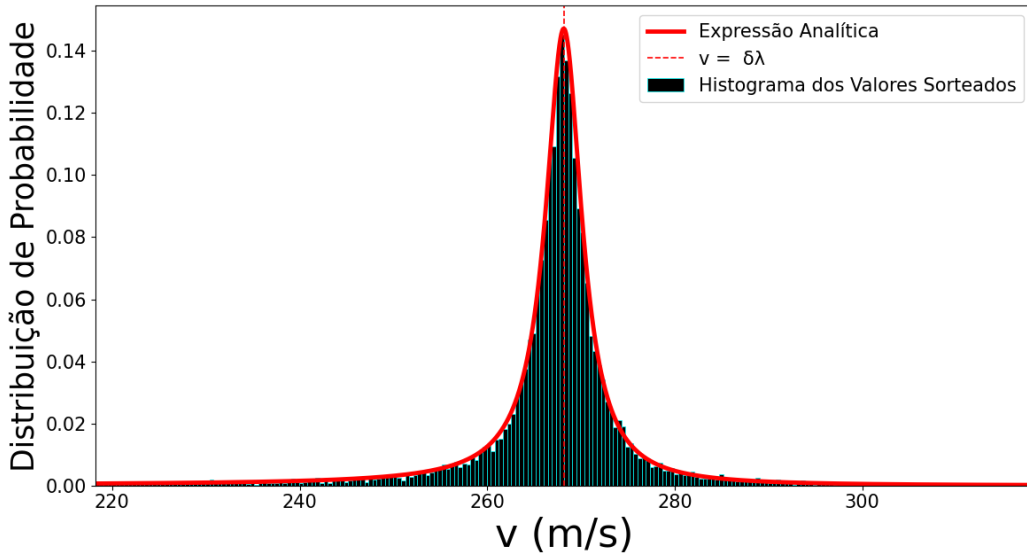
com $\tau = 30.5$ ns, o tempo de vida do estado excitado.

A equação (2.13) descreve uma distribuição de probabilidade contínua invertível, o que significa que podemos calcular sua função de distribuição acumulada, utilizar o método da transformação inversa para sortear variáveis aleatórias que sigam a distribuição de probabilidade associada e, portanto, simular o componente paralelo da velocidade dos átomos excitados do vapor. Entretanto, há uma diferença entre a distribuição de probabilidade da equação (2.13) e a da equação (2.7), a qual aplicamos uma transformada inversa na seção anterior. A função de distribuição acumulada da equação (2.13):

$$F_{v_{\parallel}}(v_{\parallel}) \propto \int_0^{v_{\parallel}} \frac{1}{1 + \frac{4(\delta - \delta_T - v_{\parallel}/\lambda)^2}{\Gamma^2}} \exp(-v_{\parallel}^2/u^2) dv_{\parallel}, \quad (2.16)$$

só pode ser avaliada numericamente. Utilizamos então um método de quadratura numérica para gerar uma curva com valores da equação (2.16) correspondentes a diversos valores de $v_{\parallel}$. Efetivamente, estamos realizando o mesmo processo de transformação inversa descrito anteriormente, porém numericamente. Notamos que quando temos uma dessintonia próxima ao centro da linha para determinada transição atômica $F \rightarrow F'$, a distribuição na equação (2.7) favorece absorção por átomos com $v_{\parallel} = (\delta - \delta_T)\lambda$, como é ilustrado na figura 8. Este é o fenômeno de seleção de velocidade.

Figura 8: Justaposição da distribuição de probabilidade do componente de velocidade do átomo paralelo à trajetória do fóton incidente (linha vermelha) com histograma de valores de velocidades paralelas sorteadas pela simulação (caixas azuis). Considerando $\delta = 300$ MHz e $\delta_T = 0$.



A dessintonia do fóton incidente no referencial atômico é dada por:

$$\delta_A = \delta - \frac{v_{\parallel}}{\lambda}. \quad (2.17)$$

Podemos notar que a distribuição da equação (2.13) favorece dessintonias incidentes no referencial atômico tal que $\delta_A \approx \delta_T$. As velocidades dos átomos não-excitados do vapor seguem uma distribuição de probabilidade Maxwell-Boltzmann usual onde u é a velocidade mais provável de um átomo. Isto significa que para uma dessintonia incidente no referencial do laboratório δ muito longe da ressonância, a probabilidade de encontrarmos um átomo com velocidade $v_{\parallel} = (\delta - \delta_T)\lambda \gg u$ é desprezível, consequentemente, $P(v_{\parallel})$ é dominada por uma distribuição Maxwell-Boltzmann, a absorção ocorre fora da ressonância no referencial atômico e não ocorre seleção de velocidade [5,16,17].

Os componentes da velocidade dos átomos excitados perpendiculares à trajetória do fóton $v_{\perp}$ são independentes da dessintonia incidente δ e seguem uma distribuição de Maxwell-Boltzmann, à qual aplicamos a técnica da transformada inversa para sortear $v_{\perp}$ na simulação.

2.2.3.2 Colisões Atômicas

No regime de densidades atômicas mais elevadas, torna-se necessário considerar o efeito das possíveis colisões atômicas sofridas por um átomo excitado. Durante as colisões, a

excitação pode passar de um átomo excitado para um átomo no estado fundamental [18, 19]. Como consequência deste processo, o efeito de seleção de velocidade devido à dessintonia incidente é eliminado [19]. Além disto, colisões causam um alargamento da linha de espessura dado por:

$$\Gamma_c = \frac{1}{2\pi\tau_c}, \quad (2.18)$$

onde τ_c é o intervalo entre colisões sucessivas. Na simulação a probabilidade de ocorrer uma colisão é dada por:

$$P_c = \frac{\Gamma_c}{\Gamma}. \quad (2.19)$$

Caso o átomo sofra colisão, nós calculamos a velocidade do novo átomo excitado aplicando o processo de transformação inversa a uma distribuição Maxwell-Boltzmann isotrópica. Consideramos que o novo átomo excitado tem a mesma probabilidade de emitir o fóton dentre as transições $6S_{1/2}(F=3) \rightarrow 6P_{1/2}(F'=3,4)$ [20, 21].

2.2.3 Evento de Emissão

Cada fóton absorvido tem um vetor unitário de direção incidente $\hat{n}$, o fóton é então emitido em uma nova direção, distribuída isotropicamente, com vetor unitário de direção emitida $\hat{n}'$. Ambos estes vetores estão contidos no plano π , ilustrado nas figuras 9 e 10, que chamamos de plano de espalhamento do fóton.

Figura 9: Ilustração do plano π .

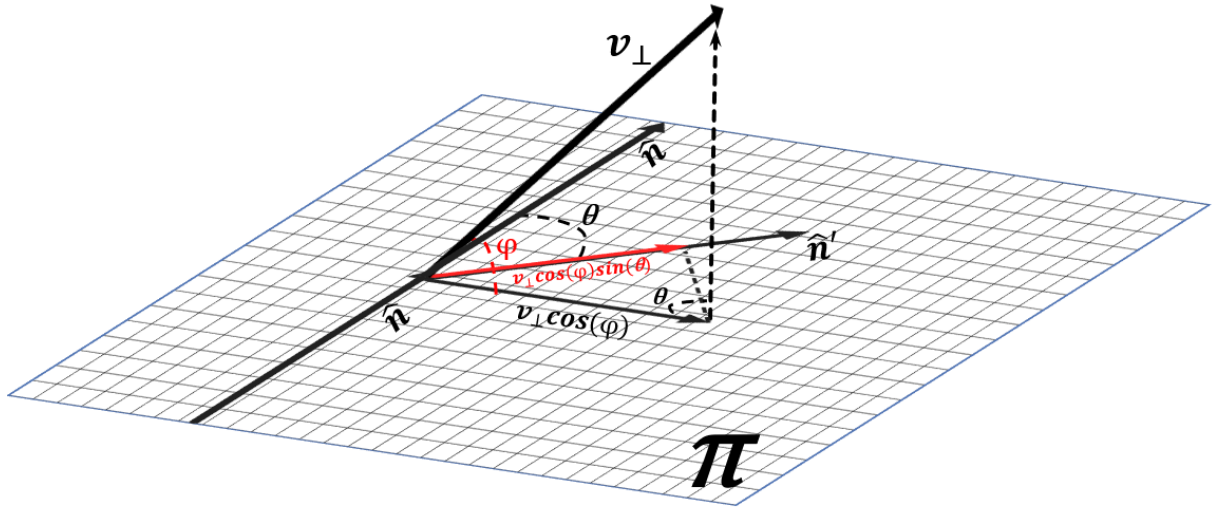
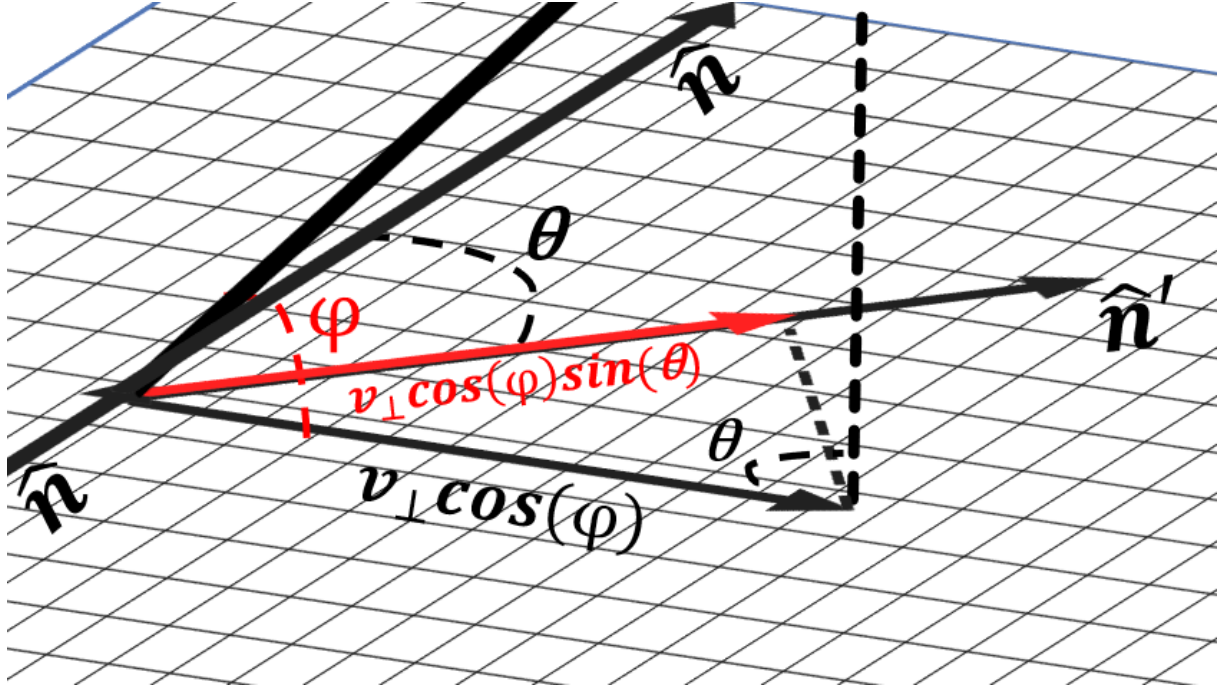


Figura 10: Visão aproximada do evento de espalhamento. Ilustração da projeção da velocidade perpendicular no plano π .



A dessintonia emitida no referencial do laboratório δ' deslocada devido ao efeito Doppler de acordo com a equação:

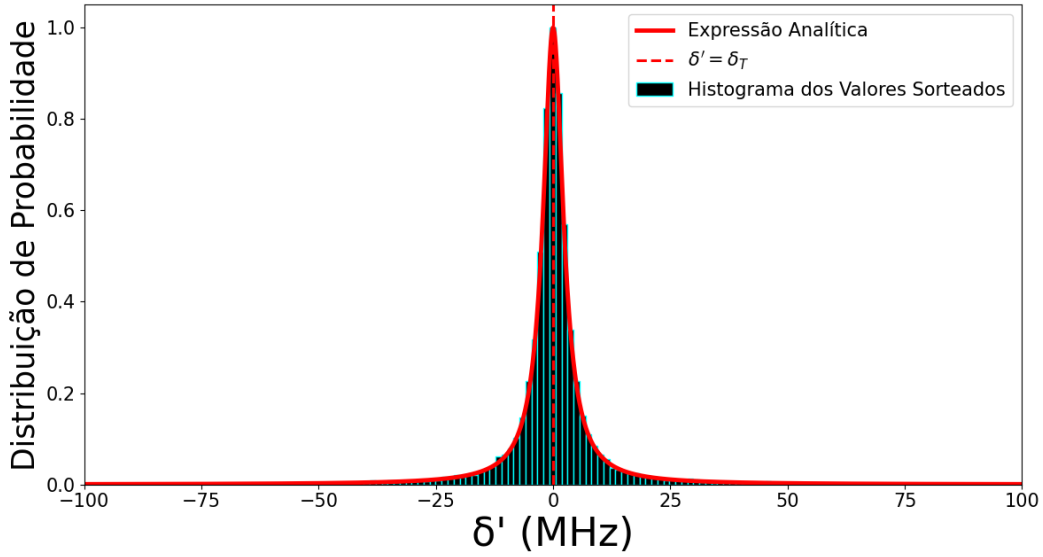
$$\delta' = \delta'_A + \frac{(v_{\parallel} \cos(\theta) + v_{\perp} \cos(\varphi) \sin(\theta))}{\lambda}, \quad (2.20)$$

onde δ'_A é a dessintonia emitida no referencial atômico, $0 < \theta < \pi$ é o ângulo entre a direção do fóton incidente e do fóton emitido e φ é o ângulo entre $v_{\perp}$ e o plano π . Na ausência de colisões atômicas, a colisão fóton-átomo é elástica no referencial atômico e portando $\delta'_A = \delta_A$.

Quando ocorrem colisões atômicas, a dessintonia do fóton emitido é redistribuída no referencial atômico seguindo uma Lorentziana (ver Fig. 11) da forma [5]:

$$P_A(\delta'_A) \propto \frac{1}{1 + 4(\delta'_A - \delta_T)^2/\Gamma^2}. \quad (2.21)$$

Figura 11: Justaposição da distribuição de probabilidade da dessintonia de um fóton emitido, após evento de colisão atômica (linha vermelha) com histograma de valores de dessintonias emitidas geradas pela simulação, após um átomo que absorveu o fóton na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$ sofrer colisão atômica.



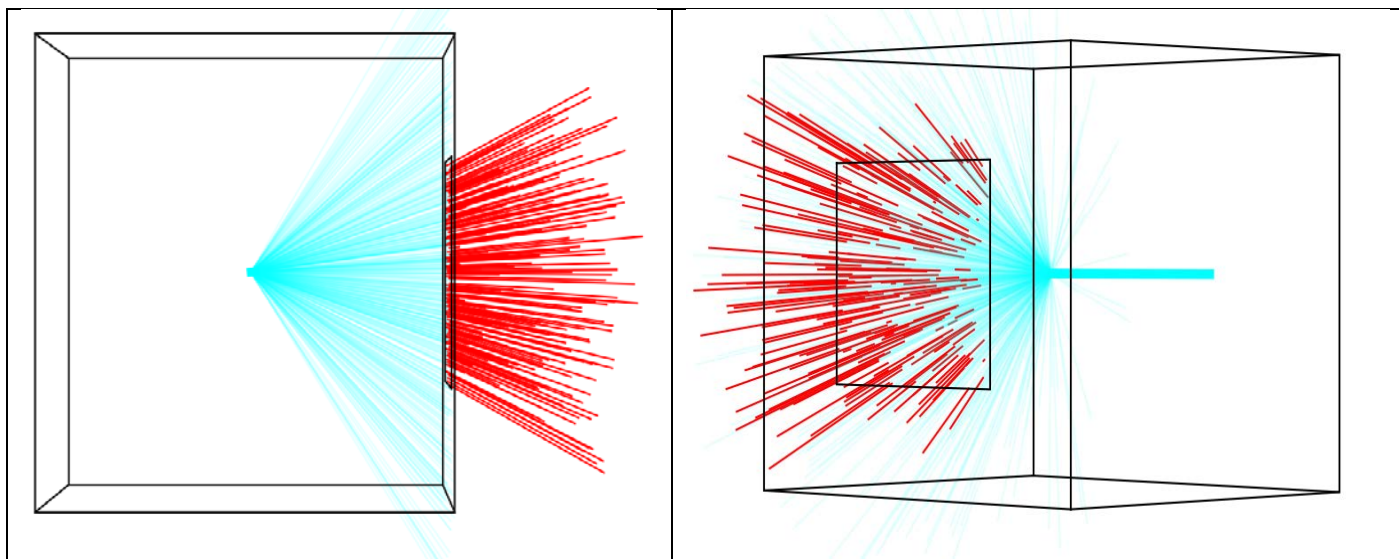
O fóton emitido no referencial do laboratório com dessintonia δ' tem tamanho de passo que segue a distribuição de probabilidade dada pela equação (2.7).

2.2.4 Checagem

Após a reemissão do fóton, utilizamos o tamanho de passo sorteado com a lei de Beer-Lambert em conjunto com a nova direção do passo para calcular qual seria a nova posição do fóton. Caso esta posição esteja fora do volume da célula, existem duas possibilidades: o fóton escapou da célula através da janela perpendicular ou o fóton foi absorvido por alguma parede da célula.

Para discernir caso o fóton escapou através da janela perpendicular, consideramos que a parede da célula que contém a janela perpendicular esteja contida em um plano infinito dado por $x = L/2$. Sabemos que os fótons se movem em linhas retas dentro do vapor. Temos tanto o ponto inicial do passo (ponto onde fóton foi absorvido e reemitido) quanto seu possível ponto final (onde o fóton se encontraria após tomar o passo). Podemos utilizar estes dois pontos para definir completamente a reta que caracteriza o espalhamento do fóton. Com esta equação de reta, podemos calcular a interseção da trajetória do fóton com o plano $x = L/2$ e então checar se esta interseção está dentro dos limites da janela perpendicular. Caso esteja, consideramos que o fóton escapou através da janela perpendicular e contamos uma ocorrência de fluorescência perpendicular (ver Fig. 12), que utilizaremos posteriormente para gerar o espectro de fluorescência através da janela perpendicular.

Figura 12: Ilustração da geometria da célula na simulação e da checagem de fluorescência perpendicular. À esquerda, vemos o feixe incidente de frente. À direita a célula é rotacionada horizontalmente por um ângulo de 45° . Em azul estão as trajetórias dos fótons que ultrapassaram o limite do eixo x da célula. Em vermelho, as trajetórias dos fótons que atravessam a janela perpendicular da célula após ultrapassar o limite do eixo x.

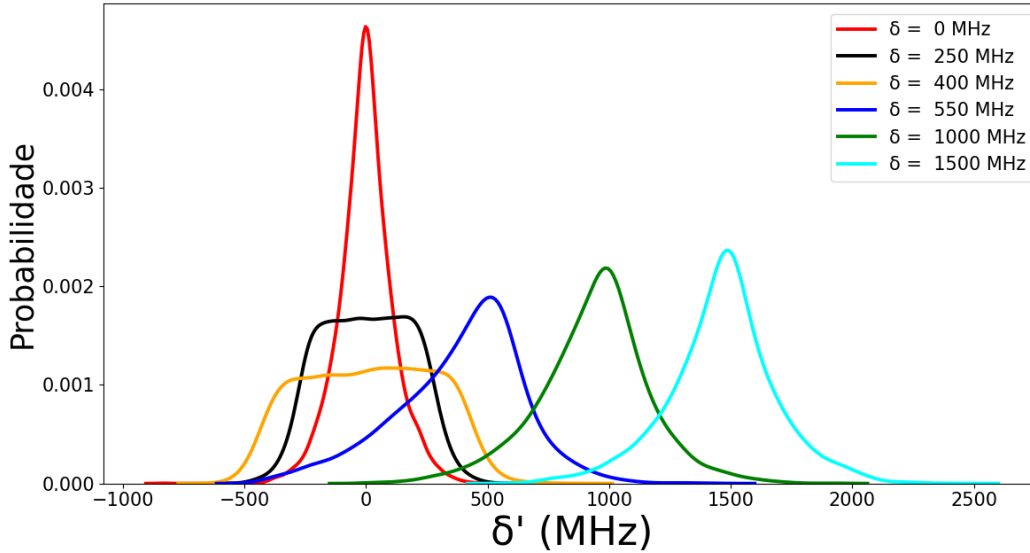


3 RESULTADOS

3.1 REDISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIA

Para que possamos verificar que a simulação está funcionando corretamente, plotamos o perfil espectral de emissão, no referencial do laboratório, após o fóton passar por um único evento de espalhamento, afim de reproduzir fenômenos conhecidos na literatura. Consideramos que a absorção ocorre na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$ e que a emissão é isotrópica.

Figura 13: Perfil espectral de emissão para várias dessintonias incidentes, considerando densidade atômica $N = 3.1 \cdot 10^{11}$ átomos/cm³. Esta densidade é baixa, portanto, podemos desprezar as colisões atômicas



Para a construção da figura 13, usamos um histograma da dessintonia emitida em todas as direções, sem checar antes se o fóton saiu da célula ou não. Observamos que para pequenas dessintonias de excitação, a emissão ocorre em torno da ressonância da transição atômica, enquanto que para dessintonias longe da ressonância, temos emissão em torno da frequência incidente. Estes comportamentos estão diretamente relacionados com o fenômeno de seleção de velocidade abordados na seção 2.

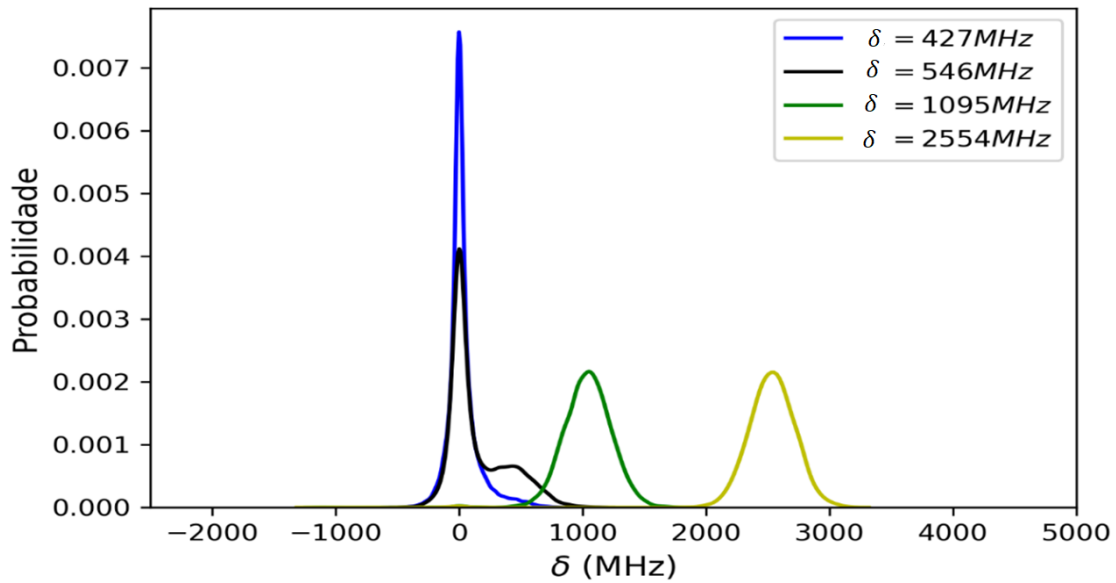
Quando a dessintonia incidente é pequena, ocorre seleção de velocidade, temos $\delta_A \approx \delta_T$ e uma emissão em torno da frequência de ressonância da transição atômica em que o fóton foi absorvido no referencial atômico. Quando a dessintonia incidente é grande, não há seleção de velocidade, a absorção ocorre fora da ressonância no referencial atômico e, portanto, temos uma emissão em torno da dessintonia incidente.

Para dessintonias de excitação pequenas, o átomo que absorve o fóton tem um componente de velocidade paralela ao fóton incidente bem definido $v_{\parallel} \approx (\delta - \delta_T)\lambda$ e, portanto, $\delta_A \approx \delta_T$. A dessintonia emitida no referencial do laboratório é dada então por:

$$\delta' = \delta_T + (\delta - \delta_T) \cos(\theta) + \frac{v_{\perp} \cos(\varphi) \sin(\theta)}{\lambda}. \quad (3.1)$$

A magnitude da velocidade perpendicular segue uma distribuição Maxwell-Boltzmann bidimensional. Sua projeção no plano de emissão é modulada por $\cos(\varphi) \sin(\theta)$. Ademais, para dessintonias incidentes próximas ao centro da linha, nas regiões em torno de $\delta = u/\lambda$, temos $v_{\parallel} \approx u$, ou seja, a probabilidade de $v_{\perp}$ ser maior do que $v_{\parallel}$ é muito pequena. Consequentemente, o componente paralelo da velocidade do átomo domina, e o deslocamento Doppler na emissão será efetivamente $(\delta - \delta_T) \cos(\theta)$. Para uma emissão isotrópica, $\cos(\theta)$ é uniformemente distribuído entre -1 e 1. No nosso sistema, para a transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$ temos então um efeito de achatamento no espectro de emissão, resultando em um platô no intervalo de $-\delta$ a $+\delta$. Observamos este comportamento na figura 13 para dessintonias incidentes próximos à ressonância. O fenômeno de seleção de velocidade é conhecido na literatura e fenômeno de achatamento das curvas é previsto nas curvas obtidas em [1]. O fato de que a simulação é capaz de reproduzir bem ambos estes fenômenos bem estudados na literatura serve para atestar seu bom funcionamento.

Figura 14: Perfil espectral de emissão, gerado pela simulação, em direção perpendicular à excitação, para várias dessintonias incidentes, considerando densidade atômica $N = 3.1 \cdot 10^{11}$ átomos/cm³. Esta densidade é baixa, portanto, podemos desprezar as colisões atômicas

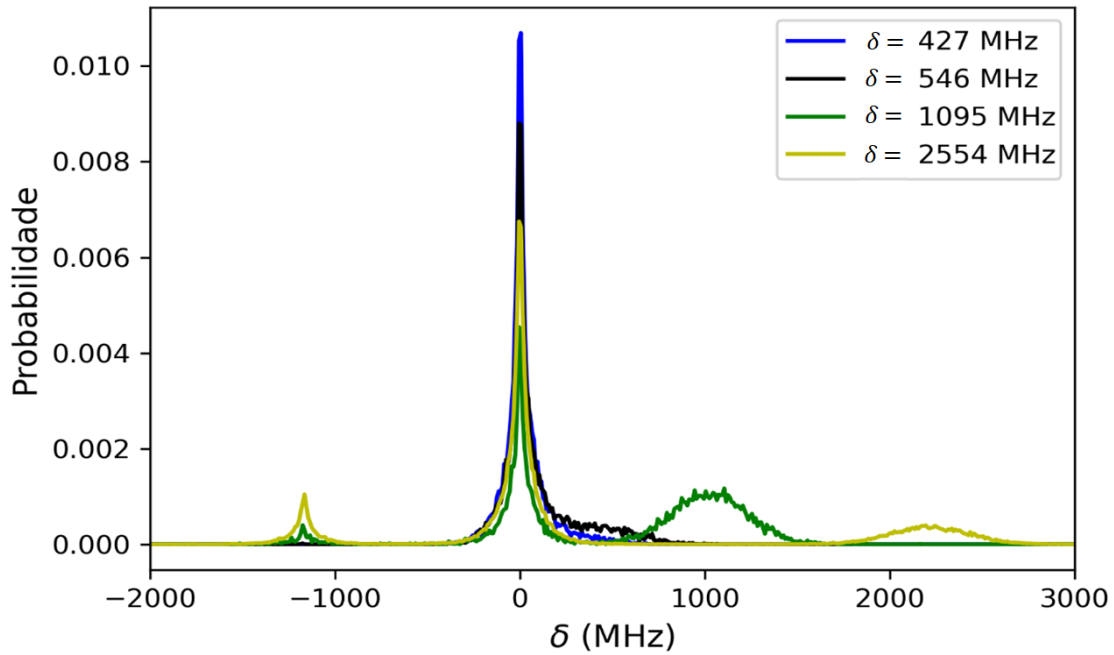


O perfil de emissão é diferente quando consideramos apenas uma direção de emissão, perpendicular à excitação. Este é o foco do nosso trabalho. A figura 14 ilustra o perfil espectral de emissão detectado apenas em uma direção perpendicular à excitação. Notamos que o efeito de seleção de velocidade ainda é presente. Portanto, para dessintonias incidentes próximos ao centro da linha, temos um espectro de emissão centrado na ressonância. Porém, agora, a direção de emissão é fixa e, portanto, perdemos o efeito de achatamento da curva, notamos este comportamento nas curvas azul e preta da figura 14.

Quando a dessintonia incidente está longe da ressonância, similarmente à figura 13 temos que a absorção ocorre longe da ressonância no referencial atômico. A emissão ocorre em torno da dessintonia incidente e temos correlação entre a dessintonia absorvida e a dessintonia emitida. Notamos também, na curva preta, um comportamento intermediário. A dessintonia incidente está mais longe da ressonância, porém não o suficiente para observarmos uma

correlação total entre dessintonia absorvida e emitida, notamos um pico mais pronunciado em torno da ressonância e outro pico em torno da dessintonia incidente.

Figura 15: Perfil espectral de emissão, gerado pela simulação, em direção perpendicular à excitação, para várias dessintonias incidentes. Cada curva foi gerada considerando uma densidade atômica diferente. Os valores das densidades são $13.2 \cdot 10^{11}$ átomos/cm³ (azul), $7.5 \cdot 10^{12}$ átomos/cm³ (preto), $5.8 \cdot 10^{13}$ átomos/cm³ (verde) e $14.2 \cdot 10^{13}$ átomos/cm³ (amarelo).



A figura 15 mostra o perfil espectral de emissão para várias dessintonias incidentes, variando a densidade atômica. Quando a densidade atômica está mais elevada, isto significa que o efeito das colisões atômicas sofridas por átomos excitados dentro do vapor torna-se significativo para nós. Novamente, observamos correlação entre dessintonia incidente e dessintonia emitida para excitações longe da ressonância e a eliminação desta correlação para dessintonias incidentes em torno da ressonância, devido à seleção de velocidade.

Porém, para as curvas com dessintonia incidente (curva verde e curva amarela) longe da ressonância, agora observamos a aparição de dois novos picos. Isto se deve ao fato de que estamos considerando uma densidade elevada para estas curvas, e, portanto, alta frequência de colisões atômicas. Quando ocorre colisão atômica, sabemos que a dessintonia emitida segue uma Lorentziana centrada na frequência de transição, de acordo com a equação (2.21).

Quando um átomo absorve um fóton na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$, a emissão ocorre em torno de 0 Mhz no referencial atômico. Já quando um átomo absorve um fóton na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3)$, a emissão ocorre em torno de -1168 Mhz. De fato, observamos o surgimento de picos centrados nestas frequências de transição, quando aumentamos a densidade atômica. A chance de um átomo absorver um fóton na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$ é mais alta do que absorvê-lo na transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3)$, por isso o pico ao redor de 0 Mhz é maior que o pico em torno de -1168 Mhz para as curvas amarela e verde.

3.2 ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA PERPENDICULAR

Vamos agora apresentar espectros de fluorescência gerados pela simulação e compará-los com espectros de fluorescência obtidos experimentalmente com o arranjo experimental descrito no capítulo 2.

Os espectros experimentais são construídos detectando a potência emitida perpendicularmente para cada dessintonia incidente. Na simulação, definimos uma dessintonia incidente e lançamos um número de fótons na célula, simulamos a trajetória destes fótons no volume do vapor e realizamos a contagem dos fótons que escapam da célula através da janela perpendicular, variamos a dessintonia incidente e repetimos o processo até obtermos um espectro de fluorescência perpendicular.

Figura 16: Comparação de espectros de fluorescência perpendicular para uma densidade de vapor de $N=3.1 \cdot 10^{11}$ átomos/cm³. Os pontos representam o espectro obtido através de simulação numérica. A linha sólida representa o espectro experimental.

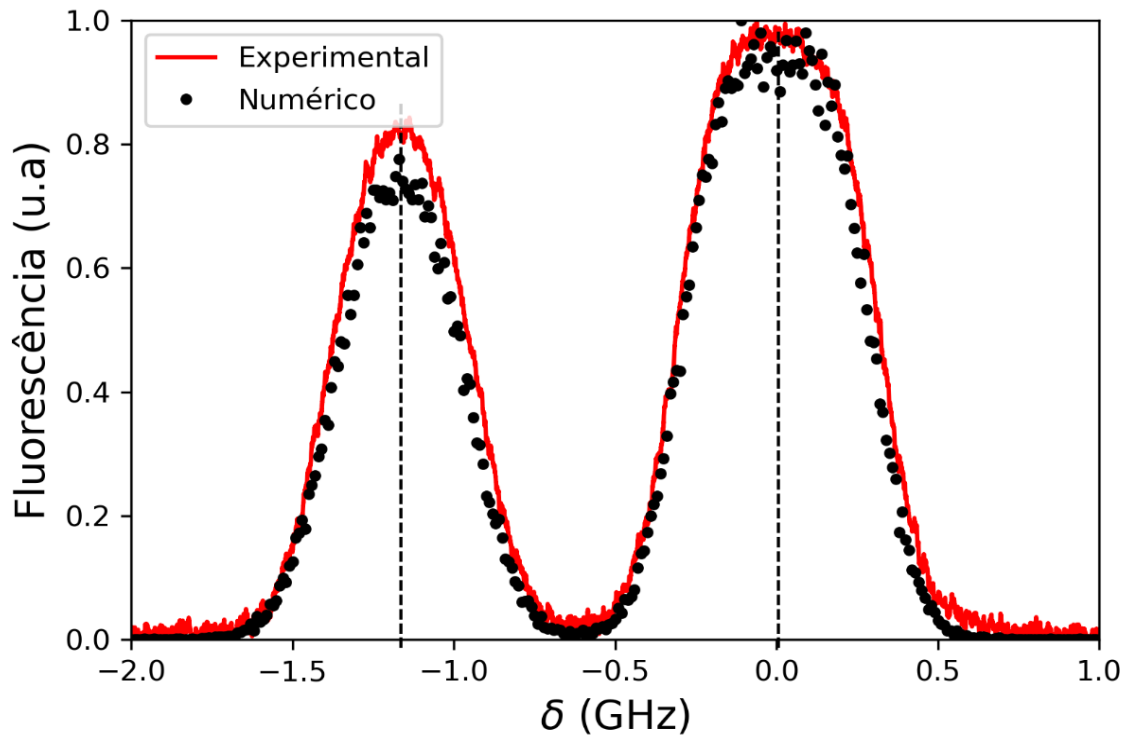


Figura 17: Comparação de espectros de fluorescência perpendicular para uma densidade de vapor de $N = 7.5 \cdot 10^{12}$ átomos/cm³. Os pontos representam o espectro obtido através de simulação numérica. A linha sólida representa o espectro experimental.

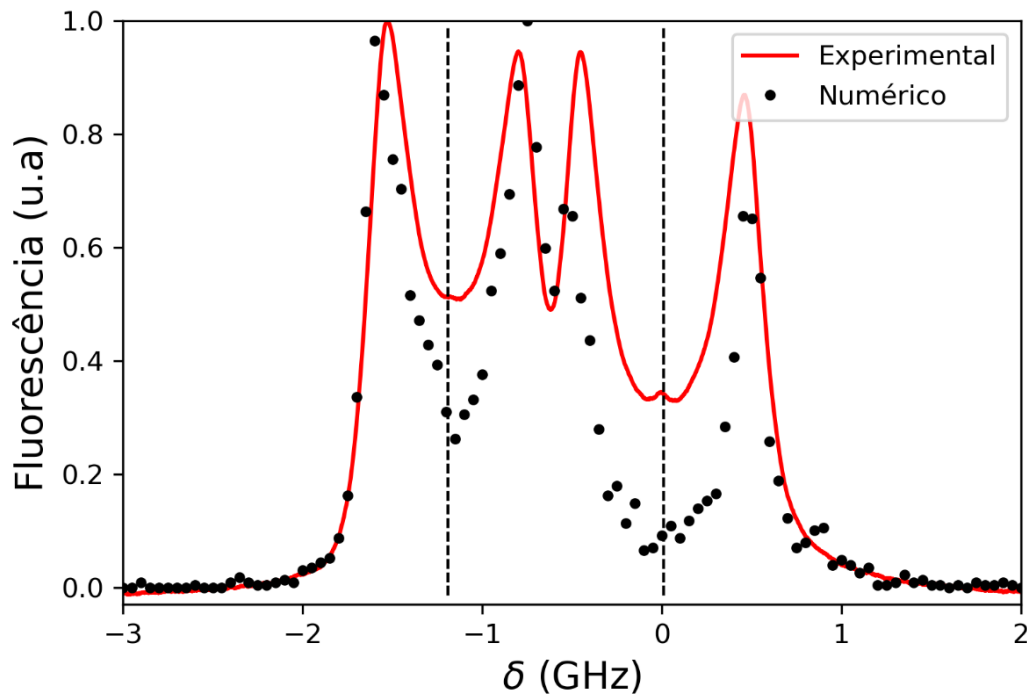
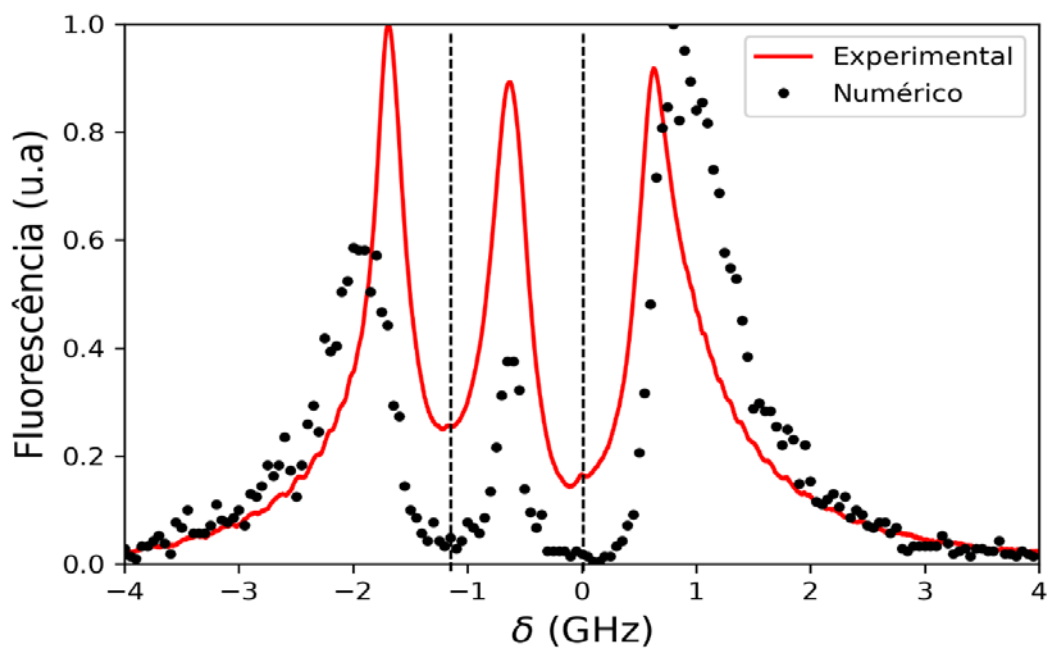


Figura 18: Comparação de espectros de fluorescência perpendicular para uma densidade de vapor de $N = 4.5 \cdot 10^{13}$ átomos/cm³. Os pontos representam o espectro obtido através de simulação numérica. A linha sólida representa o espectro experimental.



Na figura 16, o espectro experimental foi obtido com uma temperatura no reservatório em torno de 60°C . Os pontos da simulação foram gerados considerando um alargamento homogêneo $\Gamma = 5.26\text{ MHz}$. Como estamos em um regime de baixa densidade, podemos considerar que estamos aproximadamente num regime de ausência de colisões atômicas. O espectro gerado pela simulação reproduz bem o espectro experimental.

Na figura 17, o espectro experimental foi obtido com uma temperatura no reservatório em torno de 117°C . Os pontos da simulação foram gerados considerando um alargamento homogêneo $\Gamma = 5.79\text{ MHz}$. A densidade atômica considerada aqui é mais elevada, passando a ocorrerem colisões atômicas.

Observamos na figura 17, que em torno das ressonâncias das transições atômicas que estamos considerando, há uma diminuição da intensidade de fluorescência. Observamos uma depressão alargada em torno das ressonâncias. Este comportamento era esperado por nós e foi brevemente discutido no capítulo 2. Se deve ao fato que para uma alta densidade atômica, a probabilidade de que um fóton emitido em torno do centro da linha escape da célula é baixa. Isto se manifesta no espectro de emissão na forma de um efeito de afundamento dos picos em torno das ressonâncias das transições atômicas consideradas, o que resulta na formação de quatro picos em vez de apenas dois.

O espectro de fluorescência gerado pela simulação ainda reproduz bem o espectro experimental nas regiões próximas às asas do espectro, porém, em torno das ressonâncias, nota-se uma certa discrepância entre as intensidades dos espectros. O espectro gerado pela simulação tem intensidade menor em torno das ressonâncias das transições atômicas do que o espectro experimental, abordaremos a possível razão para isto no capítulo 4.

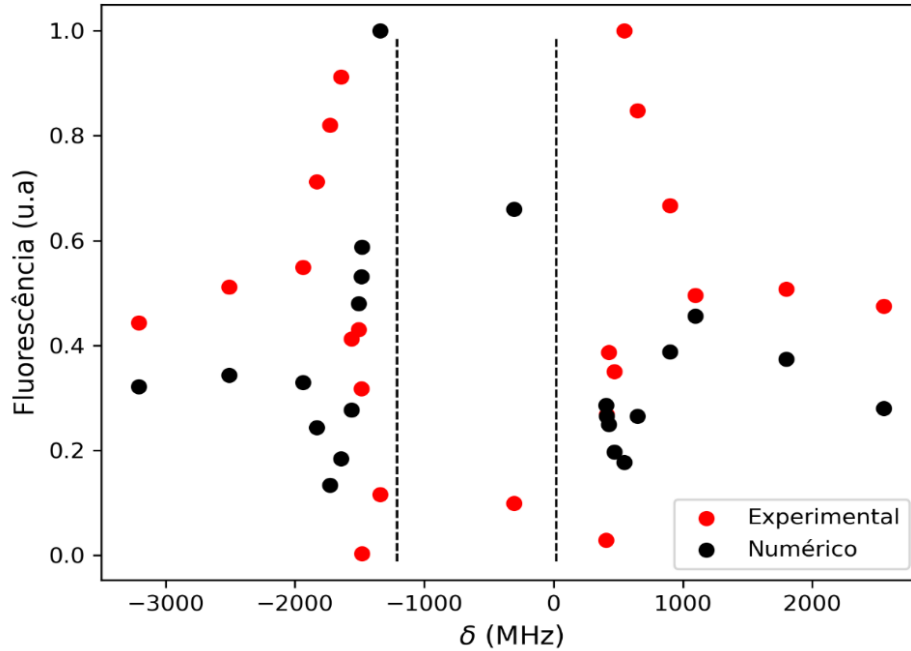
Na figura 18 o espectro experimental foi obtido com uma temperatura no reservatório em torno de 150°C . Os pontos da simulação foram gerados considerando um alargamento homogêneo $\Gamma = 8.61\text{ MHz}$. A densidade atômica neste caso é ainda mais elevada do que a da figura 17, temos ocorrência ainda mais frequentes de colisões atômicas no vapor.

Na figura 18, devido às colisões atômicas serem bastante frequentes no vapor, o fenômeno de seleção de velocidade é praticamente perdido. Observamos então uma queda ainda maior de intensidade para dessintonias em torno das ressonâncias das transições atômicas consideradas. Notamos também que agora observamos três picos, enquanto que para uma densidade menor observamos quatro. Novamente há uma discrepância entre as intensidades de fluorescência da simulação e do espectro experimental, para dessintonias em torno das ressonâncias.

3.3 RESULTADOS PARA COEFICIENTE DE ABSORÇÃO FIXO

O estudo dos espectros de fluorescência é influenciado pela distribuição espacial de átomos excitados no interior da célula. Como foi discutido no capítulo 2, o tamanho médio de um passo dado por um fóton no vapor depende da densidade atômica e da seção de choque da colisão fóton-átomo. Devido a isto, as excitações para um vapor com alta densidade ou em torno do centro da linha, ocorrem próximas à entrada da célula. Já a distribuição espacial de átomos excitados no caso onde os fótons incidentes tem dessintonia longe do centro da linha é uniformemente distribuída no volume da célula. É de nosso interesse eliminar este tipo de efeito geométrico. Uma maneira de conseguir isso é impondo que o coeficiente de absorção seja constante. Se analisarmos os espectros de fluorescência obtidos, tanto provenientes da simulação quanto experimentais, e escolhermos as medidas onde o coeficiente de absorção é $a = 1/L$, a excitação será distribuída uniformemente no volume do vapor. Vale ressaltar que, de acordo com a equação (2.8), para manter o coeficiente de absorção fixo, variamos a densidade atômica e à medida que aumentamos a densidade atômica, temos de escolher dessintonias incidentes mais distantes da ressonância.

Figura 19: Espectro de fluorescência perpendicular com coeficiente de absorção constante. $a = 1/L$. Pontos pretos correspondem a resultados simulacionais e pontos vermelhos a resultados experimentais.



Na figura 19 cada ponto representa uma intensidade de fluorescência para frequências onde temos o coeficiente de absorção igual $1/L$. As linhas verticais tracejadas representam as frequências de transição do césio na linha D1. A linha vertical da esquerda representa a transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3)$ e a da direita representa a transição $6S_{1/2}(F = 3) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 4)$.

Aqui, os resultados da simulação se comportam dentro do que é esperado teoricamente. Longe das ressonâncias das transições atômicas consideradas no sistema, temos um sinal de fluorescência aproximadamente constante. Este comportamento está associado com o espalhamento único de um fóton dentro do vapor. Este, portanto, mantém a informação da dessintonia incidente devido ao fenômeno de correlação de dessintonia incidente e emitida quando estamos longe do centro da linha. Neste caso, a densidade óptica percebida pelo fóton emitido é $d = aL = 1$. Consequentemente, o fóton tem uma boa probabilidade de sair da célula.

4 CONCLUSÃO

A pesquisa abordada neste trabalho consistiu no desenvolvimento de um modelo computacional capaz de simular a caminhada aleatória de fótons através de um vapor atômico ressonante. Tínhamos o objetivo de, através de espectros de fluorescência perpendicular obtidos com a simulação, evidenciar o fenômeno do espalhamento Rayleigh, inclusive em regiões mais próximas à transição atômica.

Desenvolvemos uma simulação de Monte Carlo capaz de reproduzir bem o fenômeno de aprisionamento de radiação, que utilizamos para gerar espectros de fluorescência perpendicular. Nossa simulação reproduz bem fenômenos conhecidos na literatura como, por exemplo, a seleção de velocidade. Além disso, quanto à redistribuição de frequência dos fótons, obtivemos resultados similares à função de redistribuição teórica obtida por Hummer [1].

Fomos capazes de evidenciar o espalhamento Rayleigh para dessintonias incidentes próximos à transição atômica. Também conseguimos evidenciar um regime intermediário, para dessintonias ainda próximas à transição atômica onde ocorre tanto seleção de velocidade quanto espalhamento Rayleigh.

Os espectros de fluorescência perpendicular gerados pela simulação apresentam boa concordância com os espectros de fluorescência perpendicular obtidos experimentalmente, especialmente para baixas densidades atômicas.

Observamos, porém que surgem discrepâncias entre os espectros, em torno das transições atômicas, à medida que aumentamos a densidade do vapor. Uma possível explicação, seria o fato de que a densidade atômica nas medidas experimentais foi calculada através um ajuste teórico, e este valor foi utilizado na simulação. Há uma possibilidade de que este valor esteja ligeiramente acima do valor real da densidade atômica observada durante as medições, o que causaria que os espectros gerados pela simulação tivessem picos com intensidade menor. Outra possível explicação seria o fato de que ainda podemos adicionar outros aspectos do sistema físico do experimento, como o bombeio óptico ou outras transições atômicas, à simulação para torná-la mais realista, e assim obter espectros mais próximos daqueles obtidos experimentalmente.

Apesar das discordâncias entre os espectros em torno das ressonâncias, para densidades mais elevadas, notamos que a evolução apresentada do comportamento dos espectros gerados pela simulação, está dentro daquilo que era previsto por nós.

À medida que aumentamos a densidade atômica, começamos a observar o comportamento discutido no capítulo 2. Uma diminuição de intensidade de fluorescência próximo às transições atômicas e um aumento da intensidade em torno das asas do espectro. Tanto as medidas experimentais quanto os espectros obtidos com a simulação apresentam este comportamento.

Para densidades atômicas elevadas, a distribuição de átomos excitados passa a ser mais concentrada perto da entrada da célula. Para eliminar efeitos geométricos nos espectros de fluorescência para altas densidades, analisamos as medidas computacionais e experimentais para um coeficiente de absorção fixo. Neste caso, a simulação mostra comportamento dentro do que é esperado na literatura e notamos uma taxa de fluorescência praticamente constante nas asas do espectro, o que novamente evidencia o espalhamento Rayleigh, como foi explicado no capítulo 3.

A simulação tem um alto custo computacional, problema comum em simulações de Monte Carlo, e demora de finalizar seu algoritmo. Esta dificuldade é tratada no apêndice A.

Entre os possíveis futuros aprimoramentos para a simulação estão: a inclusão de um ângulo de detecção de fluorescência, a inclusão das outras transições atômicas da linha D1 do cério e a inclusão do fenômeno do bombeio óptico.

Levar em conta a geometria do detector em conjunto com a célula, em particular quais fótons seriam detectados por um detector posicionado à uma distância d da janela perpendicular, nos ajudaria a obter espectros de fluorescência mais próximos a espectros experimentais, devido ao fato de que nem todos os fótons que escapam da janela perpendicular são detectados no experimento.

Considerar as transições $6S_{1/2}(F = 4) \rightarrow 6P_{1/2}(F' = 3,4)$, tornaria nosso sistema mais realista e nos ajudaria a obter perfis espectrais de emissão mais precisos, especialmente para densidades atômicas mais altas. Com a inclusão destas transições, seria possível investigar a influência do fenômeno de bombeio óptico, isto é, a emissão em uma transição diferente daquela excitada pelo laser.

REFERÊNCIAS

- [1] HUMMER, D. G. Non-Coherent Scattering: I. The Redistribution Function with Doppler Broadening. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 125, n. 1, p. 21–37, 1 Jul. 1962.
- [2] ANDERSON, H. M. et al. Xenon 147-nm resonance value and trapped decay rates. **Physical Review A**, v. 51, n. 1, p. 211–217, 1 Jan. 1995.
- [3] MERCADIER, N. et al. Lévy flights of photons in hot atomic vapours. **Nature Physics**, v. 5, n. 8, p. 602–605, 31 maio 2009.
- [4] ARAÚJO, M. O.; DE SILANS, T. P.; KAISER, R. Lévy flights of photons with infinite mean free path. **Physical Review E**, v. 103, n. 1, 6 Jan. 2021.
- [5] ALVES-PEREIRA, A. R. et al. Photonic superdiffusive motion in resonance line radiation trapping Partial frequency redistribution effects. **The Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 15, p. 154505, 21 abr. 2007.
- [6] ALFORD, W. J. et al. Collisional redistribution of light: Far-wing line shapes and polarizations for the Ba-(Ar,Xe) systems. **Physical Review A**, v. 30, n. 5, p. 2366–2380, 1 nov. 1984.
- [7] LOPEZ, J. P. et al. Dependence of Lévy-flight transmission on the starting point for photons propagating in atomic vapors. **Physical Review A**, v. 107, n. 1, 3 jan. 2023.
- [8] CHEVROLIER, M. Radiation trapping and Lévy flights in atomic vapours: an introductory review. **Contemporary Physics**, v. 53, n. 3, p. 227–239, maio 2012.
- [9] LANDAU, D. P.; BINDER, K. **A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [10] METROPOLIS, N.; ULAM, S. The Monte Carlo Method. **Journal of the American Statistical Association**, v. 44, n. 247, p. 335–341, set. 1949.
- [11] SENTIS, R. Monte Carlo methods in neutron and photon transport problems. **Monte Carlo Methods and Applications**, v. 7, n. 3-4, 2001.
- [12] HOWELL, J. R. The Monte Carlo Method in Radiative Heat Transfer. **Journal of Heat Transfer**, v. 120, n. 3, p. 547–560, 1 ago. 1998.
- [13] KALOS, M. H.; WHITLOCK, P. A. **Monte Carlo Methods**. [s.l.] John Wiley & Sons, 2008.
- [14] DEKKING, M.; AL, E. **A modern introduction to probability and statistics / understanding why and how**. London: Springer, 2005.
- [15] CHEVROLIER, M. Radiation trapping and Lévy flights in atomic vapours: an introductory review. **Contemporary Physics**, v. 53, n. 3, p. 227–239, maio 2012.
- [16] ANDERSON, H. M. et al. Xenon 147-nm resonance value and trapped decay rates. **Physical Review A**, v. 51, n. 1, p. 211–217, 1 jan. 1995.

- [17] CARVALHO, J. C. DE A. et al. Redistribution of light frequency by multiple scattering in a resonant atomic vapor. **Physical Review A**, v. 91, n. 5, 22 maio 2015.
- [18] COOPER, J.; STACEY, D. N. Effect of transfer of excitation on resonance broadening. **Physics Letters A**, v. 46, n. 4, p. 299–300, dez. 1973.
- [19] HUENNEKENS, J. et al. Thermalization of velocity-selected excited-state populations by resonance exchange collisions and radiation trapping. **Physical Review A**, v. 51, n. 6, p. 4472–4482, 1 jun. 1995.
- [20] LEWIS, E. L. Collisional relaxation of atomic excited states, line broadening and interatomic interactions. **Physics Reports**, v. 58, n. 1, p. 1–71, fev. 1980.
- [21] ŁUKASZEWSKI, M.; JACKOWSKA, I. Broadening of level-crossing signals in the 5 state of rubidium due to resonant collisions. **Physics Letters A**, v. 95, n. 8, p. 429–431, maio 1983.

APÊNDICE A – Método alternativo para cálculo da redistribuição de frequência

Como foi discutido no capítulo 4, um dos problemas encontrados no decorrer do desenvolvimento da simulação é o alto custo computacional. Sob certas condições, quando o número de espalhamentos médio para cada trajetória de fótons dentro da célula é muito alto, o tempo necessário para obter medidas de fluorescência pode ser de em torno 10 a 12 horas. Neste apêndice, discutiremos uma possível alternativa para resolver o problema do alto custo computacional da simulação.

Grande parte do custo computacional da simulação se deve ao fato de estarmos simulando detalhadamente a trajetória de cada fóton lançado na célula. Estas trajetórias são calculadas milhões ou até bilhões de vezes até que obtenhamos um resultado. A vantagem de calcular a trajetória dos fótons, como discutido no capítulo 1, é de que temos acesso a informações que não estão disponíveis ao experimento, como por exemplo a velocidade dos átomos excitados. Porém, se fosse do nosso interesse calcular apenas o espectro de emissão, o problema do custo computacional poderia ser contornado calculando diretamente o espectro de emissão. De fato, para um átomo de dois níveis, o espectro de emissão é dado por [1]:

$$\Theta(\delta', \delta) = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^\infty dv_1 e^{-v_1^2/u^2} \frac{1}{1 + 4(\delta - v_1/\lambda)/\Gamma^2} \int_0^\infty dv_2 e^{-v_2^2/u^2} p\left(\delta - v_1/\lambda, \delta' - \frac{\vec{v} \cdot \hat{n}'}{\lambda}\right), \quad (5.1)$$

onde $\Theta(\delta', \delta)$ denota a probabilidade de um fóton ser emitido com dessintonia entre δ' e $\delta' + d\delta'$, para incidência de um fóton com dessintonia δ , v_1 e v_2 são os componentes de velocidade do átomo paralelo e perpendicular à trajetória do fóton incidente, respectivamente. $\vec{v} = (v_1, v_2)$, u é a velocidade mais provável de um átomo dentro do vapor, λ é o comprimento de onda $\hat{n}'$, é o vetor unitário que aponta na direção do fóton emitido e Γ é a largura homogênea total. $p(\xi', \xi)$ é a função de redistribuição de frequência no referencial atômico. Na ausência de colisões atômicas, o espalhamento dos fótons é elástico no referencial atômico e, portanto, $p(\xi', \xi) = \delta_D(\xi' - \xi)$, onde δ_D denota a função delta de Dirac. Ou seja $\int_a^b f(\xi') p(\xi', \xi) d\xi' = f(\xi)$.

Considerando $v_2 \parallel \hat{n}'$ para simplificar os cálculos, e também considerando um vapor com baixa densidade e, portanto, um regime de ausência de colisões atômicas, podemos calcular a segunda integral da equação (5.1) utilizando as propriedades da função delta de Dirac. Temos:

$$\begin{aligned} \int_a^b dv_2 e^{-v_2^2/u^2} p\left(\delta - v_1/\lambda, \delta' - \frac{\vec{v} \cdot \hat{n}'}{\lambda}\right) &= \lambda \int_a^b e^{-v_2^2/u^2} \delta_D(v_2 - [v_1 - \lambda(\delta - \delta')]) dv_2, \\ \int_a^b dv_2 e^{-v_2^2/u^2} p\left(\delta - v_1/\lambda, \delta' - \frac{\vec{v} \cdot \hat{n}'}{\lambda}\right) &= \lambda \exp\left(\frac{[\lambda(\delta - \delta') - v_1]^2}{u^2}\right). \end{aligned} \quad (5.2)$$

A equação (5.1) se torna, então:

$$\Theta(\delta', \delta) = \frac{\lambda e^{\lambda^2(\delta - \delta')^2}}{4\pi^3} \int_0^\infty \frac{e^{-2v_1^2/u^2}}{1 + 4(\delta - v_1/\lambda)/\Gamma^2} dv_1. \quad (5.3)$$

Para que possamos ter uma perspectiva do custo computacional deste método de calcular a redistribuição de frequência, podemos integrar numericamente uma função da forma da equação (5.3) N vezes, onde N é um número comparável com o número de cálculos realizados para calcular a redistribuição de frequência através da simulação da trajetória do fóton ao longo do vapor. Podemos fazer uma estimativa bruta de qual seria o valor de N , para uma baixa densidade atômica. Considerando um espectro de dessintonias incidentes de largura 5 GHz que é varrido em passos de 15 MHz, onde para cada dessintonia incidente lançamos 10 mil fótons e cada fóton sofre em média 3 espalhamentos. Podemos estimar o valor de N como sendo, portanto, em torno de 10^8 . Considerando estes parâmetros, o tempo necessário para a simulação completar seu algoritmo seria por volta de uma hora. Realizamos, então, o cálculo da integral da equação (5.3) um total 10^8 vezes e medimos o tempo total necessário para realizar estes cálculos. Realizamos 10 iterações deste processo, medindo o tempo a cada iteração, e medimos a média de tempo necessário para que possamos compará-la com a nossa estimativa do tempo necessário para a simulação completar seu algoritmo sob as mesmas condições.

Tabela 1 – Tempo necessário para realizar 10^8 integrações numéricas da equação (5.3) utilizando o método de Gauss-Legendre.

Número da Iteração	Tempo (s)
1	1.045
2	0.462
3	0.724
4	0.452
5	0.477
6	0.463
7	0.448
8	0.455
9	0.454
10	0.460
Tempo médio $\approx$ 0.54 s	

Podemos ver na tabela 1, que nossas estimativas mostram que há uma diminuição considerável de custo computacional quando utilizamos este método para simular a redistribuição de frequência.

Outro resultado preliminar que é do nosso interesse são os espectros de emissão gerados a partir deste método, considerando uma direção fixa. Para dessintonias incidentes próximos à transição atômica, esperamos ver uma curva centrada em torno da ressonância (ver Fig. 21), e para dessintonias incidentes longe da ressonância, esperamos ver curvas centradas em torno de δ (ver Fig. 20).

Figura 20 – Espectro de emissão obtido através da integração numérica da equação (5.3). Considerando $\delta = 1200$ MHz.

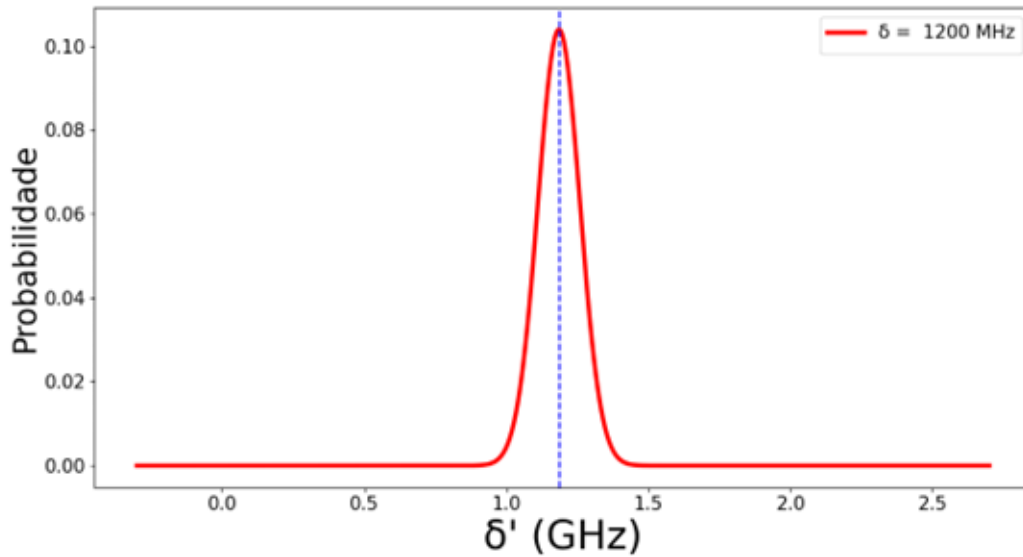
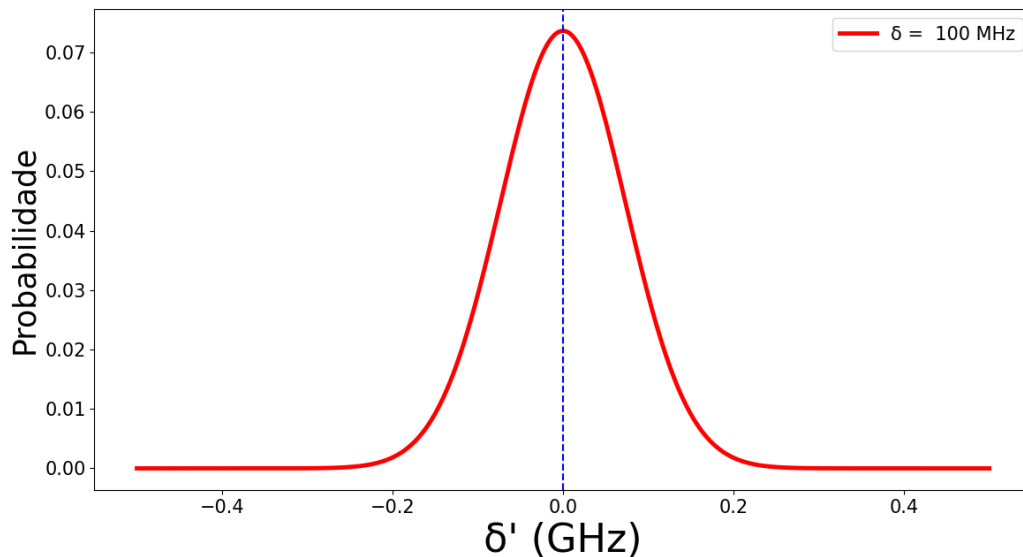


Figura 21 - Espectro de emissão obtido através da integração numérica da equação (5.3). Considerando $\delta = 100$ MHz.



Podemos notar que obtivemos o resultado dentro do que é esperado para as curvas, além disso, estimamos uma boa melhoria do custo computacional. Este método pode ficar, então, como uma possível aplicação a pesquisas futuras onde não estamos tão interessados em informações sobre os átomos que compõem o vapor. Ademais, podemos estender a aplicação para incluir a emissão em uma direção arbitrária.

Considerando agora uma direção de emissão arbitrária, para a segunda integral da equação (5.1) escrevemos:

$$\int_0^\infty e^{v_2^2/u^2} \delta_D \left(\delta - \frac{v_1}{\lambda} - \delta' + \frac{\vec{v} \cdot \hat{n}}{\lambda} \right) = \int_0^\infty e^{v_2^2/u^2} \delta_D \left(\delta - \frac{v_1}{\lambda} - \delta' + \frac{v_1 n_1}{\lambda} + \frac{v_2 n_2}{\lambda} \right),$$

reorganizando e aplicando as propriedades do delta de Dirac, temos:

$$\int_0^\infty e^{-v_2^2/u^2} \frac{\lambda}{|n_2|} \delta_D \left(v_2 - \left[\frac{v_1(1 - n_1) + \lambda(\delta' - \delta)}{n_2} \right] \right) = \frac{\lambda}{|n_2|} \exp \left[- \left(\frac{v_1(\delta' - n_1) + \lambda(\delta' - \delta)}{n_2} \right)^2 \frac{1}{u^2} \right]. \quad (5.4)$$

Substituindo na equação (5.1), obtemos:

$$\Theta(x', x) = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^\infty dv_1 e^{-v_1^2/u^2} \frac{1}{1 + 4(x - v_1/\lambda)/\Gamma^2} \left\{ \frac{\lambda}{|n_2|} \exp \left[- \left(\frac{v_1(1 - n_1) + \lambda(x' - x)}{n_2} \right)^2 \frac{1}{u^2} \right] \right\}. \quad (5.5)$$

A priori, poderíamos integrar a equação (5.5) para todas as direções para obter espectros de emissão considerando uma direção de emissão arbitrária.

