



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

**Caracterização Experimental e Numérica da Caminhada
Aleatória dos Fótons em Células de Vapor de Césio: Efeitos de
Colisões Atômicas, Transporte Superdifusivo e Voos de Lévy**

por

Isaac Cazé Nunes

João Pessoa - Paraíba - Brasil

- Julho de 2025 -

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

**Caracterização Experimental e Numérica da Caminhada
Aleatória dos Fótons em Células de Vapor de Césio: Efeitos de
Colisões Atômicas, Transporte Superdifusivo e Voos de Lévy**

Isaac Cazé Nunes

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Física.

Área de Concentração: Óptica
Orientador: Jesús Pavón López
Co-orientador: Thierry Marcelino Passerat de Silans

João Pessoa - Paraíba - Brasil

- Julho 2025 -

**Catalogação na publicação
Seção de Catalogação e Classificação**

N972c Nunes, Isaac Cazé.

Caracterização experimental e numérica da caminhada aleatória dos fótons em células de vapor de Césio : efeitos de colisões atômicas, transporte superdifusivo e voos de Lévy / Isaac Cazé Nunes. - João Pessoa, 2025. 304 f. : il.

Orientação: Jesús Pavón López.

Coorientação: Thierry Marcelino Passerat de Silans. Tese (Doutorado) - UFPB/CCEN.

1. Voos de Lévy. 2. Aprisionamento radiativo. 3. Vapores atômicos. 4. Transporte anômalo. 5. Simulações de Monte Carlo. I. López, Jesús Pavón. II. Silans, Thierry Marcelino Passerat de. III. Título.

UFPB/BC

CDU 53(043)



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

Ata da Sessão Pública da Defesa de tese de Doutorado do aluno
Isaac Cazé Nunes, candidato ao Título de Doutor em Física na
Área de Concentração Óptica.

Aos trinta dias do mês de julho do ano de dois mil e vinte e cinco, às 09h00, na sala virtual meet.google.com/pbu-cghm-vqv, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para avaliar a tese de Doutorado, na área de Óptica, de **Isaac Cazé Nunes**. A banca foi composta pelos(as) professores(as) doutores(as): Jesús Pavón López (PPGF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Thierry Marcelino Passerat de Silans (PPGF/UFPB), coorientador, Bertúlio de Lima Bernardo (PPGF/UFPB), Márcio Medeiros Soares (PPGF/UFPB), Luis Gustavo Marcassa (USP) e João Carlos de Aquino Carvalho (UFPE). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jesús Pavón López comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra para o candidato, para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição da pesquisa de tese intitulada “Caracterização Experimental e Numérica da Caminhada Aleatória dos Fótons em Células de Vapor de Césio: Efeitos de colisões atômicas, Transporte Superdifusivo e Voos de Lévy”. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora, que emitiu o parecer “**aprovado**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na forma da lei. E para constar, Ana Beatriz Cândido Vieira, Assistente em Administração, redigiu a presente ata que vai assinada pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **30 de julho de 2025**.

Documento assinado digitalmente
gov.br JESUS PAVON LOPEZ
Data: 04/08/2025 19:50:52-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente
gov.br THIERRY MARCELINO PASSERAT DE SILANS
Data: 01/08/2025 20:51:11-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Jesús Pavón López
Orientador - PPGF/UFPB

Prof. Dr. Thierry Marcelino Passerat de Silans
Coorientador - PPGF/UFPB

Documento assinado digitalmente
gov.br BERTULIO DE LIMA BERNARDO
Data: 01/08/2025 09:22:29-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente
gov.br MARCIO MEDEIROS SOARES
Data: 01/08/2025 17:24:28-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Bertúlio de Lima Bernardo
PPGF/UFPB

Prof. Dr. Márcio Medeiros Soares
PPGF/UFPB

Documento assinado digitalmente
gov.br LUIS GUSTAVO MARCASSA
Data: 30/07/2025 14:01:02-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente
gov.br JOAO CARLOS DE AQUINO CARVALHO
Data: 01/08/2025 06:12:00-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa
USP

Prof. Dr. João Carlos de Aquino Carvalho
UFPE

Dedicatória

*Dedico este trabalho aos meus pais,
Adalmi Nunes e Maria Cazé, e
a minha esposa, Raniza Carvalho.*

Agradecimentos

- À Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado da Paraíba, FAPESQ-PB, pela bolsa que proporcionou a dedicação exclusiva ao doutorado.
- A Universidade Federal da Paraíba e Unidade Acadêmica de Física desta mesma instituição, pela concessão de todo suporte tecnológico e de infraestrutura, para o execução deste trabalho.
- Ao meu orientador, Jesús Pavón López, e co-orientador, Thierry Marcelino Passerat de Silans, por todo suporte dado ao longo do doutorado.
- Aos meus pais, Adalmi e Maria, por proporcionar todo suporte emocional e financeiro, durante a execução deste trabalho.
- A minha esposa, Raniza, por toda compreensão e incentivo, durante a execução deste trabalho.
- Aos meus colegas de laboratório Álisson, Carlos, Igor, Vinícius, Gessiane, Isabel e Fernanda, por compartilharem todas as alegrias e frustrações ao longo desses anos desafiadores.

RESUMO

O aprisionamento radiativo em vapores atômicos densos é um processo fundamental que governa o transporte de luz, frequentemente manifestando-se como um transporte anômalo superdifusivo descrito por voos de Lévy. Contudo, a conexão quantitativa entre o parâmetro de Lévy, α , os parâmetros experimentais controláveis e o papel das colisões atômicas no transporte radiativo configura uma questão de alta complexidade, cujos mecanismos ainda não são plenamente compreendidos. Esta tese realizou uma investigação sistemática, teórica e experimental, da dinâmica de voos de Lévy em vapor de césio-133, caracterizando a dependência de α com a densidade atômica (N), o comprimento da célula (ℓ) e a intensidade do laser (I). A abordagem metodológica integrou medições de transmissão difusa a 10° e 90° , com relação a direção do feixe de laser de incidência, com o desenvolvimento de modelos teóricos, incluindo uma correção inédita para a finitude do sistema, e simulações de Monte Carlo. A análise revelou uma notável dualidade no transporte: enquanto a transmissão a 90° (espalhamento único) é descrita pela redistribuição parcial de frequência, conforme esperado para baixa densidade atômica onde a probabilidade de colisões atômica é baixa, a transmissão a 10° (múltiplos espalhamentos) apresentou o principal resultado paradoxal desta tese: mesmo em regimes de baixa probabilidade de colisão, os valores de α medidos são consistentemente descritos pelo cenário com colisões. Adicionalmente, quantificou-se de forma inédita a dependência complexa de α com N e ℓ . Conclui-se que a estatística do transporte pode serativamente sintonizada, mas que a natureza da caminhada aleatória do fóton em vapores atômicos é mais intricada do que os modelos atuais capturam, estabelecendo esta tese uma base experimental e computacional sólida e formulando as perguntas precisas que guiarão futuras investigações.

Palavras-chave: Voos de Lévy, Aprisionamento Radiativo, Vapores Atômicos, Transporte Anômalo, Simulações de Monte Carlo.

ABSTRACT

Radiative trapping in dense atomic vapors is a fundamental process governing the transport of light, often manifesting as anomalous superdiffusive transport described by Lévy flights. However, the quantitative connection between the Lévy exponent, α , the controllable experimental parameters, and the role of atomic collisions in radiative transport constitutes a highly complex issue, whose mechanisms are not yet fully understood. This thesis presents a systematic theoretical and experimental investigation of Lévy flight dynamics in cesium-133 vapor, characterizing the dependence of α on the atomic density (N), cell length (ℓ), and laser intensity (I). The methodological approach integrates diffuse transmission measurements at 10° and 90° relative to the incident laser beam direction with the development of theoretical models including a novel correction for finite-system effects and Monte Carlo simulations. The analysis reveals a remarkable duality in transport: while the 90° transmission (single scattering) is described by partial frequency redistribution, as expected at low atomic densities where the probability of atomic collisions is low, the 10° transmission (multiple scattering) yields the main paradoxical result of this thesis: even in regimes of low collision probability, the measured α values are consistently described by the collisional scenario. Furthermore, the complex dependence of α on N and ℓ is quantified for the first time. It is concluded that transport statistics can be actively tuned, but that the nature of the photon random walk in atomic vapors is more intricate than current models capture, thereby establishing a solid experimental and computational foundation and formulating the precise questions that will guide future investigations.

Keywords: Lévy flights; Radiative trapping; Atomic vapors; Anomalous transport; Monte Carlo simulations.

Lista de ilustrações

Figura 1.1 – Trajetória simulada e perfis de transmissão em vidros de Lévy	17
Figura 1.2 – Configuração experimental e resultados da medição da distribuição do tamanho do passo de fótons do artigo de Mercadier et al. (2009) [1]	20
Figura 1.3 – Esquema do arranjo experimental utilizado por Baudouin et al. (2014) [2] para investigar os voos de Lévy em vapor de rubídio	22
Figura 2.1 – Perfis de absorção normalizados $\kappa(\delta)/\kappa_0$ em função da dessintonia δ (em Hz) para diferentes valores de largura natural $\Gamma_0 = 1, 2$ e 3 Hz, no regime de baixa intensidade ($I/I_{\text{sat}} \ll 1$)	46
Figura 2.2 – Perfis de absorção em função da dessintonia normalizada δ/Γ_0 para diferentes razões de intensidade $I/I_{\text{sat}} = 0, 1, 2$ e 10	47
Figura 2.3 – Representação esquemática do efeito Doppler para um átomo em movimento	56
Figura 2.4 – Comparaçao dos perfis de Lorentz, Gauss e Voigt normalizados em escala logarítmica	59
Figura 2.5 – Diagramas comparativos do espalhamento ressonante no referencial do observador em repouso e do átomo	63
Figura 2.6 – Coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$ em função da frequência para a linha D2 ^{133}Cs a 100 °C	76
Figura 2.7 – Comparaçao das matriz de redistribuição de frequênci $R(x', x)$ integrada no ângulo para a linha D2 do césio-133 (^{133}Cs) a 100 °C, considerando dois níveis e todos os níveis hiperfinos	78
Figura 3.1 – Representação esquemática da caminhada aleatória de um fóton através de um meio turvo	82
Figura 3.2 – Esquema da Figura 3.1 com a adição das variáveis geométricas (z_i, z_f, z_0, ℓ) do meio, relevantes para o cálculo da transmissão difusa T_D conforme a Eq. 3.2.1	85

Figura 3.3 – Ilustração esquemática dos dois casos particulares de interesse que envolvem a detecção da transmissão difusa de primeiro espalhamento	93
Figura 3.4 – Evolução do espectro de emissão $\Theta_n(x')$ em função da frequência adimensional de emissão x' para diferentes números de espalhamentos $n = 1, 3, 7, 19, 50$, e 100, considerando a estrutura hiperfina do Césio-133 no Cenário III (com colisões)	99
Figura 3.5 – Evolução do espectro de emissão e da distribuição de probabilidade do tamanho de salto com o número de espalhamentos n para o Césio-133 em sua linha D2	103
Figura 3.6 – Evolução do espectro de emissão e da distribuição de tamanho de passo com o número de espalhamentos	107
Figura 3.7 – Função Densidade de Probabilidade (PDF, à esquerda) e Função de Distribuição Acumulada (CDF, à direita) para uma distribuição de Pareto com $z_m = 1$ e diferentes valores do expoente α	118
Figura 3.8 – Simulações de Monte Carlo bidimensionais das trajetórias aleatórias de três partículas, cada uma regida por uma distribuição de Pareto com $z_m = 1$ u.a., $n = 10^6$ passos e com valores distintos do expoente α	121
Figura 3.8 – Simulações de Monte Carlo bidimensionais das trajetórias aleatórias de três partículas, cada uma regida por uma distribuição de Pareto com $z_m = 1$ u.a., $n = 10^6$ passos e com valores distintos do expoente α	122
Figura 3.9 – Evolução do parâmetro de Lévy, obtido a partir da inclinação da distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$ em escala monolog no eixo horizontal para diferentes ordens de espalhamento n	127
Figura 4.1 – Diagrama hiperfino da linha D2 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{3/2}$) do césio-133	132
Figura 4.2 – Ilustração esquemática de uma célula de vapor atômico e da interação da luz com o meio	133
Figura 4.3 – Diagramas esquemáticos das células de vapor atômico utilizadas nos experimentos	133

Figura 4.4 – Fotografias das células de vapor atômico de césio acopladas aos seus respec- tivos fornos	137
Figura 4.5 – Diagrama esquemático da construção do forno	139
Figura 4.6 – Diagrama esquemático da montagem experimental utilizada para as medições de transmissão difusa e para a caracterização do sistema	141
Figura 4.7 – Sinais experimentais adquiridos simultaneamente durante a varredura da frequên- cia do laser em torno das transições do estado fundamental $F=4$ da linha D2 do Césio-133	145
Figura 4.8 – Diagrama esquemático da configuração experimental utilizada para a detecção da fluorescência (luz espalhada) a 90°	147
Figura 4.9 – Diagrama esquemático do arranjo para a medição da transmissão difusa a 10°	150
Figura 4.10–Ilustração do procedimento para determinação da potência de saturação (P_{sat})	153
Figura 4.11–Ilustração do processo de calibração em frequência para os espectros de ab- sorção saturada, referentes à primeira medição de transmissão difusa a 10° na célula de 1 cm	155
Figura 4.12–Ilustração do método numérico utilizado para a validação dos dados através da análise da largura do espectro de transmissão coerente	156
Figura 4.13–Comparação visual entre uma seleção de medidas individuais e os espectros médios resultantes, referentes à primeira medição de transmissão difusa a 10° na célula de 1 cm	158
Figura 4.14–Ilustração do processo de normalização dos espectros pela rampa de potência, referentes à primeira medição de transmissão difusa a 10° na célula de 1 cm .	160
Figura 4.15–Evolução do processo iterativo para a determinação da densidade atômica, referentes à quinta medição de transmissão difusa a 10° na célula de 2 cm .	161
Figura 4.16–Exemplo dos espectros finais após a aplicação de todo o protocolo de tra- tamento de dados para uma medição a 10° com densidade atômica de $N \approx$ 1.04×10^{19} átomos/m ³	164

Figura 4.17–Exemplo de determinação do expoente de Lévy (α) a partir do ajuste da transmissão difusa total (T_D) em função da profundidade óptica da amostra (r), conforme metodologia de Macedo et al. (2021) [3]	165
Figura 4.18–Ilustração do processo de ajuste da lei de potência para a determinação do expoente de Lévy α , referente à primeira medição da célula de 2 mm	167
Figura 4.19–Análise teórica da contribuição do primeiro evento de espalhamento para a transmissão difusa, em função da dessintonia em frequência	169
Figura 4.20–Ilustração do desvio do comportamento de lei de potência, exemplificado com os dados da primeira medição da célula de 2 mm	171
Figura 4.21–Comparativo entre os espectros de transmissão difusa a 90° em uma ampla faixa de dessintonia	172
Figura 4.22–Análise detalhada das asas espectrais da transmissão difusa a 90° , com foco na região de dessintonia entre 3.0 e 3.5 GHz	175
Figura 4.23–Demonstração visual da sensibilidade do método de ajuste para extrair o expoente de Lévy α , utilizando as medições 1, 5, 6 e 7 da célula de 2 cm	177
Figura 4.24–Comparação entre os valores experimentais do expoente de Lévy e as previsões teóricas para seis condições distintas de aprisionamento	180
Figura 4.25–Evolução teórica da posição média do primeiro espalhamento, $\langle z_0 \rangle$, em função da dessintonia para diferentes intensidades de saturação (I/I_{sat})	182
Figura 5.1 – Simulação de Monte Carlo da caminhada aleatória de um único fóton em um vapor atômico a 60°C ($P_c = 1.55\%$), aprisionado em uma célula cilíndrica . .	195
Figura 5.2 – Validação do método de simulação utilizando as matriz de redistribuição de frequência para o Cenário II (PFR)	199
Figura 5.3 – Validação do método de simulação utilizando as matriz de redistribuição de frequência para o Cenário III (CFR)	200
Figura 5.4 – Validação do método de simulação utilizando as matriz de redistribuição de frequência para o Cenário Resultante (ponderação por P_c)	201
Figura 5.5 – Validação do fator de truncagem para o Cenário II	205

Figura 5.5 – Validação do fator de truncagem para o Cenário II utilizando a simulação com o método da matriz redistribuição de frequência	206
Figura 5.6 – Espectros de transmissão difusa a 90° simulados via Monte Carlo para quatro condições de temperatura do reservatório (T_r) e probabilidade de colisão (P_c)	208
Figura 5.7 – Comparaçāo entre os espectros de transmissão frontal obtidos por simulações com matrizes de redistribuição de frequência e com Monte Carlo, para $N = 4.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ e $N = 2.1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$	211
Figura C.1 – Diagrama da estrutura hiperfina da linha D1 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$) do Césio-133	225
Figura C.2 – Procedimento para determinação da potência de saturação (P_{sat})	226
Figura C.3 – Diagrama esquemático do arranjo experimental utilizado para a medição da largura de linha atômica	227
Figura C.4 – Processo de tratamento de dados para a extração da largura de linha atômica	229
Figura C.5 – Ilustração do tratamento de dados para a medição da largura de linha do laser	230

Lista de tabelas

Tabela 1 – Resumo dos parâmetros para a linha D2 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{3/2}$) do Césio-133	131
Tabela 2 – Valores medidos da FWHM, em MHz, para as transições hiperfinas da linha D1 do Césio-133	135
Tabela 3 – Resultados da medição da largura espectral do laser (Γ_{laser})	136
Tabela 4 – Estimativa da largura de linha atômica (Γ_0) para a verificação da pureza de cada uma das células de Césio-133 a serem utilizadas nos experimentos	136
Tabela 5 – Parâmetros experimentais utilizados nas medições a de transmissão difusa a 90°	148
Tabela 6 – Parâmetros experimentais utilizados nas medições de transmissão difusa, consolidados para as células com comprimentos ℓ de 0.2 cm, 1.0 cm e 2.0 cm	151
Tabela 7 – Resumo dos valores da razão entre a intensidade do feixe e a intensidade de saturação (I/I_{sat}) para cada medição experimental	152
Tabela 8 – Resumo dos valores da densidade atômica (N), em m^{-3} , determinados experimentalmente para cada medição	162
Tabela 9 – Parâmetros relevantes para cada medição	163
Tabela 10 – Valores do expoente de Lévy (α) de cada medição	176
Tabela 11 – Valores teóricos do expoente de Lévy (α) para diferentes condições experimentais	179
Tabela 12 – Tabela comparativa dos valores do expoente de Lévy (α) obtidos a partir das simulações de Monte Carlo para $N = 4.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ e $N = 2.1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$.	210
Tabela 13 – Parâmetros da linha D1 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$) do Césio-133 relevantes para a análise de pureza	225

Lista de siglas

Sigla	Descrição
CCD	<i>Charge-Coupled Device</i> (Dispositivo de Carga Acoplada)
CDF	<i>Cumulative Distribution Function</i> (Função de Distribuição Acumulada)
CFR	<i>Complete Frequency Redistribution</i> (Redistribuição Completa de Frequência)
Cs	Césio
DC	<i>Direct Current</i> (Corrente Contínua)
FPI	<i>Fabry-Pérot Interferometer</i> (Interferômetro de Fabry-Pérot)
FRD	<i>Frequency Redistribution</i> (Redistribuição de Frequência)
FRF	<i>Frequency Redistribution Function</i> (Função de Redistribuição de Frequência)
FWHM	<i>Full Width at Half Maximum</i> (Largura Total à Meia Altura)
ODF	<i>Opacity Distribution Function</i> (Função de Distribuição de Opacidades)
PDF	<i>Probability Density Function</i> (Função Densidade de Probabilidade)
PFR	<i>Partial Frequency Redistribution</i> (Redistribuição Parcial de Frequência)
Rb	Rubídio
TCL	Teorema Central do Limite
u.a.	Unidades Arbitrárias

Lista de símbolos

Símbolo	Descrição
α	Expoente de Lévy; caracteriza o regime de transporte
α_n	Fator da constante de acoplamento do potencial de interação
β	Coeficiente de alargamento colisional
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo
ϵ_r	Permissividade elétrica relativa
γ	Expoente do regime de transporte, $\langle r^2(t) \rangle \propto t^\gamma$
Γ	Largura de linha espectral (FWHM)
Γ_0	Largura de linha natural (FWHM)
Γ_c	Largura de linha colisional (FWHM)
$\Gamma_{0,c}$	Largura de linha total (natural + colisional)
Γ_D	Largura de linha Doppler (FWHM)
Γ_{eff}	Largura de linha efetiva (FWHM)
Γ_{laser}	Largura espectral do laser (FWHM)
$\Gamma_{\text{laser},0}$	Largura espectral do laser adicionada da natural (FWHM)
$\Gamma_{\text{SUBSCRITO}}^\nu$	Largura de linha em frequência linear ($\Gamma/2\pi$), onde o subscrito denota a origem
δ	Dessintonia em frequência angular ($\omega - \omega_0$)
δ_A	Dessintonia em frequência angular no referencial do átomo
ΔE	Incerteza na energia
Δt	Incerteza no tempo
$\Delta\omega$	Incerteza na frequência angular
$\hat{\varepsilon}$	Vetor unitário de polarização do campo elétrico
θ	Ângulo de espalhamento
θ_{lente}	Meio ângulo de abertura da lente de detecção
$\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}})$	Função de Redistribuição de Frequência (FRF)
$\Theta_{\text{at}}(\dots)$	FRF no referencial atômico
$\Theta_n(\nu')$	Espectro de emissão após n espalhamentos
$\kappa(\nu)$	Coeficiente de absorção geral, dependente da frequência ν (perfil de Voigt)
κ_0	Coeficiente de absorção em ressonância ($\delta = 0$)
$\kappa_\chi(\delta)$	Coeficiente de absorção com alargamentos natural e por potência
$\kappa_{\chi,c}(\delta)$	Coeficiente de absorção com alargamentos natural, por potência e colisional
λ, λ_0	Comprimento de onda da radiação
μ	Magnitude do momento de dipolo elétrico
$\hat{\mu}$	Operador vetorial do momento de dipolo elétrico
μ_{ij}	Elemento de matriz do momento de dipolo entre os estados i e j

Continua na próxima página

– Continuação da Lista de Símbolos –

Símbolo	Descrição
μ_r	Permeabilidade magnética relativa
ν	Frequência linear do fóton
ν_0	Frequência linear de ressonância atômica
ν'	Frequência linear do fóton reemitido ou espalhado
$\nu_{FF'}$	Frequência da transição entre os subníveis hiperfinos F e F'
$\hat{\rho}$	Operador da matriz densidade
ρ_{ij}	Elementos da matriz densidade
ρ_W	Raio de Weisskopf
σ	Desvio padrão
σ_{ij}	Elementos da matriz densidade no referencial de variáveis lentas
τ_0	Tempo de vida característico do decaimento natural
τ_c	Tempo de vida característico colisional
$\text{Var}(z)$	Variância da posição ou do tamanho do passo
$\Phi_A(\nu)$	Perfil de absorção normalizado (função de Voigt)
$\chi^{(1)}, \chi(\omega)$	Susceptibilidade elétrica linear
$\Psi(\vec{r}, t), \Psi(\vec{r}, t)\rangle$	Função de onda (e vetor de estado) do sistema quântico
$ \psi_n(\vec{r})\rangle$	Autoestado estacionário do hamiltoniano
ω	Frequência angular da radiação
ω_0	Frequência angular de ressonância atômica
ω_A	Frequência angular percebida no referencial do átomo
Ω_{lente}	Ângulo sólido de coleta da lente de detecção
Ω, Ω_{mn}	Frequência de Rabi
Ω_S	Ângulo sólido de detecção ou propagação
a	Parâmetro de Voigt
$a_n(t)$	Amplitude de probabilidade do estado n
A	Constante de acoplamento dipolar magnético
A_{eff}	Área efetiva do feixe
$b_n(t)$	Amplitude de probabilidade no formalismo de variáveis lentas
B	Constante de acoplamento quadrupolar elétrico
$B(a, b)$	Função Beta de Euler
C_n	Constante de acoplamento do potencial de interação $V(r) \propto r^{-n}$
c	Velocidade da luz no vácuo
$\text{comp}, d, h, R, \ell$	Dimensões das células
$d_{\text{lente/célula}}$	Distância entre a lente de detecção e a célula
D	Coeficiente de difusão
\vec{D}	Vetor deslocamento elétrico
e^-	Carga elementar
$\vec{E}, \vec{E}_0, \vec{E}_0 $	Vetor campo elétrico, sua amplitude e módulo
E_n	Autovalor de energia de um estado n
E_{hfs}	Energia do subnível hiperfino

Continua na próxima página

– Continuação da Lista de Símbolos –

Símbolo	Descrição
E_T	Energia térmica
F, F'	Número quântico do momento angular total hiperfino
$F(z)$	Função de Distribuição Acumulada (CDF)
$F(a, b, c, d)$	Função hipergeométrica
g	Fator de escape da radiação
g_F	Fator de degenerescência do nível hiperfino F
$G(\vec{r}', \vec{r})$	Função de Green do transporte radiativo
$\hat{\mathcal{H}}$	Operador Hamiltoniano
$\hat{\mathcal{H}}_0$	Hamiltoniano não-perturbado do sistema
$\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}$	Termo do Hamiltoniano de interação com campo externo
$\hat{\mathcal{H}}_{\text{dip}}$	Termo do Hamiltoniano de interação de dipolo elétrico
\hbar	Constante de Planck reduzida
\bar{h}	Hamiltoniana de um único átomo
$\hbar\nu, \hbar\nu'$	Energia do fóton (incidente, emitido)
I	Intensidade do feixe de laser
I_s	Número quântico do momento angular de spin nuclear
\vec{I}_s	Momento angular de spin nuclear
I_{sat}	Intensidade de saturação da transição atômica
J	Número quântico do momento angular eletrônico total
\vec{J}	Momento angular eletrônico total
\vec{k}, \vec{k}'	Vetor de onda do fóton (incidente, reemitido)
k_B	Constante de Boltzmann
K	Termo de acoplamento hiperfino $F(F+1) - I_s(I_s+1) - J(J+1)$
l, l_i	Comprimento do passo na caminhada aleatória
$l_{\text{esc}}(z_0)$	Distância de escape a partir da posição z_0
L_c	Perfil de Lorentz
m	Massa atômica
Média(x)	Média amostral
N	Densidade atômica do vapor
$N(\vec{r}, t)$	Densidade de átomos excitados na posição \vec{r} e no tempo t
N_e, N_g	Densidade populacional dos estados excitado e fundamental
n_r	Índice de refração do meio
O, r_l	Profundidade óptica/distância adimensional
\vec{P}	Vetor polarização elétrica do meio
P_0	Potência do feixe incidente
$P(\delta)$	Potência transmitida na dessintonia δ
$P(r)$	Função Densidade de Probabilidade (PDF) do tamanho do passo
$P(l \nu')$	PDF do tamanho do passo l , dada a frequência ν'
$P(v_{\parallel})$	Densidade de probabilidade da componente paralela da velocidade
$P(\nu, z_0)$	PDF de absorção na posição z_0

Continua na próxima página

– Continuação da Lista de Símbolos –

Símbolo	Descrição
$P(z, t)$	PDF de encontrar uma partícula em z no instante t
$p_A(\nu)$	Densidade de probabilidade de absorção na frequência ν
$p_E(\nu', \nu)$	Densidade de probabilidade condicional de emissão
$p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}})$	Densidade de probabilidade angular da emissão
P_c	Probabilidade de colisão descorrelacionadora
P_{sat}	Potência de saturação
$\vec{\mathbf{p}}$	Vetor momento linear
$\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}'}$	Vetor posição
$\vec{\mathbf{r}}_d$	Braço do momento de dipolo elétrico
$\vec{\mathbf{r}}_\varepsilon$	Vetor posição na direção do campo elétrico
$R(x', x)$	Função de redistribuição de frequência integrada no ângulo
R_l	Raio efetivo da lente de detecção
$S_{FF'}$	Fator de força de oscilador para a transição $F \rightarrow F'$
t	Tempo
T	Temperatura absoluta
$T_D, T_D(r)$	Transmissão difusa (total e perfil espacial)
$T_{D,1}(\nu)$ e $T_{D,M}(\nu)$	Contribuição do primeiro (ou múltiplos) espalhamento(s) para a transmissão difusa
$T_D^E(z_0)$	Fração de fôtons que escapam por transmissão difusa após absorção em z_0
T_j, T_r	Temperatura da janela e do reservatório da célula
$T(\nu)$	Transmitância balística
u	Velocidade atômica mais provável (distribuição de Maxwell-Boltzmann)
$\vec{\mathbf{v}}$	Vetor velocidade do átomo
\bar{v}	Velocidade média dos átomos
v_r	Velocidade de propagação da luz no meio
v_{\parallel}, v_{\perp}	Componentes da velocidade atômica (paralela, perpendicular)
V	Volume
x, x'	Frequências adimensionais normalizadas pela largura Doppler
\underline{x}, \bar{x}	Mínimo e máximo entre duas frequências adimensionais, $\min(x' , x)$ e $\max(x' , x)$
X_i, Y_i	Pontos de intensidade de espectros para cálculo de correlação
z	Coordenada espacial ou comprimento do passo
\bar{z}	Média amostral dos passos na simulação
z_0	Posição (profundidade) do primeiro espalhamento
z_i, z_f	Coordenadas da face de entrada e saída do meio
z_m	Parâmetro de escala da distribuição de Pareto (valor mínimo)
Z_n	Variável padronizada no Teorema Central do Limite

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Fundamentos do Aprisionamento Radiativo e da Redistribuição de Frequência	2
1.1.1	Primeiros Modelos e o Paradigma Difusivo	2
1.1.2	O Modelo de Holstein: A Hipótese de Redistribuição Completa (CFR)	5
1.1.3	Avanços Teóricos: A Teoria da Redistribuição Parcial de Frequência (PFR)	7
1.2	Voos de Lévy no Transporte de Radiação: Fundamentos e Medidas Experimentais	12
1.2.1	Fundamentos Teóricos do Transporte Superdifusivo	12
1.2.2	O Conceito de Voos de Lévy e sua Universalidade	14
1.2.3	Medição Experimental do Expoente de Lévy	16
1.3	Síntese e Proposta Desta Tese	25
1.4	Objetivos	26
1.5	Estrutura da Tese	27
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA		32
2	INTERAÇÃO MATÉRIA-RADIAÇÃO	32
2.1	Absorção Atômica	32
2.1.1	Equações de Bloch	33
2.1.2	Coeficiente de Absorção do Meio	38
2.2	Alargamentos Espectrais	44
2.2.1	Alargamento Natural	44
2.2.2	Alargamento por Potência	45
2.2.3	Alargamento Colisional	48
2.2.4	Alargamento Doppler	54
2.3	Emissão Atômica	58

2.3.1	Teoria da Redistribuição de Frequência: Parcial e Completa	59
2.3.2	Função Redistribuição de Frequência	61
2.3.2.1	Função Densidade de Probabilidade Angular	65
2.3.2.2	Função Densidade de Probabilidade de Absorção e Emissão	65
2.3.3	Perfis Integrado no Ângulo	69
2.4	Sistemas de n-Níveis: Estruturas Hiperfinas	71
2.4.1	Estrutura Hiperfina	71
2.4.2	Implementação nas Formulação da Absorção e Emissão Atômica	72
3	APRISIONAMENTO RADIATIVO	80
3.1	Caminhada Aleatória dos Fótons: Descrição Fenomenológica	81
3.1.1	Transporte Radiativo em Meios Turvos	81
3.1.2	Aleatoriedade na Direção de Espalhamento	81
3.1.3	Aleatoriedade na Amplitude do Passo	82
3.2	Transmissão Difusa	83
3.2.1	Expressão Geral da Transmissão Difusa	84
3.2.2	Primeiro Espalhamento	88
3.2.2.1	Distribuição de Probabilidade de Tamanho de Passo	88
3.2.2.2	Transmissão por Espalhamento Único	90
3.2.2.3	Casos de Interesse	91
3.2.3	Múltiplos Espalhamento	95
3.2.3.1	Distribuição de Probabilidade de Tamanho de Passo	95
3.2.3.2	Evolução do Espectro de Emissão	96
3.2.3.3	Truncagem na Amplitude dos Passos dos Sistemas Finitos	102
3.2.3.4	Transmissão Difusa Total	106
3.3	Voos de Lévy	108
3.3.1	Regimes de Transporte	109
3.3.2	Regime Difusivo	111
3.3.2.1	Teorema Central do Limite (TCL)	111

3.3.2.2	Movimento Difusivo	112
3.3.3	Fundamentos Estatísticos dos Voos de Lévy	113
3.3.4	Voos de Lévy versus Movimento Difuso: Uma Análise com a Distribuição de Pareto	114
3.3.4.1	Distribuição de Pareto	115
3.3.4.2	Simulações de Monte Carlo Bidimensionais	120
3.3.5	Transmissão Difusa e Voos de Lévy	124

EXECUÇÃO TÉCNICA DO ESTUDO: LABORATÓRIO E ALGORÍTIMOS 129

4	ABORDAGENS EXPERIMENTAIS	129
4.1	Células de Vapor de Césio com Fornos Integrados	129
4.1.1	Césio-133	130
4.1.2	Células de Vapor Atômico	131
4.1.2.1	Descrição Geométrica	132
4.1.2.2	Pureza Atômica	134
4.1.3	Fornos Integrados	137
4.2	Técnicas Experimentais e Tratamento de Dados	138
4.2.1	Diagrama Experimental e Sinais Captados	138
4.2.2	Detecção da Transmissão Difusa	145
4.2.2.1	Transmissão Difusa à 90°	146
4.2.2.2	Transmissão Difusa à 10°	149
4.2.3	Tratamento de Dados	151
4.2.3.1	Ajuste da Lei de Potência	165
4.3	Resultados e Discussão	170
4.3.1	Transmissão à 90°	170
4.3.2	Transmissão à 10°	175
4.4	Conclusão do Capítulo	183
5	CAMINHADA ALEATÓRIA DOS FÓTONS: MÉTODO DE MONTE CARLO	186

5.1	Simulações de Monte Carlo no Aprisionamento Radiativo	186
5.1.1	Descrição das Simulações	187
5.1.2	Vantagens e Desvantagens do Método	188
5.2	Rotinas Computacionais	189
5.2.1	Método com Seleção de Velocidade	190
5.2.2	Método com Matriz Redistribuição de Frequência	194
5.2.2.1	Validação do Método	197
5.2.3	Condições de Contorno e Transmissão Difusa	202
5.3	Resultados e Discussão	203
5.3.1	Fator $[1-T(\nu)]$	203
5.3.2	Transmissão a 90°	207
5.3.3	Transmissão para Frente	209
5.4	Conclusão do Capítulo	213
6	CONCLUSÃO	215
APÊNDICES		220
A	CONVOLUÇÃO DE DUAS LORENTZIANAS	220
B	CÓDIGOS DAS SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO COM DISTRIBUIÇÃO DE PARETO	222
C	EXPERIMENTO DA PUREZA ATÔMICA	224
D	ROTINAS COMPUTACIONAIS DE MONTE CARLO	231
REFERÊNCIAS		259

1 Introdução

O aprisionamento radiativo (*radiation trapping*, em inglês) é o fenômeno em que fôtons emitidos por átomos ou moléculas excitadas são reabsorvidos por outras partículas do meio antes de conseguirem escapar, prolongando seu tempo de permanência no sistema [4, 5]. Uma forma intuitiva de entender esse fenômeno é através da caminhada aleatória realizada pelos fôtons: a cada emissão por um átomo excitado, o fôton percorre uma certa distância até ser reabsorvido por outro átomo no estado fundamental, iniciando um novo ciclo; esse processo se repete diversas vezes até que o fôton, eventualmente, escape do meio ou seja extinto por outros mecanismos [6, 7].

Mais amplamente, esse fenômeno ilustra como interações repetidas entre radiação e matéria podem dar origem a dinâmicas complexas de transporte, oferecendo uma base conceitual útil para o estudo de diversos processos, como a transferência radiativa em física atômica [8] e, em contextos atmosféricos, o aprisionamento de radiação no efeito estufa, onde o espalhamento múltiplo de fôtons por nuvens leva a caminhos geométricos estendidos para a luz, sendo um processo estatístico [9, 10]. Esse mecanismo é particularmente importante em sistemas com alta densidade óptica, como meios plasmáticos [11–13], atmosferas estelares [14–16] e vapores atômicos [17–19], onde a elevada taxa de reabsorções sucessivas de fôtons torna o transporte radiativo um processo altamente complexo [20].

Além de seu interesse teórico, o aprisionamento radiativo revelou-se também de grande importância prática. Diversas tecnologias se beneficiam ou precisam levar em conta os efeitos desse fenômeno, como é o caso da física de plasmas [21], lâmpadas fluorescentes [22], lasers [23–25], monitores e televisores de plasma [26], e concentradores solares luminescentes [27, 28]. Mais recentemente, ele passou a desempenhar um papel central em experimentos com átomos frios [29], bem como em investigações sobre transporte anômalo de luz em vapores atômicos quentes, nos quais múltiplos eventos de absorção e reemissão podem induzir comportamentos estatísticos compatíveis com distribuições do tipo Lévy [30].

1.1 Fundamentos do Aprisionamento Radiativo e da Redistribuição de Frequência

O aprisionamento radiativo e a redistribuição de frequência (FRD) são dois pilares conceituais para a compreensão do transporte de luz em meios densos. A descrição teórica desses fenômenos evoluiu significativamente ao longo do século XX, partindo de modelos macroscópicos simples para formulações quânticas cada vez mais sofisticadas.

1.1.1 Primeiros Modelos e o Paradigma Difusivo

O marco inicial do estudo do aprisionamento radiativo foi em 1922, quando Compton, no artigo “*Theory of ionization by cumulative action and the low voltage arc*” [31], descreveu como a radiação de ressonância gerada após um impacto eletrônico pode ser absorvida por moléculas neutras próximas, que se tornam parcialmente ionizadas e reemitem radiação. Ele comparou esse processo à difusão de um gás, argumentando que a ionização provocada pela absorção dessa radiação era mais relevante do que a causada por impactos eletrônicos diretos para explicar o comportamento de arcos de baixa voltagem. Poucos anos depois, em 1926, Milne [32], inspirado nas observações de Hayner [33], desenvolveu teoricamente o conceito de “aprisionamento de radiação” monocromática, propondo uma equação de difusão que levava em conta o tempo médio em que os quanta de radiação permanecem retidos no meio. Embora o foco de seu estudo fosse o decaimento da radiação no vapor de mercúrio após o desligamento da fonte de luz, Milne também apontou a relevância do fenômeno para a atmosfera solar.

A partir desses primeiros esforços para caracterizar o aprisionamento radiativo como um processo difusivo, tornou-se evidente a necessidade de compreender em maior detalhe os mecanismos subjacentes à absorção e à reemissão da luz nesses meios. Essa busca levou, nas décadas seguintes, ao desenvolvimento de uma descrição mais completa dos processos microscópicos envolvidos, em especial a teoria da redistribuição de frequência (FRD, do inglês *Frequency Redistribution*), que se tornou fundamental para descrever como a frequência dos fôtons pode ser alterada ao longo de múltiplos eventos de absorção e emissão dentro do meio.

O reconhecimento da importância da FRD surgiu inicialmente no contexto da astrofísica,

especialmente na tentativa de explicar as características observadas nas linhas espectrais de absorção em atmosferas estelares [15]. Nesse contexto, o fenômeno da absorção atômica já era bem compreendido, mas persistia uma incerteza fundamental quanto ao espectro dos fótons após a reemissão. Essa questão foi levantada de forma incisiva por Eddington (1929) [34], que destacou a importância de saber se a luz absorvida em uma linha espectral seria ou não reemitida na mesma frequência. Essa reflexão marcou um ponto de inflexão ao chamar atenção para a possibilidade e as implicações da redistribuição de frequência na formação dos perfis de emissão, especialmente porque muitas interpretações contemporâneas ainda assumiam a ausência de tal redistribuição.

Posteriormente, em 1932, Kenty, em seu artigo “*On Radiation Diffusion and the Rapidity of Escape of Resonance Radiation from a Gas*” [35], aprofundou a compreensão do processo de difusão da radiação de ressonância. Kenty analisou o fenômeno sob a perspectiva dos caminhos livres dos quanta de radiação, influenciados pelo efeito Doppler e outros mecanismos de alargamento de linha. Embora seus cálculos detalhados no artigo tenham assumido o efeito Doppler como a única causa de alargamento para simplificar a derivação matemática, a discussão geral e as conclusões do trabalho consideram explicitamente o impacto de outros mecanismos, como o alargamento por pressão, especialmente em densidades de gás mais elevadas. Uma conclusão central de seu trabalho foi que caminhos livres “anormalmente longos” desempenham um papel de grande importância, permitindo que a radiação de ressonância escape de um gás mais rapidamente do que se supunha com base nas teorias anteriores, que muitas vezes tratavam os quanta como se tivessem um coeficiente de absorção médio. Kenty demonstrou que, para um gás de tamanho infinito, o coeficiente de difusão, o caminho livre quadrático médio e o caminho livre médio seriam infinitos devido a esses longos percursos. Ele também ressaltou que outros efeitos de alargamento de linha, como o acoplamento e efeitos de pressão, aumentariam ainda mais a relevância dos caminhos livres extremamente longos e, consequentemente, a rapidez com que a radiação de ressonância escapa do gás. Suas conclusões foram corroboradas por experimentos em vapor de mercúrio, que mostravam um escape mais rápido da radiação do que o previsto pelas teorias clássicas de difusão.

Dando seguimento à questão sobre o espectro dos fótons reemitidos, os trabalhos de Spitzer (1936) [36] e Woolley (1938) [37] foram pioneiros ao aplicar formalmente a teoria quântica da largura natural das linhas. Spitzer concentrou-se em derivar fórmulas para a transferência de radiação entre as diferentes partes de uma linha e modificou a equação de transferência radiativa para incluir esses efeitos, enquanto Woolley desenvolveu expressões para a função de probabilidade de redistribuição e o coeficiente de espalhamento, buscando soluções para a formação da linha por meio de aproximações sucessivas. Dando continuidade a essa linha de investigação, Henyey (1940) [38] examinou explicitamente o papel do efeito Doppler como mecanismo fundamental para a redistribuição de frequência em linhas de ressonância. Em seu trabalho, ele considerou um coeficiente de absorção que incorporava tanto o alargamento por decaimento natural quanto o alargamento Doppler, demonstrando que as diferenças entre os desvios Doppler na absorção e na reemissão, resultantes das velocidades térmicas dos átomos, levam inevitavelmente à redistribuição de frequência da radiação espalhada. A partir disso, Henyey derivou a função de redistribuição de frequência correspondente, a qual inclui explicitamente o efeito da largura natural por meio de um parâmetro de decaimento. Em seu modelo, a redistribuição emerge da combinação entre o espalhamento coerente no referencial do átomo e os deslocamentos Doppler causados pelo movimento térmico, evidenciando que mesmo processos localmente coerentes produzem efeitos de redistribuição quando vistos no referencial do laboratório. Essa formulação já antecipava, de forma clara, as limitações dos modelos puramente coerentes para a descrição precisa dos espectros e da transferência radiativa em meios astrofísicos.

Em 1941, Zanstra [39] demonstrou que o decaimento por colisão altera fundamentalmente o processo de reemissão da luz. Ele estabeleceu que, para a luz absorvida nas asas de uma linha espectral, as colisões induzem uma redistribuição de frequência, fazendo com que uma porção significativa dessa energia seja reemitida em frequências próximas ao centro da linha, enquanto apenas uma fração residual é novamente espalhada coerentemente na frequência original, sendo esta última a que manteria as propriedades de polarização. Dessa forma, ficou estabelecido que o decaimento por colisão era um mecanismo físico que resultava no espalhamento não coerente de parte dos fótons. Expandindo essa linha de investigação, em 1944, Spitzer [40] sistematizou

os principais fatores físicos responsáveis pela não-coerência no espalhamento, destacando o decaimento radiativo (alargamento natural da linha), o alargamento por pressão (decorrente de colisões) e o efeito Doppler (decorrente do movimento térmico dos átomos). Posteriormente, Zanstra (1946) [41] reforçou esse entendimento ao argumentar que a ausência de polarização em diversas linhas de Fraunhofer constituía uma evidência observacional clara da supressão do espalhamento coerente, indicando a predominância do espalhamento não coerente em atmosferas estelares.

1.1.2 O Modelo de Holstein: A Hipótese de Redistribuição Completa (CFR)

Com o passar dos anos, a compreensão teórica do aprisionamento radiativo e da FRD continuou a progredir significativamente e, em 1947, Holstein publicou seu primeiro modelo analítico de uma equação integro-diferencial do transporte radiativo [42]. Neste trabalho seminal, ele investigou a probabilidade $T(\vec{r})$ de um quantum atravessar uma camada de gás de espessura r sem ser absorvido, considerando os efeitos do alargamento Doppler e à pressão, este último também denominado alargamento por dispersão. A formulação geral do problema de transporte foi estabelecida por meio de uma equação integro-diferencial do tipo Boltzmann. Uma conclusão importante foi a demonstração de que, para distribuições espectrais Doppler ou de dispersão, o conceito de um caminho livre médio definido para os quanta de ressonância não é aplicável, contrastando com abordagens anteriores. Holstein também discutiu o método variacional para obter soluções de estado estacionário e aplicou sua teoria para avaliar a taxa de decaimento da excitação em uma geometria de placas plano-paralelas infinitas, comparando os resultados com dados experimentais para o vapor de mercúrio. Quatro anos depois, em 1951, Holstein publicou um segundo artigo [43], que expandiu significativamente seu tratamento anterior. Nesta continuação, a teoria foi estendida para incluir uma geometria de cilindros infinitos e para abranger uma variedade mais ampla de formas de linha espectral, com uma análise detalhada de diferentes tipos de alargamento por pressão, como o de impacto e o estatístico, e seus efeitos sobre a probabilidade de transmissão $T(\vec{r})$ e o fator de escape g . O trabalho de 1951 também apresentou um cálculo sistemático e um sumário dos fatores de escape para essas novas condições geométricas e espetrais.

Para desenvolver esse tratamento analítico, Holstein adotou uma série de hipóteses simplificadoras que definem o escopo e os limites de aplicabilidade de seu modelo. Entre elas, destaca-se a suposição central de redistribuição completa de frequência (CFR, do inglês *Complete Frequency Redistribution*), segundo a qual a frequência do fóton reemitido é sorteada de forma independente a partir do perfil de emissão, sem qualquer memória da frequência de absorção anterior. Além dessa suposição central, o modelo adota ainda as seguintes hipóteses [42, 43]:

- **Sistema de dois níveis:** Apenas dois níveis de energia são considerados, um nível fundamental e um único nível excitado. Isso garante que o decaimento radiativa ocorra exclusivamente para o estado fundamental, sem a participação de níveis intermediários.
- **Emissão isotrópica:** Os fótons são reemitidos igualmente em todas as direções, sem preferência angular.
- **Tempo de voo desprezível:** O tempo necessário para um fóton viajar entre dois eventos consecutivos de absorção e emissão é considerado desprezível em comparação ao tempo de vida médio do estado excitado, τ_0 .
- **Átomos estacionários durante o estado excitado:** As velocidades térmicas dos átomos são consideradas suficientemente pequenas para que a posição de emissão coincida com a posição de absorção. Ou seja, o átomo não se desloca significativamente durante o tempo em que permanece excitado.
- **Distribuição espacial uniforme:** A densidade de átomos no estado fundamental é assumida como uniforme em todo o volume do meio.
- **Ausência de não-linearidades:** A população atômica nos estados fundamental e excitado deve ser suficientemente baixa para garantir que efeitos não lineares, como reabsorção estimulada ou saturação, possam ser desprezados.
- **Paredes perfeitamente absorventes:** As paredes do recipiente que confina o vapor são tratadas como não refletoras e não contribuem para o transporte de fótons. Além disso, ignora-se a possibilidade de extinção colisional de átomos ao interagirem com as paredes.

Sob essas hipóteses, o modelo de Holstein leva naturalmente a uma formulação matemática em termos de uma equação integro-diferencial, que descreve a evolução temporal da densidade de excitações $N(\vec{r}, t)$ em função das emissões e reabsorções sucessivas dentro do meio:

$$\frac{\partial N(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{N(\vec{r}, t)}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_0} \int_V N(\vec{r}', t) G(\vec{r}', \vec{r}) d^3 \vec{r}',$$

onde τ_0 é o tempo de vida médio do estado excitado e $G(\vec{r}, \vec{r}')$ é a função de Green, que representa a probabilidade de um fóton emitido em \vec{r}' ser reabsorvido em \vec{r} . Embora o fator de escape g não apareça explicitamente na equação de evolução, ele pode ser calculado a partir de suas soluções, representando a fração de fótons que, ao serem emitidos, conseguem escapar do meio sem sofrer reabsorção. A equação pode ser resolvida para diferentes geometrias (como esferas [44], cilindros [44, 45] ou placas plano-paralelas [46]) e os perfis espetrais Doppler, Lorentziano ou Voigt [42, 43], permitindo a determinação de g em cada caso.

O modelo de Holstein era funcional nas situações em que as colisões frequentes favorecem a perda de “memória” espectral e representou um avanço importante para a época. No entanto, apresentava limitações, especialmente no tratamento da redistribuição espectral e em regimes fora do limite difusivo [44, 46]. Em sistemas de baixa densidade, onde o tempo médio entre colisões é maior que o tempo de vida do estado excitado ou na análise de escalas de tempo muito curtas, a frequência do fóton reemittido pode manter uma correlação significativa com a frequência do fóton absorvido, fazendo com que a hipótese fundamental de CFR do modelo de Holstein seja violada, tornando-o inadequado para tais regimes [44, 46]. Tornou-se então necessário recorrer à redistribuição parcial de frequência (PFR, do inglês *Partial Frequency Redistribution*).

1.1.3 Avanços Teóricos: A Teoria da Redistribuição Parcial de Frequência (PFR)

A necessidade de uma descrição mais precisa da redistribuição de frequência, para além da aproximação de redistribuição completa, tinha sido abordada anteriormente. Henyey (1940) [38], por exemplo, já havia desenvolvido uma função de redistribuição de frequência que considerava o alargamento Doppler em combinação com o alargamento natural, e cujo formalismo também permitiria, em princípio, analisar o caso puramente Doppler como um li-

mite. Apesar dessas contribuições seminais, outros cientistas também se dedicaram ao estudo da redistribuição. Em particular, Zanstra chamou atenção para a importância de considerar a distribuição térmica dos átomos na formulação da função de redistribuição de frequência. Em 1949, ele publicou um trabalho pioneiro sobre o tema [47]. Nesse trabalho, ele buscou corrigir as imperfeições de tratamentos anteriores que consideravam um perfil de linha retangular e espalhamento ordinário, introduzindo o perfil Doppler e o espalhamento com redistribuição para nebulosas. Dada a complexidade do problema, ele apresentou uma solução aproximada, adotando como principal aproximação que, a cada espalhamento, ocorreria uma redistribuição completa de frequência de acordo com o perfil Doppler térmico, embora reconhecesse que o espalhamento médio real poderia desviar-se um pouco disso.

Seguindo essa linha de investigação, em 1951, Unno [48] aprofundou o estudo da redistribuição de frequência, partindo da premissa de que, em uma nebulosa estática, essa redistribuição decorre unicamente dos movimentos térmicos dos átomos. Para derivar a função de redistribuição, ele assumiu que a largura do decaimento natural era desprezível em comparação com a largura Doppler. Essa aproximação resultou em uma expressão característica do espalhamento puramente Doppler, na qual a nova frequência do fóton era normalizada pela largura Doppler. Pouco depois, em uma nota intitulada “*Note on the Zanstra Redistribution in Planetary Nebulae*” [49], Unno apresentou uma fórmula que incorporava não apenas o efeito Doppler, mas também o decaimento natural. Da formulação exata, ele demonstrou que, no limite em que a largura natural tende a zero, isto é, quando o tempo de vida do estado excitado se torna infinito, sua expressão completa recupera a forma mais simples, correspondente ao regime puramente Doppler previamente proposto.

Um tratamento teórico detalhado e amplamente reconhecido da FRD por incorporar tanto PDF quanto CFR, foi proposto por Hummer em 1962 [50]. Seu trabalho consolidou e estendeu investigações anteriores, fornecendo um formalismo para calcular a função de redistribuição de frequência para radiação espalhada por átomos que possuem uma distribuição térmica de velocidades (incorporando o efeito Doppler) e que podem exibir diferentes comportamentos de espalhamento em seu próprio referencial de repouso. Ele introduziu a função de redistribuição

$\Theta(\nu', \mathbf{k}'; \nu, \mathbf{k})d\nu d\Omega d\nu' d\Omega'$, que quantifica a probabilidade de um fóton incidente, caracterizado pela frequência ν (em $d\nu$) e direção de propagação \mathbf{k} (em $d\Omega$), ser absorvido e, subsequentemente, reemitido com frequência ν' (em $d\nu'$) na direção \mathbf{k}' (em $d\Omega'$)⁽¹⁾. Estas grandezas são definidas no referencial de um observador em repouso, onde o vapor exibe movimento térmico.

Em seu estudo, Hummer detalhou quatro casos principais para o processo de espalhamento no referencial atômico, que levam a diferentes funções de redistribuição [50]:

- **Largura de Linha Natural Zero (Cenário I):** Neste caso idealizado, o átomo possui níveis de energia infinitamente finos e o espalhamento no referencial atômica é perfeitamente coerente, sendo a distribuição representada por uma delta de Dirac. Apesar disso, o efeito Doppler ainda causa uma redistribuição no referencial do laboratório.
- **Decaimento Radiativo com Coerência (Cenário II):** Aqui, o perfil de absorção no referencial atômico é Lorentziano devido ao alargamento natural, mas o espalhamento em si permanece coerente e representado por uma delta de Dirac. Contudo, no referencial do laboratório, a função resultante acumula tanto os efeitos do alargamento natural, como também da distribuição térmica, resultando na redistribuição da frequência do fóton emitido devido ao efeito Doppler.
- **Decaimento Radiativo e Colisional (Cenário III):** Neste caso, assume-se que as colisões são suficientemente frequentes para causar uma completa redistribuição da frequência do fóton emitido já no referencial atômico. Aqui, tanto o perfil de absorção como o de emissão no referencial atômico são dados por distribuições de Lorentz.
- **Espalhamento de Ressonância (Tipo IV):** Este caso descreve transições do tipo $i \rightarrow j \rightarrow i$, em que o formalismo geral permite que ambos os níveis, inferior i e superior j , possuam larguras finitas. Para obter a função de redistribuição, Hummer emprega a expressão de Weisskopf [51, 52]. Contudo, o próprio autor ressalva que o tratamento de Weisskopf é, a rigor, aplicável ao espalhamento a partir do estado fundamental, situação na qual a largura do nível inferior seria, para todos os efeitos práticos, nula. Reconhecendo

⁽¹⁾Adota-se aqui a notação $\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{k}$, conforme empregada por Hummer, exclusivamente para manter a concordância das variáveis com os capítulos posteriores.

essa limitação, o autor justifica a inclusão do modelo como a melhor aproximação disponível na época.

O trabalho de Hummer estabeleceu um formalismo robusto para diferentes tipos de espalhamento no referencial atômico e suas transformações para o referencial do laboratório. Em particular, seu cenário III, que assume redistribuição completa de frequência no referencial atômico, levantou questões sobre a validade dessa aproximação quando observada no laboratório, onde o movimento térmico dos átomos introduz complexidades adicionais. A investigação de como a hipótese de CFR no referencial atômico se manifesta no referencial do laboratório, e sob quais condições a CFR poderia ser uma aproximação válida para o observador, tornou-se um ponto de interesse subsequente. Nesse contexto, em 1967, Finn [53] investigou o caso de redistribuição completa de frequência no referencial do átomo e demonstrou que, mesmo sob essa condição, a redistribuição observada no referencial do laboratório não é, em geral, completa, particularmente no núcleo da linha espectral. Seu trabalho mostrou que a suposição comum de que CFR no referencial do átomo implica automaticamente CFR no referencial do observador não é válida devido às correlações introduzidas pelo efeito Doppler.

O papel das colisões na FRD foi posteriormente explorado com maior profundidade por Omont et al. (1972) [54], utilizando a teoria moderna de alargamento de linha, forneceram um tratamento detalhado do espalhamento de radiação polarizada no ARF, incorporando explicitamente os efeitos de colisões elásticas e inelásticas. Eles demonstraram que, se o estado fundamental possui largura zero, a redistribuição de frequência na região próxima ao centro da linha de ressonância é predominantemente causada por colisões elásticas. Além disso, eles mostraram que as colisões inelásticas, por outro lado, tendem a remover a energia da transição de ressonância, seja transferindo-a para outros níveis atômicos ou convertendo-a em energia cinética, o que efetivamente “apaga” o fóton da linha de interesse. Além disso, eles evidenciaram que os resultados da FRD são influenciados pela polarização da luz e pelas distintas taxas de relaxação dos componentes multipolares dos estados atômicos. No ano seguinte, Omont et al. (1973) [55] refinaram essa abordagem ao reformular os resultados anteriores dentro de um formalismo de matriz de densidade, que utiliza uma descrição tensorial irredutível do campo

de radiação. Este formalismo mostrou-se especialmente útil para problemas de transferência radiativa envolvendo polarização e foi estendido para incluir os efeitos de um campo magnético fraco. Eles destacaram que o efeito Hanle e as colisões despolarizantes desempenham um papel importante no núcleo Doppler da linha, enquanto nas asas da linha, o termo de espalhamento coerente é o principal a ser considerado em cálculos de polarização.

Para modelar a transição entre os regimes de baixa e alta pressão, funções de redistribuição combinadas foram propostas. Payne et al. (1974) [56] introduziram uma forma onde a função de redistribuição total é a soma ponderada da componente relacionada com a redistribuição completamente e da componente coerente, com os pesos dependendo da probabilidade de ocorrer uma colisão descorrelacionadora durante o tempo de vida do estado excitado. Esta probabilidade é $P_c = \Gamma_c/(\Gamma_0 + \Gamma_c)$, onde Γ_c é a taxa de colisões e Γ_0 é a taxa de decaimento natural. Seus estudos experimentais e teóricos sobre o transporte de radiação de ressonância em argônio confirmaram essas previsões, mostrando que, enquanto em pressões elevadas (maior que 1 Torr) a equação de transporte se assemelha à de Holstein-Biberman (CFR), em pressões mais baixas (entre 0.002 e 0.5 Torr) surgem divergências notáveis. Com base no formalismo de Omont et al., Domke & Hubeny (1988) [57] derivaram uma matriz de redistribuição geral para o espalhamento de ressonância de luz arbitrariamente polarizada, assumindo um estado fundamental isotrópico. Eles mostraram que, no referencial do átomo, essa matriz pode ser decomposta em termos com dependências angulares e de frequência separadas, mas que essa separabilidade se perde no referencial do laboratório após a média sobre as velocidades atômicas. Eles também propuseram métodos para tratar a dependência angular, como expansões azimutais, e forneceram expressões para linhas de ressonância.

Posteriormente, em uma série de dois artigos publicados em 1997, Bommier [58, 59] utilizou um desenvolvimento perturbativo no âmbito da eletrodinâmica quântica não relativística, estendendo-o a ordens superiores à segunda, para descrever a interação átomo-radiação sob a hipótese de campo de radiação fraco. No primeiro artigo, focado no caso sem campo magnético, seu trabalho avançou ao levar o desenvolvimento perturbativo a ordens mais elevadas, resultando em uma equação mestre para a matriz de densidade atômica e nos coeficientes para a

equação de transferência de radiação polarizada. Uma das principais novidades foi a emergência de um novo termo na emissividade na quarta ordem da expansão, denominado “termo de espalhamento Rayleigh”, responsável por introduzir a coerência de frequência nos processos de espalhamento. A matriz de redistribuição derivada dessa formulação, no caso de níveis inferiores infinitamente finos, recupera os resultados de Omont et al. (1972) e, no caso degenerado e polarizado, generaliza os de Domke & Hubeny (1988) ao incorporar de forma mais explícita a coerência de frequência. O segundo artigo estendeu essa abordagem para o caso de um campo magnético de força arbitrária, fornecendo uma descrição mais completa da redistribuição de radiação polarizada nessas condições e derivando a matriz de redistribuição correspondente.

1.2 Voos de Lévy no Transporte de Radiação: Fundamentos e Medidas Experimentais

A constatação de que o transporte de radiação em meios ressonantes desvia-se do paradigma difusivo clássico, como inferido pioneiramente por Kenty [35], abriu caminho para a aplicação de formalismos estatísticos mais robustos na descrição do aprisionamento radiativo. Entre eles, o modelo de Voos de Lévy emergiu como uma ferramenta poderosa para descrever os “saltos” dos fótons anormalmente longos que caracterizam esse transporte.

1.2.1 Fundamentos Teóricos do Transporte Superdifusivo

Avançando da descrição detalhada dos eventos de espalhamento para as consequências macroscópicas do transporte de radiação, Pereira et al. (2004) [60] investigaram a natureza estatística das trajetórias fotônicas no aprisionamento de radiação ressonante, caracterizando-as explicitamente como voos de Lévy. Focando primariamente na condição de CFR, eles analisaram a distribuição de tamanho de passo dos fótons, $P(r)$, e sua íntima relação com diferentes perfis de linha espectral. Retomando observações pioneiras de Kenty (1932) sobre a natureza não difusiva do transporte, derivaram as formas assintóticas de $P(r)$ para grandes distâncias. Demonstraram que, para um perfil Lorentziano, $P(r) \sim r^{-3/2}$, e, para um perfil Doppler, $P(r) \sim r^{-2}(\ln r)^{-1/2}$. No caso do perfil de Voigt, a cauda assintótica é dominada pelo caráter Lorentziano, embora a trajetória fotônica configure um fractal auto-afim com dois expoentes de escala distintos.

Concluíram, assim, que o aprisionamento de radiação com CFR leva a um regime de transporte superdifusivo, o que justifica os passos “anormalmente longos” observados por Kenty (1932). Os autores ressaltaram, ainda, que o movimento superdifusivo também é observado no cenário de PFR.

Em continuidade a essa abordagem estatística do transporte de radiação sob aprisionamento, o trabalho de Berberan-Santos et al. (2006) [30] trouxe uma perspectiva complementar e mais generalizada. Investigando o aprisionamento de radiação ressonante sob a condição de CFR, os autores estabeleceram relações gerais entre a forma da linha espectral e a função de densidade de probabilidade de tamanho de passo dos fótons. Demonstraram que, para qualquer perfil de linha sob CFR, a distribuição de tamanho de passo possui uma cauda longa e pesada com um expoente característico $\alpha \leq 1$ para essa cauda⁽²⁾, levando a um movimento fotônico superdifusivo do tipo voo de Lévy. Uma contribuição notável do trabalho foi a derivação formal de uma distribuição de probabilidade para a projeção do salto dos fótons sobre uma única direção. Essa abordagem permite tratar o transporte radiativo, intrinsecamente tridimensional, por meio de um modelo unidimensional mais simples, ao descrever o deslocamento líquido do fóton (para frente ou para trás) ao longo de uma direção específica. Por fim, os autores também exploraram a função distribuição de opacidades (ODF, do inglês *Opacity Distribution Function*) efetivas da linha.

Em um trabalho subsequente em 2007, o grupo estendeu essa análise para incluir os efeitos da PFR [61]. Eles generalizaram o conceito da ODF de uma única linha para incluir a PFR e discutiram diversos mecanismos de redistribuição, como alargamento Doppler puro (R_I); combinado natural e Doppler (R_{II}); e combinado Doppler, natural e colisional (R_{III}), correspondentes aos cenários I, II e III de Hummer, respectivamente. Um resultado central do trabalho foi a demonstração de que coexistem duas escalas distintas de comportamento: uma escala menor, controlada pelos detalhes intrincados da PFR, e uma escala maior, essencialmente determinada pela assintótica da redistribuição no referencial de repouso do átomo. Eles mostraram que os casos de alargamento Doppler puro (R_I) e combinado natural, Doppler e colisional

⁽²⁾No trabalho de Berberan-Santos et al. (2006), foi empregado a notação $\alpha \rightarrow \mu$. Por uma questão de consistência com as variáveis adotadas ao longo dos próximos capítulos, foi feita a mudança.

(R_{III}) , são caracterizados por um comportamento superdifusivo do tipo voo de Lévy em ambas as escalas. Em contraste, o caso combinado natural e Doppler (R_{II}) , que envolve coerência no referencial do átomo, embora exiba um comportamento anômalo em pequena escala, evolui para um regime difusivo em grandes escalas, o que representa uma quebra do caráter superdifusivo.

Esse comportamento superdifusivo e dos voos de Lévy no transporte da radiação aprisionada está diretamente ligada ao processo de redistribuição de frequência. Durante os múltiplos eventos de absorção e reemissão, a frequência de um fóton pode ser alterada e, embora a reemissão ocorra predominantemente próximo ao centro da linha, existe uma probabilidade não nula de que o fóton seja reemitido nas “asas da linha espectral”, onde o coeficiente de absorção do meio é drasticamente menor em comparação com o centro da linha [6]. Fótons emitidos nessas frequências de baixa opacidade podem percorrer distâncias significativamente longas antes de uma nova reabsorção, constituindo os “saltos anormalmente longos” que Kenty (1932) já havia inferido. São esses saltos longos, ainda que infrequentes, que dominam a estatística do transporte, conferindo à distribuição de tamanho de passo, $P(r)$, as características “caudas longas e pesadas” [6, 62]. Essa propriedade leva à divergência da variância dos comprimentos de passo [62], uma marca registrada das estatísticas de Lévy. Assim, a trajetória fotônica resultante, composta por inúmeros saltos curtos intercalados por esses raros deslocamentos extensos, configura um voo de Lévy, levando ao regime de transporte superdifusivo [63].

1.2.2 O Conceito de Voos de Lévy e sua Universalidade

Historicamente, o conceito de distribuições estáveis, que generalizam a distribuição gaussiana e formam a base matemática dos Voos de Lévy, foi desenvolvido por Paul Lévy na década de 1920 [64]. Essas distribuições tornaram-se fundamentais para descrever processos estocásticos com saltos longos, como aqueles observados em regimes de transporte superdifusivo. Matematicamente, a distribuição de probabilidade $P(r)$ de tamanho de passo r decai assintoticamente como uma lei de potência [65],

$$P(r) \propto \frac{1}{r^{1+\alpha}},$$

onde α é o parâmetro de forma do regime de transporte, que para voos de Lévy pertence ao intervalo $0 < \alpha < 2$ [65]. A aplicação e popularização do termo “voos de Lévy” para descrever

os processos estocásticos com parâmetro $0 < \alpha < 2$, ganhou notoriedade com os trabalhos de Mandelbrot (1967 [66], 1979 [67] e 1983 [68]), que os utilizou para descrever fenômenos em diversas áreas, incluindo a geometria fractal da natureza. Desde então, os Voos de Lévy têm sido reconhecidos como um modelo estocástico fundamental para descrever uma vasta gama de fenômenos complexos que se estendem por inúmeras áreas da ciência.

Um dos primeiros e mais influentes estudos a identificar Voos de Lévy em sistemas naturais foi realizado por Viswanathan et al. (1996) [69], que analisaram os padrões de voo de albatrozes errantes durante a busca por alimento. Eles observaram que as trajetórias dessas aves apresentavam sequências de muitos passos curtos intercalados com saltos longos, padrão característico de um processo do tipo Lévy. Esse achado foi interpretado como uma possível estratégia de forrageamento eficiente em ambientes nos quais os recursos são escassos e distribuídos de maneira irregular. A partir desse trabalho pioneiro, os Voos de Lévy passaram a ser amplamente estudados em ecologia e etologia [70, 71], com pesquisas subsequentes relatando padrões semelhantes em diversas espécies, como albatrozes, abelhas e veados [72]. A hipótese central que emergiu dessas investigações é que alternar entre exploração local (vários passos curtos) e exploração global (saltos longos ocasionais) pode maximizar o sucesso na busca por recursos sob certas condições ambientais.

Embora o caso dos albatrozes tenha se tornado o exemplo mais emblemático, padrões compatíveis com Voos de Lévy foram posteriormente identificados em uma ampla variedade de sistemas naturais e artificiais, e aparentemente desconexos, evidenciando a relevância desse modelo estocástico. Na dinâmica de mercados financeiros, por exemplo, as flutuações extremas frequentemente são modeladas por distribuições de cauda pesada associadas a esses voos [73–75]. Na geofísica, tais distribuições têm sido utilizadas para descrever a ocorrência e a magnitude de terremotos [76]. Em sistemas físicos, Voos de Lévy foram observados em fenômenos como turbulência [73] e no transporte de partículas carregadas durante erupções solares [77, 78]. Estudos sobre os padrões de viagem humana [79–81] revelam que esses movimentos exibem características de Voos de Lévy, influenciando significativamente a velocidade e a extensão geográfica da disseminação de epidemias [82–85], por exemplo. No campo da física do estado sólido, o transporte

de energia em materiais nanoestruturados, como o movimento de fônonos em nanofios, também tem sido interpretado sob a ótica dos Voos de Lévy [86].

1.2.3 Medição Experimental do Expoente de Lévy

Dada a caráter recorrente dos Voos de Lévy em contextos tão diversos, surge naturalmente o interesse em investigar experimentalmente os mecanismos físicos capazes de gerar esse tipo de transporte anômalo. Em particular, estudos recentes têm buscado não apenas identificar assinaturas qualitativas compatíveis com esse regime, mas também quantificar diretamente o expoente de Lévy α , responsável por caracterizar a distribuição de tamanhos de passo e, consequentemente, a natureza do transporte observado. Essa abordagem experimental permite estabelecer uma ponte concreta entre modelos teóricos e observações físicas, fornecendo evidências mais robustas da presença de dinâmicas superdifusivas em meios reais.

Uma abordagem inovadora para criar um meio onde a luz realiza Voos de Lévy foi demonstrada por Barthelemy et al. (2008) [87] com a fabricação dos chamados “vidros de Lévy” (*Lévy glasses*, em inglês). Eles construíram um material óptico desordenado incorporando microesferas de vidro com uma distribuição de tamanhos específica dentro de uma matriz de vidro (silicato de sódio) contendo nanopartículas espalhadoras de dióxido de titânio (TiO_2). As microesferas de vidro, por terem o mesmo índice de refração da matriz hospedeira, não espalham a luz, mas sua função é modificar localmente a densidade dos elementos espalhadores. Ao controlar a distribuição de tamanhos das microesferas, eles conseguiram modular a densidade local de espalhadores, criando um material onde a distribuição de tamanho de passo dos fôtons segue uma lei de potência, característica dos Voos de Lévy. Na Figura 1.1a é apresentado um diagrama representativo desse sistema, no qual a trajetória de um fóton (em vermelho) é obtida por meio de uma simulação de Monte Carlo e evidencia os longos passos característicos dos Voos de Lévy ao atravessar regiões sem espalhamento. Medidas da transmissão total de luz através de amostras de diferentes espessuras mostraram um decaimento mais lento do que o previsto pela lei de Ohm difusiva, consistente com um transporte superdifusivo. Para amostras projetadas para terem um expoente de Lévy $1 + \alpha = 2$, foi obtido um valor experimental de $1 + \alpha = 1.948 \pm 0.09$. Além disso, a análise dos perfis espaciais da luz transmitida revelou

características distintas dos Voos de Lévy, como um *cusp* (pico agudo) pronunciado no centro e caudas que decaem lentamente, em contraste com o perfil gaussiano da difusão normal (ver Figuras 1.1b e 1.1c).

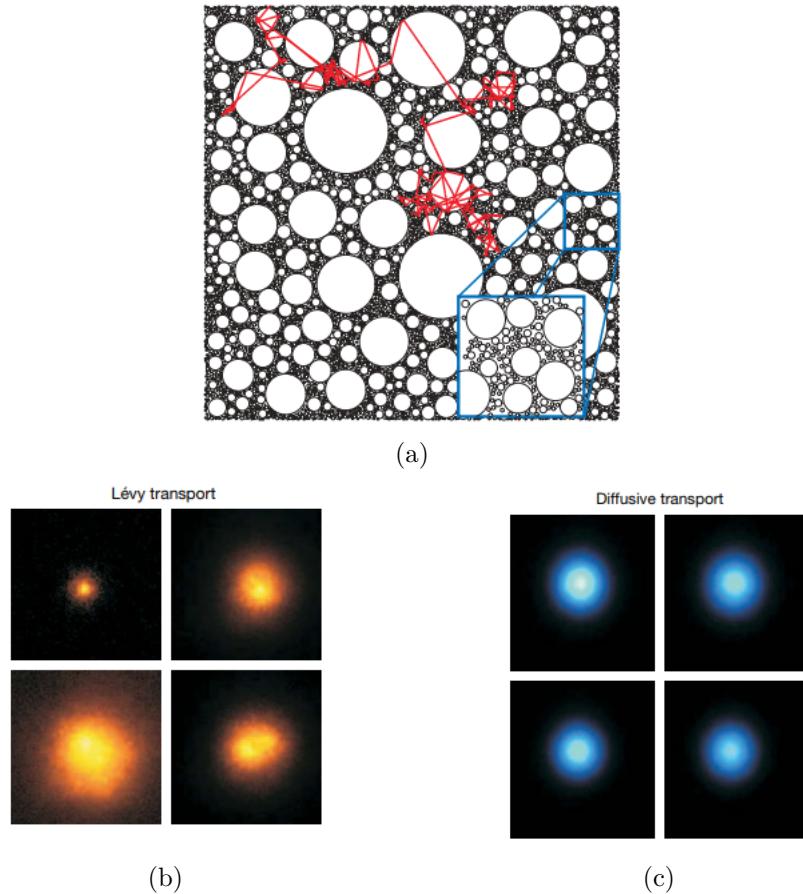


Figura 1.1 – Trajetória simulada e perfis de transmissão em vidros de Lévy. (a) Trajetória de um caminhante aleatório (vermelho), obtida por simulação de Monte Carlo, em um meio bidimensional inhomogêneo projetado para induzir voos de Lévy. As flutuações de densidade no material espalhador, causadas pela inclusão de discos de diferentes tamanhos onde o espalhamento é ausente (regiões brancas), permitem a ocorrência dos passos longos característicos desse tipo de transporte. O detalhe ampliado (azul) mostra a estrutura interna do meio. As demais figuras mostram os perfis espaciais da intensidade da luz transmitida, medidas experimentalmente na superfície de saída de amostras de vidro de Lévy sob quatro diferentes iluminações (configurações de desordem). Observa-se: (b) fortes flutuações nos perfis de transmissão de uma medida para outra, uma característica típica do transporte do tipo Lévy; e (c) uma amostra difusiva comum, com a mesma espessura, na qual os perfis são praticamente constantes, como esperado no regime difusivo. As imagens em (b) e (c) foram obtidas iluminando-se a amostra frontalmente com um feixe de laser focado e registrando-se a luz transmitida com uma câmera CCD, com as amostras posicionadas entre polarizadores cruzados para bloquear a luz balística residual.

Fonte: Figura adaptada de Barthelemy et al. (2008) [87].

Posteriormente, Bertolotti et al. (2010) [88] refinaram o método de fabricação e aprofundaram

daram a compreensão desses materiais. Eles apresentaram vidros de Lévy baseados em polímeros, utilizando partículas de titânio e esferas de vidro dispersas em um hospedeiro polimérico, o que ofereceu vantagens como maior estabilidade a longo prazo em comparação com a matriz de silicato de sódio. Neste trabalho, detalhou-se como o grau de superdifusão pode ser ajustado ao se engenhar a inhomogeneidade espacial da densidade de espalhadores. Foi apresentado um modelo que relaciona os parâmetros microscópicos (distribuição de diâmetros das esferas de vidro) com as propriedades de transporte macroscópicas, mostrando como essa distribuição determina a distribuição de tamanho de passo $P(r) \sim r^{-(1+\alpha)}$ e, consequentemente, o expoente de Lévy α . Experimentalmente, foram fabricadas amostras com diferentes valores de β para produzir materiais com $1 + \alpha$ variando de 1.5 a 3.0. A assinatura da superdifusão foi confirmada pela observação do perfil de transmissão de luz através de uma placa: em contraste com o perfil suave em forma de sino da difusão normal ($1 + \alpha = 3$), os materiais superdifusivos apresentaram um perfil com um pico agudo no centro. Essa característica tornava-se mais pronunciada à medida que o valor de α diminuía, indicando um transporte cada vez mais dominado por saltos longos, em total acordo com as simulações de Monte Carlo realizadas. A conclusão principal é que é possível criar materiais dielétricos desordenados nos quais o transporte de luz é superdifusivo e que o grau de superdifusão pode ser controlado através da engenharia da distribuição espacial dos espalhadores.

Além do sistema sólido projetado para simular Voos de Lévy, investigações recentes têm explorado o transporte superdifusivo da luz em vapores atômicos ressonantes. O trabalho teórico de Pereira et al. (2004) [60] relaciona o expoente α , que caracteriza as distribuições de tamanho de passo com caudas pesadas, à forma dos perfis espectrais de absorção e emissão do vapor. Especificamente, observa-se o seguinte comportamento [60]:

- **Doppler puro:** Com decaimento gaussiano nas asas, espera-se $1 + \alpha \approx 2$, indicando que o comprimento médio dos passos é finito, mas sua variância diverge.
- **Lorentziano puro:** Com asas que decaem mais lentamente, obtém-se $1 + \alpha = 1.5$, situação em que tanto o valor médio quanto a variância dos comprimentos de passo divergem, caracterizando uma superdifusão mais intensa.

- **Voigt:** O comportamento assintótico é dominado pelas asas Lorentzianas, levando a $1 + \alpha = 1.5$ em sistemas suficientemente extensos. Em sistemas de tamanho finito, entretanto, a contribuição central Doppler pode prevalecer, resultando em um expoente efetivo mais próximo de $1 + \alpha = 2$.

Com base nessas previsões, diversas investigações experimentais foram realizadas para detectar Voos de Lévy em vapores atômicos e medir os valores do expoente α sob diferentes regimes espectrais e condições experimentais. A seguir, apresentam-se os principais resultados obtidos.

Mercadier et al. (2009) [1] realizaram um experimento engenhoso para medir diretamente a distribuição do tamanho do passo dos fótons em vapores de rubídio aquecidos, um elemento crucial para caracterizar os voos de Lévy. Utilizando uma configuração de múltiplas células, eles conseguiram isolar e medir o comprimento do passo dos fótons entre eventos de espalhamento sucessivos. A luz de um laser era espalhada em uma primeira célula (denominada “célula fonte”), e um feixe colimado dessa luz espalhada, que possuía um espectro alargado pelo efeito Doppler, era então direcionado para uma segunda célula (a “célula de observação”). Ao captar a imagem da fluorescência ao longo do eixo desta segunda célula, eles inferiram a distribuição da distância que os fótons viajavam antes de serem novamente espalhados. Na Figura 1.2a é apresentado um diagrama representativo desse sistema. Seus resultados mostraram que a distribuição do tamanho do passo seguia uma lei de potência $P(r) \propto 1/r^\alpha$ com $1 + \alpha = 3.41 \pm 0.12$ para fótons que sofreram um primeiro espalhamento e cujo espectro era determinado pelo alargamento Doppler. Este valor de α é diferente do $1 + \alpha \approx 3$, ou mais precisamente, $1 + \alpha = 3.112 \pm 0.001$ no modelo simplificado que considera apenas o alargamento Doppler puro, esperado para um perfil puramente Doppler, indicando a influência da largura natural Lorentziana da transição atômica, mesmo esta sendo muito menor que o alargamento Doppler. Em uma configuração subsequente de três células, desenhada para simular múltiplos espalhamentos e investigar a “termalização” do espectro dos fótons, ou seja, a convergência para um espectro estável após vários espalhamentos, eles mediram um expoente $1 + \alpha = 3.09 \pm 0.15$. Na Figura 1.2b são apresentadas as imagens de fluorescência da célula de observação: (imagem superior) quando esta é iluminada diretamente

por um feixe de laser incidente na ressonância atômica, imagem da qual se extrai a distribuição do tamanho do passo para este feixe de referência , e (imagem inferior) quando iluminada pela luz proveniente de uma primeira célula de espalhamento, imagem esta que é utilizada para extrair a distribuição do tamanho do passo $P(r)$ e determinar o expoente α da lei de potência.

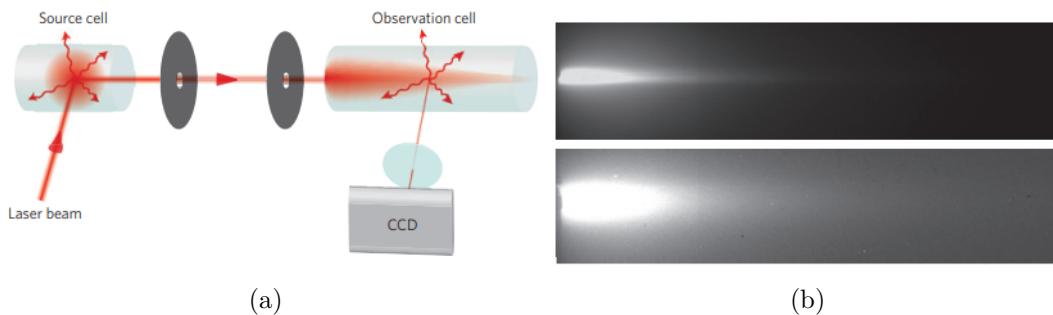


Figura 1.2 – Configuração experimental e resultados da medição da distribuição do tamanho do passo de fôtons do artigo de Mercadier et al. (2009) [1]. (a) corresponde ao diagrama do arranjo experimental com uma célula fonte e uma célula de observação para imagear a fluorescência do vapor de rubídio. (b) imagens de fluorescência obtidas na célula de observação: (imagem superior) utilizando um feixe de laser incidente na frequência de ressonância atômica , e (imagem inferior) utilizando luz incidente proveniente de uma primeira célula de espalhamento, imagem esta que permite a extração da distribuição do tamanho do passo $P(r)$ e do expoente α .

Fonte: Figura adaptada de Mercadier et al. (2009) [1].

O trabalho de Mercadier et al. (2013) [89] aprofundaram essa caracterização microscópica, investigando detalhadamente a evolução do espectro de emissão e da distribuição do tamanho do passo com o número de eventos de espalhamento. Eles refinaram os modelos teóricos para incluir efeitos como a largura natural da transição, a estrutura multinível do rubídio e as diferenças de temperatura entre as células, obtendo excelente concordância com os dados experimentais para o primeiro passo ($1 + \alpha = 3.45 \pm 0.04$ teoricamente, comparado com $1 + \alpha = 3.41 \pm 0.12$ experimentalmente). No regime de múltiplos espalhamentos (configuração C3), a medição resultou em $1 + \alpha = 3.08 \pm 0.13$, confirmando a convergência para um valor menor, característico de um regime superdifusivo mais acentuado e consistente com a termalização da luz. Ambos os estudos confirmam que, para as distâncias acessíveis experimentalmente, a distribuição do tamanho do passo no regime de múltiplos espalhamentos é descrita por uma lei de potência com $1 + \alpha < 4$, implicando uma variância divergente e, consequentemente, que o transporte de luz nesses vapores atômicos pode ser descrito por um modelo de voos de Lévy.

No estudo de Baudouin et al. (2014) [2], investigou-se experimentalmente os voos de Lévy da luz em vapor de rubídio (Rb) aquecido contido em uma célula plana de 5 mm de comprimento, com opacidade controlada pela temperatura. Um feixe de laser iluminava a célula e a luz transmitida difusamente era analisada com uma câmera CCD para medir a transmissão difusa total (T_D) em função da opacidade (O) e o perfil espacial da intensidade transmitida ($T_D(r)$). A configuração experimental está esquematizada na Figura 1.3. Os resultados experimentais obtidos sob condições de espalhamento múltiplo forneceram evidências macroscópicas dos voos de Lévy. A transmissão difusa total, T_D , integrada sobre todos os pixels da CCD, não seguiu a lei de Ohm (que previa $T_D \propto O^{-1}$), mas sim uma lei de potência $T_D \propto O^{-0.516 \pm 0.024}$. Além disso, a análise do perfil espacial da luz transmitida, $T_D(r)$, revelou que as “asas” da distribuição de intensidade seguiam uma lei de potência $T_D(r) \propto r^{-4.03 \pm 0.15}$. Esta observação é consistente com a previsão teórica $T_D(r) \propto r^{-(3+\alpha)}$ para um $1 + \alpha = 2.01 \pm 0.04$, e este comportamento foi verificado para uma ampla faixa de opacidades da célula. Os autores concluíram que seus resultados teóricos, numéricos e experimentais confirmavam de forma robusta a ocorrência de voos de Lévy de fótons em vapor de Rb quente, em um regime de espalhamento múltiplo e com desordem do tipo “annealed” (recozida). Neste tipo de sistema, não existem correlações entre a posição e o tamanho do passo do caminho aleatório dos fótons e as altas temperaturas de operação justificam a hipótese de completa redistribuição de frequência, o que anula efeitos de memória que poderiam complicar a observação das características puras dos voos de Lévy. O estudo demonstrou a viabilidade de caracterizar o expoente de Lévy α através de medições macroscópicas, o que é significativo para futuras investigações de voos de Lévy em outros sistemas, incluindo os astrofísicos.

No estudo de Araújo et al. (2021) [90], foi utilizada uma configuração experimental similar à de Baudouin et al. (2014), com o objetivo de investigar voos de Lévy em vapor de rubídio (Rb) aquecido. A principal modificação foi a introdução de 50 torr de gás hélio como gás tampão, com a finalidade de induzir um alargamento espectral predominantemente colisional nas linhas do Rb. Essa alteração levou a perfis de absorção e emissão essencialmente Lorentzianos, para os quais se espera teoricamente um expoente de Lévy $1 + \alpha < 2$, mais especificamente

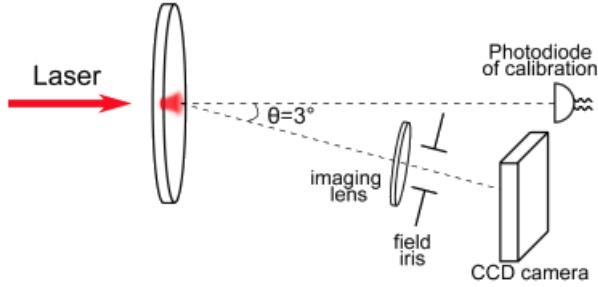


Figura 1.3 – Esquema do arranjo experimental utilizado por Baudouin et al. (2014) [2] para investigar os voos de Lévy em vapor de rubídio. Um feixe de laser incide em uma célula plana contendo o vapor atômico. A luz balística transmitida é medida por um fotodiodo de calibração alinhado com o laser. A luz espalhada difusamente pela célula é coletada por um sistema de imageamento (lente de imageamento e íris) e registrada por uma câmera CCD, posicionada com um ângulo de 3° em relação ao eixo do laser, para medir o perfil espacial da intensidade transmitida $T_D(r)$ e a transmissão difusa total T_D .

Fonte: Figura adaptada de Baudouin et al. (2014) [2].

$1 + \alpha \approx 1.5$, associado a um caminho livre médio divergente para os fótons. Assim como no estudo anterior, uma célula de Rb aquecida ($\ell = 6.3$ mm) foi iluminada por um feixe de laser, e a luz transmitida difusamente foi captada por uma câmera CCD, permitindo a análise do perfil radial da intensidade transmitida $T(r)$ e da transmissão difusa total T_D em função da opacidade O da amostra. Os resultados experimentais corroboraram as expectativas para um sistema com perfis Lorentzianos: a análise das caudas do perfil radial $T(r)$ forneceu um expoente $s = 3 + \alpha = 3.45 \pm 0.13$, o que corresponde a $1 + \alpha = 1.45 \pm 0.13$. Adicionalmente, a dependência da transmissão difusa total com a opacidade, $T_D \propto O^{-\beta}$, onde $\beta = \alpha/2$, resultou em $\beta = 0.20 \pm 0.03$, levando a um $1 + \alpha = 1.40 \pm 0.06$. Ambos os valores medidos para α foram consistentes com o valor teórico de $1 + \alpha \approx 1.5$ esperado para perfis Lorentzianos e os dados experimentais foram bem reproduzidos por simulações numéricas para essas formas de linha. Os autores concluíram, portanto, que o uso do gás tampão permitiu controlar o expoente de Lévy, realizando experimentalmente voos de Lévy de fótons com $1 + \alpha \approx 1.5$, caracterizados por um caminho livre médio divergente.

Seguindo uma metodologia experimental para investigar voos de Lévy em vapores atômicos, similar à empregada por Baudouin et al. (2014), o estudo de Macedo et al. (2021) [3] focou nos efeitos do tamanho da amostra (truncamento) sobre o expoente de Lévy α em vapor de Césio (Cs), que naturalmente exibe um perfil de absorção de Voigt. Diferentemente do ima-

gemento espacial com CCD utilizado por Baudouin para obter $T_D(r)$, este trabalho empregou um fotodetector precedido por uma lente coletora, posicionado a um ângulo de 15° em relação ao feixe de laser incidente, para medir a transmissão difusa total (T_D) através de uma célula de Cs aquecida ($\ell = 3$ cm). A opacidade da amostra (r , análoga a O) foi variada em uma ampla faixa (de $r = 8$ a $r = 1.5 \times 10^5$) através do controle da pressão do vapor. Os resultados, baseados na relação $T_D \propto r^{-\alpha/2}$, demonstraram uma transição no valor de α em função da opacidade: para baixas opacidades (amostras opticamente mais finas), foi medido $1 + \alpha = 2.2 \pm 0.2$, o que é consistente com o transporte dominado pelo núcleo Doppler do perfil de Voigt; já para altas opacidades (amostras opticamente mais espessas), obteve-se $1 + \alpha = 1.50 \pm 0.04$, característico do transporte dominado pelas asas Lorentzianas do perfil. Os autores concluíram que o tamanho finito da amostra impõe um truncamento nos tamanhos dos saltos, fazendo com que diferentes regiões espectrais do perfil de Voigt (núcleo Doppler ou asas Lorentzianas) dominem o transporte dependendo da opacidade da amostra, explicando a variação observada no expoente de Lévy α em torno de uma opacidade de crossover de $r_c \approx 10^3$. Simulações de Monte Carlo foram realizadas para corroborar a interpretação desses resultados.

Utilizando o mesmo arranjo experimental descrito em Macedo et al. (2021), o trabalho de Lopez et al. (2023) [91] introduziu uma nova abordagem para determinar o expoente de Lévy α em vapor de Césio (Cs). A principal distinção metodológica foi a investigação da dependência da transmissão difusa (T_D) não primordialmente com a opacidade total da amostra, mas sim com o ponto de partida médio (\bar{r}_0) do caminho aleatório do fóton dentro da célula de Cs ($\ell = 3$ cm). Este ponto \bar{r}_0 , que representa a profundidade média de penetração do fóton incidente antes do primeiro evento de espalhamento, foi controlado experimentalmente através da variação da frequência do laser incidente, enquanto a T_D era medida por um fotodetector posicionado a um ângulo de 15° em relação ao feixe incidente. Os resultados demonstraram que, na condição $\bar{r}_0/\ell \ll 1$, a transmissão difusa escalava conforme a lei de potência $T_D \propto (\bar{r}_0/\ell)^{\alpha/2}$, o que permitiu a extração do expoente α para uma densidade atômica específica. Foi observado que o valor de α assim medido variava com a densidade do vapor: $1 + \alpha$ aproximava-se de 2.0 para baixas densidades (alto r_0/ℓ) e de 1.5 para altas densidades (baixo r_0/ℓ). Os autores concluíram

que esta técnica permite a determinação de α para cada densidade atômica individualmente, e que o valor de α obtido está relacionado às características da distribuição do tamanho do passo na escala do comprimento da célula ($r = \ell$), o que é consistente com o chamado princípio do “salto único grande” (single-big-jump). O estudo também reforçou a importância das colisões átomo-átomo para a emissão nas asas Lorentzianas do perfil de Voigt, que são responsáveis pelo regime com $1 + \alpha \sim 1.5$ em densidades mais elevadas.

O trabalho de Nunes et al. (2025) [92] apresenta uma investigação teórica detalhada da redistribuição de frequência e da distribuição do tamanho do passo para a luz que se difunde em vapores atômicos com foco nas suas implicações para os voos de Lévy. Os autores calcularam como o expoente de Lévy α , definido localmente a partir de $P(r)$ como $1 + \alpha(r) = -\frac{d \log(P(r))}{d \log(r)}$, é influenciado por dois aspectos cruciais frequentemente simplificados em modelos anteriores: o tamanho finito do vapor e a estrutura de múltiplos níveis energéticos característica dos átomos alcalinos. Para átomos de dois níveis, demonstrou-se que a finitude do sistema, modelada pela introdução de um fator de transmissão balística $[1 - T(x)]$ na regra de recorrência para o espectro espalhado $\Theta_n(x')$, introduz um corte mais pronunciado neste espectro, especialmente no cenário de redistribuição parcial de frequência R_{II} (espalhamento coerente no referencial do átomo), quando comparado a um vapor de tamanho infinito. Esse corte espectral, por sua vez, modifica a $P(r)$ resultando em valores de $\alpha(r)$ maiores (menos característicos de voos de Lévy intensos) para um dado tamanho de passo, pois menos fôtons nas asas espetrais contribuem para saltos longos. No caso do cenário R_{III} (com colisões que levam à completa redistribuição de frequência no referencial do átomo), o efeito do tamanho finito no espectro de emissão é consideravelmente menor. Ao considerar a estrutura hiperfina complexa de átomos alcalinos como Césio (linhas D1 e D2) e Rubídio (linha D2), os cálculos revelaram que a presença de múltiplos níveis de energia no estado fundamental e excitado, juntamente com as regras de seleção para as transições, induz oscilações características no espectro de frequência redistribuído e, consequentemente, no expoente $\alpha(r)$ em função do tamanho do passo r . Os autores concluíram que seus resultados teóricos, que levam em conta esses efeitos de tamanho finito e estrutura multinível, são consistentes com dados experimentais previamente publicados para voos de Lévy

em vapores de Cs e Rb. Este estudo contribui para um melhor entendimento da aplicação da teoria de voos de Lévy na interpretação de espectros atômicos e no transporte radiativo em diversos meios, incluindo plasmas astrofísicos e experimentos de laboratório.

1.3 Síntese e Proposta Desta Tese

A compreensão do transporte de radiação em meios como vapores atômicos é fundamental, pois fenômenos como o aprisionamento radiativo afetam profundamente a interpretação de experimentos em física atômica e o projeto de dispositivos tecnológicos, e sua negligência pode levar a erros significativos. Nesse contexto, a redistribuição de frequência durante os múltiplos espalhamentos emerge como um processo complexo e vital; enquanto a Redistribuição Completa de Frequência (CFR) oferece uma simplificação útil em certos regimes, a Redistribuição Parcial de Frequência (PFR) é muitas vezes essencial para uma descrição precisa do transporte de radiação, com implicações diretas na modelagem de fenômenos astrofísicos e de laboratório. De fato, a interação entre aprisionamento e redistribuição de frequência frequentemente faz com que a descrição do transporte de radiação transcenda o modelo difusivo clássico, encontrando nos Voos de Lévy um formalismo mais adequado para capturar a natureza dos saltos longos.

O conceito de voos de Lévy no transporte de luz, impulsionado por previsões teóricas como as de Pereira et al. (2004) [60] para vapores atômicos, foi explorado experimentalmente em duas plataformas principais. Por um lado, desenvolveram-se meios desordenados artificiais, conhecidos como “vidros de Lévy” [87, 88], nos quais o transporte superdifusivo é obtido pela engenharia da distribuição espacial dos espalhadores. Por outro lado, e em linha mais direta com as previsões teóricas originais, uma variedade de investigações em vapores atômicos corroborou a influência dos perfis espectrais no transporte. Estas incluem medições diretas da distribuição do tamanho dos passos [1, 89], que confirmaram a influência de detalhes como a largura natural da transição e a estrutura multinível dos átomos. Estudos subsequentes nos vapores atômicos exploraram ainda as manifestações macroscópicas dos Voos de Lévy [2, 3, 90, 91], como o desvio da lei de Ohm e os perfis espaciais de lei de potência da luz transmitida, elucidando também o impacto de fatores como o alargamento colisional, que pode levar a expoentes $1 + \alpha < 2$, e o

truncamento da distribuição de passos devido ao tamanho finito da amostra. Assim, os Voos de Lévy consolidam-se como um paradigma essencial para a compreensão do transporte de luz em meios ressonantes. Contudo, apesar do sucesso na identificação das assinaturas de Lévy, uma compreensão quantitativa da transição entre os diferentes regimes de transporte, especialmente em função de parâmetros experimentais controláveis, permanece como um desafio em aberto.

É precisamente este desafio que a presente tese se propõe a enfrentar. A partir dos avanços teóricos recentes, incluindo as nossas contribuições no trabalho de Nunes et al. (2025) [92], busca-se realizar a caracterização sistemática que explore a transição entre o cenário sem colisões (II) e com colisões (III). Para isso, propõe-se uma investigação abrangente do aprisionamento de radiação em células de vapor de césio-133 com diferentes comprimentos característicos (ℓ) e em uma ampla faixa de densidades atômicas (N). Por meio de medições de transmissão difusa em múltiplos arranjos de detecção e sob um conjunto variado de condições físicas, busca-se não apenas determinar o expoente de Lévy α sob condições variáveis, mas também estabelecer critérios quantitativos para a transição entre os regimes de transporte. Adicionalmente, o robusto conjunto de dados experimentais a ser obtido servirá como base para validar e aprimorar os modelos de simulação de Monte Carlo existentes, refinando a descrição do transporte fotônico em vapores atômicos e aprofundando a compreensão dos voos de Lévy em condições de laboratório realísticas.

1.4 Objetivos

Essa tese tem como objetivo geral investigar o aprisionamento de radiação e a dinâmica dos voos de Lévy em células de vapor atômico de césio-133, considerando diferentes comprimentos característicos (ℓ) e regimes de densidade atômica (N), caracterizando quantitativamente a transição entre os cenários de transporte sem e com colisões atômicas, por meio de uma análise integrada de dados experimentais, simulações de Monte Carlo e modelos teóricos.

Objetivos Específicos

1. Obter experimentalmente espectros de transmissão difusa a 10° de células de vapor atômico de césio-133, com comprimentos característicos $\ell = 0.20$ cm, 1.00 cm e 2.00 cm, sob

condições de múltiplos espalhamentos induzidas por densidades atômicas no intervalo $N \in [3.50 \times 10^{18}, 4.40 \times 10^{19}]$ átomos/m³⁽³⁾.

2. Determinar o expoente de Lévy α para cada espectro experimental obtido na difusão a 10° e, com base nas previsões teóricas, identificar o cenário correspondente (sem colisão (cenário II) com colisão (cenário III) e intermediário entre os dois cenários) que melhor se enquadra, além de estabelecer a dependência de α com os parâmetros ℓ e N .
3. Obter experimentalmente espectros de transmissão difusa a 90° de uma célula de vapor atômico de césio-133 com comprimento característico $\ell = 2.00$ cm e densidade atômica no intervalo $N \in [7.40 \times 10^{17}, 1.80 \times 10^{19}]$ átomos/m³, de modo a capturar simultaneamente regiões de espalhamento único e múltiplo em um mesmo espectro.
4. Correlacionar quantitativamente os dados experimentais da transmissão a 90° com espectros construídos a partir das previsões teóricas, identificando, em cada medida, as regiões espectrais que melhor se ajustam a cada um dos cenários previstos.
5. Estabelecer critérios de transição entre os cenários II e III, considerando o comprimento da célula, a densidade atômica e os resultados combinados de difusão 10° e 90°.
6. Aprimorar as simulações de Monte Carlo disponíveis na literatura por meio da comparação com os resultados experimentais obtidos nas geometrias de difusão a 10° e espalhamento a 90°, refinando os parâmetros físicos do modelo para melhorar a descrição do aprisionamento de radiação em células de vapor atômico.

1.5 Estrutura da Tese

Esta tese foi estruturada para oferecer uma compreensão abrangente do transporte radiativo em vapores atômicos ressonantes, modelado por meio do processo estocástico de voos de Lévy, combinando teoria, experimentos e simulações numéricas. O trabalho contribui para o avanço do conhecimento sobre processos de transporte anômalo e suas implicações na óptica de

⁽³⁾Este intervalo de densidade foi selecionado para permitir a investigação do sistema em um regime de transição, onde a probabilidade de colisão em cada evento de espalhamento varia de um valor muito baixo (pouco mais de 5%) até aproximadamente 50%.

vapores atômicos, com potenciais aplicações em diversos contextos científicos e tecnológicos. A estrutura da tese organiza-se da seguinte forma:

- **Capítulo 2:** Detalhamos os fundamentos teóricos da interação entre a radiação e a matéria, essenciais para a compreensão do transporte radiativo em vapores atômicos. O capítulo começa abordando a absorção atômica, introduzindo as equações de Bloch para descrever a dinâmica de um sistema de dois níveis e derivando o coeficiente de absorção do meio. Subsequentemente, explora os diversos mecanismos de alargamento espectral que definem o perfil de uma linha atômica: o alargamento natural, decorrente do princípio da incerteza; o alargamento por potência, relacionado à saturação da transição atômica; o alargamento colisional, causado por interações entre os átomos; e o alargamento Doppler, resultante do movimento térmico dos átomos. A combinação desses efeitos leva ao perfil de Voigt para o coeficiente de absorção. A seção sobre emissão atômica foca na teoria da redistribuição de frequência, apresentando a Função de Redistribution de Frequência (FRF) e suas formulações integradas no ângulo para os cenários envolvendo a ausência e presença de colisões atômicas binárias. Por fim, o capítulo generaliza os conceitos de absorção e emissão para sistemas atômicos de múltiplos níveis, incorporando a estrutura hiperfina e sua influência nos perfis espectrais e nas funções de redistribuição.
- **Capítulo 3:** Abordamos o fenômeno do aprisionamento radiativo em vapores atômicos, modelando-o através da caminhada aleatória dos fôtons. Inicialmente, descrevemos o transporte radiativo em meios turvos, enfatizando a natureza estocástica da direção de propagação e da amplitude dos passos dos fôtons. Em seguida, analisamos a transmissão difusa da radiação, derivando uma expressão geral e, posteriormente, detalhando as contribuições do primeiro espalhamento, incluindo a dedução da distribuição de probabilidade do tamanho do passo para este evento e sua aplicação a diferentes geometrias de detecção. Para os múltiplos espalhamentos, discutimos a evolução do espectro de emissão com o número de interações e um dos resultados centrais da tese: a introdução da truncagem na amplitude dos passos devido ao tamanho finito dos sistemas experimentais e seu impacto na distribuição de tamanho de passo. Finalmente, o capítulo introduz e desenvolve o forma-

lismo dos Voos de Lévy para descrever o transporte superdifusivo, explicando os diferentes regimes de transporte (difusivo, superdifusivo, balístico), os fundamentos estatísticos dos Voos de Lévy e o papel do expoente de Lévy α , contrastando-os com o movimento difusivo clássico por meio da distribuição de Pareto e simulações de Monte Carlo. Finalizamos o capítulo estabelecendo a relação entre a transmissão difusa e a caracterização de α a partir da distribuição de passos.

- **Capítulo 4:** Constituímos o pilar experimental da tese, detalhando a metodologia empregada e apresentando a análise dos resultados obtidos para o aprisionamento radiativo em vapor de césio-133. Iniciamos com a descrição do aparato, focando nas características das células de vapor de diferentes geometrias (prismática e cilíndricas) e nos sistemas de fornos integrados, projetados para o controle térmico preciso. Também detalhamos o procedimento de verificação da pureza atômica de cada célula, baseado na espectroscopia de absorção saturada. Na sequência, expomos os arranjos experimentais para as medições de transmissão difusa a 90° , projetada para sondar o regime de espalhamento único, e a 10° , voltada para o regime de múltiplos espalhamentos. Detalhamos o rigoroso protocolo de tratamento de dados, que inclui a calibração em frequência, a correção das flutuações de potência do laser, a determinação da densidade atômica e o método para a extração do expoente de Lévy, α . O capítulo culmina com a apresentação e discussão dos resultados, onde validamos o modelo de espalhamento sem colisões para as asas espectrais (via detecção a 90°) e, de forma central, se utiliza a análise do expoente α para caracterizar o transporte superdifusivo (via detecção a 10°), revelando suas dependências com a densidade atômica, o comprimento da célula e a intensidade do laser.
- **Capítulo 5:** Apresentamos a abordagem computacional utilizada para simular o transporte radiativo, baseada no método de Monte Carlo. Iniciamos com uma descrição dos princípios do método aplicado à caminhada aleatória dos fótons, discutindo suas vantagens e os desafios computacionais. Em seguida, detalhamos as duas principais rotinas desenvolvidas: a primeira, um método que simula a interação a partir de princípios fundamentais, incluindo a seleção explícita da velocidade do átomo absorvedor; a segunda, uma

abordagem otimizada que utiliza matrizes de redistribuição de frequência pré-calculadas para acelerar significativamente as simulações, cuja validação frente aos modelos teóricos é demonstrada. Descrevemos também como as condições de contorno, que delimitam as geometrias experimentais, e a detecção da transmissão difusa são implementadas. Por fim, utilizamos os resultados das simulações para três objetivos principais: primeiramente, validar o modelo teórico do fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$, proposto no Capítulo 3; em segundo lugar, avaliar se os espectros captados nos experimentos a 90° correspondem de fato ao regime de primeiro espalhamento; e, finalmente, discutir os resultados das simulações de transmissão para a frente para determinar numericamente o expoente de Lévy, α , e compará-lo com os dados experimentais.

- **Capítulo 6:** Sintetizamos os principais resultados obtidos ao longo desta pesquisa, destacando as contribuições significativas para o entendimento do transporte de radiação e aprisionamento radiativo em vapores atômicos. As simulações de Monte Carlo realizadas, juntamente com as técnicas experimentais empregadas, permitiram explorar em detalhes o processo de difusão de fôtons, incluindo os efeitos de voos de Lévy e a influência do primeiro espalhamento em vapores atômicos ressonantes sujeitos a radiação. Por fim, sugerimos direções para investigações futuras, incluindo a aplicação de modelos mais complexos e a extensão das simulações para sistemas de maior dimensão e mais realistas, a fim de melhor compreender os fenômenos observados em escalas experimentais mais amplas.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2 Interação Matéria-Radiação

A interação entre radiação e matéria é um dos pilares fundamentais da óptica e da física atômica. No contexto dos vapores atômicos ressonantes, compreender como os átomos absorvem e emitem fótons é essencial para descrever os processos de transporte de luz. Este capítulo apresenta os fundamentos teóricos que regem essas interações, com ênfase nos aspectos mais relevantes para o transporte radiativo. O conteúdo servirá como base física para a compreensão dos fenômenos que determinam o comportamento coletivo da luz em meios atômicos homogêneos. Para isso, é necessário caracterizar a resposta atômica à excitação eletromagnética e compreender os mecanismos responsáveis pela modelagem do perfil espectral da radiação. Esses elementos são indispensáveis para a formulação de uma descrição estatística precisa do transporte de fótons em meios opticamente espessos.

Inicia-se com a descrição da absorção atômica, abordando as Equações de Bloch e a definição do coeficiente de absorção do meio. Em seguida, examinam-se os mecanismos de alargamento espectral, com foco nos efeitos natural, por potência, colisional e Doppler. A seção dedicada à emissão atômica discute as teorias de redistribuição de frequência, tanto em regimes completos quanto parciais, além das funções de redistribuição espectral e angular. Por fim, generalizam-se as principais equações apresentadas ao longo do capítulo para sistemas com N níveis hiperfinos.

2.1 Absorção Atômica

O coeficiente de absorção é fundamental para descrever quantitativamente a eficiência com que os átomos capturam a radiação incidente, determinando diretamente a dinâmica do transporte radiativo. Seu estudo permite prever como a intensidade da luz decai no meio, sendo essencial para modelar com precisão o aprisionamento e a redistribuição da radiação em sistemas reais. Assim, compreender detalhadamente esse parâmetro é crucial para estabelecer uma base teórica sólida que conecte as propriedades microscópicas do meio às suas respostas ópticas

macroscópicas, possibilitando uma descrição rigorosa e realista do aprisionamento radiativo.

2.1.1 Equações de Bloch

Da literatura, sabe-se que a equação de Schrödinger descreve a evolução temporal dos estados quânticos de um sistema e é expressa como [93]

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(\vec{r}, t)\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\Psi(\vec{r}, t)\rangle, \quad (2.1.1)$$

em que $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ é o ket que representa a função de onda dependente do tempo do sistema e $\hat{\mathcal{H}}$ é o operador hamiltoniano, com \vec{r} sendo o vetor posição e t o tempo. Ao aplicar o método da separação de variáveis, a função de onda pode ser expandida em termos dos autoestados do hamiltoniano. A solução da Eq. (2.1.1) é então dada por uma combinação linear desses autoestados, escrita como

$$|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \sum_{\{n\}} a_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n(\vec{r})\rangle, \quad (2.1.2)$$

onde $\{n\}$ representa o conjunto de índices que rotula os autoestados $|\psi_n(\vec{r})\rangle$ do operador hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, os quais formam uma base completa e ortonormal no espaço de estados do sistema, E_n são os autovalores de energia correspondentes a cada autoestado $|\psi_n(\vec{r})\rangle$ e $a_n(t)$ são as amplitudes de probabilidade dependentes do tempo, que indicam a contribuição de cada autoestado $|\psi_n(\vec{r})\rangle$ para o estado total do sistema $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$. A Eq. (2.1.2) manifesta o princípio da superposição quântica, onde o estado global $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ é uma combinação linear dos autoestados estacionários $|\psi_n(\vec{r})\rangle$, com coeficientes $a_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ que determinam a contribuição relativa e a fase de cada autoestado no sistema.

Considere agora um sistema atômico homogêneo confinado em um volume fechado V . Quando esse arranjo é perturbado por um campo externo periódico, a hamiltoniana do sistema pode ser expressa como [94]

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}},$$

onde $\hat{\mathcal{H}}_0$ e $\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}$ são, respectivamente, os operadores hamiltonianos não perturbado e perturbado. Substituindo essa expressão juntamente com a Eq. (2.1.2) na Eq. (2.1.1), calculando a derivada temporal no lado esquerdo da igualdade e aplicando a relação de autovalor

$\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_n(\vec{r})\rangle = E_n|\psi_n(\vec{r})\rangle$ no lado direito, obtém-se, após simplificações,

$$i\hbar \sum_{\{n\}} \dot{a}_n e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} |\psi_n(\vec{r})\rangle = \sum_{\{n\}} a_n e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t} \hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}} |\psi_n(\vec{r})\rangle.$$

Multiplicando ambos os lados da equação à esquerda pelo bra $\langle\psi_m(\vec{r})|$ (ortogonal ao ket $|\psi_n(\vec{r})\rangle$), com $\langle\psi_m(\vec{r})|\psi_n(\vec{r})\rangle = \delta_{m,n}$ e reagrupando os termos, chega-se a

$$\dot{a}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\{n\}} a_n e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \langle\psi_m(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_n(\vec{r})\rangle, \quad (2.1.3)$$

em que $\omega_{m,n} = \frac{E_{m,n}}{\hbar}$.

Considere um sistema atômico de dois níveis, onde $|\psi_1(\vec{r})\rangle$ e $|\psi_2(\vec{r})\rangle$ correspondem, respectivamente, ao estado fundamental (de menor energia) e ao estado excitado (de maior energia).

Expandindo os termos da Eq.(2.1.3) para este sistema, fica-se com

$$\begin{cases} \dot{a}_1 = -\frac{i}{\hbar} \left(a_1 \langle\psi_1(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_1(\vec{r})\rangle + a_2 e^{-i\omega_0 t} \langle\psi_1(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_2(\vec{r})\rangle \right), \\ \dot{a}_2 = -\frac{i}{\hbar} \left(a_1 e^{i\omega_0 t} \langle\psi_2(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_1(\vec{r})\rangle + a_2 \langle\psi_2(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_2(\vec{r})\rangle \right), \end{cases}$$

sendo $\omega_0 \equiv \omega_2 - \omega_1$ a frequência de ressonância (ou transição) do sistema. Adotando a hipótese de que o campo externo perturbativo não causa deslocamento dos níveis de energia, mas apenas induz transições entre estados⁽¹⁾, obtém-se a simplificação do sistema dada por

$$\begin{cases} i\dot{a}_1 = \frac{a_2}{\hbar} e^{-i\omega_0 t} \langle\psi_1(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_2(\vec{r})\rangle, \\ i\dot{a}_2 = \frac{a_1}{\hbar} e^{i\omega_0 t} \langle\psi_1(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_2(\vec{r})\rangle^*. \end{cases} \quad (2.1.4)$$

Tomemos que a perturbação ocorre devido à ação de um campo luminoso monocromático com frequência angular ω , descrito por uma onda plana na forma

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{E}_0}{2} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega t} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t} \right), \quad (2.1.5)$$

em que \vec{E}_0 e \vec{k} são os vetores de amplitude do campo e de onda, respectivamente. Tomando o comprimento de onda da luz incidente como muito maior que o tamanho do sistema atômico, o que é válido em interações típicas entre luz visível e átomos, pode-se aplicar a aproximação de dipolo elétrico, na qual a dependência espacial do campo na escala do átomo é desprezada, pois

⁽¹⁾ Assume-se que os elementos diagonais do hamiltoniano de interação se anulam, ou seja, $\langle\psi_1(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_1(\vec{r})\rangle = \langle\psi_2(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_2(\vec{r})\rangle = 0$. Assim, o campo externo não altera as energias dos estados, apenas promove transições entre eles via $\langle\psi_1(\vec{r})|\hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}|\psi_2(\vec{r})\rangle \neq 0$.

o campo elétrico torna-se praticamente uniforme sobre a extensão da função de onda⁽²⁾ [95].

Com isso, o campo elétrico externo assume a forma simplificada, dada por

$$\vec{E}(t) = \frac{|\vec{E}_0|}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \hat{\epsilon}, \quad (2.1.6)$$

onde $\hat{\epsilon}$ é o vetor unitário que define a direção do campo. Nessa circunstância, pode-se tratar o átomo como sendo um dipolo elétrico $-e^- \vec{r}_d$ sob a ação de um campo elétrico \vec{E} , resultando em um hamiltoniano de interação dado por [94]

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{dip}} = -\hat{\mu} \cdot \vec{E}, \quad (2.1.7)$$

em que $\hat{\mu} = -e^- \vec{r}_d$ é o operador momento de dipolo elétrico, onde e^- representa a carga elementar e \vec{r}_d a posição relativa do elétron em relação ao núcleo do átomo.

Substituindo a Eq. (2.1.6) em (2.1.7) e utilizando esse resultado na Eq. (2.1.4), após reagrupar os termos, obtém-se

$$\begin{cases} i\dot{a}_1 = \frac{\Omega}{2} e^{-i\omega_0 t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) a_2, \\ i\dot{a}_2 = \frac{\Omega^*}{2} e^{i\omega_0 t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) a_1, \end{cases}$$

onde

$$\boxed{\Omega_{mn} = \frac{\mu_{mn} |\vec{E}_0|}{\hbar}}, \quad (2.1.8)$$

é a frequência de Rabi, com

$$\mu_{mn} = e^- \langle \psi_m(\vec{r}) | \hat{\mathbf{r}}_\epsilon | \psi_n(\vec{r}) \rangle, \quad (2.1.9)$$

sendo $\hat{\mathbf{r}}_\epsilon = \vec{r}_d \cdot \hat{\epsilon}$ a projeção do operador tridimensional \vec{r}_d na direção $\hat{\epsilon}$. Aplicando agora a aproximação de onda girante⁽³⁾, o sistema se reduz a

$$\begin{cases} i\dot{a}_1 = \frac{\Omega}{2} e^{i\delta t} a_2, \\ i\dot{a}_2 = \frac{\Omega^*}{2} e^{-i\delta t} a_1, \end{cases} \quad (2.1.10)$$

onde $\delta = \omega - \omega_0$ é a dessintonia.

A evolução das amplitudes de probabilidade $a_1(t)$ e $a_2(t)$, descrita pelo sistema de Eqs. (2.1.10), permite caracterizar completamente a dinâmica do sistema em condições ideais, ou seja,

⁽²⁾De acordo com essa aproximação, quando o comprimento de onda da luz é muito maior que o tamanho do sistema, $e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1$, ou seja, o campo tem amplitude aproximadamente uniforme sobre a função de onda, permitindo que seja tratado como constante. Como a abordagem envolve apenas átomos, $\lambda \gg$ raio de Bohr, tornando a aproximação válida.

⁽³⁾Quando $\omega \approx \omega_0$, o termo $e^{-i(\omega_0 - \omega)t}$ varia lentamente e domina a dinâmica do sistema, enquanto $e^{-i(\omega_0 + \omega)t}$ oscila rapidamente, tornando sua contribuição média desprezível.

quando ele está isolado e sem dissipação. Entretanto, para descrever cenários mais realistas, como os que envolvem relaxação, decoerência ou interações com um ambiente térmico, torna-se necessário um formalismo mais amplo. Assim, adota-se a partir daqui a matriz densidade, que generaliza a descrição quântica e incorpora tanto sistemas puros quanto mistos de maneira unificada.

No formalismo da matriz densidade, define-se $\hat{\rho} = |\Psi(\vec{r}, t)\rangle\langle\Psi(\vec{r}, t)|$. Para um sistema de dois níveis, pode-se expressar essa matriz como

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |a_1|^2 & a_1 a_2^* \\ a_1^* a_2 & |a_2|^2 \end{pmatrix}, \quad (2.1.11)$$

onde ρ_{11} e ρ_{22} representam as populações dos estados fundamental e excitado, respectivamente, enquanto ρ_{12} e ρ_{21} descrevem as coerências entre os dois estados. Calculando a derivada temporal dos elementos da matriz em (2.1.11) e utilizando as Eqs. (2.1.10), obtém-se, após rearranjo,

$$\begin{cases} \dot{\rho}_{22} = -\dot{\rho}_{11} = \frac{i}{2} \left(e^{i\delta t} \Omega \rho_{21} - e^{-i\delta t} \Omega^* \rho_{12} \right), \\ \dot{\rho}_{12} = \dot{\rho}_{21}^* = \frac{i\Omega}{2} e^{-i\delta t} (\rho_{11} - \rho_{22}). \end{cases} \quad (2.1.12)$$

A relação $\dot{\rho}_{22} = -\dot{\rho}_{11}$ é uma consequência direta da conservação populacional do sistema, expressa por $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$. Como a derivada temporal desta soma é nula, segue-se que as populações dos estados evoluem de forma acoplada. Esta é uma propriedade dos sistemas fechados, onde não há troca de probabilidade com o ambiente externo, preservando assim o caráter unitário da evolução temporal.

Utilizando a aproximação de variáveis lentas⁽⁴⁾, introduz-se as amplitudes $b_{1,2}(t)$, que descrevem a evolução temporal lenta do sistema, e defini-se os elementos de uma nova matriz σ em termos de $b_{1,2}(t)$ da seguinte forma,

$$\begin{pmatrix} |b_1|^2 & b_1 b_2^* \\ b_1^* b_2 & |b_2|^2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix},$$

onde os elementos σ_{ij} representam os componentes da matriz densidade no referencial das variáveis lentas. Nessa nova notação as populações não são alteradas pela transformação na fase ($\rho_{11} = |a_1(t)|^2 = |b_1(t)|^2 = \sigma_{11}$ e $\rho_{22} = |a_2(t)|^2 = |b_2(t)|^2 = \sigma_{22}$), devido à natureza unitária dos

⁽⁴⁾Essa aproximação consiste em redefinir as amplitudes $a_{1,2}(t)$ na forma $a_{1,2}(t) = e^{\pm i\delta t/2} b_{1,2}(t)$, de modo que as oscilações rápidas associadas à frequência δ sejam absorvidas nos fatores exponenciais. As novas variáveis $b_{1,2}(t)$ passam então a variar mais lentamente, permitindo uma análise mais conveniente da dinâmica do sistema em torno da ressonância.

fatores de fase $e^{\pm i\delta t/2}$. As coerências, por outro lado, relacionam-se através de $\rho_{12} = \sigma_{12}e^{i\delta t}$ e $\rho_{21} = \sigma_{21}e^{-i\delta t}$, assumindo a forma $a_{1,2}(t) \equiv e^{\pm i\delta t/2}b_{1,2}(t)$ para as amplitudes. Após manipulações algébricas e a introdução dos σ_{ij} conforme definidos, o sistema de Eqs. (2.1.12) pode ser reescrito como

$$\begin{cases} \dot{\rho}_{22} = -\dot{\rho}_{11} = \frac{i}{2}(-\Omega^*\sigma_{12} + \Omega\sigma_{21}), \\ \dot{\sigma}_{21} = \dot{\sigma}_{12}^* = \frac{i}{2}[\Omega^*(\rho_{22} - \rho_{11}) + 2\delta\sigma_{21}]. \end{cases} \quad (2.1.13)$$

Na realidade, os átomos não apenas são excitados para níveis energéticos superiores, mas também decaem para estados inferiores através de processos radiativos ou não radiativos. Portanto, uma modelagem precisa do sistema requer a inclusão desses efeitos nas Eqs. (2.1.13). Nesse contexto, o termo de relaxação Γ_0 , que representa a taxa de decaimento do estado excitado para o fundamental por emissão espontânea, é introduzido fenomenologicamente, levando a [95]

$$\begin{cases} \dot{\rho}_{22} = -\dot{\rho}_{11} = \frac{i}{2}(-\Omega^*\sigma_{12} + \Omega\sigma_{21}) - \Gamma_0\rho_{22}, \\ \dot{\sigma}_{21} = \dot{\sigma}_{12}^* = \frac{i\Omega^*}{2}(\rho_{22} - \rho_{11}) + \left(i\delta - \frac{\Gamma_0}{2}\right)\sigma_{21}. \end{cases} \quad (2.1.14)$$

O termo $-\Gamma_0\rho_{22}$ em $\dot{\rho}_{22}$ descreve o decaimento da população do estado excitado $|2\rangle$ para o estado fundamental $|1\rangle$ com taxa Γ_0 . Esse decaimento implica um aumento correspondente na população do estado fundamental, uma vez que $\dot{\rho}_{11} = -\dot{\rho}_{22}$. Analogamente, o termo $-\frac{\Gamma_0}{2}\sigma_{21}$ representa o decaimento por emissão espontânea da coerência entre os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ com meia-taxa $\frac{\Gamma_0}{2}$. O modelo adotado considera, especificamente, o decaimento espontâneo, onde a transição atômica é induzida pelas flutuações do campo eletromagnético do vácuo que interage com o átomo excitado [96]. Essa interação leva à emissão de um fóton e ao consequente decaimento do átomo para um nível de energia mais baixo. Essa abordagem é adequada para a análise proposta, pois captura de maneira eficiente os efeitos essenciais para o comportamento espectral do sistema.

Quando o sistema atinge o equilíbrio e o regime estacionário governa a dinâmica, tem-se $\dot{\rho}_{11} = \dot{\rho}_{22} = \dot{\rho}_{12} = \dot{\rho}_{21} = 0$. Adicionalmente, como o sistema é fechado, a condição de normalização impõe $\rho_{11}(t) + \rho_{22}(t) = 1$. Combinando essas condições com o sistema de Eqs.

(2.1.14), chega-se nas soluções estacionárias, dada por

$$\boxed{\begin{cases} \rho_{11}(\delta, \Omega) = \frac{4\delta^2 + |\Omega|^2 + \Gamma_0^2}{4\delta^2 + 2|\Omega|^2 + \Gamma_0^2}, \\ \rho_{22}(\delta, \Omega) = \frac{|\Omega|^2}{4\delta^2 + 2|\Omega|^2 + \Gamma_0^2}, \\ \sigma_{21}(\delta, \Omega) = \sigma_{12}^*(\delta, \Omega) = \frac{\Omega^*(2\delta - i\Gamma_0)}{4\delta^2 + 2|\Omega|^2 + \Gamma_0^2}. \end{cases}} \quad (2.1.15)$$

A frequência de Rabi, definida pela Eq. (2.1.8), quantifica a intensidade do acoplamento entre o campo externo e o sistema atômico, desempenhando um papel fundamental na descrição das transições coerentes entre estados quânticos, particularmente em processos de ressonância atômica. As soluções apresentadas em (2.1.15) correspondem às equações de Bloch no regime estacionário. As duas primeiras equações descrevem as populações dos estados fundamental $|\psi_1(\vec{r})\rangle$ e excitado $|\psi_2(\vec{r})\rangle$ no equilíbrio. Elas mostram que a população ρ_{11} do estado fundamental diminui quando a dessintonia δ se aproxima de zero (condição de ressonância) ou quando a intensidade Ω do campo aumenta, levando a um aumento correspondente na população ρ_{22} do estado excitado. A terceira equação caracteriza a coerência σ_{21} entre os estados, que quantifica a capacidade do sistema de manter superposições quânticas. Esta grandeza complexa, cuja parte real está associada à dispersão e a parte imaginária à absorção, exibe uma dependência sensível tanto à dessintonia δ quanto à taxa de decaimento Γ_0 , refletindo o balanço dinâmico entre excitação coerente e relaxação no sistema.

2.1.2 Coeficiente de Absorção do Meio

Considere que o campo elétrico dado pela Eq. (2.1.5) incide sobre um meio linear, homogêneo e isotrópico, e induz nele uma polarização. De acordo com a mecânica estatística, essa polarização pode ser expressa como [97]

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = N \langle \hat{\vec{\mu}} \rangle \hat{\varepsilon}, \quad (2.1.16)$$

onde N representa a densidade de partículas no meio e $\langle \hat{\vec{\mu}} \rangle$ é o valor esperado do operador momento de dipolo elétrico.

Para um sistema de dois níveis, o valor esperado do momento de dipolo elétrico é determinado pela superposição coerente dos estados, conforme expresso pela Eq. (2.1.2). O cálculo

explícito resulta em

$$\langle \hat{\mu} \rangle = -e^- \int \Psi^*(\vec{r}, t)(\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon)\Psi(\vec{r}, t)d^3r = -e^- \langle \Psi(\vec{r}, t)|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\Psi(\vec{r}, t) \rangle,$$

onde $\Psi(\vec{r}, t) = a_1(t)\psi_1(\vec{r})e^{-i\omega_1 t} + a_2(t)\psi_2(\vec{r})e^{-i\omega_2 t}$. Desenvolvendo esta expressão com a evolução temporal completa, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mu} \rangle = -e^- & \left[\underbrace{|a_1|^2 \langle \psi_1(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_1(\vec{r}) \rangle + |a_2|^2 \langle \psi_2(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_2(\vec{r}) \rangle}_{\text{Termos diagonais}} + \right. \\ & \left. + \underbrace{a_1^* a_2 e^{-i\omega_0 t} \langle \psi_1(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_2(\vec{r}) \rangle + a_2^* a_1 e^{i\omega_0 t} \langle \psi_2(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_1(\vec{r}) \rangle}_{\text{Termos de coerência}} \right]. \end{aligned}$$

Conforme discutido na subseção anterior, a interação campo-átomo apenas acopla os estados sem alterar os níveis energéticos, anulando, assim, os elementos diagonais $\langle \psi_i(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_i(\vec{r}) \rangle$ por simetria de paridade. Portanto, a polarização depende exclusivamente dos termos de coerência. Logo, no formalismo da matriz densidade a expressão anterior é reduzida a

$$\langle \hat{\mu} \rangle = -e^- [\rho_{12} e^{i\omega_0 t} \langle \psi_2(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_1(\vec{r}) \rangle + \rho_{21} e^{-i\omega_0 t} \langle \psi_1(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_2(\vec{r}) \rangle].$$

Sabendo que $\langle \psi_1(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_2(\vec{r}) \rangle = \langle \psi_2(\vec{r})|\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon|\psi_1(\vec{r}) \rangle^*$, e utilizando a relação $\rho_{21} \equiv \sigma_{21} e^{-i\delta t}$ juntamente com $\rho_{21} = \rho_{12}^*$ e a definição do elemento de matriz dipolar da Eq. (2.1.9), pode-se reescrever a expressão anterior como

$$\langle \hat{\mu} \rangle = -\sigma_{21} e^{-i\omega t} \mu_{12} + \text{c.c.}$$

Substituindo este resultado na Eq. (2.1.16), chega-se finalmente a expressão para a polarização do meio, dada por

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = -N\sigma_{21}\mu_{12}e^{-i\omega t}\hat{\varepsilon} + \text{c.c.} \quad (2.1.17)$$

No contexto do eletromagnetismo clássico, a polarização de primeira ordem induzida em um meio dielétrico pela ação de um campo elétrico é descrita por [98]

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega) \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1.18)$$

onde ϵ_0 representa a permissividade elétrica do vácuo e $\chi^{(1)}(\omega)$ denota a susceptibilidade linear do meio, que caracteriza a resposta linear do meio à frequência ω do campo aplicado. Igualando

as expressões para a polarização nas Eqs. (2.1.17) e (2.1.18), e aplicando as aproximações de dipolo elétrico e onda girante (já utilizadas na Eq. (2.1.6)), obtém-se a relação

$$\chi(\delta, \Omega; N) = -\frac{2N\mu_{12}}{\epsilon_0|\vec{E}_0|}\sigma_{21}(\delta, \Omega).$$

Substituindo a expressão para σ_{21} da Eq. (2.1.15) e utilizando a relação de conjugação complexa da frequência de Rabi Ω^* , após manipulações algébricas chega-se à susceptibilidade elétrica dependente dos parâmetros do sistema:

$$\chi(\delta; \Omega, N) = -\frac{2N|\mu_{12}|^2}{\epsilon_0\hbar}\left(\frac{2\delta - i\Gamma_0}{4\delta^2 + 2|\Omega|^2 + \Gamma_0^2}\right). \quad (2.1.19)$$

A equação (2.1.19) fornece a susceptibilidade elétrica do meio em termos dos parâmetros microscópicos do sistema atômico, estabelecendo a ponte entre a descrição quântica da interação campo-matéria e os efeitos macroscópicos observáveis. A partir deste ponto, é possível empregar os resultados do eletromagnetismo clássico para descrever como essa resposta microscópica afeta a propagação da luz no meio. Para isso, retoma-se o formalismo das equações de Maxwell, a fim de relacionar a susceptibilidade com grandezas como o índice de refração, o vetor de onda e a intensidade da radiação transmitida.

De acordo com a primeira equação de Maxwell, o vetor deslocamento elétrico em um meio material é dado por

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}(\vec{r}, t).$$

Para um meio linear, isotrópico e homogêneo, onde a polarização é proporcional ao campo aplicado, esta relação pode ser escrita como

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0\epsilon_r\vec{E}(\vec{r}, t),$$

com $\epsilon_r = 1 + \chi$ sendo a permissividade relativa e χ a susceptibilidade elétrica do material [99].

Além disso, a velocidade de propagação da luz no meio é dada por

$$v_r = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r\mu_r}} = \frac{c}{n_r},$$

onde μ_r é a permeabilidade relativa e n_r o índice de refração⁽⁵⁾ [100]. Consequentemente, o vetor de onda do campo elétrico é modificado, com módulo dado por

$$|\vec{k}| = \frac{\omega}{v_r} = \frac{\omega n_r}{c} = \frac{2\pi n_r}{\lambda},$$

sendo λ o comprimento de onda no vácuo. Considerando que o vetor de onda possui apenas componente ao longo de um eixo do sistema, têm-se $\vec{k} \cdot \vec{r} = |\vec{k}| |\vec{r}| = (2\pi n_r / \lambda) \ell$, onde $n_r \ell$ é o caminho óptico percorrido pelo campo no meio e ℓ é a distância física real no meio material.

Assim, a Eq. (2.1.5) assume a forma

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{E}_0}{2} \left(e^{i \frac{2\pi n_r \ell}{\lambda} t} + \text{c.c.} \right).$$

Para meios não magnéticos⁽⁶⁾, têm-se $\mu_r = 1$, levando a $n_r = \sqrt{1 + \chi}$. Quando $\chi \ll 1$, uma expansão em série de potências de primeira ordem fornece $n_r \approx 1 + \frac{\chi}{2}$, resultando em

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{E}_0}{2} \left(e^{i \frac{2\pi(1+\chi/2)\ell}{\lambda} t} + \text{c.c.} \right).$$

Considerando a estrutura complexa da susceptibilidade dada pela Eq. (2.1.19), pode-se separar suas partes real e imaginária, obtendo

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{E}_0}{2} \left[e^{-\frac{\pi \text{Im}(\chi)}{\lambda} \ell} e^{i \frac{2\pi}{\lambda} \left(1 + \frac{\text{Re}(\chi)}{2} \right) \ell} e^{i \omega t} + \text{c.c.} \right]. \quad (2.1.20)$$

Estabelecido o campo elétrico no meio material, a intensidade da radiação propagada pode ser calculada a partir da expressão $I = \frac{1}{2} v_r \epsilon_0 |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$ [101]. Utilizando a expressão do campo elétrico dada pela Eq. (2.1.20) e a relação $v_r = c/n_r$ para a velocidade de propagação no meio, obtém-se após as devidas manipulações matemáticas

$$I(\delta; \Omega, N) = \frac{c \epsilon_0 |\vec{E}_0|^2}{8 n_r} \exp \left(-\frac{2\pi \text{Im}[\chi(\delta; \Omega, N)]}{\lambda} \ell \right), \quad (2.1.21)$$

onde o fator exponencial descreve a atenuação da intensidade devido à componente imaginária da susceptibilidade χ . Para o caso de radiação monocromática, a transmissão de intensidade através do meio é igualmente descrita pela lei de Beer-Lambert [102], que estabelece a relação entre a potência transmitida e incidente, dada por

$$\frac{P(\delta)}{P_0} = T(\delta) = e^{-\kappa(\delta; \Omega, N) \ell},$$

(2.1.22)

⁽⁵⁾O índice de refração quantifica a mudança na velocidade de fase da luz ao atravessar um meio.

⁽⁶⁾Sistemas atômicos são tipicamente não magnéticos, com poucas exceções.

sendo $P(\delta)$ a potência transmitida, P_0 a potência incidente, $T(\delta)$ a transmitância, $\kappa(\delta; \Omega, N)$ o coeficiente de absorção do meio.

Como a potência óptica é dada pelo produto entre a intensidade e a área de incidência, a Eq. (2.1.22) pode ser reescrita em termos de intensidade como

$$I(\delta) = I_0 e^{-\kappa(\delta; \Omega, N)\ell},$$

onde I_0 representa a intensidade incidente. Comparando esta expressão com a Eq. (2.1.21), deduz-se a relação fundamental entre o coeficiente de absorção e a susceptibilidade do meio, escrita como

$$\kappa(\delta) = \frac{2\pi}{\lambda} \text{Im}[\chi(\delta)].$$

Substituindo a expressão para a susceptibilidade $\chi(\delta)$ dada pela Eq. (2.1.19), obtém-se o coeficiente de absorção na forma explícita, dado por

$$\kappa(\delta; \Omega, N) = \frac{4\pi N |\mu_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar \lambda \Gamma_0} \left(\frac{1}{1 + 2 \frac{|\Omega|^2}{\Gamma_0^2} + 4 \frac{\delta^2}{\Gamma_0^2}} \right). \quad (2.1.23)$$

A intensidade de saturação no centro da linha I_{sat} , corresponde à intensidade luminosa na qual a absorção óptica em ressonância se reduz à metade de seu valor máximo no regime linear, devido à saturação da transição atômica [96]. Este efeito surge quando a taxa de excitação induzida pelo campo se torna comparável à taxa de decaimento espontâneo, levando a uma redução significativa da população disponível no estado fundamental. A relação entre a intensidade incidente I e a intensidade de saturação pode ser expressa em termos da frequência de Rabi como [95]

$$\frac{I}{I_{\text{sat}}} = \frac{2|\Omega|^2}{\Gamma_0^2},$$

onde a dependência quadrática reflete a proporcionalidade entre a intensidade e o quadrado da amplitude do campo elétrico. Substituindo esta relação na Eq.(2.1.23), obtém-se a forma explícita do coeficiente de absorção em função da intensidade:

$$\kappa(\delta; I, N) = \frac{4\pi N |\mu_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar \lambda \Gamma_0} \left(\frac{1}{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}} + 4 \frac{\delta^2}{\Gamma_0^2}} \right). \quad (2.1.24)$$

Observando que

$$\frac{1}{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}} + \frac{4\delta^2}{\Gamma_0^2}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}\right)} \cdot \frac{1}{\left[1 + \frac{4\delta^2}{\Gamma_0^2 \left(1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}\right)}\right]}.$$

Nesse caso, pode-se reescrever o coeficiente de absorção como

$$\boxed{\kappa_\chi(\delta; I, N) = \frac{\kappa_0}{1 + 4 \frac{\delta^2}{\Gamma_{\text{eff}}^2}}}, \quad (2.1.25)$$

onde,

$$\kappa_0 = \frac{4\pi N |\mu_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar \lambda \Gamma_0 \left(1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}\right)}, \quad \Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0 \sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}},$$

representam, respectivamente, o coeficiente de absorção em ressonância ($\delta = 0$) e a largura efetiva do perfil de absorção, que aumenta com a intensidade do campo (alargamento por saturação).

A Lei de Beer-Lambert, Eq. (2.1.22), descreve quantitativamente a atenuação da intensidade luminosa durante sua propagação em um meio absorvente, sendo governada pelo coeficiente de absorção apresentado na Eq. (2.1.25). Este coeficiente, que depende fundamentalmente da densidade atômica N e da interação entre os átomos e o campo eletromagnético incidente, exibe um perfil espectral de forma Lorentziana cuja largura total à meia altura (FWHM, do inglês *Full Width at Half Maximum*) é dada por $\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0 \sqrt{1 + I/I_{\text{sat}}}$. Nesta expressão, Γ_0 representa a largura natural da transição atômica, enquanto a razão I/I_{sat} caracteriza o grau de saturação óptica do sistema. No regime de baixas intensidades, quando $I \ll I_{\text{sat}}$, o termo de saturação torna-se desprezível, recuperando-se assim o perfil de absorção linear não saturado. É importante destacar que todas as quantidades de frequência na Eq. (2.1.25), especificamente δ e Γ_{eff} , estão expressas em unidades de frequência angular; para conversão a unidades de frequência cíclica comum, estas grandezas devem ser divididas por um fator 2π , garantindo assim a consistência dimensional em aplicações práticas.

2.2 Alargamentos Espectrais

Embora a teoria sugira um cenário idealizado, onde fontes de radiação bem definidas, como lasers, produziriam espectros de absorção e emissão perfeitamente monocromáticos⁽⁷⁾, a realidade experimental apresenta um quadro mais complexo. Na prática, observa-se que cada linha espectral exibe uma largura e um perfil característicos, originados de diversos mecanismos de alargamento. Esses efeitos fazem com que a distribuição de frequências em torno da transição atômica ω_0 seja um perfil alargado. Esta característica tem implicações importantes: mesmo quando o campo aplicado não está precisamente em ressonância com ω_0 , ainda existe uma probabilidade finita (embora decrescente com o afastamento da frequência central) de ocorrer absorção. Este comportamento é crucial para uma descrição acurada da resposta espectral de sistemas atômicos reais. Entre os principais mecanismos responsáveis por este alargamento, destacam-se quatro tipos fundamentais: alargamento natural (introduzido anteriormente de forma fenomenológica e quantificado por Γ_0), por potência (saturação), Doppler e colisional, que serão abordados na sequência.

2.2.1 Alargamento Natural

O alargamento natural das linhas espetrais é uma consequência direta do princípio da incerteza energia-tempo de Heisenberg [20, 93], expresso por:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.2.26)$$

Nesta relação, a incerteza na energia de uma transição, ΔE , está intrinsecamente ligada ao tempo de vida finito do estado excitado, $\Delta t \sim \tau$. Portanto, um tempo de vida finito implica necessariamente uma indeterminação na energia, o que se manifesta como o alargamento da linha espectral. Do ponto de vista físico, essa relação indica que estados com tempo de vida finito ($\Delta t \sim \tau$) não podem ter energia de transição perfeitamente definida, originando, assim, o alargamento natural.

⁽⁷⁾Isto é, compostos por frequências únicas e com larguras de linha nulas ou tão estreitas que podem ser consideradas como larguras nulas.

Para quantificar esse alargamento, considera-se que a energia da transição atômica está relacionada à frequência de ressonância pela relação de Planck, $E_0 = \hbar\omega_0$. Assim, uma incerteza ΔE na energia necessária para transição, manifesta-se como uma incerteza correspondente, $\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$, na frequência da transição. Ao aplicar a Eq. (2.2.26) para um estado com tempo de vida médio τ_0 , ou seja, $\Delta t \approx \tau_0$, obtém-se a incerteza mínima para a frequência da transição dada por

$$\Delta\omega \geq \frac{1}{2\tau_0} = \frac{\Gamma_0}{2},$$

onde $\Gamma_0 = \frac{1}{\tau_0}$ representa a taxa de decaimento natural. Essa relação constitui um limite fundamental para a precisão espectroscópica e seu resultado demonstra que, mesmo com um tempo de vida τ_0 bem definido, a frequência de transição não é um valor bem definido, mas sim uma distribuição centrada em ω_0 com uma FWHM igual a Γ_0 , caracterizando o alargamento natural. Notavelmente, a taxa de relaxação Γ_0 introduzida fenomenologicamente na Eq. (2.1.14), originalmente associada ao decaimento espontâneo dos átomos excitados, revela-se idêntica ao parâmetro que quantifica o alargamento natural da linha espectral.

Em regime de baixa intensidade, $I/I_{\text{sat}} \rightarrow 0$, o perfil de absorção da Eq. (2.1.25) mantém sua forma Lorentziana característica, porém com a largura efetiva reduzida exclusivamente à contribuição natural ($\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0$). A Figura 2.1 apresenta perfis de absorção normalizados no máximo para diferentes valores de Γ_0 no regime não-saturado, onde se observa que a largura à meia altura Γ_{eff} de cada perfil coincide precisamente com o respectivo Γ_0 . Esta correspondência direta demonstra que a taxa de relaxação radiativa Γ_0 é o parâmetro fundamental que determina o alargamento natural da linha espectral. Fisicamente, quanto maior a taxa de decaimento Γ_0 , ou equivalentemente, quanto menor o tempo de vida $\tau_0 = 1/\Gamma_0$ do estado excitado, mais largo se torna o perfil de absorção. Este comportamento está de acordo com o princípio da incerteza energia-tempo, vinculando diretamente a dinâmica temporal do sistema às propriedades espectrais observadas.

2.2.2 Alargamento por Potência

Em condições experimentais onde a intensidade luminosa I se torna comparável ou superior à intensidade de saturação I_{sat} , o termo I/I_{sat} na Eq. (2.1.25) não pode ser negligenciado.

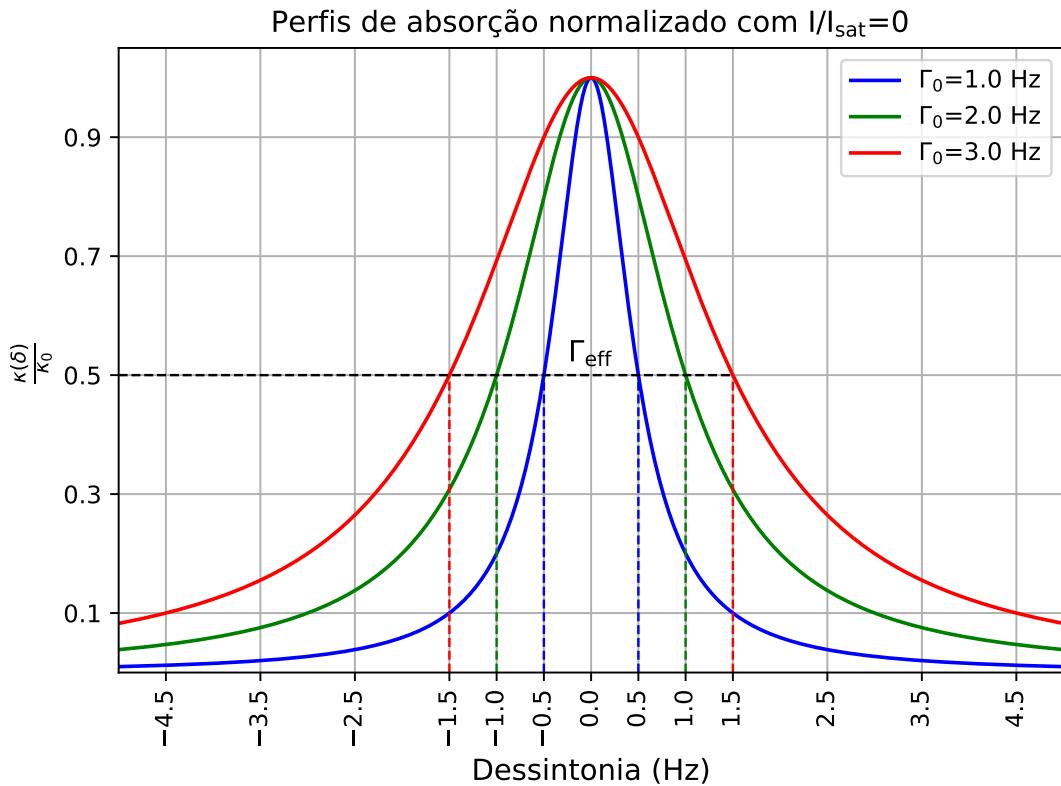


Figura 2.1 – Perfis de absorção normalizados $\kappa(\delta)/\kappa_0$ em função da dessintonia δ (em Hz) para diferentes valores de largura natural $\Gamma_0 = 1, 2$ e 3 Hz, no regime de baixa intensidade ($I/I_{\text{sat}} \ll 1$). Cada curva Lorentziana apresenta largura à meia altura (Γ_{eff}) exatamente igual ao respectivo Γ_0 , indicado pelas linhas verticais tracejadas. A condição $\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0$ comprova que o alargamento observado é puramente natural, decorrente exclusivamente do tempo de vida finito do estado excitado ($\Gamma_0 = 1/\tau_0$).

Fonte: Autoria própria.

Neste regime, a elevada taxa de excitação atômica leva a uma redução na *probabilidade líquida* de absorção por fóton, pois uma fração significativa de átomos permanece no estado excitado, um efeito que persiste mesmo considerando o tempo de vida finito τ_0 do estado excitado. A rápida reciclagem dos átomos entre os estados fundamental e excitado cria uma situação dinâmica onde a população efetivamente disponível para absorção diminui. Consequentemente, o perfil de absorção sofre um achatamento na região de ressonância ($\delta = 0$) e um alargamento espectral característico, com $\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0 \sqrt{1 + I/I_{\text{sat}}}$. Este alargamento por potência, que difere fundamentalmente do alargamento natural, torna-se progressivamente mais pronunciado com o aumento da intensidade do campo, modificando qualitativamente a resposta espectral do sistema atômico.

A Figura 2.2 apresenta a evolução dos perfis de absorção para quatro valores distintos da

razão de intensidade I/I_{sat} . O eixo de frequências, normalizado pela largura natural Γ_0 , mostra o desvio em relação à ressonância (δ/Γ_0) de forma adimensional, permitindo comparação direta das larguras espectrais em unidades de Γ_0 . A curva azul corresponde ao regime não-saturado ($I/I_{\text{sat}} \ll 1$), exibindo o perfil Lorentziano característico com FWHM exatamente igual a Γ_0 . Em contraste, a curva amarela ($I = I_{\text{sat}}$) demonstra o efeito de saturação: a absorção no centro da linha ($\delta = 0$) reduz-se à metade do valor não-saturado, enquanto a largura espectral aumenta para $\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0\sqrt{2}$. Para intensidades mais elevadas, representadas pelas curvas verde ($I = 2I_{\text{sat}}$) e vermelha ($I = 10I_{\text{sat}}$), observa-se um progressivo alargamento e achatamento dos perfis, com Γ_{eff} atingindo $\Gamma_0\sqrt{3}$ e $\Gamma_0\sqrt{11}$, respectivamente.

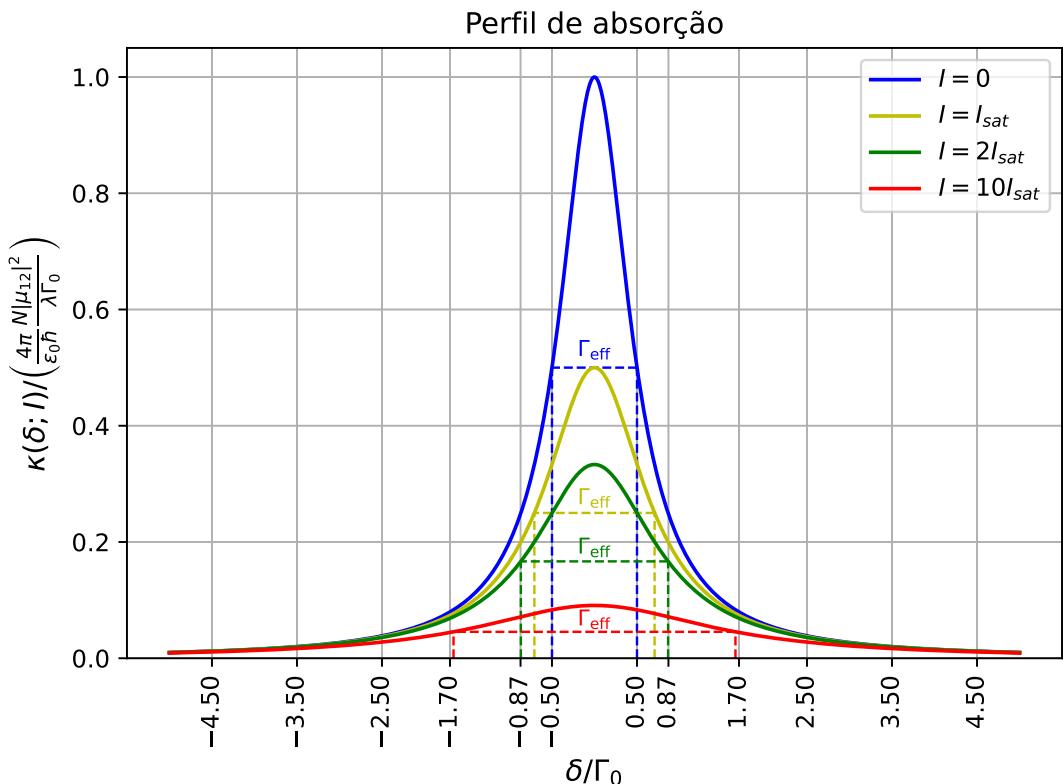


Figura 2.2 – Perfis de absorção em função da desintonia normalizada δ/Γ_0 para diferentes razões de intensidade $I/I_{\text{sat}} = 0^+, 1, 2$ e 10 . A curva azul ($I = 0$) mostra o perfil Lorentziano não-saturado com largura natural $\Gamma_{\text{eff}} = \Gamma_0$. A curva amarela ($I = I_{\text{sat}}$) apresenta absorção reduzida à metade na ressonância e largura $\Gamma_0\sqrt{2}$, enquanto as curvas verde ($I = 2I_{\text{sat}}$) e vermelha ($I = 10I_{\text{sat}}$) demonstram o progressivo alargamento por potência ($\Gamma_0\sqrt{3}$ e $\Gamma_0\sqrt{11}$, respectivamente). As linhas tracejadas indicam a largura à meia altura (FWHM) para cada perfil, evidenciando o aumento de Γ_{eff} com a intensidade conforme $\Gamma_0\sqrt{1 + I/I_{\text{sat}}}$.

Fonte: Autoria própria.

2.2.3 Alargamento Colisional

O confinamento e movimento térmico dos átomos em células de vapor induzem colisões que perturbam os níveis de energia atômicos, causando o alargamento colisional (ou por pressão). Tais colisões perturbam os níveis de energia dos átomos absorvedores, modificando consequentemente a frequência de ressonância da radiação absorvida e promovendo o alargamento da linha espectral [103]. Essas interações colisionais podem ocorrer entre: átomos da mesma espécie, átomos de espécies diferentes, moléculas do meio ou, inclusive, com as paredes do recipiente. Estas interações, que podem ocorrer entre átomos da mesma espécie, de espécies diferentes, com moléculas residuais ou com as paredes do recipiente, modificam abruptamente o momento dipolar atômico.

Tipos de Colisões

As colisões podem ser classificadas em [104, 105]:

- **Colisões inelásticas:** Envolvem transferência de energia interna entre as partículas e alteração em suas trajetórias, podendo induzir processos de desexcitação atômica. Essas colisões influenciam tanto o perfil espectral quanto as populações dos estados atômicos. Ressalta-se que não ocorre transferência de carga nem reações químicas entre as espécies colidentes. A identidade das partículas permanece inalterada, restringindo-se à redistribuição de energia entre seus graus de liberdade internos e externos. Este fenômeno difere fundamentalmente de processos reativos ou de transferência de carga, onde há efetiva troca de elétrons ou constituintes, alterando a natureza química das espécies envolvidas.
- **Colisões elásticas:** Caracterizam-se pela ausência de transferência de energia entre os graus de liberdade internos das partículas, seus estados eletrônicos, rotacionais e vibracionais permanecem inalterados. Entretanto, ocorrem modificações na direção dos vetores de momento linear e na fase das funções de onda associadas. Classicamente, a colisão pode resultar em deflexão da trajetória relativa das partículas. Embora não provoquem transições entre estados quânticos, as colisões elásticas são responsáveis pelo alargamento

homogêneo da linha espectral (denominado alargamento por pressão) e podem afetar a coerência quântica entre os estados envolvidos na transição óptica.

No caso de vapores, a natureza elástica ou inelástica das colisões é determinada, fundamentalmente, pelo tipo de interação entre as partículas envolvidas e pela energia térmica associada ao sistema $E_T \sim k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema.. Nesse contexto, os potenciais que descrevem as interações binárias de interesse são [106, 107]:

- **van der Waals:** As colisões regidas por esse potencial são, em geral, elásticas. Esse tipo de interação é comumente utilizado para descrever colisões entre elementos da mesma espécie com ambos no estado fundamental, bem como entre espécies diferentes, seja quando ambos os elementos estão no estado fundamental ou nos casos em que um está no fundamental e o outro no excitado.
- **Dipolo-Dipolo:** As colisões descritas por esse potencial podem ser tanto elásticas quanto inelásticas. Interações que envolvem elementos de mesma espécie com um no estado fundamental e o outro excitado, são modelados com esse potencial. Especificamente nessas situações, as colisões são classificadas como ressonante e o problema deve ser tratado como inelástico, pois há uma probabilidade significativa de que o átomo excitado transfira sua energia para o átomo no estado fundamental, promovendo-o ao estado excitado enquanto ele próprio relaxa para o estado fundamental. Além disso, em sistemas com múltiplos níveis energéticos próximos, durante a transferência de energia, o átomo no estado fundamental pode ser excitado para um nível energético diferente daquele ocupado inicialmente pelo átomo excitado, promovendo, inclusive, transições proibidas no regime radiativo regidos pelas regras de seleção quântica.

Além do potencial de interação, a energia térmica do sistema, $E_T \sim k_B T$, é um parâmetro essencial na caracterização dos processos colisionais. Quando $E_T \gtrsim E_0$, as colisões tendem a ser predominantemente inelásticas, independentemente do potencial de interação, sendo que os eventos de colisões podem promover tanto a excitação atômica (quando pelo menos um

átomo encontra-se no estado fundamental) quanto a emissão induzida (caso um dos átomos esteja inicialmente excitado); por outro lado, na situação em que $E_T \ll E_0$, as colisões são rigorosamente elásticas, validando a aproximação de espalhamento puramente elástico [106,107].

Regimes de Colisões

As colisões são descritas por dois regimes principais [106–108]:

- **Teoria do impacto:** Aplicável quando a duração da colisão é significativamente menor que o tempo de vida do estado excitado. Neste regime, as colisões são sempre binárias, instantâneas e tratadas como eventos pontuais estatisticamente independentes. O alargamento resultante apresenta perfil Lorentziano com largura à meia altura Γ_c , relacionada ao tempo médio de duração de uma colisão binária, t_c , conforme expresso por

$$L_c(\delta) = \frac{2}{\pi\Gamma_c} \cdot \frac{1}{1 + 4\frac{\delta^2}{\Gamma_c^2}}. \quad (2.2.27)$$

- **Teoria quasi-estática:** Adequada quando a duração das interações é comparável ou superior ao tempo de vida do estado excitado. Neste caso, o campo perturbador atua continuamente sobre o átomo durante os processos de emissão ou absorção, gerando perfis assimétricos e não triviais, como o perfil de Holtsmark [106].

O raio de Weisskopf ρ_W é uma distância de referência crucial que ajuda a classificar a força das colisões individuais, o que, por sua vez, influencia a aplicabilidade das teorias de impacto e quasi-estática [109]. Ele determina a distância de interação a partir da qual as partículas perturbadoras afetam a linha espectral [110]. Colisões com parâmetro de impacto inferior a ρ_W , são denominadas “colisões fortes” e nelas a fase do dipolo oscilante atômica é interrompida de forma abrupta, causando distorções na sua energia de transição; em contraste, colisões com parâmetro de impacto superior a ρ_W , são consideradas “colisões fracas” e alteram suavemente e em menor grau a fase do dipolo oscilante [106,107]. Seja forte ou fraca, a teoria do impacto é utilizada na descrição dessas colisões, desde que região espectral analisada seja próxima do centro de linha [111]. Além disso, a adoção dessa teoria

Nas situações em que o parâmetros de impacto for muito inferior a ρ_W e a duração da interação é suficientemente longa (ou a velocidade do perturbador é baixa), o átomo emite como

se o perturbador estivesse quase parado naquela configuração, sendo o regime quasi-estático adequadamente empregado na descrição da interação [106, 107]. Nesses casos, o dipolo oscilante atômica é fortemente perturbado e o espectro é substancialmente alargado.

O cálculo do raio de Weisskopf é feito através da expressão [109]

$$\rho_W = \left(\frac{\alpha_n C_n}{\hbar \bar{v}} \right)^{\frac{1}{n-1}}, \quad (2.2.28)$$

onde C_n representa a constante de acoplamento do potencial de interação átomo-perturbador, que assume a forma $V(r) = -\frac{C_n}{r^n}$, em que α_n é uma constante dependente do tipo de perturbador, n corresponde ao expoente do potencial, e \bar{v} denota a velocidade média dos átomos. Além disso, as equações abaixo estabelecem critérios fundamentais para validar a aplicação da teoria do impacto na descrição do alargamento espectral por colisões [111]:

$$|\nu_0 - \nu| < \frac{\bar{v}}{2\pi\rho_W} \quad (2.2.29)$$

e

$$\rho_W^3 N < 1, \quad (2.2.30)$$

onde ν_0 e ν representam as frequências lineares de ressonância e da radiação incidente, respectivamente. O regime de impacto é válido quando ambas as condições são satisfeitas; caso contrário, o modelo quasi-estático deve ser adotado. Uma consequência fundamental do regime de impacto é a existência de uma dependência linear entre o alargamento colisional Γ_c e a densidade atômica N [112]. Essa relação é formalmente expressa por

$$\Gamma_c = \beta N, \quad (2.2.31)$$

onde β é o coeficiente de alargamento colisional, uma constante de proporcionalidade cujo valor depende das espécies atômicas em interação e da transição específica considerada.

A desigualdade (2.2.29) define um limite de validade em frequência para a teoria do impacto, sendo aplicável na região central da linha espectral, onde o desvio em frequência em relação à ressonância é pequeno. Nas regiões das asas da linha, onde os desvios de frequência são maiores, este critério deixa de ser válido, tornando necessário o uso da abordagem quasi-estática. A relação (2.2.30) assegura que, em média, haja menos de uma partícula perturbadora

dentro de uma esfera de raio ρ_W centrada no átomo emissor. Quando esta condição é satisfeita, as colisões podem ser tratadas como eventos binários e independentes, fundamentando a teoria do impacto. Para $\rho_W^3 N \gtrsim 1$, ocorre sobreposição significativa das interações, com múltiplas colisões simultâneas, o que invalida a hipótese de colisões independentes e exige a adoção da teoria quasi-estática ou de modelos híbridos mais sofisticados.

Vapor Atômico como Gás Ideal

Nesta tese, investigamos vapor atômico de césio-133 homogêneo sob condições específicas de baixa densidade atômica ($N \in [10^{15}, 10^{20}]$ átomos/m³) e ação de campo luminoso de baixa intensidade. Nessas condições, as interações colisionais relevantes ocorrem entre átomos da mesma espécie, destacando-se dois casos:

- **Colisões ressonantes:** Quando um átomo está no estado fundamental e outro no estado excitado, regidas pelo potencial dipolo-dipolo com $n = 3$, $\alpha_3 = 2$ e $C_3 = \frac{|\mu|^2}{4\pi\epsilon_0}$ [109, 111];
- **Colisões não-ressonantes:** Quando ambos os átomos estão no estado fundamental, descritas pelo potencial de van der Waals com $n = 6$, $\alpha_6 = \frac{3\pi}{8}$ e $C_6 \in [10^{-77}, 10^{-79}]$ J·m⁶ [109, 111].

Considerando as condições experimentais extremas de temperatura ($T = 20^\circ\text{C}$ e $T = 160^\circ\text{C}$), a distribuição de Maxwell-Boltzmann fornece as velocidades médias:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} = \begin{cases} 216 \text{ m/s} & (\text{a } 20^\circ\text{C}) \\ 263 \text{ m/s} & (\text{a } 160^\circ\text{C}) \end{cases}$$

Para a linha D2 do césio ($\lambda = 852$ nm), o momento de dipolo é $|\mu| = 3.7971 \times 10^{-29}$ C·m [113], resultando em $C_3 \approx 2 \times 10^{-48}$ J·m³. Aplicando a Eq.(2.2.28), obtemos os raios Weisskopf:

- Potencial de van der Waals: $\rho_W \approx 1$ nm;
- Potencial dipolo-dipolo: $\rho_W \approx 14$ nm.

A análise espectral via critério (2.2.29) revela que:

- Potencial de van der Waals: $|\nu_0 - \nu| \sim 35$ GHz (20°C) e 42 GHz (160°C);

- Potencial dipolo-dipolo: $|\nu_0 - \nu| \sim 2.5 \text{ GHz}$ (20°C) e 3.5 GHz (160°C).

Para as densidades atômicas típicas dos experimentos:

$$N = \begin{cases} 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3} & (\text{a } 20^\circ\text{C}) \\ 1 \times 10^{20} \text{ m}^{-3} & (\text{a } 160^\circ\text{C}) \end{cases}$$

os parâmetros $\rho_W^3 N$ situam-se entre:

- Potencial de van der Waals: $\rho_W^3 N \approx 10^{-12}$ (20°C) e 10^{-7} (160°C),
- Potencial dipolo-dipolo: $\rho_W^3 N \approx 10^{-9}$ (20°C) e 10^{-4} (160°C),

satisfazendo plenamente a condição $\rho_W^3 N \ll 1$ do critério (2.2.30). Portanto, a teoria do impacto mostra-se plenamente aplicável ao sistema em estudo.

Tão importante quanto o regime de colisões, outro aspecto crucial a ser estabelecido refere-se à natureza das colisões no sistema. A energia cinética média dos átomos no gás é dada por:

$$E_T = \frac{3}{2} k_B T \approx \begin{cases} 4 \text{ meV} & (\text{a } 20^\circ\text{C}), \\ 5 \text{ meV} & (\text{a } 160^\circ\text{C}). \end{cases}$$

Considerando que a energia de transição da linha D2 do césio-133 é $E_{0,\text{D2}} = 1.45 \text{ eV}$ [113], tem-se que $E_{0,\text{D2}} \gg E_T$. Essa disparidade energética implica que os processos colisionais inelásticos estão termicamente suprimidos. Adicionalmente, como os campos luminosos utilizados possuem baixa intensidade, a população atômica excitada N_e é significativamente menor que a população no estado fundamental N_g , isto é, $\frac{N_e}{N_g} \ll 1$. Como consequência, colisões ressonantes (entre um átomo no estado fundamental e outro no excitado) são estatisticamente raras, sendo que as colisões predominantes ocorrem entre átomos no estado fundamental, que por sua vez são elásticas. Diante dessas condições, adotamos em nossa modelagem a aproximação de colisões puramente elásticas.

Contribuição das Colisões no Coeficiente de Absorção do Meio

Como os alargamentos são eventos independentes com distribuições estatisticamente independentes, seus efeitos podem ser combinados através de uma integral de convolução [114]. Essa abordagem matemática permite combinar eficientemente os diferentes mecanismos de alargamento sem exigir tratamentos adicionais complexos. Aplicando a definição da convolução,

têm-se

$$\kappa_{\chi,c}(\delta) = \int_{-\infty}^{\infty} \kappa_{\chi}(\delta') L_c(\delta - \delta') d\delta'.$$

Substituindo a expressão para o coeficiente de absorção da Eq. (2.1.25) e o perfil Lorentziano do alargamento colisional da Eq. (2.2.27), obtém-se

$$\kappa_{\chi,c}(\delta) = \underbrace{\frac{2\kappa_0}{\pi\Gamma_c} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{1 + 4\frac{\delta'^2}{\Gamma_{\text{eff}}^2}} \right) \left[\frac{1}{1 + 4\frac{(\delta - \delta')^2}{\Gamma_c^2}} \right] d\delta'}_{\text{Int}(\delta)}$$

A solução desta integral (detalhada no Apêndice A) resulta em

$$\kappa_{\chi,c}(\delta) = \frac{\kappa_0\Gamma_{\text{eff}}}{\Gamma_{\text{eff}} + \Gamma_c} \cdot \frac{1}{1 + 4\frac{\delta^2}{(\Gamma_{\text{eff}} + \Gamma_c)^2}}.$$

Utilizando as expressões para κ_0 e Γ_{eff} , obtém-se a forma final do coeficiente de absorção combinado, dada por

$$\kappa_{\chi,c}(\delta; I, N) = \frac{4\pi N |\mu_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar \lambda \Gamma} \sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}} \cdot \frac{1}{1 + 4\frac{\delta^2}{\Gamma^2}}, \quad (2.2.32)$$

com a largura total à meia altura Γ dada por,

$$\Gamma = \Gamma_0 \sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}} + \Gamma_c, \quad (2.2.33)$$

onde Γ_0 é a largura natural, Γ_c é a contribuição colisional e o termo $\sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}}$ descreve o alargamento por potência.

2.2.4 Alargamento Doppler

Os átomos em vapores atômicos apresentam movimento térmico contínuo em relação a um observador em repouso, exceto no caso teórico em que o vapor está no zero absoluto. Quando submetidos a um campo luminoso direcional com frequência ω , definida no referencial do observador em repouso, o movimento relativo dos átomos induz um desvio Doppler que faz com que cada átomo perceba a frequência da radiação de forma distinta, dependendo de sua componente de velocidade ao longo da direção de propagação da luz. A combinação entre esses desvios Doppler individuais e a distribuição térmica de velocidades (descrita pela distribuição de Maxwell-Boltzmann) resulta em um alargamento característico do perfil espectral, conhecido como alargamento Doppler, que se manifesta como um alargamento e achatamento da linha espectral observada [95].

Para compreender como esse fenômeno afeta o coeficiente de absorção do meio, considere um átomo movendo-se com velocidade \vec{v} que interage com um campo luminoso de frequência ω , ambos definidos no referencial do observador em repouso xOz , conforme ilustrado na Figura 2.3. No referencial do átomo $x'O'z'$, a frequência efetivamente percebida ω_A é dada, em aproximação não relativística, por [115]

$$\omega_A = \omega - \vec{v} \cdot \vec{k},$$

onde \vec{k} é o vetor de onda da radiação. Quando expressa em termos da componente de velocidade v_{\parallel} ao longo da direção de propagação, esta relação se reduz a

$$\omega_A = \omega - \frac{2\pi v_{\parallel}}{\lambda_0},$$

onde λ_0 é o comprimento de onda característico da transição atômica. Introduzindo a frequência de ressonância ω_0 do sistema e reorganizando os termos, obtém-se a relação fundamental entre as dessintonias nos dois referenciais, dada por

$$\delta_A = \delta - \frac{2\pi v_{\parallel}}{\lambda_0}, \quad (2.2.34)$$

com $\delta = \omega - \omega_0$ representando a dessintonia no referencial do observador em repouso e $\delta_A = \omega_A - \omega_0$ a dessintonia no referencial atômico.

Após determinar a dessintonia percebida no referencial atômico (δ_A), procedemos à descrição estatística do sistema, considerando a distribuição de velocidades no vapor atômico. Em tal meio, os átomos exibem um espectro contínuo de velocidades, formando diversas classes de velocidade que coletivamente seguem uma distribuição estatística bem definida. Essa distribuição pode ser caracterizada precisamente utilizando formalismos da mecânica estatística, apesar da impossibilidade prática de medir individualmente cada velocidade atômica⁽⁸⁾.

Para descrever estatisticamente o comportamento dos átomos no vapor, consideramos um ensemble canônico de gás ideal⁽⁹⁾ confinado em um volume V em equilíbrio com um reservatório térmico à temperatura T . Neste cenário, a estatística de Boltzmann fornece o fundamento para

⁽⁸⁾ Considerando que um mol de substância contém aproximadamente 6×10^{23} átomos, a descrição individual torna-se inviável.

⁽⁹⁾ Caracterizado por: colisões perfeitamente elásticas, hamiltoniana puramente cinética, equilíbrio térmico com distribuição de Maxwell-Boltzmann, e dimensões atômicas desprezíveis frente ao volume ocupado [116].

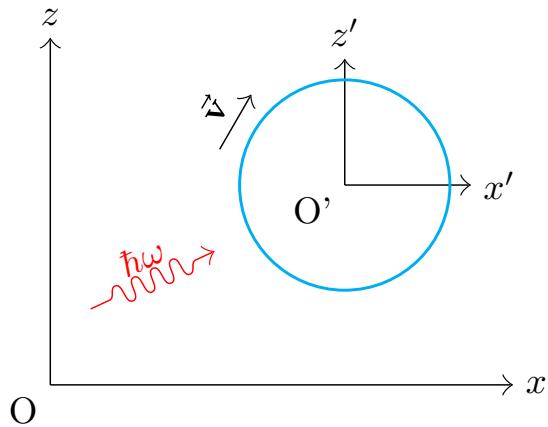


Figura 2.3 – Representação esquemática do efeito Doppler para um átomo em movimento. O sistema de coordenadas xOz corresponde ao referencial do observador em repouso, enquanto $x'O'z'$ representa o referencial do átomo em movimento com velocidade \vec{v} . A onda eletromagnética de frequência ω (linha ondulada vermelha) se propaga ao longo do eixo x , sofrendo um desvio de frequência para ω_A no referencial atômico devido ao movimento relativo. O círculo ciano ilustra a posição instantânea do átomo.

Fonte: Autoria própria.

descrever a distribuição atômica no espaço de fase. A probabilidade de um átomo possuir energia entre E e $E + dE$, o que corresponde a ter posição entre \vec{r} e $\vec{r} + d\vec{r}$ e momento entre \vec{p} e $\vec{p} + d\vec{p}$, é dada por

$$d\mathcal{P}(\vec{r}, \vec{p}) = f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} d\vec{p},$$

onde $f(\vec{r}, \vec{p}) = A e^{-\frac{\bar{h}(\vec{r}, \vec{p})}{k_B T}}$ representa a função densidade de probabilidade no espaço de fase, sendo A a constante de normalização, k_B a constante de Boltzmann, e $\bar{h}(\vec{r}, \vec{p})$ a hamiltoniana de um único átomo. Para um gás ideal com hamiltoniana puramente cinética $\bar{h} = \vec{p}^2/2m$ (onde m é a massa atômica), a distribuição independe da posição, reduzindo-se a

$$d\mathcal{P}(\vec{p}) = A V e^{-\frac{\vec{p}^2}{2m k_B T}} d\vec{p}, \quad (2.2.35)$$

A integral da função densidade de probabilidade sobre todo o espaço deve necessariamente resultar no número total de partículas \mathcal{N} do sistema. A partir da Eq. (2.2.35), determina-se a constante de normalização, dada por

$$A = \frac{N}{(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}},$$

onde $N = \mathcal{N}/V$ representa a densidade de partículas no vapor. Substituindo este resultado na Eq. (2.2.35), obtém-se o número médio de partículas com momento entre \vec{p} e $\vec{p} + d\vec{p}$ por unidade de volume, escrita como

$$dN = \frac{Ne^{-\frac{\vec{p}^2}{2mk_B T}}}{(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}} d\vec{p}.$$

Utilizando a relação clássica entre momento e velocidade em coordenadas cartesianas, $p_{x,y,z} = mv_{x,y,z}$, chega-se à expressão

$$dN = N \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T}} dv_x dv_y dv_z,$$

com $\vec{v}^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$.

Para descrever quantitativamente o alargamento Doppler, deve-se considerar apenas a componente de velocidade na direção de propagação da luz. Nos caso em que apenas a componente paralela ao vetor de onda (v_{\parallel}) é não nula, obtém-se a distribuição de velocidades atômicas nessa direção, dada por

$$dN = \frac{N}{u\sqrt{\pi}} e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}} dv_{\parallel}, \quad (2.2.36)$$

onde a velocidade mais provável é

$$u = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}. \quad (2.2.37)$$

A Eq. (2.2.36) descreve especificamente a distribuição de velocidades atômicas na direção de propagação da radiação incidente.

Para incorporar os efeitos de todas as classes de velocidade atômica no espectro de absorção, realiza-se as substituições $\delta \rightarrow \delta_A$ e $N \rightarrow dN$ na Eq. (2.2.32). O coeficiente de absorção diferencial para átomos com velocidades entre v_{\parallel} e $v_{\parallel} + dv_{\parallel}$ torna-se

$$d\kappa(\delta; I, N) = \frac{4\sqrt{\pi}N|\mu_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar u \lambda \Gamma \sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}}} \left[\frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{1 + 4 \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{\left(\delta - 2\pi \frac{v_{\parallel}}{\lambda}\right)^2}} \right] dv_{\parallel}.$$

A integração sobre todas as velocidades fornece o coeficiente de absorção total do vapor atômico, dada por

$$\kappa(\delta; I, N) = \frac{4\sqrt{\pi}N|\mu_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar u \lambda \Gamma \sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{1 + 4 \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{\left(\delta - 2\pi \frac{v_{\parallel}}{\lambda}\right)^2}} dv_{\parallel} \quad (2.2.38)$$

A Eq. (2.2.38) descreve um perfil de Voigt, resultante da convolução entre um perfil Lorentziano (associado aos alargamentos natural e colisional) e uma distribuição Gaussiana (correspondente ao alargamento Doppler térmico). Este perfil caracteriza precisamente a resposta espectral de vapores atômicos em equilíbrio térmico, não admitindo solução analítica simples e requerendo métodos numéricos para sua avaliação.

A Figura 2.4 compara três perfis de absorção normalizados no máximo: Lorentziano (azul), Gaussiano/Doppler (vermelho) e Voigt (verde), sendo este último obtido pela convolução dos dois primeiros. A representação em escala logarítmica no eixo vertical permite uma análise simultânea das regiões centrais e das asas espectrais. Cada perfil apresenta sua respectiva largura à meia altura ($\Gamma_L = 2$ Hz para o Lorentziano, $\Gamma_D = 3$ Hz para o Doppler), indicada por linhas tracejadas nas cores correspondentes. O perfil Lorentziano exibe caudas amplas características de processos de decaimento natural ou colisional. Em contraste, o perfil Doppler, associado ao movimento térmico atômico, mostra um decaimento exponencial mais rápido e formato mais estreito no centro. O perfil de Voigt sintetiza ambos os comportamentos: região central de forma Gaussiana e caudas com características Lorentzianas em dessintonias maiores. Esta comparação direta revela claramente como os diferentes mecanismos de alargamento moldam o perfil espectral completo.

2.3 Emissão Atômica

A emissão atômica desempenha um papel fundamental no aprisionamento radiativo, pois é o processo pelo qual a energia absorvida pelos átomos é reemitida na forma de fôtons que podem continuar a interagir com o meio. A teoria da redistribuição de frequência (FRD, do inglês *Frequency Redistribution*) é essencial nesse contexto, pois descreve como as frequências dos fôtons reemittidos são modificadas devido a processos físicos como colisões e Doppler, influenciando diretamente a dinâmica do transporte radiativo e a forma do espectro observado. Compreender esses mecanismos é crucial para modelar com precisão o transporte da radiação e os efeitos de aprisionamento em meios gasosos ressonantes.

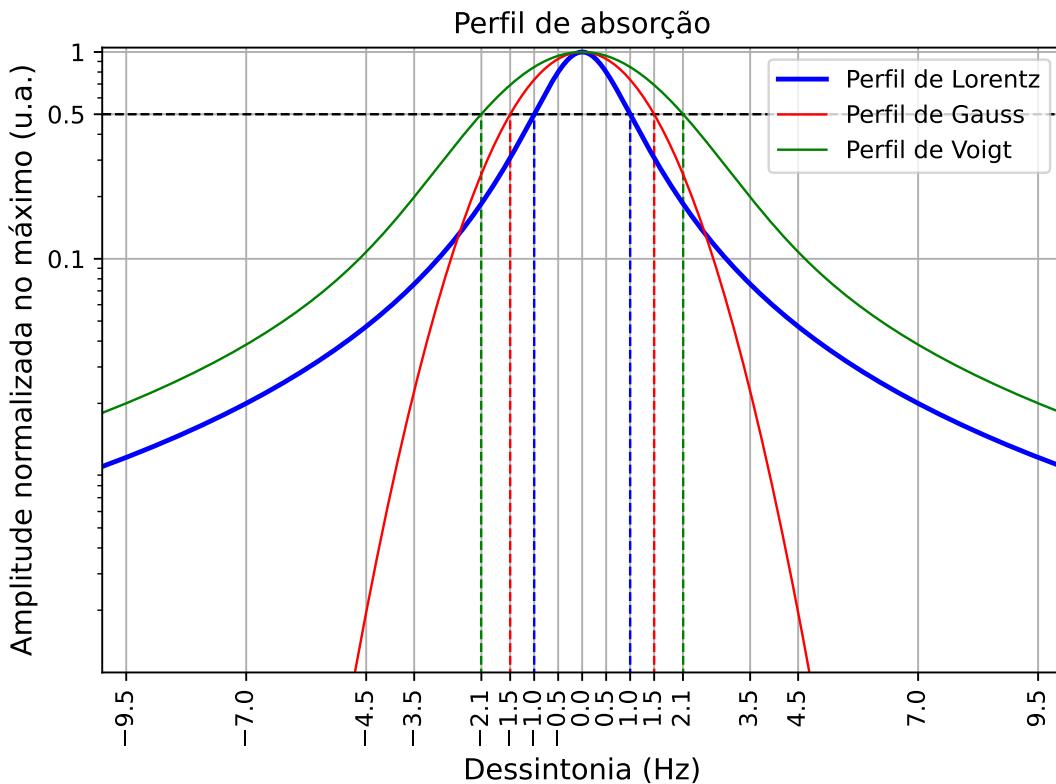


Figura 2.4 – Comparação dos perfis de absorção normalizados em escala logarítmica: Lorentziano (azul, $\Gamma_L = 2$ Hz), Gaussiano/Doppler (vermelho, $\Gamma_D = 3$ Hz) e Voigt (verde). As linhas tracejadas verticais indicam a FWHM de cada perfil. O perfil Lorentziano, característico de processos de decaimento natural ou colisional, exibe caudas amplas ($\sim 1/\delta^2$). O perfil Gaussiano, associado ao alargamento Doppler térmico, apresenta decaimento mais rápido ($\sim e^{-\delta^2}$). O perfil de Voigt, resultante da convolução dos anteriores, mostra comportamento intermediário: região central Gaussiana e caudas Lorentzianas. A escala logarítmica no eixo vertical permite visualizar simultaneamente as regiões centrais e asas espectrais.

Fonte: Autoria própria.

2.3.1 Teoria da Redistribuição de Frequência: Parcial e Completa

Enquanto a absorção remove energia do campo de radiação em frequências específicas, a subsequente reemissão (espalhamento) determina como essa energia é reintegrada ao campo. No contexto do aprisionamento radiativo, onde fótons sofrem múltiplos eventos de espalhamento antes de escaparem do meio, a Teoria da Redistribuição de Frequência [50, 61] descreve precisamente como a energia é redistribuída em cada evento de emissão. Esta teoria estabelece uma relação estatística fundamental entre as frequências do fóton absorvido e emitido [56], onde a natureza da redistribuição (parcial ou completa) é determinada por parâmetros físicos do meio. A temperatura afeta diretamente a energia cinética dos átomos, a pressão influencia a frequência

de colisões entre os átomos e a largura de linha está relacionada ao tempo de vida dos estados excitados [7, 53, 117]. Esses fatores combinados governam a probabilidade de modificação da frequência do fóton emitido em relação à frequência absorvida.

Na ausência completa de colisões, a interação fóton-átomo é governada pelo alargamento natural da linha, Γ_0^ν (em Hz). No referencial próprio do átomo, a absorção de um fóton de frequência ν_{at} , cuja probabilidade é descrita por um perfil Lorentziano devido ao alargamento natural, é seguida pela reemissão na mesma frequência da absorção; entretanto, no referencial do observador em repouso, o movimento térmico dos átomos introduz uma redistribuição devido ao efeito Doppler [50, 118]. Independentemente do referencial adotado, observa-se uma correlação direta⁽¹⁰⁾ entre as frequências do fóton absorvido e do fóton emitido. Nesse caso, devido a presença de correlação, diz-se que houve Redistribuição Parcial de Frequência (PFR, do inglês *Partial Frequency Redistribution*) [50].

Quando átomos excitados sofrem colisões antes da emissão, a fase do dipolo oscilante atômico é alterada (decoerência). Uma única colisão forte pode ser suficiente para randomizar significativamente a fase da oscilação, enquanto o efeito acumulado de colisões (sejam fortes ou uma sucessão de fracas) interrompe a coerência da oscilação atômica ao longo do tempo de vida do estado excitado [106, 111]. Como resultado, a frequência do fóton que o átomo emitirá é redistribuída segundo um perfil espectral, que dentro da teoria do impacto, corresponde a uma Lorentziana [107, 109].

Se as colisões forem suficientemente eficazes para interromper a fase de oscilação do átomo e destruir a 'memória' da frequência do fóton absorvido, diz-se que houve Redistribuição Completa de Frequência (CFR, do inglês *Complete Frequency Redistribution*) no referencial do átomo, onde a frequência emitida (ν'_{at}) é independente da frequência absorvida(ν_{at}) [15]. Entretanto, no referencial do observador em repouso, mesmo que ocorra CFR no referencial do átomo, pode persistir PFR se a velocidade do átomo que absorveu o fóton não for completamente randomizada por colisões antes da reemissão. Essa "memória" da velocidade selecionada na absorção pode manter uma correlação entre a frequência do fóton incidente e a frequência

⁽¹⁰⁾Entendida aqui como dependência estatística entre os processos de absorção e emissão.

do fóton emitido no referencial do observador em repouso [53, 61]. Para que haja CFR no referencial do observador em repouso é necessário que ou as colisões sejam capazes de alterar significativamente a energia cinética dos átomos [107] ou haja troca de excitação durante as interações [119].

De modo mais geral, a correlação no referencial atômico entre a frequência do fóton absorvido e a do fóton emitido define os regimes CFR e PFR. A transição entre esses regimes é fundamentalmente determinada pela relação entre o tempo médio entre colisões, τ_c , se presentes, e o tempo de vida do estado excitado, τ_0 [120]. Nos caso em que a CFR domina, $\tau_c \ll \tau_0$ e é observado em meios muito densos ou quando os tempos de vida radiativos dos estados envolvidos são prolongados; em contraste, a PFR prevalece quando $\tau_c \gg \tau_0$, típico de meios rarefeitos, nos quais o átomo emite antes que colisões possam destruir completamente a informação da frequência incidente [110].

2.3.2 Função Redistribution de Frequência

A redistribuição de frequência é descrita quantitativamente pela Função de Redistribution de Frequência (FRF, do inglês *Frequency Redistribution Function*), denotada por $\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}})$. Essa função representa a densidade de probabilidade conjunta de que um fóton com frequência ν , propagando-se na direção $\hat{\mathbf{k}}$, fóton $(\nu, \hat{\mathbf{k}})$, seja absorvido e subsequentemente reemittido com frequência ν' na direção $\hat{\mathbf{k}}'$, fóton $(\nu', \hat{\mathbf{k}}')$ [15]. Além disso, o átomo absorvedor é selecionado aleatoriamente da distribuição de Maxwell-Boltzmann, que, para um vapor em equilíbrio térmico, é isotrópica. Logo, as velocidades atômicas não têm direção preferencial e a probabilidade de um átomo absorver luz independe da direção de sua velocidade.

No referencial atômico, as direções de absorção, $\hat{\mathbf{k}}$, e emissão, $\hat{\mathbf{k}}'$, são eventos estatisticamente independentes das frequências envolvidas. Além disso, como foi descrito anteriormente, a absorção em uma dada frequência ν é estatisticamente independente do evento da emissão. Entretanto, se o processo envolver PFR, a emissão dependerá da absorção. Já no caso em que há CFR, a emissão independe da absorção. Contudo, fatorando a FRF, pode-se escrevê-la no

referencial do átomos como [50]

$$\Theta_{\text{at}}(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) = p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) p_A(\nu) p_E(\nu', \nu), \quad (2.3.39)$$

onde $p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}})$ é a densidade de probabilidade angular condicional do fóton emitido ter direção $\hat{\mathbf{k}}'$ dado que o absorvido tinha direção $\hat{\mathbf{k}}$ (normalizada por $\int p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) d\Omega_s = \int p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) d\Omega'_s = 1$), $p_A(\nu)$ é a densidade de probabilidade de absorção do fóton de frequência ν (normalizada por $\int p_A(\nu) d\nu = 1$) e $p_E(\nu', \nu)$ é a densidade de probabilidade condicional do fóton emitido ter frequência ν' dado que o absorvido tinha frequência ν (normalizada por $\int p_E(\nu', \nu) d\nu' = \int p_E(\nu', \nu) d\nu = 1$), de forma que o produto $p_A(\nu) p_E(\nu', \nu)$ corresponde a probabilidade conjunta de absorver um fóton de frequência ν e emitir um de frequência ν' .

Nesse cenário, a probabilidade conjunta infinitesimal de um fóton ser absorvido com frequência entre ν e $\nu + d\nu$ que se propaga na direção $\hat{\mathbf{k}}$ (dentro do ângulo sólido $d\Omega_s$), ser reemissionado com frequência entre ν' e $\nu' + d\nu'$ na direção $\hat{\mathbf{k}}'$ (dentro de $d\Omega'_s$) é proporcional a

$$dP_{\text{at}}(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) \propto \Theta_{\text{at}}(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) d\nu d\nu' d\Omega_s d\Omega'_s,$$

onde o produto $p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) p_E(\nu', \nu) d\nu' d\Omega'_s$ representa a probabilidade de emitir o fóton $(\nu', \hat{\mathbf{k}}')$ condicionado à absorção do fóton $(\nu, \hat{\mathbf{k}})$, enquanto $p_A(\nu) d\nu d\Omega_s$ representa a probabilidade de absorção do fóton $(\nu, \hat{\mathbf{k}})$.

Para incorporar o efeito Doppler na emissão, considere um átomo movendo-se com velocidade constante \vec{v} em relação a um observador em repouso. Esse átomo absorve um fóton $(\nu, \hat{\mathbf{k}})$ e emite outro fóton $(\nu', \hat{\mathbf{k}}')$, cujas frequências e vetores de onda são medidos no referencial atômico. Os diagramas da Figura 2.5 ilustram essa situação: 2.5a mostra a perspectiva do observador em repouso, enquanto 2.5b apresenta o referencial do átomo. Incluindo o desvio Doppler associado à velocidade do átomo, a FRF, Eq. (2.3.39), agora no referencial do observador em repouso é dada por

$$\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) = p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) p_A\left(\nu - \frac{\vec{v} \cdot \hat{\mathbf{k}}}{\lambda}\right) p_E\left(\nu' - \frac{\vec{v} \cdot \hat{\mathbf{k}}'}{\lambda}; \nu - \frac{\vec{v} \cdot \hat{\mathbf{k}}}{\lambda}\right). \quad (2.3.40)$$

Como discutido anteriormente, o meio é considerado isotrópico, o que implica a ausência de direções privilegiadas no espaço. Essa propriedade permite adotar um sistema de coordenadas

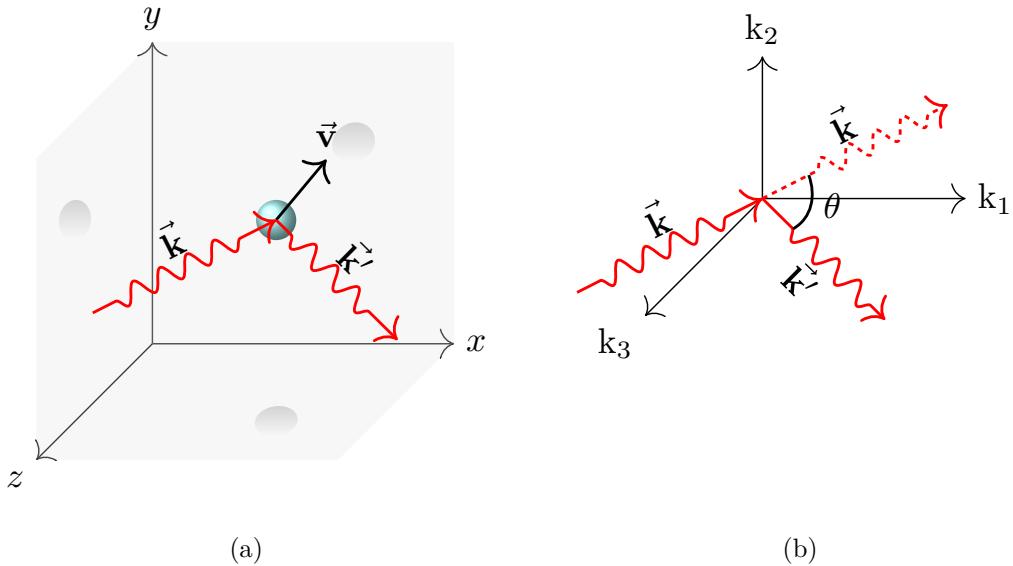


Figura 2.5 – Diagramas comparativos do espalhamento ressonante em dois referenciais. **(a)** No referencial do observador em repouso, o átomo (esfera azul) move-se com velocidade \vec{v} , absorve um fóton incidente com vetor de onda \vec{k} e emite outro com vetor de onda \vec{k}' em direção aleatória. Os eixos (x, y, z) representam o sistema de coordenadas do observador. **(b)** No referencial do átomo, evidencia-se o ângulo θ entre os vetores de onda \vec{k} (incidente) e \vec{k}' (emitido). A trajetória do fóton incidente é indicada pela linha tracejada e ondulada vermelha. Os eixos (k_1, k_2, k_3) definem o sistema de coordenadas do átomo.

Fonte: Autoria própria.

próprias para cada evento de espalhamento, de modo que o vetor de onda do fóton incidente \mathbf{k} esteja sempre alinhado com um dos eixos do referencial atômico (k_i). Além disso, por construção, os vetores \mathbf{k} e \mathbf{k}' devem ser coplanares, formando o plano de espalhamento. Assim, utilizando as variáveis dos diagramas da Figura 2.5, obtém-se $\vec{v} \cdot \hat{\mathbf{k}} = v_{\parallel}$ e $\vec{v} \cdot \hat{\mathbf{k}'} = v_{\parallel} \cos\theta + v_{\perp} \sin\theta$, onde v_{\parallel} e v_{\perp} representam, respectivamente, as componentes da velocidade paralela e perpendicular no plano de espalhamento. Substituindo esses resultados na Eq. (2.3.40), chega-se a

$$\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) = p_{\theta}(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) p_A \left(\nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right) p_E \left(\nu' - \frac{v_{\parallel} \cos\theta + v_{\perp} \sin\theta}{\lambda}; \nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right). \quad (2.3.41)$$

O resultado líquido de todo o conjunto de átomos é obtido através do cálculo da média sobre a distribuição de velocidades atômicas [15]. Tomando a média sobre todas as velocidades possíveis na Eq. (2.3.41), com o sistema de coordenadas k_i satisfazendo as condições impostas

anteriormente, obtém-se

$$\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) = \frac{p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}})}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dv_{\parallel} p_A \left(\nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right) e^{\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_{\perp} e^{\frac{v_{\perp}^2}{u^2}} \cdot p_E \left(\nu' - \frac{v_{\parallel} \cos \theta + v_{\perp} \sin \theta}{\lambda}; \nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right) \quad (2.3.42)$$

É fundamental destacar que a Eq. (2.3.42), embora expressa no referencial do observador em repouso, tem suas componentes p_θ , p_A e p_E originalmente definidas no referencial do átomo. Isso significa que, embora $\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}})$ descreva a redistribuição espectral no sistema do observador, as distribuições angular, de absorção e emissão são formuladas com base nas frequências e direções relativas ao átomo. Portanto, ao construir essas funções, deve-se adotar rigorosamente o referencial atômico como base, garantindo a consistência física na modelagem dos mecanismos de espalhamento.

Adendo Sobre Luz Polarizada no Modelo

A polarização da luz, que caracteriza a orientação espacial do vetor campo elétrico da onda eletromagnética, influencia significativamente tanto a dinâmica da interação átomo-fóton quanto o padrão angular da radiação redistribuída [101, 121] e sua inclusão exige uma generalização do formalismo que introduz duas complexidades principais [55, 57, 122]:

- A descrição rigorosa da interação entre luz polarizada e átomo, requer o uso dos vetores de Stokes. Consequentemente, a função de redistribuição (escalar na Eq. (2.3.42)) precisa ser generalizada para uma matriz de redistribuição que opera sobre esses vetores, resultando em um acoplamento intrincado entre frequências, direções de propagação e estados de polarização.
- Quando se considera especificamente a distribuição angular dipolar, a descrição adequada requer substituir a função escalar $p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}})$ por uma matriz de espalhamento completa. Esta matriz não apenas caracteriza a mudança de direção ($\hat{\mathbf{k}}' \rightarrow \hat{\mathbf{k}}$), mas também codifica a rotação dos vetores de polarização em relação ao plano de espalhamento, revelando assim como a anisotropia intrínseca do processo dipolar afeta a radiação redistribuída.

Nesse sentido, toda a abordagem levará em conta que a radiação envolvida é não polarizada.

2.3.2.1 Função Densidade de Probabilidade Angular

A função angular $p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}})$ apresenta duas formas canônicas em sistemas físicos: distribuição isotrópica e dipolar. A distribuição isotrópica é frequentemente utilizada em cenários onde o meio é predominantemente espalhador⁽¹¹⁾ [123, 124] e em sistemas onde os tamanhos das partículas envolvidas são muito menores que o comprimento de onda da luz incidente [125]. Nessas situações a densidade de probabilidade angular se reduz a uma constante normalizada, dada por [15]

$$p_\theta^{\text{iso}}(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) = \frac{1}{4\pi} \quad (2.3.43)$$

que se traduz na emissão igualmente prováveis em todos os possíveis ângulos sólidos.

Quando as transições eletrônicas atômicas interagem com a luz devido ao seu momento de dipolo elétrico, denominadas como transições dipolares, a distribuição angular assume uma forma anisotrópica a cada espalhamento. Se tratando dos casos que envolvem luz não polarizada⁽¹²⁾, a forma dessa distribuição é dada por [101, 121]

$$p_\theta^{\text{dip}}(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) = \frac{3}{4}(1 + \cos^2\theta), \quad (2.3.44)$$

onde θ é o ângulo entre os vetores de onda do fóton incidente e espalhado, sendo seu uso indicado em modelos que envolvem transições eletrônicas dipolares [15, 101]. Note que a dependência quadrática com o θ introduz acoplamentos não triviais entre as variáveis espaciais e espectrais, tornando as integrações necessárias para calcular a função de redistribuição significativamente mais complexas e computacionalmente custosas. É importante ressaltar que, embora os átomos espalhadores estejam distribuídos isotropicamente, cada evento individual de espalhamento redireciona o fóton de maneira anisotrópica.

2.3.2.2 Função Densidade de Probabilidade de Absorção e Emissão

Na formulação da FRF, observa-se uma assimetria fundamental no tratamento dos mecanismos de alargamento espectral entre os processos de absorção e emissão [50]. A parcela

⁽¹¹⁾Meios espalhadores envolvem múltiplos espalhamentos, o que faz com que a informação sobre a direção de incidência seja 'perdida' ao longo do processo.

⁽¹²⁾Observada, por exemplo: (i) em meios opticamente espessos com múltiplos espalhamentos, onde a radiação tende a se tornar progressivamente menos polarizada a cada espalhamento; (ii) quando a luz incidente é natural, ou seja, não possui uma direção de polarização preferencial.

da função $\Theta(\nu, \hat{\mathbf{k}}; \nu', \hat{\mathbf{k}}')$ associada à absorção incorpora de forma completa os mecanismos de alargamento relevantes, natural, Doppler e colisional [15]. Por outro lado, o termo que trata da emissão condicional, $p_E(\nu', \nu)$, assume apenas o regime físico considerado.

Quando os efeitos da intensidade da radiação incidente são desprezados, no referencial atômico o alargamento total é determinado pelo decaimento natural e pelas colisões. Nesse caso, o perfil resultante corresponde a uma Lorentziana normalizada com FWHM dada por $\Gamma_{0,c}^\nu = \Gamma_0^\nu + \Gamma_c^\nu$, conforme a Eq. (2.2.32). Sendo assim, pode-se escrever que a FRF é dada por

$$\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) = \frac{2}{\pi^2 \Gamma_{0,c}^\nu} p_\theta(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) \int_{-\infty}^{\infty} dv_{\parallel} \frac{e^{\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{1 + 4 \frac{(\nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda})^2}{\Gamma_{0,c}^\nu}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_{\perp} e^{\frac{v_{\perp}^2}{u^2}} \cdot p_E\left(\nu' - \frac{v_{\parallel} \cos \theta + v_{\perp} \sin \theta}{\lambda}; \nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda}\right) \quad (2.3.45)$$

Convém notar que, apesar de p_A ter sido estabelecida no referencial do átomo, o termo de $\Theta(\nu, \hat{\mathbf{k}}; \nu', \hat{\mathbf{k}}')$ relacionado à absorção é rigorosamente descrito por um perfil de Voigt, constituído pelos alargamentos natural, Doppler e colisional.

Em relação a emissão, a função de densidade de probabilidade pode assumir três diferentes perfis [91, 126]:

- **Cenário II** (PFR): Em sistemas onde a correlação entre as frequências de absorção e emissão é preservada no referencial atômico durante o processo de emissão, p_E , no referencial do observador em repouso, assume a forma de um perfil puramente Doppler⁽¹³⁾, que, no referencial do átomo, se resume a um delta de Dirac, dado por⁽¹⁴⁾

$$p_E^{\text{II}}(\nu', \nu) = \delta(\nu' - \nu). \quad (2.3.46)$$

- **Cenário III** (CFR): Em ambientes fortemente perturbados, ou seja, onde as colisões dominam de tal forma que a correlação é destruída até mesmo no referencial atômico, p_E reduz-se a um perfil puramente colisional⁽¹⁵⁾, o qual, independentemente do referencial,

⁽¹³⁾Exceto em abordagens que envolvem átomos frios ($T < 1$ K), a largura Doppler é, em geral, muito superior à largura natural, permitindo a sua negligência sem prejuízo à precisão dos resultados [127].

⁽¹⁴⁾No referencial do átomo, as frequências são definidas localmente, de modo que não há dispersão Doppler associada à distribuição de velocidades térmicas, razão pela qual o perfil de emissão assume a forma de uma função delta.

⁽¹⁵⁾Como discutido anteriormente, em regimes onde as colisões dominam ($\Gamma_c^\nu \gg \Gamma_N^\nu$), a coerência atômica é destruída, eliminando qualquer memória do fóton absorvido. Nesses casos, a inclusão adicional dos alargamentos natural e Doppler em p_E torna-se redundante.

assume a forma

$$p_E^{III}(\nu') = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\Gamma_{0,c}^\nu}{\nu'^2 + (\Gamma_{0,c}^\nu/2)^2}. \quad (2.3.47)$$

- **Cenário Resultante:** Uma fração significativa de átomos sofre colisões elásticas que perturbam parcialmente, sem destruir completamente, a correlação da emissão. Esta situação intermediária, situada entre a preservação da correlação (Cenário II) e a redistribuição completa de frequências (Cenário III), é caracterizada por dois parâmetros fundamentais: $(1 - P_c)$ e P_c , que correspondem as frações de átomos que preservam totalmente a correlação e redistribuem completamente a frequência, respectivamente. Estes parâmetros relacionam-se com as taxas de decaimento radiativo, Γ_0 , e colisional, Γ_c , por

$$(1 - P_c) \equiv \frac{\Gamma_0}{\Gamma_0 + \Gamma_c} \quad (2.3.48)$$

e

$$P_c \equiv \frac{\Gamma_c}{\Gamma_0 + \Gamma_c}. \quad (2.3.49)$$

A função de redistribuição para este caso combina linearmente os casos limites, de modo que [15, 41, 56, 128]

$$p_E^R(\nu', \nu) = (1 - P_c)p_E^{II}(\nu', \nu) + P_c p_E^{III}(\nu'). \quad (2.3.50)$$

Substituindo individualmente os respectivos perfis de cada cenário, Eqs. (2.3.46) e (2.3.47), na Eq. (2.3.45), obtém-se as FRF para cada cenário em uma dada direção θ do plano de espalhamento, são^{(16) (17)}

$$\Theta_{II}(\nu', \vec{k}'; \nu, \vec{k}) = \frac{2}{\pi^2 \Gamma_{0,c}^\nu} p_\theta(\hat{k}', \hat{k}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{1}{u^2} \left\{ v_{\parallel}^2 + \frac{[(\nu' - \nu)\lambda + v_{\parallel}(1 - \cos\theta)]^2}{\sin^2\theta} \right\}}}{1 + 4 \frac{\left(\nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right)^2}{\Gamma_{0,c}^\nu}} dv_{\parallel} \quad (2.3.51)$$

(16) $p_E^{II} = \delta \left(\nu' - \frac{v_1 \cos\theta + v_2 \sin\theta}{\lambda} - \nu + \frac{v_1}{\lambda} \right) \rightarrow \nu' - \frac{v_1 \cos\theta}{\lambda} - \frac{v_2 \sin\theta}{\lambda} - \nu + \frac{v_1}{\lambda} = 0 \rightarrow \frac{v_2 \sin\theta}{\lambda} = \nu' - \nu + \frac{v_1}{\lambda} (1 - \cos\theta) \rightarrow v_2 = \frac{1}{\sin\theta} [(\nu' - \nu)\lambda + v_1(1 - \cos\theta)].$
(17) $p_E^{III} = \frac{2}{\pi \Gamma^\nu \left[1 + 4 \frac{\left(\nu' - \frac{v_1 \cos\theta + v_2 \sin\theta}{\lambda} \right)^2}{\Gamma^\nu} \right]}.$

e

$$\Theta_{III}(\nu', \vec{k}'; \nu, \vec{k}) = \frac{4}{\pi^3 \Gamma_{0,c}^{\nu^2}} p_\theta(\hat{k}', \hat{k}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2}{u^2}}}{\left[1 + 4 \frac{\left(\nu - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right)^2}{\Gamma_{0,c}^{\nu^2}} \right] \left[1 + 4 \frac{\left(\nu' - \frac{v_{\parallel} \cos \theta + v_{\perp} \sin \theta}{\lambda} \right)^2}{\Gamma_{0,c}^{\nu^2}} \right]} dv_{\perp} dv_{\parallel} \quad (2.3.52)$$

As Eqs. (2.3.51) e (2.3.52) $\Theta_{II}(\nu', \vec{k}'; \nu, \vec{k})$ e $\Theta_{III}(\nu', \vec{k}'; \nu, \vec{k})$ descrevem a redistribuição de frequência de fótons espalhados em meios atômicos isotrópicos, que incorporam os efeitos térmicos via a distribuição de Maxwell-Boltzmann e a largura natural das transições atômicas por meio de perfis lorentzianos. Θ_{II} corresponde ao caso de emissão com correlação no referencial do átomo, apresentando uma estrutura mais simples que envolve apenas a componente de velocidade paralela à direção incidente, enquanto Θ_{III} representa um caso mais geral com emissão sem qualquer correlação entre absorção e emissão, exigindo integração sobre duas componentes de velocidade (paralela e perpendicular).

Convém também abordar a interpretação probabilística da função de redistribuição. As Eqs. (2.3.51) e (2.3.52) descrevem completamente a densidade de probabilidade conjunta de um processo de absorção seguido de emissão. No entanto, em muitas aplicações práticas, apenas a frequência e a direção do fóton emitido são relevantes, sendo a absorção considerada um evento anterior conhecido ou marginalizado. Nesses casos, é natural recorrer à densidade de probabilidade condicional de emissão, dado que houve absorção com frequência ν e direção \hat{k} . A transição da densidade conjunta para a condicional é formalmente realizada por meio da regra de Bayes [129]. Para tais aplicações, deve-se utilizar a relação $\Theta_{\text{cond}}(\nu', \hat{k}' | \nu, \hat{k}) = \frac{\Theta(\nu', \hat{k}' | \nu, \hat{k})}{p_A^E(\nu, \hat{k})}$ [60, 130–132], em que $p_A^E(\nu, \hat{k})$ representa a probabilidade de ocorrer emissão após a absorção de um fóton com frequência ν e direção \hat{k} .

Em meios isotrópicos, essa probabilidade corresponde ao perfil de absorção $p_A(\nu)$ [61], pois a absorção não depende da direção \hat{k} da radiação incidente. Nesse contexto, a marginalização sobre os estados finais de emissão conduz diretamente ao perfil espectral. Em contrapartida, em meios anisotrópicos, essa simplificação deixa de ser válida, e a dependência angular precisa ser considerada explicitamente. Ressalta-se que, como $\Theta_{\text{cond}}(\nu', \hat{k}' | \nu, \hat{k})$ já foi generalizada para o referencial do observador em repouso, o mesmo deve ser feito com $p_A(\nu)$, convertendo o perfil

de Lorentz em um perfil de Voigt. A normalização da absorção nesse referencial é feita com base na Eq. (2.2.38), que, após manipulações matemáticas apropriadas, leva à expressão

$$\boxed{\Phi_A(\nu) = \frac{a}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v_u^2}}{a^2 + \left(\frac{\nu}{\Gamma_D^\nu} - v_u\right)^2} dv_u,} \quad (2.3.53)$$

onde $a = \frac{\Gamma_{0,c}}{2\Gamma_D^\nu}$ é o parâmetro de Voigt e

$$\Gamma_D^\nu = \frac{u}{\lambda} \quad (2.3.54)$$

é a largura Doppler associada à temperatura do sistema. Dessa forma, a versão condicional da função de redistribuição é dada por

$$\boxed{\Theta_{\text{cond}}(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) = \frac{\Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}})}{\Phi_A(\nu, \hat{\mathbf{k}})}} \quad (2.3.55)$$

com $\Phi_A(\nu)$ dada pela Eq. (2.3.53).

2.3.3 Perfis Integrado no Ângulo

A informação angular das funções de redistribuição é especialmente relevante quando a radiação incidente é polarizada, tornando-se secundária no estudo de sistemas homogêneos e isotrópicos [50, 133]. Em tais configurações, a redistribuição em frequência domina amplamente sobre as correlações angulares, uma vez que o transporte radiativo é determinado principalmente pelo acoplamento entre as frequências dos fótons absorvidos e reemitidos [15, 134]. Essa característica justifica plenamente o uso de funções de redistribuição angularmente integradas, que mantêm a essência física enquanto oferecem vantagens computacionais decisivas. Estudos comparativos em meios homogêneos demonstram que as formulações integradas reproduzem com alta fidelidade os resultados das abordagens completas, com discrepâncias pequenas em relação a formulação dependente do ângulo [15, 50, 135, 136].

Para determinar as funções de redistribuição de frequência angularmente integradas em cada cenário, deve-se:

1. Substituir na Eq. (2.3.41) a função de densidade de probabilidade de emissão p_E correspondente ao cenário que se deseja avaliar (Eqs. (2.3.46) e (2.3.47)), além do perfil de absorção, representado por uma Lorentziana normalizada com FWHM $\Gamma_{0,c}^\nu$;

2. Definir a função de distribuição angular que melhor se adequa à situação que deseja-se analisar. Como as equações integradas no ângulo serão utilizadas na averiguação de espectros que envolvem múltiplos espalhamentos, será avaliada apenas a distribuição angular isotrópico;
3. Na sequência, deve-se realizar a integração sobre todas as direções de emissão possíveis, que conduz a expressão

$$R(\nu', \nu) = \frac{1}{4\pi} \int \Theta(\nu', \hat{\mathbf{k}}'; \nu, \hat{\mathbf{k}}) d\Omega',$$

seguido pela ponderação através da média sobre todas as velocidades possíveis da distribuição de térmica de Maxwell-Boltzmann. A integração sobre o ângulo sólido $d\Omega'$ remove a dependência angular explícita, mantendo apenas os efeitos espectrais relevantes para descrever o transporte radiativo em meios opticamente espessos.

Ao final desse procedimento, obtém-se as funções de redistribuição angularmente integradas $R(x', x)$, que representam a probabilidade conjunta de absorver um fóton com frequência x e emitir um com frequência x' , expressas em termos de variáveis adimensionais. As expressões para $R(x', x)$ são dadas por⁽¹⁸⁾:

$$R_{II}(x', x) = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{\frac{1}{2}|x-x'|}^{\infty} e^{-v_u^2} \left[\tan^{-1} \left(\frac{\underline{x} + v_u}{a} \right) - \left(\frac{\bar{x} - v_u}{a} \right) \right] dv_u \quad (2.3.56)$$

e

$$R_{III}(x', x) = \frac{1}{\pi^{\frac{5}{2}}} \int_0^{\infty} e^{-v_u^2} \left[\tan^{-1} \left(\frac{x' + v_u}{a} \right) - \left(\frac{x' - v_u}{a} \right) \right] \cdot \left[\tan^{-1} \left(\frac{x + v_u}{a} \right) - \left(\frac{x - v_u}{a} \right) \right] dv_u, \quad (2.3.57)$$

onde $x = \frac{\nu}{\Gamma_D^\nu}$, $x' = \frac{\nu'}{\Gamma_D^{\nu'}}$, $\underline{x} = \min(|x'|, |x|)$ e $\bar{x} = \max(|x'|, |x|)$.

Vale destacar que, da mesma forma que foi feito para as FRF com dependência angular, quando se deseja avaliar apenas a emissão independentemente da absorção, basta aplicar a regra de Bayes nas Eqs. (2.3.56) e (2.3.57), resultando na probabilidade de emissão de um fóton com frequência x' , condicionada à absorção de um fóton com frequência x . Nesse caso, tem-se que

$$R_{\text{cond}}(x'|x) = \frac{R(x', x)}{\Phi_A(x)}, \quad (2.3.58)$$

⁽¹⁸⁾Para deduções completas, veja [15, 50].

com $\Phi_A(x)$ dada pela Eq. (2.3.53).

2.4 Sistemas de n -Níveis: Estruturas Hiperfinas

Embora o modelo de dois níveis atômicos tenha sido suficiente para descrever os aspectos fundamentais da interação luz-matéria discutidos anteriormente, ele não contempla a rica estrutura presente em sistemas atômicos reais. Em átomos, a interação entre nuclear e elétron produz uma estrutura hiperfina que modifica significativamente o espectro de absorção e os processos de espalhamento. A consideração desses efeitos é crucial para uma descrição quantitativa precisa do coeficiente de absorção do meio e da redistribuição de frequência na emissão.

2.4.1 Estrutura Hiperfina

A estrutura hiperfina atômica surge da interação entre os momentos eletromagnéticos do núcleo (principalmente o momento de dipolo magnético, mas também o momento de quadrupolo elétrico para núcleos com spin $I_s \geq 1$) e os campos internos gerados pelos elétrons (em particular, o campo magnético no núcleo devido ao momento angular total dos elétrons) e subdivide cada nível da estrutura fina em múltiplos subníveis de energia [95]. Esse desdobramento é caracterizado pelo número quântico hiperfino F , definido a partir da composição vetorial $\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{J}} + \vec{\mathbf{I}}_s$, onde $\vec{\mathbf{J}}$ é o momento angular total do elétron e $\vec{\mathbf{I}}_s$ o spin nuclear, de modo que, para um dado J , os valores permitidos de F variam de $|J - I_s|$ até $J + I_s$, cada um com degenerescência $g_F = 2F + 1$, sendo I_s o número quântico do momento angular nuclear [118].

As energias dos subníveis hiperfinos são determinadas principalmente por dois termos [95, 118]: o acoplamento dipolar magnético, proporcional a $A(\vec{\mathbf{I}}_s \cdot \vec{\mathbf{J}})$, e, para núcleos com $I_s \geq 1$, o termo quadrupolar elétrico. A expressão geral para a energia hiperfina é dada por [137]

$$E_{\text{hfs}}(F) = \frac{AK}{2} + B \frac{\frac{3}{4}K(K+1) - I_s(I_s+1)J(J+1)}{2I_s(2I_s-1)J(2J-1)},$$

em que

$$K = F(F+1) - I_s(I_s+1) - J(J+1),$$

e A e B são as constantes de acoplamento magnético (dipolo) e quadrupolar (quadrupolo), respectivamente. Essas constantes são características de cada átomo e estado eletrônico, podendo

ser determinadas experimentalmente ou por meio de cálculos de estrutura atômica.

No dia a dia da espectroscopia, as energias envolvidas nos estados hiperfinos são normalmente referenciadas em relação ao centro da estrutura hiperfina, com separações típicas na faixa de MHz a GHz, particularmente nos alcalinos como o ^{87}Rb ($I_s = 3/2$) e o ^{133}Cs ($I_s = 7/2$), a estrutura hiperfina manifesta-se por meio de separações energéticas características nessa faixa de frequências [113, 138]. O isótopo ^{133}Cs , em especial, fornece um exemplo emblemático de sua estrutura hiperfina: seu estado fundamental $6S_{1/2}$ divide-se em dois subníveis hiperfinos bem definidos, $F = 3$ e $F = 4$, com uma separação de exatamente 9.192.631.770 Hz – valor que foi adotado para a definição do segundo no Sistema Internacional de Unidades [113, 139].

A presença da estrutura hiperfina modifica significativamente o espectro de interação luz-matéria, introduzindo múltiplas componentes espectrais associadas a cada transição eletrônica. Logo, a consideração explícita desses efeitos é essencial para a interpretação correta dos espectros observados em experimentos de espectroscopia de alta resolução.

2.4.2 Implementação nas Formulação da Absorção e Emissão Atômica

A descrição rigorosa dos efeitos hiperfinos em espectros de absorção e emissão atômicos exige a incorporação explícita dos fatores estatísticos e dinâmicos que governam as intensidades das transições entre subníveis hiperfinos $F \rightarrow F'$. Essas intensidades são determinadas por dois componentes fundamentais:

1. Degenerescência (g_F): Ela representa o número de estados magnéticos disponíveis para um dado subnível hiperfino F e funciona como um peso estatístico determinante da população térmica de cada subnível [140]. Em um gás térmico em equilíbrio, a ocupação relativa dos níveis é proporcional à sua degenerescência, de modo que níveis com maior g_F concentram uma fração maior da população atômica [141]. Consequentemente, subníveis mais degenerados contribuem com maior intensidade para as transições ópticas, aumentando a proeminência das linhas espectrais associadas [140, 141].
2. Elementos da matriz do momento de dipolo elétrico ($S_{FF'} = \langle F | \vec{r} | F' \rangle$): Trata-se de um fator relativo entre um subnível hiperfino inicial F e um subnível final F' , em que,

cada elemento quantifica a amplitude de acoplamento efetivo entre os dois estados e, portanto, determina a intensidade com que a radiação eletromagnética interage com a transição correspondente [113, 138, 141]. O cálculo desses elementos recorre ao formalismo do acoplamento angular e à decomposição do operador de dipolo elétrico em termos de operadores esféricos, envolvendo coeficientes de Clebsch-Gordan e símbolos de Wigner-6j que levam em conta o acoplamento entre \vec{J} , \vec{I}_s e \vec{F} [142, 143]. As regras de seleção impõem que apenas transições com $\Delta F = 0, \pm 1$ sejam permitidas, excetuando-se o caso $F = 0 \rightarrow F' = 0$, que é proibido por simetria [144].

Assim, a combinação entre g_F e $S_{FF'}$ define o peso relativo de cada linha hiperfina na absorção e emissão, sendo essencial para calcular com precisão o perfil espectral total de sistemas com estrutura hiperfina resolvida [144].

Implementação no Perfil de Absorção ($\Phi_A(\nu)$)

Sendo F_1 e F' , os subníveis hiperfinos fundamentais incidentes e excitados, respectivamente, a intensidade relativa das linhas hiperfinas no perfil de absorção é determinada por três fatores principais [118, 140, 144–146]:

- 1. Fator de Degenerescência e População Inicial - $\frac{(2F_1+1)}{\sum_F (2F+1)}$:** Em um gás térmico em equilíbrio, os subníveis hiperfinos do estado eletrônico inferior são populados de forma proporcional à sua degenerescência. Assim, a fração de átomos no subnível F_1 é dada pela razão entre $g_{F_1} = 2F_1 + 1$ e a degenerescência total do estado inferior, $\sum_{\{F\}} (2F + 1)$, em que a soma sobre $\{F\}$ percorre todos os subníveis hiperfinos do estado fundamental. Como cada componente do perfil de absorção corresponde a uma transição $F_1 \rightarrow F'$ específica, esse fator determina o peso inicial de cada uma delas, refletindo a probabilidade de um átomo estar no subnível F_1 e, portanto, disponível para absorver um fóton de frequência apropriada. Subníveis com maior degenerescência tendem a contribuir mais fortemente, devido à sua maior população relativa.
- 2. Fator de Força da Transição - $S_{F_1 F'}^2$:** Uma vez que o átomo esteja no subnível inferior F_1 , a probabilidade de absorver um fóton com frequência apropriada e transitar para

o subnível excitado F' é proporcional a $S_{F_1F'}^2$. Esse fator está diretamente relacionado ao quadrado do módulo do elemento de matriz do momento de dipolo elétrico, $|\mu_{F_1F'}|^2$, conforme aparece na Eq. (2.2.38), e está intimamente ligado à frequência de Rabi, Eq. (2.1.9). Ele quantifica a força intrínseca da transição $F_1 \rightarrow F'$, determinando a contribuição relativa de cada componente hiperfina para o perfil total de absorção. As regras de seleção $\Delta F = 0, \pm 1$ (exceto $0 \leftrightarrow 0$) restringem as transições permitidas, influenciando diretamente os valores possíveis de $S_{F_1F'}$. Transições com maiores valores de $S_{F_1F'}^2$ apresentam maior probabilidade de ocorrência e contribuem de forma mais expressiva para o espectro observado.

3. Deslocamento de Frequência - $\delta(\nu, \nu - \nu_{F_1F'})$: A interação hiperfina divide os níveis eletrônicos em subníveis F , introduzindo pequenos deslocamentos energéticos que resultam em diferentes frequências de transição $\nu_{F_1F'}$ para cada par $F_1 \rightarrow F'$. Consequentemente, o perfil de absorção total $\Phi_A(\nu)$ é composto pela superposição de múltiplas componentes espetrais, cada uma centrada em sua respectiva frequência $\nu_{F_1F'}$. Isso é refletido na forma funcional típica $\Phi(\nu - \nu_{F_1F'})$, que representa o perfil de linha deslocado para a frequência correspondente. Assim, ao invés de uma única linha de absorção, a estrutura hiperfina gera um conjunto de linhas distintas, cada uma com sua própria intensidade e posição espectral.

Matematicamente, essas considerações se traduzem no perfil de absorção como

$$\Phi_A(\nu) \propto \sum_{F_1} \sum_{F'} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} S_{F_1F'}^2 \delta(\nu, \nu - \nu_{F_1F'}) \quad (2.4.59)$$

Utilizando a Eq. (2.4.59), é possível generalizar o coeficiente de absorção de um sistema de dois níveis, dado pela Eq. (2.2.38), bem como seu perfil espectral associado, Eq. (2.3.53), para sistemas com múltiplos subníveis hiperfinos (n -níveis), por meio das expressões:

$$\kappa(\nu; I, N) = \frac{2N|\mu|^2}{\sqrt{\pi}\epsilon_0\hbar u\lambda\Gamma^\nu \sqrt{1 + \frac{I}{I_{\text{sat}}}}} \sum_{F_1} \sum_{F'} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} S_{F_1F'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{1 + 4 \frac{(\nu - \nu_{F_1F'} - \frac{v_{\parallel}}{\lambda})^2}{\Gamma^\nu}} dv_{\parallel} \quad (2.4.60)$$

e

$$\boxed{\Phi_A(\nu) = \frac{a}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{F_1} \sum_{F'} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} S_{F_1 F'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v_u^2}}{a^2 + \left(\frac{\nu - \nu_{F_1 F'}}{\Gamma_D^\nu} - v_u \right)^2} dv_u.} \quad (2.4.61)$$

Na Fig. 2.6 é apresentado o coeficiente de absorção espectral $\kappa(\nu)$ para a linha D2 do césio-133, calculado para uma temperatura de 100 °C. Cada transição hiperfina $F_1 \rightarrow F'$ contribui com um perfil individual, ponderado tanto pela degenerescência térmica do estado fundamental quanto pela força de oscilador associada, assim como foi explicado ao longo dessa subseção. A curva ciano, marcada como Total na legenda da figura, representa a soma dessas contribuições. O eixo de frequência foi deslocado de forma que o zero ($\nu = 0$) corresponda à frequência central da transição $F_1 = 4 \rightarrow F' = 5$. Nota-se que o perfil total não é simétrico, o que decorre do fato de que cada transição possui um deslocamento de frequência distinto, e a superposição ponderada dessas transições deslocadas leva a uma assimetria característica no espectro de absorção.

Implementação no Perfil de Emissão ($\Phi_E(\nu)$)

Sendo F_1 , F_2 e F' , os subníveis hiperfinos fundamentais da incidência e emissão, e excitados, respectivamente, similarmente ao que ocorre no perfil de absorção, a intensidade relativa das linhas hiperfinas no perfil de emissão é influenciada por dois fatores principais [89, 118, 141, 144]:

1. **Fator de Força da Transição Normalizada** - $\sum_{F_2} \sum_{F'} \frac{S_{F_2 F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2}$: Esse fator expressa a razão de ramificação (*branching ratio*) da transição $F' \rightarrow F_2$, isto é, a probabilidade relativa de que um átomo no subnível excitado F' decaia para o subnível F_2 , entre todas as transições possíveis permitidas pelas regras de seleção $\Delta F = 0, \pm 1$. Diferentemente da força absoluta da transição, dada por $S_{F_2 F'}^2$, essa razão é normalizada pela soma das forças de todas as transições que partem de F' , garantindo que a soma total das probabilidades de decaimento a partir de um dado estado excitado seja unitária. Essa normalização assegura a conservação de probabilidade no processo de emissão espontânea.
2. **Deslocamento de Frequência** - $\delta(\nu', \nu' - \nu_{F_2 F'})$: De maneira análoga a absorção, quando incorpora-se os subníveis hiperfinos na abordagem, a energia do fóton emitido resulta da diferença entre o subnível inferior F_2 e o subnível superior F' . Cada transição $F_2 \rightarrow F'$

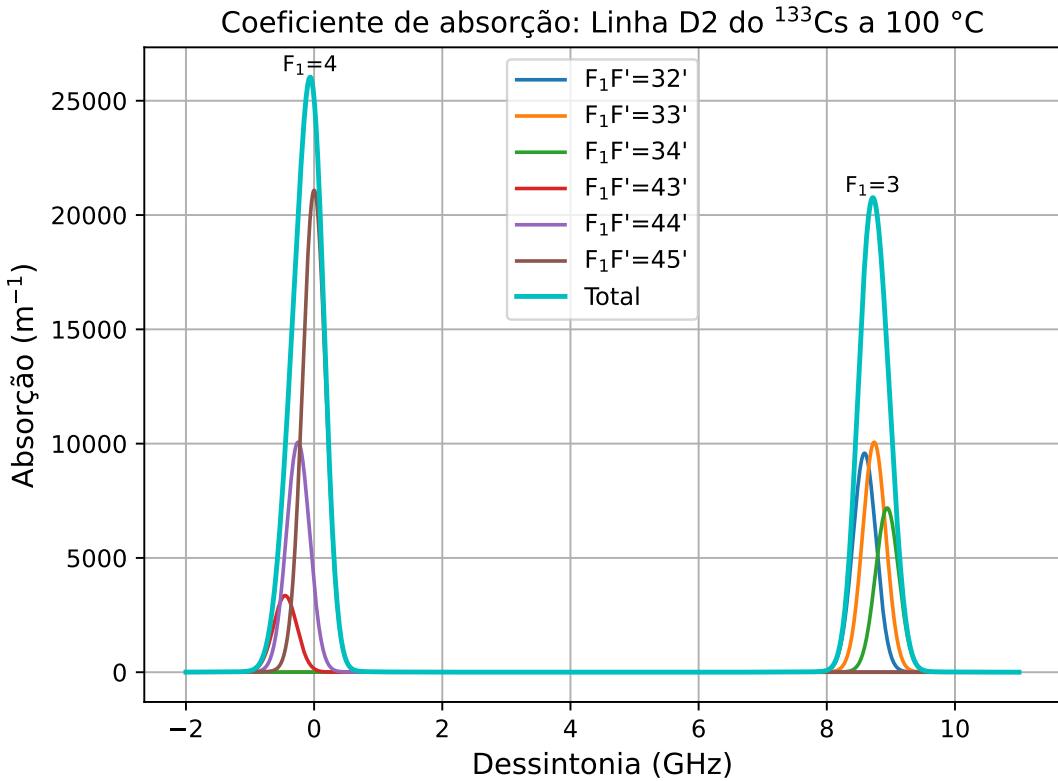


Figura 2.6 – Coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$ em função da frequência para a linha D2 ^{133}Cs a 100 °C. O zero do espectro foi definido sobre a transição $F_1F' = 45$. As curvas coloridas representam as contribuições individuais de cada transição hiperfina, identificadas pela notação F_1F' , onde F_1 representa o número quântico hiperfino do estado fundamental, (3 e 4) e F corresponde ao estado excitado (2, 3, 4 e 5). A curva em ciano (Total) é a soma ponderada de todas as transições, levando em conta a degenerescência dos níveis e a força de oscilador de cada uma. A assimetria no perfil total surge devido ao deslocamento das frequências de cada transição, que se somam de forma não simétrica, resultando em picos distintos para os estados fundamentais $F_1 = 3$ e $F_1 = 4$.

Fonte: Autoria própria.

contribui com uma linha de emissão centrada na frequência característica $\nu_{F_2F'}$. O perfil de emissão total Φ_E é, portanto, a soma dessas linhas, com cada uma delas centrada em sua respectiva frequência $\nu_{F_2F'}$.

Matematicamente, essas considerações se traduzem no perfil de absorção como

$$\Phi_E(\nu) \propto \sum_{F_2} \sum_{F'} \frac{S_{F_2F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2} \delta(\nu', \nu' - \nu_{F_2F'}) \quad (2.4.62)$$

Como discutido na Seção 2.3, o perfil de absorção está intrinsecamente relacionado às formulações de emissão. Para incorporar ambos os efeitos diretamente, basta multiplicar as Equações (2.4.59) e (2.4.62), considerando que apenas um estado excitado está envolvido. Se-

guindo esse raciocínio, pode-se escrever que

$$\Phi_{A,E}(\nu) \propto \sum_{F_1} \sum_{F'} \sum_{F_2} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} \frac{S_{F_1 F'}^2 S_{F_2 F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2} \delta(\nu, \nu - \nu_{F_1 F'}) \delta(\nu', \nu' - \nu_{F_2 F'}) \quad (2.4.63)$$

Para generalizar as expressões para um sistema de n -níveis hiperfinos, incorpora-se a Eq. (2.4.63) em cada cenário de FRF dependente do ângulo, Eqs. (2.3.51) e (2.3.52), e integrada nos ângulos, Eqs. (2.3.56) e (2.3.57), obtendo assim as seguintes relações generalizadas:

$$\Theta_{II}(\nu', \vec{k}'; \nu, \vec{k}) = \frac{2}{\pi^2 \Gamma_{0,c}^{\nu}} p_\theta(\hat{k}', \hat{k}) \sum_{F_1} \sum_{F'} \sum_{F_2} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} \frac{S_{F_1 F'}^2 S_{F_2 F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp \left(-\frac{1}{u^2} \left\{ v_{\parallel}^2 + \frac{[(\nu' - \nu + \nu_{F_1 F'} - \nu_{F_2 F'})\lambda + v_{\parallel}(1 - \cos\theta)]^2}{\sin^2\theta} \right\} \right)}{1 + 4 \frac{\left(\nu - \nu_{F_1 F'} - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right)^2}{\Gamma_{0,c}^{\nu}^2}} dv_{\parallel}, \quad (2.4.64)$$

$$\Theta_{III}(\nu', \vec{k}'; \nu, \vec{k}) = \frac{4}{\pi^3 \Gamma_{0,c}^{\nu}^2} p_\theta(\hat{k}', \hat{k}) \sum_{F_1} \sum_{F'} \sum_{F_2} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} \frac{S_{F_1 F'}^2 S_{F_2 F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2}{u^2}}}{\left[1 + 4 \frac{\left(\nu - \nu_{F_1 F'} - \frac{v_{\parallel}}{\lambda} \right)^2}{\Gamma_{0,c}^{\nu}^2} \right] \left[1 + 4 \frac{\left(\nu' - \nu_{F_2 F'} - \frac{v_{\parallel} \cos\theta + v_{\perp} \sin\theta}{\lambda} \right)^2}{\Gamma_{0,c}^{\nu}^2} \right]} dv_{\perp} dv_{\parallel}, \quad (2.4.65)$$

$$R_{II}(x', x) = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{F_1} \sum_{F'} \sum_{F_2} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} \frac{S_{F_1 F'}^2 S_{F_2 F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2} \cdot \int_{\frac{1}{2}|x - x' - x_{F_1 F'} + x_{F_2 F'}|}^{\infty} e^{-v_u^2} \left[\tan^{-1} \left(\frac{x_f + v_u}{a} \right) - \left(\frac{\bar{x}_f - v_u}{a} \right) \right] dv_u \quad (2.4.66)$$

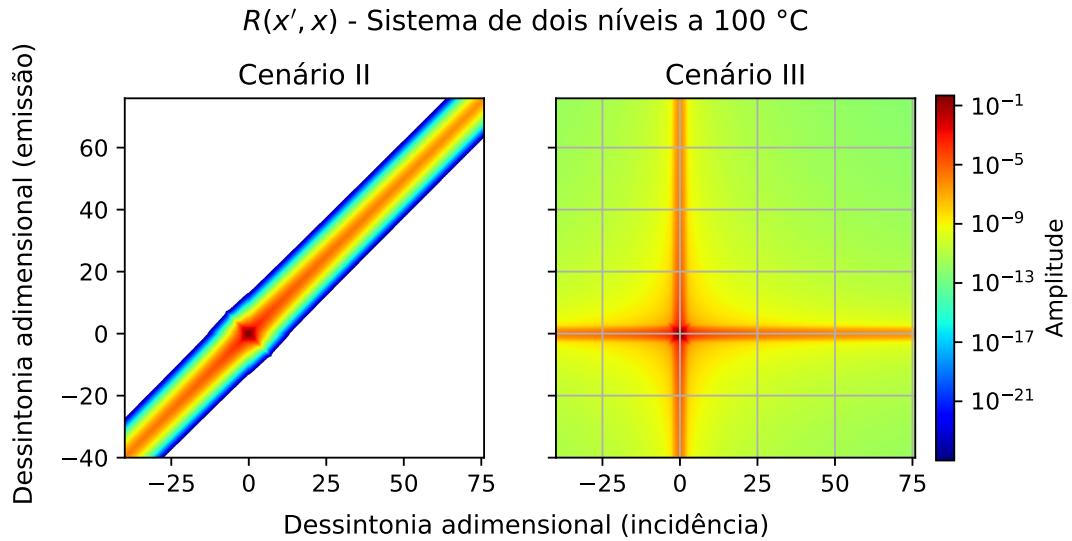
e

$$R_{III}(x', x) = \frac{1}{\pi^{\frac{5}{2}}} \sum_{F_1} \sum_{F'} \sum_{F_2} \frac{2F_1 + 1}{\sum_{\{F\}} (2F + 1)} \frac{S_{F_1 F'}^2 S_{F_2 F'}^2}{\sum_{\{F\}} S_{FF'}^2} \cdot \int_0^{\infty} e^{-v_u^2} \cdot \left[\tan^{-1} \left(\frac{x' - x_{F_2 F'} + v_u}{a} \right) - \left(\frac{x' - x_{F_2 F'} - v_u}{a} \right) \right] \cdot \left[\tan^{-1} \left(\frac{x - x_{F_1 F'} + v_u}{a} \right) - \left(\frac{x - x_{F_1 F'} - v_u}{a} \right) \right] dv_u \quad (2.4.67)$$

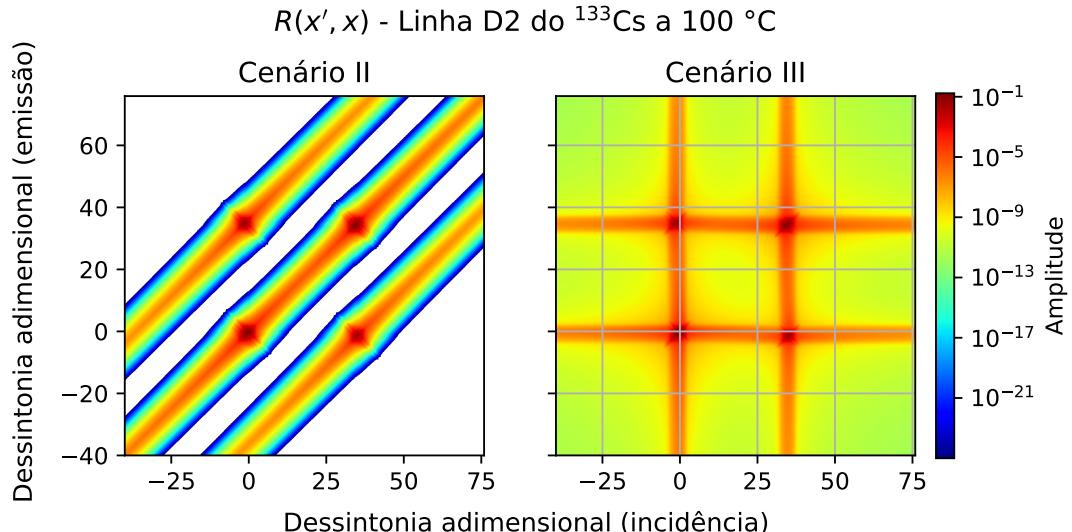
onde $x_{F_1 F'} = \frac{\nu_{F_1 F'}}{\Gamma_D^{\nu}}$, $x_{F_2 F'} = \frac{\nu_{F_2 F'}}{\Gamma_D^{\nu}}$, $\underline{x}_f = \min(|x' - x_{F_2 F'}|, |x - x_{F_1 F'}|)$ e $\bar{x}_f = \max(|x' - x_{F_2 F'}|, |x - x_{F_1 F'}|)$.

A Figura 2.7 apresenta as matrizes de redistribuição de frequência $R(x', x)$ integradas no ângulo para a linha D2 do ^{133}Cs a 100°C . São comparados dois modelos atômicos: um simplificado, de dois níveis (Figura 2.7a), e outro mais completo, que inclui n níveis hiperfinos (Figura

2.7b). Ambos são avaliados em dois cenários: sem colisões (Cenário II, painéis à esquerda) e com colisões (Cenário III, painéis à direita). As amplitudes das matrizes são representadas em escala de cores logarítmica.



(a) Modelo atômico de dois níveis, utilizando parâmetros da linha D2 do ^{133}Cs .



(b) Modelo atômico considerando o efeito toda estrutura hiperfina da linha D2 do ^{133}Cs com zero centrado na transição 45°.

Figura 2.7 – Matrizes de redistribuição de frequência $R(x', x)$ integrada no ângulo para a linha D2 do césio-133 (^{133}Cs) a 100°C. O eixo vertical representa a frequência de emissão adimensional x' e o eixo horizontal a frequência de incidência adimensional x . A amplitude da redistribuição é indicada pela barra de cor em escala logarítmica. São comparados: **(a)** um modelo atômico simplificado de dois níveis e **(b)** um modelo que considera os N níveis da estrutura hiperfina da linha D2 do ^{133}Cs . Para cada modelo, são apresentados dois cenários: Cenário II (gráfico à esquerda), na ausência de colisões, e Cenário III (painéis à direita), que inclui o efeito de colisões.

Fonte: Autoria própria.

No Cenário II (sem colisões), as matrizes mostram padrões diagonais intensos próximos de $x' \approx x$, indicando espalhamento coerente. No modelo de dois níveis, surge uma única linha diagonal, em que a frequência do fóton é praticamente conservada. Já no modelo de n níveis, a estrutura se fragmenta em várias diagonais paralelas, refletindo as transições dos subníveis hiperfinos da linha D2 do césio. Fora dessas diagonais, a intensidade da matriz é muito baixa, indicando que, na ausência de colisões, a redistribuição de frequência é limitada (truncada).

No Cenário III (com colisões), esse padrão se altera drasticamente. No modelo de dois níveis, a coerência da diagonal desaparece e surge uma estrutura difusa em forma de cruz centrada em $x', x \approx 0$, sinalizando uma redistribuição significativa de frequência, causada pela quebra na fase do fóton absorvido em decorrência das colisões. No modelo de n níveis, o mesmo efeito é observado: as diagonais se tornam menos definidas, a intensidade se espalha entre elas e se concentra também no centro da linha, formando uma estrutura cruzada. Contudo, diferente do modelo com 2 níveis, a estrutura se mostra muito mais complexa devido a proeminência das regiões da estrutura hiperfina. Além disso, diferente do caso sem colisões, agora existe uma redistribuição efetiva de intensidade também para frequências distantes do centro, ou seja, para as asas da linha, evidenciando o padrão de “caudas pesadas”, ao qual esse tipo de regime está sujeito. Esse fato evidencia que colisões podem romper eliminar a memória da frequência original do fóton incidente, permitindo que a emissão ocorra nas asas com maior probabilidade, se comparado ao Cenário II (sem colisões).

3 Aprisionamento Radiativo

O transporte de luz em meios onde o espalhamento múltiplo predomina pode ser descrito como um processo estocástico. Em vapores atômicos ressonantes, esse transporte ocorre por meio de ciclos sucessivos de absorção e emissão espontânea, processos que, em conjunto, caracterizam o espalhamento da radiação no meio. Durante esses ciclos, o fóton percorre um caminho livre até ser reabsorvido por outro átomo e cada um desses deslocamentos entre emissões consecutivas constitui um “passo” na trajetória do fóton, configurando assim uma caminhada aleatória. Em regimes com grande número de espalhamentos, a estatística dessas caminhadas pode ser adequadamente descrita pelo formalismo dos voos de Lévy, já que, apesar de a maioria dos passos ser curta, eventos raros com longos deslocamentos exercem influência desproporcional na dinâmica global. Em sistemas com tamanho finito, a manifestação macroscópica desse comportamento se dá por meio da transmissão difusa, na qual parte da radiação escapa do meio ao seguir trajetórias aleatórias e anômalas, muitas vezes associadas a passos longos.

Este capítulo apresenta os conceitos fundamentais que descrevem a propagação dos fótons em vapores atômicos com ênfase nos mecanismos de aprisionamento radiativo que governam essa dinâmica. Esse estudo é essencial, pois fornecerá subsídios para a comparação entre resultados analíticos e dados experimentais. Inicialmente, aborda-se o fenômeno de aprisionamento radiativo por meio da modelagem da caminhada aleatória de fótons em meios turvos, destacando-se a natureza estocástica tanto da direção quanto do comprimento dos passos entre interações. Em seguida, analisa-se a transmissão difusa da radiação e a função densidade de probabilidade dos tamanhos de passo, desde cenários de espalhamento único até situações com múltiplos espalhamentos, incorporando os efeitos da função de redistribuição de frequência. Por fim, discutem-se os diferentes regimes de transporte, balístico, difusivo e superdifusivo, com ênfase nos voos de Lévy e na conexão entre o parâmetro de Lévy e o comportamento assintótico da distribuição de tamanhos de salto.

3.1 Caminhada Aleatória dos Fóttons: Descrição Fenomenológica

A caminhada aleatória dos fóttons descreve a trajetória da luz em meios que os aprisionam, fazendo-os sofrer múltiplos eventos de espalhamento até conseguirem escapar [6]. Em particular, em vapores atômicos aquecidos, esse processo é influenciado por interações complexas entre os fóttons e os átomos, que afetam tanto a frequência quanto a direção da radiação ao longo da propagação. A caracterização estatística dessas trajetórias é fundamental para compreender fenômenos como a transmissão difusa, o espalhamento angular e a redistribuição espectral, além de permitir a modelagem precisa do transporte radiativo em meios com geometria limitada.

3.1.1 Transporte Radiativo em Meios Turvos

O transporte radiativo em meios turvos é um fenômeno essencial para a compreensão da propagação da luz em uma ampla variedade de sistemas físicos, que vão desde atmosferas estelares e planetárias até tecidos biológicos e materiais ópticos complexos [2, 60, 87, 147, 148]. Nesses meios, os fóttons geralmente não percorrem uma única trajetória retilínea até escaparem; ao contrário, costumam interagir repetidamente com os constituintes do meio, tendo sua direção de propagação modificada de forma aleatória a cada interação [60]. Além disso, a amplitude dos comprimentos realizados pelos fóttons entre esses eventos também é uma variável aleatória [87]. A combinação dessas múltiplas interações, que randomizam tanto a direção quanto a amplitude do percurso em cada evento de espalhamento, confere ao processo um caráter estocástico e define a caminhada aleatória dos fóttons em meios turvos [87]. Na Figura 3.1, apresenta-se um diagrama que representa um sistema em que um fótton, com energia inicial $\hbar\nu$, penetra o meio, fica aprisionado e, antes de emergir com energia $\hbar\nu'$, executa uma caminhada aleatória em seu interior.

3.1.2 Aleatoriedade na Direção de Espalhamento

Cada vez que um fótton interage com uma partícula no meio, idealiza-se que ocorre uma absorção seguida por uma reemissão resultando em um espalhamento [4]. Essa reemissão, no entanto, geralmente não ocorre na mesma direção de propagação do fótton absorvido; em vez disso, a nova direção é escolhida aleatoriamente, segundo uma distribuição angular bem definida,

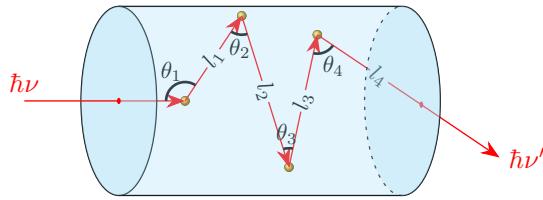


Figura 3.1 – Representação esquemática da caminhada aleatória de um fóton através de um meio turvo. Um fóton incidente, com energia inicial $\hbar\nu$, penetra o meio (delimitado pela região preenchida em ciano). As setas vermelhas indicam a trajetória do fóton entre sucessivos eventos de espalhamento. Cada evento de espalhamento ocorre quando o fóton interage com uma das partículas constituintes do meio, aqui representadas como esferas amarelas. Após cada interação, tanto o comprimento do passo percorrido pelo fóton, l_i (com $i = 1, 2, 3, 4$), quanto a sua direção de propagação, caracterizada pelos ângulos de espalhamento θ_i , são alterados de forma aleatória, de acordo com distribuições específicas. É importante notar que, embora um meio material macroscópico contenha um número de partículas da ordem do número de Avogadro, esta figura ilustra apenas as poucas partículas que efetivamente participam dos eventos de espalhamento com o fóton representado. Finalmente, após múltiplas interações, o fóton pode emergir do meio com energia $\hbar\nu'$, uma vez que, em cada interação, sua frequência é redistribuída, seja por colisões ou pelo efeito Doppler associado ao movimento das partículas do meio.

Fonte: Autoria própria.

que depende das propriedades físicas do meio e do tipo de interação envolvida [2]. Em outras palavras, a trajetória original do fóton pode ser alterada a cada evento de espalhamento e, após múltiplas interações acumuladas, o fóton realiza uma caminhada aleatória dentro do meio [60].

Neste trabalho serão consideradas apenas as distribuições angulares previamente discutidas na Subsecção 2.3.2, onde se analisou o caso de luz incidente não polarizada. Nessa análise, foram adotadas duas distribuições típicas: a isotrópica e a dipolar, descritas pelas Eqs. (2.3.43) e (2.3.44), respectivamente.

3.1.3 Aleatoriedade na Amplitude do Passo

Entre dois eventos consecutivos de espalhamento, o fóton percorre uma trajetória retilínea [60]. Esse percurso, entre uma reemissão e a absorção subsequente, é denominado “passo”, e sua extensão é uma variável aleatória que depende fortemente do coeficiente de absorção do meio, o qual regula sua capacidade de absorver a radiação incidente [1]. Neste contexto, um aspecto crucial que determina a amplitude do passo é a frequência do fóton reemisso, pois, como discutido nas Seções 2.1 e 2.2, o coeficiente de absorção varia com a frequência do fóton

incidente. Por sua vez, a frequência do fóton reemittido, que corresponde à frequência de incidência no próximo evento de absorção, é definida estatisticamente pelas funções de redistribuição de frequência, conforme discutido na Seção 2.3.

Consequentemente, a forma como a absorção do meio se distribui ao longo do espectro exerce influência decisiva sobre o transporte radiativo. Em meios cuja absorção está concentrada em faixas espectrais estreitas, como ocorre, por exemplo, em vapores atômicos homogêneos, grande parte dos fótons com frequências distantes da ressonância interage pouco com as partículas constituintes, resultando em amplitude de passos maiores [1]. Por outro lado, em meios com bandas largas de absorção, como certos gases atmosféricos associados ao efeito estufa, a radiação é atenuada em uma ampla faixa de frequências [9, 10, 149], o que encurta os passos livres, modificando abruptamente o modo como essa caminhada acontece.

A dinâmica torna-se particularmente relevante quando o fóton é emitido com uma frequência próxima daquela necessária para promover transições energéticas nas partículas do meio. Nessa condição, a probabilidade de absorção cresce drasticamente, reduzindo a distância média percorrida até a próxima interação [92]. Em contraste, fótons com frequências distantes da ressonância interagem menos com o meio, o que se reflete em coeficientes de absorção menores e, portanto, em maior probabilidade de passos livres mais longos [6].

Dessa forma, conclui-se que o caráter estocástico da caminhada aleatória dos fótons resulta da aleatoriedade associada tanto às direções de reemissão quanto aos comprimentos dos passos livres entre interações sucessivas. Além disso, verifica-se que diferentes regimes de transporte da radiação podem surgir, conforme as condições em que ocorre a redistribuição de frequência e as propriedades do meio. Entre essas propriedades, destaca-se a largura espectral de absorção, que exerce influência significativa sobre o processo.

3.2 Transmissão Difusa

A transmissão difusa descreve o modo como a radiação emerge de um meio após sofrer múltiplas interações de espalhamento, que desviam os fótons de suas trajetórias retilíneas iniciais e resultam em uma saída angularmente dispersa da luz [2, 90]. A análise desse fenômeno

torna-se especialmente relevante, e desafiadora, em sistemas envolvendo luz ressonante incidindo sobre vapores atômicos, onde a natureza estocástica das trajetórias fotônicas requer uma descrição teórica cuidadosa baseada em modelos de caminhada aleatória. As expressões matemáticas que descrevem a transmissão difusa em diferentes regimes físicos são fundamentais para a correta interpretação dos dados experimentais, permitindo distinguir os efeitos do aprisionamento radiativo e identificar assinaturas de transporte anômalo nos sistemas analisados.

3.2.1 Expressão Geral da Transmissão Difusa

Define-se como transmissão difusa (T_D) a fração da radiação incidente que, após penetrar um meio, consegue emergir angularmente espalhada [3]. Diferentemente da transmissão balística (coerente), ela não ocorre ao longo da trajetória retilínea do feixe incidente; em vez disso, devido a um ou mais eventos de espalhamento internos, a direção de propagação dos fótons é modificada em cada interação, fazendo com que a radiação seja transmitida de forma difusa [91]. Este caráter difuso é particularmente evidente em meios onde ocorrem múltiplos eventos de espalhamento.

Para quantificar esse comportamento, considera-se a probabilidade de absorção inicial dos fótons no meio e sua posterior contribuição à transmissão difusa. A probabilidade de que os fótons de um feixe incidente monocromático com dessintonia ν sejam absorvidos inicialmente na posição z_0 de um meio absorvedor é $P(\nu, z_0)dz_0$. Além disso, define-se a função $T_D^E(z_0)$ como a fração dos fótons que, após serem absorvidos em z_0 , escapam do meio por transmissão difusa depois de sofrerem um ou mais espalhamentos. Assim, a transmissão difusa associada à absorção inicial no intervalo $z_0 \in [z_i, z_f]$ é obtida pela média de $T_D^E(z_0)$ ponderada pela densidade de probabilidade de absorção $P(\nu, z_0)$, conforme a equação

$$T_D(\nu) = \int_{z_i}^{z_f} P(\nu, z_0)T_D^E(z_0)dz_0, \quad (3.2.1)$$

onde a transmissão difusa total é obtida considerando as contribuições de todas as possíveis posições iniciais de absorção, o que corresponde a integrar a expressão sobre todo o comprimento ℓ do meio. A Figura 3.2 oferece uma representação visual deste cenário, ilustrando a trajetória de um fóton e o meio de propagação. Nela, se observar claramente as variáveis geométricas discutidas, como a posição de absorção inicial z_0 , os limites z_i e z_f , e o comprimento total ℓ do

meio, todas fundamentais na integral da Eq. (3.2.1).

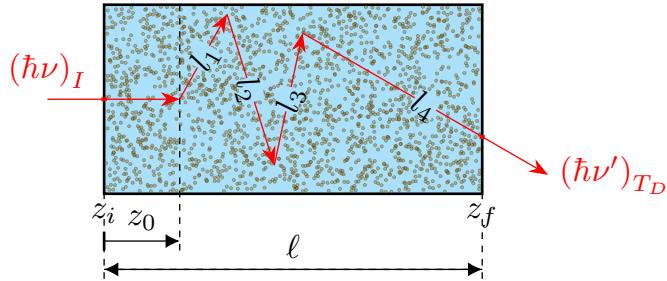


Figura 3.2 – Esquema da Figura 3.1 com a adição das variáveis geométricas (z_i, z_f, z_0, ℓ) do meio, relevantes para o cálculo da transmissão difusa T_D conforme a Eq. 3.2.1. Essa figura complementa a representação da caminhada aleatória do fóton (detalhada na Figura 3.1), com foco nas variáveis geométricas utilizadas na Eq. 3.2.1 para a transmissão difusa. São explicitamente indicadas: as coordenadas da face de entrada z_i e de saída z_f do meio espalhador (região ciano preenchida com centros espalhadores), o seu comprimento total ℓ e uma profundidade de primeira interação z_0 . Esta última corresponde à posição inicial de absorção $P(\nu, z_0)$ na integral que define $T_D(\nu)$. O fóton incidente $(\hbar\nu)_I$, após sofrer múltiplos espalhamentos com comprimentos de passo l_i , pode emergir pela face z_f , como ilustrado pelo fóton $(\hbar\nu')_{T_D}$. Os subscritos I e T_D explicitam, respectivamente, que o fóton incidiu no meio e que, ao emergir, contribui para a transmissão difusa quantificada.

Fonte: Autoria própria.

Probabilidade de Absorção

Para determinar explicitamente a função $P(\nu, z_0)$, recorre-se à lei de Beer-Lambert, conforme discutido no Capítulo 2, a qual descreve a atenuação da potência da radiação incidente em um meio absorvedor. A partir dessa lei, pode-se calcular a probabilidade $P(\nu, z_0)dz_0$ de que um fóton do feixe incidente, com frequência ν , seja absorvido pela primeira vez em um intervalo infinitesimal dz_0 na profundidade z_0 . Para estabelecer a lei, considera-se que a fração da radiação inicialmente incidente que é absorvida na camada infinitesimal entre z_0 e $z_0 + dz_0$ é numericamente equivalente à probabilidade de um fóton individual ser absorvido nessa região. Essa fração absorvida corresponde à diferença entre a transmitância do feixe ao entrar na camada, $T(\nu, z_0)$, e ao sair dela, $T(\nu, z_0 + dz_0)$, ou seja,

$$P(\nu, z_0)dz_0 = T(\nu, z_0) - T(\nu, z_0 + dz_0).$$

Além disso, como dz_0 é infinitesimal, a diferença $T(\nu, z_0) - T(\nu, z_0 + dz_0)$ pode ser aproximada por $-\frac{dT(\nu, z_0)}{dz_0} dz_0$. Assim, a densidade de probabilidade de absorção é dada por

$$P(\nu, z_0) = -\frac{dT(\nu, z_0)}{dz_0}. \quad (3.2.2)$$

Empregando a definição matemática da lei de Beer-Lambert, Eq. (2.1.22), que fornece a expressão para a transmitância, na Eq. (3.2.2), obtém-se a densidade de probabilidade de um fóton de frequência ν ser absorvido no intervalo infinitesimal $[z_0, z_0 + dz_0]$, dada por

$$P(\nu, z_0) = \kappa(\nu) e^{-\kappa(\nu)z_0}. \quad (3.2.3)$$

Substituindo esse resultado na Eq. (3.2.1) considerando $\kappa(\nu)$ constante em relação a z_0 , chega-se em

$$T_D(\nu) = \kappa(\nu) \int_{z_i}^{z_f} dz_0 e^{-\kappa(\nu)z_0} T_D^E(z_0). \quad (3.2.4)$$

Uma vez estabelecida a distribuição de probabilidade para a profundidade da absorção inicial, $P(\nu, z_0)$, pode-se determinar a profundidade (posição dentro do meio) média de absorção inicial $\langle z_0 \rangle$. Pela definição de valor esperado, tem-se que

$$\langle z_0 \rangle = \int_0^\infty z_0 P(\nu, z_0) dz_0.$$

Substituindo a Eq. (3.2.3) nesta expressão e utilizando o método da integração por partes, encontra-se que

$$\langle z_0 \rangle = \frac{1}{\kappa(\nu)}. \quad (3.2.5)$$

A Eq. (3.2.4) descreve a probabilidade de um fóton incidente com frequência ν percorra uma distância z_0 e ser absorvido na sequência. Embora a Eq. (3.2.4) tenha sido introduzida no contexto da determinação da posição do primeiro evento de espalhamento, sua forma fundamental é generalizável. Após qualquer evento de reemissão subsequente, se um fóton é emitido com uma nova frequência ν' , a densidade de probabilidade de ele percorrer um novo comprimento de passo l antes de sofrer a próxima absorção é, analogamente, $P(l|\nu') = \kappa(\nu') e^{-\kappa(\nu')l}$. Assim, a lei exponencial governa o comprimento de cada passo individual, sendo a frequência ν' o parâmetro que define a escala de decaimento para aquele passo específico na caminhada aleatória do fóton. Analogamente, para um fóton reemitido com frequência ν' , o deslocamento

médio até sua próxima absorção é dado por $\langle l|\nu' \rangle = \frac{1}{\kappa(\nu')}$, assim como ocorre com o fóton incidente original, cuja absorção média se dá após $\langle z_0 \rangle = \frac{1}{\kappa(\nu)}$ (Eq. (3.2.5)). Esse resultado, bem como sua generalização, admite uma interpretação física bastante intuitiva: a distância média percorrida por um fóton antes de ser reabsorvido é inversamente proporcional ao coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$. Dessa forma, confirma-se matematicamente a relação discutida na seção anterior entre a frequência de emissão do fóton e a amplitude dos passos que ele realiza. Ressalte-se que esse valor representa o comprimento médio do passo dado pelos fótons para uma frequência de emissão específica.

A Eq. (3.2.4) expressa de forma concisa a conexão fundamental entre os processos microscópicos de absorção e espalhamento e a descrição macroscópica da transmissão radiativa. A função $T_D^E(z_0)$ incorpora toda a complexidade do transporte aleatório subsequente à absorção inicial em z_0 , contabilizando os múltiplos espalhamentos e possíveis mudanças de frequência que levam ao escape do fóton. A integração sobre todas as posições possíveis de absorção z_0 reflete o caráter estatístico do fenômeno, em que cada trajetória individual contribui para o sinal transmitido total. Em meios opticamente espessos ($\kappa(\nu)\ell \gg 1$), a transmissão balística torna-se irrelevante, e o transporte da radiação passa a ser dominado pela difusão, cenário típico de vapores atômicos densos sob excitação ressonante. Nessa situação, a competição entre a absorção, governada por $\kappa(\nu)$, e os diferentes cenários de redistribuição de frequência, incorporados em $T_D^E(z_0)$, determina a forma funcional do espectro de transmissão difusa, ou seja, a dependência da fração de luz transmitida com a frequência da radiação incidente. Adicionalmente, a geometria do meio, representada pelos seus limites z_i e z_f , exerce um papel crucial sobre a fração de fótons que escapam, influenciando diretamente a probabilidade de transmissão. Dessa forma, a equação permite quantificar como o aprisionamento radiativo, por meio da combinação entre absorção, reemissão e múltiplos espalhamentos, afeta o espectro da transmissão difusa.

Apesar de $T_D^E(z_0)$ da Eq. (3.2.4) já incorporar todas as possibilidades da caminhada aleatória do fóton, uma análise mais detalhada dos mecanismos de transporte torna-se possível ao se decompor a transmissão difusa total em termos do número de espalhamentos sofridos pelos fótons antes de escaparem. Essa decomposição permite separar explicitamente as contribuições

associadas a regimes distintos de transporte, como o escape após um único espalhamento e o escape após múltiplas interações [91]. Nesse caso, a Eq. (3.2.4) pode ser reescrita como

$$T_D(\nu) = T_{D,1}(\nu) + T_{D,M}(\nu), \quad (3.2.6)$$

onde $T_{D,1}(\nu)$ representa a contribuição de fótons que escapam após um único evento de espalhamento e $T_{D,M}(\nu)$ contabiliza aqueles que sofrem múltiplos espalhamentos antes de emergir do meio. Essa decomposição possibilita um tratamento analítico diferenciado para cada regime de espalhamento, sendo particularmente relevante quando: (i) o espalhamento único domina a física do transporte radiativo e (ii) no limite assintótico de múltiplos espalhamentos.

3.2.2 Primeiro Espalhamento

No contexto do espalhamento único em vapor atômico, o interesse recai sobre o primeiro deslocamento realizado por um fóton após sua interação inicial com um átomo do meio. Considera-se, em particular, um fóton proveniente do feixe incidente, com frequência ν , que é absorvido na posição z_0 e posteriormente reemitido. A contribuição $T_{D,1}(\nu)$ é determinada a partir da caracterização estatística da primeira trajetória, isto é, da distância percorrida pelo fóton reemitido até sua próxima interação com o meio. Tal caracterização é fornecida pela distribuição de probabilidade do tamanho de passo associado ao primeiro espalhamento, $P_1(l|\nu)$.

3.2.2.1 Distribuição de Probabilidade de Tamanho de Passo

Após a absorção em uma posição z_0 , o fóton é reemitido com uma nova frequência ν' , iniciando o processo de aprisionamento radiativo. O caminho livre percorrido a partir desse ponto até a próxima interação, seja uma nova absorção ou o escape do meio, define o comprimento l do primeiro passo da caminhada aleatória, em que a distribuição de probabilidade do primeiro passo, $P_1(l|\nu)$, é condicionada pela frequência ν do fóton incidente. As características dessa distribuição é particularmente relevante em relação as que regem os passos subsequentes na caminhada aleatória do fóton. Essa distinção ocorre porque o fóton emitido após a primeira absorção ainda carrega uma forte correlação com as condições do evento original. Em particular, a frequência reemitida ν' pode depender não apenas da frequência ν e da direção de propagação $\hat{\mathbf{k}}$ do fóton absorvido, mas também da velocidade do átomo absorvedor, que afeta o processo via

efeito Doppler [53, 61, 91]. Como resultado, a redistribuição espectral no primeiro espalhamento preserva uma “memória” da absorção inicial, tornando a distribuição $P_1(l|\nu)$ sensivelmente distinta daquela associada aos passos subsequentes.

Para incorporar adequadamente a dependência da frequência ν do fóton incidente na distribuição de tamanho do primeiro passo, $P_1(l|\nu)$, é essencial caracterizar o espectro de emissão do fóton após a sua primeira interação. Nesse contexto, o processo de redistribuição de frequência é o principal responsável por moldar o espectro da radiação reemitida, determinando a distribuição das novas frequências ν' que o fóton pode assumir. A probabilidade de que essa reemissão ocorra em uma frequência específica ν' , dado que a frequência do fóton absorvido era ν , é descrita pela distribuição espectral condicional de primeira reemissão, $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}}) = \Theta_{\text{cond}}(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$, com $\Theta_{\text{cond}}(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$ definida na Eq. (2.3.55). Assim, $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})d\nu'$ representa a probabilidade de que o fóton seja reemitido com frequência no intervalo $[\nu', \nu' + d\nu']$ após a primeira absorção do aprisionamento radiativo.

A forma precisa de $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$ depende do regime físico considerado, como discutido na Seção 2.3, em particular quanto à ausência ou presença de colisões binárias durante o tempo de vida do estado excitado. No caso de um sistema atômico fechado de dois níveis em equilíbrio térmico, as distribuições assumem as formas dadas pelas Eqs. (2.3.51) e (2.3.52), conforme o cenário. Já para sistemas fechados com n níveis hiperfinos em equilíbrio térmico, empregam-se as expressões generalizadas das Eqs. (2.4.64) e (2.4.65).

Uma vez que um fóton é reemitido com uma frequência bem definida ν' , proveniente da distribuição $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$, a física que governa seu subsequente deslocamento até a próxima interação é análoga àquela da absorção inicial, expressa na Eq. (3.2.3). Assim, a densidade de probabilidade de que esse fóton percorra uma distância l antes de ser novamente absorvido é dada pela lei de Beer-Lambert, assumindo a forma exponencial da Eq. (3.2.3), agora dependente da nova frequência: $P(l|\nu') = \kappa(\nu')e^{-\kappa(\nu')l}$, onde $\kappa(\nu')$ é o coeficiente de absorção do meio na frequência ν' .

Para determinar a distribuição de probabilidade total do primeiro passo condicionada à frequência ν do fóton incidente, $P_1(l|\nu)$, é necessário integrar a contribuição de todas as

possíveis frequências de reemissão ν' . Cada contribuição é dada pela densidade de probabilidade $P(l|\nu')$, que descreve a chance de o fóton percorrer uma distância l após ser reemitido com frequência ν' , conforme estabelecido no parágrafo anterior. Essa densidade deve ser ponderada pela probabilidade $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})d\nu'$. Essa integração resulta na expressão para $P_1(l|\nu)$, dada por

$$P_1(l|\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}}) \kappa(\nu') e^{-\kappa(\nu')l} d\nu'. \quad (3.2.7)$$

A Eq. (3.2.7) representa, portanto, de forma geral, a densidade de probabilidade de que um fóton, originado de um feixe incidente com frequência ν , execute um primeiro passo de comprimento l após ser absorvido e subsequentemente reemitido. Essa expressão combina a probabilidade de reemissão em cada frequência ν' , dada por $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$, com a probabilidade exponencial de o fóton percorrer a distância l nessa frequência específica, dada por $\kappa(\nu')e^{-\kappa(\nu')l}$, integrando sobre todas as frequências de reemissão possíveis. Dessa forma, a formulação captura a influência da “memória” do primeiro espalhamento na subsequente propagação do fóton.

3.2.2.2 Transmissão por Espalhamento Único

Com a caracterização estatística do primeiro passo estabelecida, é possível agora abordar sua contribuição direta para o transporte da radiação no meio. Especificamente, deseja-se quantificar a parcela da transmissão difusa que resulta exclusivamente de fótons que sofrem um único evento de espalhamento antes de escapar do meio. Para isso, é necessário, primeiramente, especificar a função de escape $T_D^E(z_0)$ presente na Eq. (3.2.4) para este cenário particular. Denomina-se, assim, $T_{D,1}^E(z_0)$ como a função que representa a probabilidade de um fóton escapar do meio em decorrência de um único evento de espalhamento, tendo sua trajetória aleatória iniciada em z_0 após a absorção de um fóton incidente de frequência ν e subsequente reemissão. Nesse contexto, o fóton escapa do meio sempre que o passo l executado for maior que a distância característica, $l_{\text{esc}}(z_0)$, da posição de reemissão z_0 até a fronteira de saída do meio na direção de interesse.

A probabilidade do comprimento do passo executado por um fóton no primeiro espalhamento ser $l' \geq l_{\text{esc}}(z_0)$, dado que a absorção do fóton incidente de frequência ν ocorreu na posição z_0 , é obtida integrando-se a distribuição de tamanho do primeiro passo $P_1(l'|\nu)$ a partir

de $l_{\text{esc}}(z_0)$ até o infinito [91], ou seja,

$$P_1(l \geq l_{\text{esc}}(z_0)) = \int_{l_{\text{esc}}(z_0)}^{\infty} P_1(l'|\nu) dl'.$$

Substituindo a Eq. (3.2.7) nessa integral e reagrupando os termos, chega-se a

$$P_1(l \geq l_{\text{esc}}(z_0)) = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}}) \kappa(\nu') \int_{l_{\text{esc}}(z_0)}^{\infty} e^{-\kappa(\nu')l'} dl' d\nu' = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}}) e^{-\kappa(\nu')l_{\text{esc}}(z_0)} d\nu'.$$

Como se trata do escape no primeiro espalhamento, por definição, tem-se $P_1(l \geq l_{\text{esc}}(z_0)) \equiv T_D^E(z_0)$. Substituindo esse resultado na Eq. (3.2.4), a transmissão difusa total do primeiro espalhamento, no intervalo $z_0 \in [z_i, z_f]$, é dada por

$$T_{D,1}(\nu) = \kappa(\nu) \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}}) \int_{z_i}^{z_f} dz_0 e^{-\kappa(\nu)z_0 - \kappa(\nu')l_{\text{esc}}(z_0)} \quad (3.2.8)$$

A Eq. (3.2.8) representa a contribuição para a transmissão difusa dos fótons que são absorvidos inicialmente no intervalo $[z_i, z_f]$ e, após uma única reemissão, escapam do meio. A Eq. (3.2.8) é, portanto, a formulação geral que articula a probabilidade de absorção inicial, a redistribuição de frequência no primeiro espalhamento, a probabilidade do passo subsequente de escape e a geometria do problema, contida em $l_{\text{esc}}(z_0)$. Sua avaliação depende da geometria específica do meio e da forma explícita da função de redistribuição $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$, dada pela Eq. (2.3.55).

É importante ressaltar que uma abordagem mais exaustiva para a transmissão difusa detectada experimentalmente consideraria a integração da intensidade emitida sobre o ângulo sólido específico subtendido pelo detector. Contudo, para os propósitos desta tese e para a análise dos casos particulares de interesse, a formulação da Eq. (3.2.8), na qual a dependência angular está implicitamente tratada na definição de $l_{\text{esc}}(z_0)$ para as geometrias de detecção consideradas, é considerada suficiente e adequada.

3.2.2.3 Casos de Interesse

A expressão para a transmissão difusa do primeiro espalhamento, dada pela Eq. (3.2.8), fornece uma ferramenta poderosa para analisar a contribuição dos fótons que interagem uma única vez com o meio antes de o deixarem. Embora esta equação já incorpore a probabilidade de absorção inicial, a redistribuição de frequência e o escape subsequente, sua avaliação depende

da forma específica da distância de escape, $l_{\text{esc}}(z_0)$. A natureza de $l_{\text{esc}}(z_0)$ é determinada pela geometria do sistema e pela direção de detecção.

Serão considerados dois casos de grande interesse prático: a detecção de fôtons espalhados perpendicularmente à direção de incidência do feixe original e a detecção de fôtons que atravessam o meio e emergem pela face oposta à de entrada (transmissão para frente). O interesse nesses dois casos particulares decorre da sua relevância para a elucidação e análise de dados experimentais. Ambas as situações estão esquematizadas na Figura 3.3b. Nela, cada um dos diagramas representa uma célula de vapor atômico de espessura total ℓ . Em cada representação, um fôton incidente é absorvido em uma profundidade z_0 e subsequentemente reemittido. A subfigura 3.3a ilustra a detecção a 90° , com o fôton escapando lateralmente, enquanto a subfigura 3.3b mostra a transmissão para frente, com o fôton emergindo pela face oposta da célula.

Serão apresentadas, quando necessárias, algumas informações dos arranjos experimentais utilizados nessas configurações, com o intuito de objetivar as análises teóricas subsequentes; contudo, o detalhamento completo dos experimentos será reservado para o próximo capítulo.

Transmissão Difusa Total a 90°

Iniciando a análise dos casos particulares, o primeiro cenário abordado é a detecção de fôtons de primeiro espalhamento em uma direção perpendicular à propagação do feixe incidente, uma configuração ilustrada na Figura 3.3a. Esta geometria é de grande relevância, pois corresponde diretamente a um dos experimentos realizados ao longo deste doutorado, no qual foi detectada a fluorescência lateral emitida pelo vapor atômico de césio-133.

No experimento em questão, e consequentemente na presente análise teórica, a configuração diz respeito a uma célula de geometria cilíndrica contendo vapor atômico, iluminada por um feixe de laser incidente ao longo do seu eixo central de simetria. Considerando que a reemissão do fôton ocorre a partir deste eixo central e que a região sondada na detecção experimental (e, portanto, no modelo) concentra-se em torno do centro da célula, especificamente no intervalo $z_0 \in \left[\frac{\ell}{2} - z', \frac{\ell}{2} + z'\right]$ com z' sendo uma variável do experimento, a distância de escape $l_{\text{esc}}(z_0)$ para um fôton que se propaga radialmente em direção à parede lateral do cilindro é simplesmente o raio R do cilindro.

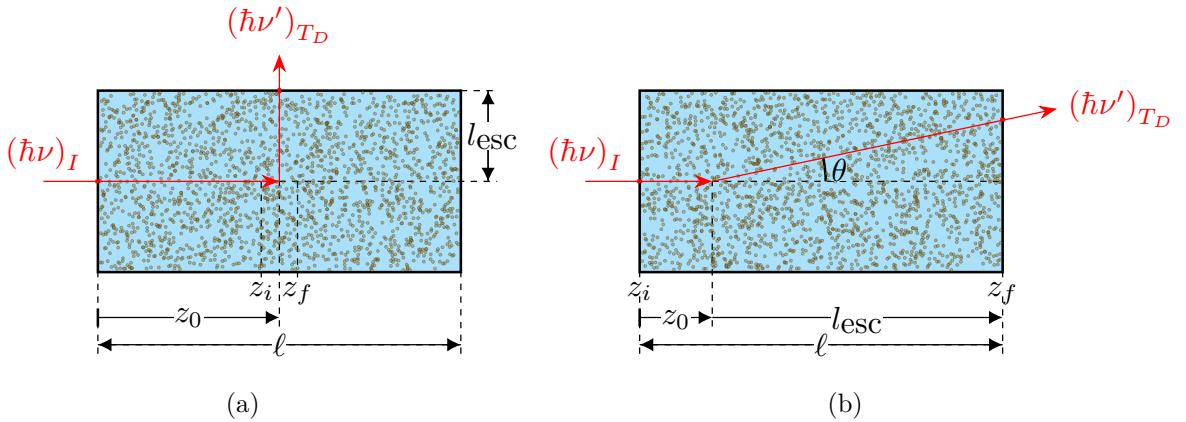


Figura 3.3 – Ilustração esquemática dos dois casos particulares de interesse que envolvem a detecção da transmissão difusa de primeiro espalhamento. Nas duas figuras, a região em ciano representa a célula do vapor atômico de espessura total ℓ (delimitada pelas linhas pretas sólidas), contendo átomos (pontos amarelos). Em ambos os cenários, um fóton incidente $(\hbar\nu)I$ penetra o vapor e é absorvido em uma profundidade z_0 (contida no intervalo de interesse $[z_i, z_f]$), sendo subsequentemente reemisido como um fóton $(\hbar\nu')_{TD}$. (a) Detecção a 90 graus: o fóton reemisido escapa lateralmente (em uma direção perpendicular à de incidência do feixe original, assumida aqui como o eixo z). A distância de escape l_{esc} relevante é a distância da posição de reemissão z_0 até a superfície lateral da célula. (b) Transmissão para frente: o fóton reemisido escapa através da face oposta à de entrada da célula ($z = \ell$), formando um ângulo θ com o eixo z (direção de incidência do feixe original). Neste diagrama, l_{esc} é esquematicamente representada como a distância horizontal de z_0 até a face de saída $z = \ell$, indicando a componente principal da distância a ser vencida para o escape frontal.

Fonte: Autoria própria.

Considerando as condições de contorno descritas, pode-se reescrever a Eq. (3.2.8) na seguinte forma

$$T_{D,1}(\nu) = \kappa(\nu) \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) e^{\kappa(\nu')R} \int_{\frac{\ell}{2}-z'}^{\frac{\ell}{2}+z'} dz_0 e^{-\kappa(\nu)z_0}.$$

Executando a integração, após manipulações matemáticas, obtém-se que

$$T_{D,1}(\nu) = e^{-\frac{\ell\kappa(\nu)}{2}} \left(e^{\kappa(\nu)z'} - e^{-\kappa(\nu)z'} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) e^{-\kappa(\nu')R} d\nu'.$$

(3.2.9)

Transmissão pela Janela de Saída

O segundo caso particular de interesse aborda a situação em que os fótons do primeiro espalhamento são detectados após atravessarem todo o comprimento ℓ da célula e emergirem através da superfície oposta àquela pela qual penetraram, conforme esquematizado na Figura 3.3b. Esta configuração corresponde à medição da transmissão difusa para frente.

Nesse cenário, a distância de escape $l_{\text{esc}}(z_0)$ na Eq. (3.2.8) representa a distância que o fóton reemittido em z_0 deve percorrer até alcançar a fronteira de saída $z = \ell$. Como se deseja determinar a transmissão total ao longo de todo o comprimento, considera-se $z_0 \in [0, \ell]$; e, diferentemente do caso a 90° , aqui $l_{\text{esc}}(z_0)$ depende explicitamente de z_0 , sendo dada pela relação $l_{\text{esc}}(z_0) = \ell - z_0$.

De acordo com as condições de contorno abordadas, pode-se então escrever a Eq. (3.2.8) para esta configuração como

$$T_{D,1}(\nu) = \kappa(\nu) \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) \int_0^{\ell} dz_0 e^{-\kappa(\nu)z_0 - \kappa(\nu')(\ell - z_0)},$$

que após reorganização dos termos, chega-se em

$$T_{D,1}(\nu) = \kappa(\nu) \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) e^{-\kappa(\nu')\ell} \int_0^{\ell} dz_0 e^{z_0(\kappa(\nu') - \kappa(\nu))}.$$

A integração direta resulta em

$$T_{D,1}(\nu) = \kappa(\nu) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) (e^{-\kappa(\nu)\ell} - e^{-\kappa(\nu')\ell})}{\kappa(\nu') - \kappa(\nu)} d\nu' \quad (3.2.10)$$

É fundamental observar que o integrando da Eq. (3.2.10) apresenta uma descontinuidade removível. No caso específico em que a frequência de emissão coincide com a de incidência ($\nu' = \nu$), o denominador se anula e a expressão adquire a forma indeterminada $\frac{0}{0}$. Para que a integral possa ser corretamente avaliada, o valor do integrando nesse ponto precisa ser determinado, o que é feito calculando-se o limite da expressão quando $\nu' \rightarrow \nu$ por meio da Regra de L'Hôpital⁽¹⁾. Nesse caso, a regra é aplicada apenas à fração que contém as exponenciais, uma vez que o termo $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}})$ é um fator contínuo. Sendo assim, a transmissão difusa do primeiro espalhamento é dada por⁽²⁾

$$T_{D,1}(\nu) = \kappa(\nu) \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) (e^{-\kappa(\nu)\ell} - e^{-\kappa(\nu')\ell})}{\kappa(\nu') - \kappa(\nu)} d\nu', & \text{para } \nu' \neq \nu, \\ \ell e^{-\kappa(\nu)\ell} \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}' | \nu, \hat{\mathbf{k}}) d\nu', & \text{para } \nu' = \nu. \end{cases} \quad (3.2.11)$$

⁽¹⁾ Ao aplicar a regra de L'Hôpital, garante-se a continuidade da função a ser integrada [150].

⁽²⁾ De acordo com a regra de L'Hôpital: $\lim_{\nu' \rightarrow \nu} \frac{e^{-\kappa(\nu)\ell} - e^{-\kappa(\nu')\ell}}{\kappa(\nu') - \kappa(\nu)} = \lim_{\nu' \rightarrow \nu} \frac{\frac{d}{d\nu'} (e^{-\kappa(\nu)\ell} - e^{-\kappa(\nu')\ell})}{\frac{d}{d\nu'} (\kappa(\nu') - \kappa(\nu))} = \lim_{\nu' \rightarrow \nu} \frac{\ell e^{-\kappa(\nu')\ell} \frac{d\kappa(\nu')}{d\nu'}}{\frac{d\kappa(\nu')}{d\nu'}} = \ell e^{-\kappa(\nu)\ell}$.

3.2.3 Múltiplos Espalhamento

Após o primeiro evento de espalhamento, os fótons que permanecem no meio podem sofrer sucessivas reabsorções e reemissões, caracterizando o regime de múltiplos espalhamentos. Nessa etapa, a trajetória individual dos fótons perde qualquer correlação com a frequência original do feixe incidente, sendo agora influenciada por uma sequência de redistribuições espectrais ao longo das interações. A contribuição desses eventos subsequentes para a transmissão difusa, denotada por $T_{D,M}(\nu)$, representa a fração de luz que consegue escapar do meio somente após sofrer dois ou mais espalhamentos. O cálculo dessa componente é estatisticamente complexo, pois descreve a propagação de fótons cuja trajetória é governada por essa dinâmica de reemissões já sem correlação com a frequência incidente.

3.2.3.1 Distribuição de Probabilidade de Tamanho de Passo

Nos regimes onde a radiação sofre múltiplos espalhamentos, a distribuição de probabilidade do tamanho de passo, $P(l)$, mantém a mesma forma funcional que no caso do primeiro espalhamento: se um fóton é emitido com frequência ν' , a probabilidade de ele percorrer uma distância l antes de ser reabsorvido é dada por $\kappa(\nu')e^{-\kappa(\nu')l}$. A distinção fundamental, no entanto, reside na natureza do espectro de emissão $\Theta(\nu')$, que, diferentemente da distribuição condicionada $\Theta_1(\nu', \hat{\mathbf{k}}'|\nu, \hat{\mathbf{k}})$ do primeiro espalhamento, deixa de depender diretamente da frequência ν do fóton incidente original. Devido a sucessivos efeitos de redistribuição espectral, causados por movimentos térmicos e/ou colisões, o espectro $\Theta(\nu')$ tende a evoluir para uma distribuição estacionária, refletindo as propriedades termodinâmicas do meio [6, 89, 91].

Apesar dessa diferença espectral, a determinação da densidade de probabilidade do tamanho de passo no regime de múltiplos espalhamentos, $P(l)$, segue uma formulação matemática análoga àquela utilizada no caso do primeiro espalhamento, conforme a Eq. (3.2.7). A função $P(l)$ é obtida a partir da média ponderada das distribuições exponenciais individuais $\kappa(\nu')e^{-\kappa(\nu')l}$, associadas à propagação de fótons emitidos com diferentes frequências ν' . O peso de cada termo é dado pela distribuição espectral de emissão $\Theta(\nu')$, que caracteriza o regime de

múltiplos espalhamentos. Assim, $P(l)$ é dada por

$$P(l) = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(\nu') \kappa(\nu') e^{-\kappa(\nu')l} d\nu'. \quad (3.2.12)$$

No regime de múltiplos espalhamentos, a Eq. (3.2.12) incorpora o espectro de emissão que se estabelece após um número suficientemente grande de interações, quando a memória da frequência do fóton originalmente incidente é progressivamente apagada [6, 89]. Em condições de redistribuição completa na frequência (CFR), por exemplo, $\Theta(\nu')$ pode coincidir com o perfil de absorção normalizado do vapor, $\Phi_A(\nu)$ [6, 90]. Vale destacar, contudo, que $\Theta(\nu')$ não é fixa desde o início do processo, mas evolui dinamicamente com o número de interações, à medida que os fótons perdem gradualmente a memória de sua frequência inicial [89, 91].

3.2.3.2 Evolução do Espectro de Emissão

Durante a caminhada aleatória de um fóton confinado no vapor, sua frequência pode ser alterada a cada evento de espalhamento, seja de forma parcial ou completa, conforme discutido ao longo deste capítulo. Como consequência direta dessas sucessivas variações em frequência, o espectro que descreve a distribuição das frequências dos fótons propagantes no meio não permanece estático, mas evolui à medida que eles acumulam um número n de espalhamentos, tendendo a convergir para uma forma estacionária após interações suficientes [89, 91]. Dessa forma, a distribuição de tamanho dos passos também depende do número de espalhamentos n , pois está diretamente relacionada ao espectro de emissão $\Theta_n(\nu)$ após cada evento, conforme indicado na Eq. (3.2.12).

Antes de iniciar a descrição formal da evolução do espectro de emissão, é importante destacar que, para os propósitos de se descrever a evolução do espectro global $\Theta_n(\nu)$ e a subsequente determinação da distribuição de tamanho de passo $P(l)$, os espectros de emissão dos fótons confinados são convenientemente caracterizados pela FRF já integrada sobre todas as direções de emissão e incidência, resultando na função $R(\nu', \nu)$, conforme discutido na Seção 2.3. Essa escolha se justifica pelos seguintes pontos:

- O interesse central desta análise recai sobre a evolução do conteúdo espectral da radiação, essencial para avaliar como a distribuição de tamanho de passo se modifica ao longo dos

múltiplos eventos de espalhamento. Como discutido anteriormente, em um meio isotrópico, o comprimento do passo de um fóton depende principalmente de sua frequência de emissão e não diretamente da direção em que foi emitido para a próxima absorção.

- Por definição, a função de redistribuição $R(\nu', \nu)$ já incorpora a média sobre os detalhes angulares do espalhamento e sobre a distribuição de velocidades dos átomos no vapor. Dessa forma, fornece diretamente a probabilidade efetiva da redistribuição de frequência de ν para ν' .

Logo, os detalhes angulares da emissão tornam-se secundários na descrição da evolução espectral global, permitindo o uso das funções $R(\nu', \nu)$ em vez de suas formas não integradas em ângulo.

Com o uso de $R(\nu', \nu)$ devidamente justificada, pode-se agora formalizar como o espetro de emissão dos fótons evolui após cada evento de espalhamento. Considere que, após n interações, os fótons que estão prestes a serem reemitidos para iniciar seu $(n + 1)$ -ésimo passo, possuem suas frequências distribuídas de acordo com o espetro $\Theta_n(\nu)$. Quando um fóton individual desta população, com frequência específica ν , é absorvido por um átomo e subsequentemente reemitido, sua frequência é alterada para uma nova frequência ν' . O novo espetro de emissão, $\Theta_{n+1}(\nu')$, que descreve os fótons após esta $(n + 1)$ -ésima reemissão, é, portanto, o resultado agregado de todas essas transições individuais de ν para ν' , originadas a partir da distribuição $\Theta_n(\nu)$.

A formalização matemática desse processo de agregação, que conduz à evolução do espetro de $\Theta_n(\nu)$ para $\Theta_{n+1}(\nu')$, baseia-se em como a frequência ν de um fóton absorvido se relaciona com sua nova frequência de emissão ν' . Conforme já estabelecido na seção 2.3, a FRF $R(\nu', \nu)$ descreve a probabilidade conjunta de um fóton ser absorvido em torno de ν e subsequentemente reemitido em torno de ν' . No entanto, quando se constrói o novo espetro $\Theta_{n+1}(\nu')$, o interesse recai na probabilidade de um fóton ser reemitido em ν' dado que ele foi efetivamente absorvido com frequência ν . Esta é precisamente uma probabilidade condicional, descrita por $R_{\text{cond}}(x'|x)$, expressa na Eq. (2.3.58).

Estabelecida a importância da probabilidade condicional de reemissão, a evolução do espetro global de emissão, de $\Theta_n(\nu)$ para $\Theta_{n+1}(\nu')$, pode ser formalmente construída. O novo

espectro $\Theta_{n+1}(\nu')$ é obtido integrando-se todas as contribuições dos fótons da distribuição $\Theta_n(\nu)$ que, após serem absorvidos na frequência ν , são reemittidos na frequência ν' segundo a probabilidade condicional $R_{\text{cond}}(\nu'|\nu)$. Essa abordagem resulta na relação iterativa

$$\Theta_{n+1}(\nu') = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_n(\nu) R_{\text{cond}}(\nu'|\nu) d\nu,$$

que, por meio da Eq. (2.3.58), pode ser escrita como

$$\Theta_{n+1}(\nu') = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_n(\nu) \frac{R(\nu', \nu)}{\Phi_A(\nu)} d\nu. \quad (3.2.13)$$

Este processo iterativo tipicamente se inicia com $\Theta_0(\nu)$ representando o espectro da fonte de excitação inicial. Nos casos idealizados em que essa fonte é considerada monocromática, $\Theta_0(\nu)$ assume a forma da função delta de Dirac [91]; já quando a fonte possui largura espectral não desprezível, $\Theta_0(\nu)$ adota a forma do perfil de Lorentz [89]. A cada iteração da Eq. (3.2.13), o espectro de emissão é atualizado, refletindo as sucessivas alterações de frequência impostas pelos processos de espalhamento e redistribuição. Após um número suficiente de eventos de espalhamento, o espectro $\Theta_n(\nu')$ pode convergir para uma distribuição estacionária, especialmente em condições próximas ao regime de CFR [89, 91]. A partir de cada espectro de emissão $\Theta_n(\nu')$ obtido, calcula-se a correspondente distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$ por meio da Eq. (3.2.12).

A Figura 3.4 ilustra a evolução progressiva do espectro de emissão $\Theta_n(x')$ para a linha D2 do Césio-133 no Cenário III (com colisões) em relação ao número de espalhamentos n . Os resultados são apresentados para dois tipos de perfis de incidência: um perfil delta de Dirac e um perfil Lorentziano com largura à meia altura de 1MHz. A curva amarela pontilhada presente em ambos os painéis representa o espectro de incidência inicial. As curvas mostram o comportamento do espectro para diferentes valores de $n = 1, 3, 7, 19, 50$ e 100 . As curvas foram construídas considerando uma temperatura do vapor de césio-133 de 100°C e utilizaram como base as matrizes de redistribuição de frequência apresentadas na Figura 2.7b. Observa-se que, apesar da diferença nos perfis de incidência, os espectros de emissão resultantes são muito semelhantes, indicando que, sob estas condições, a forma do perfil de incidência tem impacto limitado sobre a redistribuição espectral promovida pelos múltiplos espalhamentos colisionais.

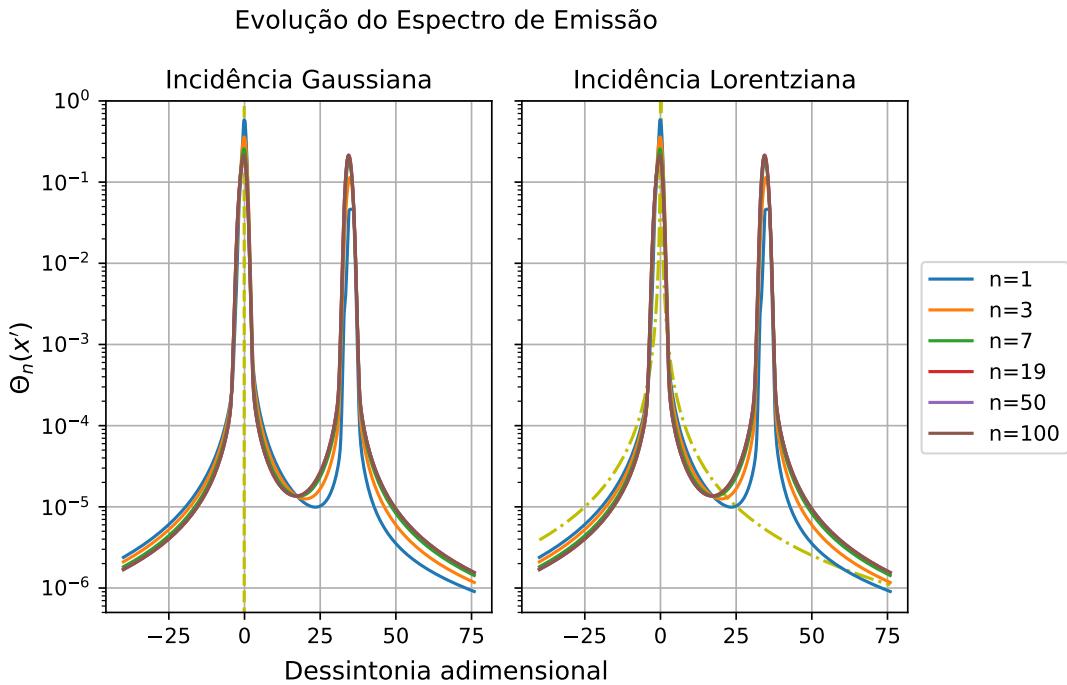


Figura 3.4 – Evolução do espectro de emissão $\Theta_n(x')$ em função da frequência adimensional de emissão x' para diferentes números de espalhamentos $n = 1, 3, 7, 19, 50$, e 100 , considerando a estrutura hiperfina do Césio-133 no Cenário III (com colisões). Os dois painéis comparam os resultados obtidos para perfis de incidência distintos: Gaussiano (à esquerda) e Lorentziano com largura à meia altura de 1MHz (à direita), representadas pelas curvas amarela pontilhada em cada gráfico. As construções foram realizadas a uma temperatura de 100°C , com base nas matrizes redistribuição de frequência apresentadas na Figura 2.7b.

Fonte: Autoria própria.

Na Figura 3.5, apresenta-se a evolução do espectro de emissão $\Theta_n(x')$, representado na Figura 3.5a, e da densidade de probabilidade do tamanho de salto $P_n(r_l)$, mostrada na Figura 3.5b, em função do número de espalhamentos n , para os Cenários II (sem colisões, gráficos à esquerda) e III (com colisões, gráficos à direita). A distribuição $P_n(r_l)$ foi obtida com base nos espectros $\Theta_n(x')$. Para construção dessas curvas, foi considerada a estrutura hiperfina da linha D2 do Césio-133. As simulações adotaram incidência espectral centrada no máximo do coeficiente de absorção da transição fundamental $F = 4$, a uma temperatura de 100°C , utilizando as matrizes de redistribuição de frequência apresentadas na Figura 2.7b.

A Figura 3.5a apresenta a evolução do espectro de emissão em função da frequência adimensional de emissão x' dos cenários II e III. No Cenário II, Figura 3.5a à esquerda, o espectro de emissão para $n = 1$ apresenta dois picos principais bem definidos, localizados nas

ressonâncias das transições hiperfinas do nível fundamental da linha D2 do Césio-133, com uma queda abrupta na probabilidade de emissão fora dessas regiões. Isso indica que a emissão está fortemente concentrada nas regiões de ressonância do espectro, com uma chance muito pequena de ocorrer nas asas (regiões de frequência distantes do centro da ressonância). À medida que n aumenta, surgem oscilações espectrais nas regiões periféricas (asas), cujas intensidades crescem progressivamente.

Essas oscilações são uma assinatura da estrutura fina e hiperfinas, que para a linha D2 do átomo de césio-133, possui dois estados hiperfinos fundamentais ($F = 3$ e $F = 4$). O mecanismo origina-se da possibilidade de um fóton, absorvido a partir de um estado fundamental, ser reemittido em uma transição que o leve ao outro estado fundamental. A cada novo espalhamento, picos adicionais são formados no espectro, espaçados pela diferença de frequência entre os níveis fundamentais, criando a estrutura oscilatória observada nas asas. O pico central ($x' \approx 0$) corresponde aos fótons absorvidos a partir do estado fundamental $F = 4$ que decaem (são emitido) de volta para o mesmo estado. O pico proeminente à direita ($x' \approx 32$) é formado por fótons absorvidos a partir do estado $F = 4$ que decaem para o estado $F = 3$. Inversamente, o pico de menor intensidade à esquerda ($x' \approx -32$) é resultado de um processo menos provável: átomos que estão no estado $F = 3$ podem absorver a luz, que para eles está fora de ressonância, e subsequentemente decair para o estado $F = 4$. À medida que n aumenta, esse processo de troca entre os níveis fundamentais se repete, gerando novos picos espaçados pela diferença de frequência entre os estados, o que cria a estrutura oscilatória nas asas. Além disso, com um número suficientemente alto de espalhamentos, a redistribuição espectral se torna mais completa e o espectro tende à forma de um perfil Lorentziano. Nesse cenário, a probabilidade de emissão nas asas aumenta gradualmente com n , refletindo a crescente ocorrência de fótons emitidos em frequências menos absorvíveis pelo meio.

No Cenário III (com colisões), Figura 3.5a à direita, a emissão assume desde o início um perfil mais suave, sem oscilações espectrais. Já nos primeiros espalhamentos, observa-se um espectro contínuo entre os picos principais. Além disso, a emissão se estende de forma mais pronunciada para as asas espectrais em comparação com o Cenário II, onde essas regiões

apresentam estrutura oscilatória e decaem mais rapidamente. Isso indica que, no Cenário III, há uma maior probabilidade de emissão em frequências afastadas da ressonância, ou seja, nas asas do espectro, mesmo nos primeiros eventos de espalhamento. Observa-se também que, à medida que n aumenta, o espectro do Cenário III se estabiliza rapidamente, atingindo uma forma estacionária com relativamente poucos eventos. Apesar da maior chance de emissão nas asas no Cenário III, em ambos os cenários a frequência da radiação reemisita tende a permanecer concentrada nas proximidades dos centros das ressonâncias associadas às transições fundamentais $F = 4$ e $F = 3$.

A Figura 3.5b apresenta a evolução da distribuição de probabilidade do tamanho de passo, $P_n(r_l)$, em função da distância adimensional r_l , para os Cenários II (sem colisões) e III (com colisões). A distância adimensional r_l descreve fisicamente a profundidade óptica de um meio, quantificando o quanto ele atenua a radiação ao longo de um percurso ℓ [92]. Matematicamente, ela está para o comprimento do meio ℓ , assim como o coeficiente de absorção normalizado $\Phi_A(\nu)$ está para o coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$, ou seja, $r_l = \ell \frac{\kappa(\nu)}{\Phi_A(\nu)}$. Dessa forma, $P_n(r_l)$ reflete a estatística dos comprimentos de salto resultantes do processo de redistribuição espectral. Os resultados são apresentados para diferentes valores de espalhamentos n . Em ambos os cenários, observa-se que a probabilidade de ocorrência de passos muito curtos (distâncias adimensionais próximas a 1) é significativamente maior do que a de passos longos (distâncias adimensionais próximas a 10^5). No entanto, o comportamento da distribuição com o aumento de n difere entre os dois casos. No Cenário II, Figura 3.5b à esquerda, $P_n(r_l)$ sofre alterações consideráveis com n : nos primeiros espalhamentos, a probabilidade de passos longos é reduzida (devido a queda abrupta, truncagem, em frequência nos primeiros espalhamentos), mas aumenta progressivamente à medida que as oscilações do espectro de emissão começam a convergir para um perfil Lorentziano, o que implica maior probabilidade de emissão nas asas da linha e, consequentemente, maior chance de saltos longos.

No Cenário III, Figura 3.5b à direita, por outro lado, as distribuições de $P_n(r_l)$ variam muito pouco com n . Devido à presença de colisões, a redistribuição de frequência é eficiente desde os primeiros espalhamentos, o que leva a uma rápida perda de memória da condição es-

pectral inicial. Como resultado, o espectro de emissão e a distribuição de tamanhos de passo se estabilizam rapidamente, atingindo uma forma praticamente estacionária após poucos eventos. Além disso, no Cenário III, devido à formação de asas Lorentzianas no espectro de emissão, $P_n(r_l)$ deveria produzir uma cauda que decai lentamente e sem um corte abrupto (sem truncagem). Apesar disso, não é o que se observa na Figura 3.5b à direita. A truncagem observada é, na verdade, consequência das limitações do cálculo numérico, que ocorre quando os valores de probabilidade se tornam menores que a precisão computacional ou quando o limite de integração numérica é atingido. O mesmo efeito passa a dominar o Cenário II quando o número de espalhamentos se torna grande o suficiente a ponto do espectro de emissão convergir para um perfil com asas Lorentzianas. Apesar disso, nos primeiros espalhamentos da PFR, a truncagem é um efeito físico intrínseco ao processo. Nesse caso, as asas dos espectros de emissão são naturalmente cortadas pela natureza da redistribuição parcial, o que impõe um limite físico ao comprimento dos saltos.

3.2.3.3 Truncagem na Amplitude dos Passos dos Sistemas Finitos

A análise teórica da propagação de fôtons em meios gasosos ressonantes costuma idealizar sistemas de dimensões infinitas, nos quais os fôtons podem realizar passos de comprimento arbitrário. No entanto, em experimentos reais, a finitude do sistema impõe um limite natural: fôtons que se propagam para fora dos limites físicos da célula de vapor escapam antes de sofrer nova interação, sendo assim excluídos do processo de transporte radiativo. Esse fenômeno resulta em uma truncagem da distribuição dos tamanhos de passo efetivamente observados, sobretudo afetando os fôtons emitidos nas asas do perfil espectral, que, por apresentarem alcance médio mais longo, seriam os principais responsáveis pelos saltos mais longos.

Essa alteração estatística induzida pela finitude do sistema apresenta-se especialmente relevante na caracterização do transporte radiativo. Em nossas investigações, observamos de forma inédita como o efeito de escape pelas bordas do meio impõe uma truncagem sistemática nas distribuições de frequência que leva a uma truncagem na distribuição de tamanho de passo, uma limitação ausente nos modelos ideais infinitos. Essa constatação representa o primeiro resultado central desta tese e deu origem a uma publicação científica dedicada ao tema. Ao

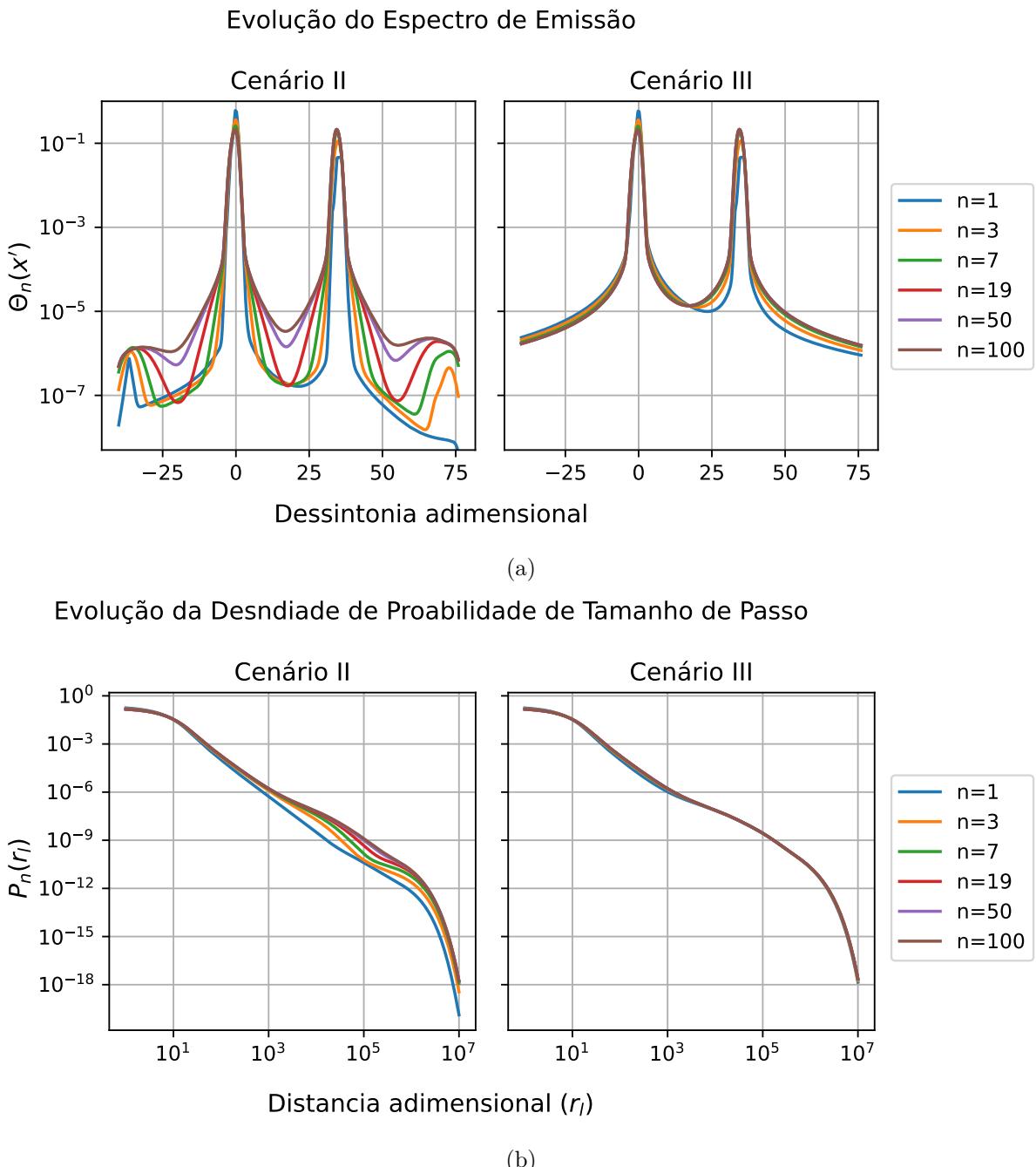


Figura 3.5 – Evolução do espectro de emissão e da distribuição de probabilidade do tamanho de salto com o número de espalhamentos n para o Césio-133 em sua linha D2. **(a)** Evolução do espectro de emissão $\Theta_n(x')$ em função da frequência adimensional x' . **(b)** Evolução da distribuição de probabilidade de tamanho de passo $P_n(r_l)$ em função da distância adimensional r_l . Ambos os painéis comparam os Cenários II (sem colisões, à esquerda) e III (com colisões, à direita), para $n = 1, 3, 7, 19$ e 100 espalhamentos. As curvas foram construídas considerando incidência espectral centrada no máximo do coeficiente de absorção da transição fundamental $F = 4$ da linha D2 do Césio-133. Os resultados foram obtidos com base nas matrizes de redistribuição de frequência apresentadas na Figura 2.7b.

Fonte: Autoria própria.

incorporar explicitamente esse mecanismo em nossa modelagem, fornecemos uma descrição mais realista do transporte de fótons em meios confinados, estabelecendo um elo fundamental entre formulações teóricas e sistemas experimentais reais.

Para contabilizar este efeito, modificamos a regra de recorrência utilizada para calcular o espectro de emissão $\Theta_n(x')$ após n eventos de espalhamento, expressa na Eq. (3.2.13), introduzindo o fator $[1 - T(\nu)]$. Nesse caso, a expressão de recorrência foi reescrita como

$$\Theta_{n+1}(\nu') = \int_{-\infty}^{\infty} [1 - T(\nu)] \Theta_n(\nu') \frac{R(\nu', \nu)}{\phi(\nu)} d\nu, \quad (3.2.14)$$

onde $T(\nu)$ representa a transmissão balística⁽³⁾ de um fóton através da amostra, dada pela Lei de Beer-Lambert, Eq. (2.1.22). O fator complementar $[1 - T(\nu)]$ corresponde, portanto, à fração de fótons emitidos no evento de espalhamento anterior que permanecem confinados no sistema e, portanto, têm chance de sofrer nova interação. São esses fótons que contribuem para a formação do espectro $\Theta_{n+1}(\nu')$ no $(n + 1)$ -ésimo evento de espalhamento.

A multiplicação do espectro do passo anterior, $\Theta_n(\nu)$, pelo fator $[1 - T(\nu)]$ antes da integração com a função de redistribuição $R_{\text{cond}}(\nu', \nu)$, tem o efeito de remover da consideração os fótons com alta probabilidade de escape. Dessa forma, a teoria simula diretamente o processo de truncagem: quanto maior a chance de um fóton escapar balisticamente ($T(\nu)$ elevado), menor sua contribuição para os espalhamentos subsequentes ($[1 - T(\nu)]$ reduzido). O fator $[1 - T(\nu)]$ quantifica, portanto, a fração dos fótons emitidos no n -ésimo evento de espalhamento que permanecem confinados e seguem participando do transporte radiativo dentro do vapor. Em um sistema idealmente infinito, $T(\nu) = 0$, e o fator se reduz a 1, recuperando o caso sem truncagem. A escolha de $T(\nu)$ com base na dimensão total do sistema é justificada pelo *Princípio do Salto Único Grande* (*Single-Big-Jump Principle*, em inglês), segundo o qual a excitação tende a permanecer próxima de sua origem até que um salto de magnitude comparável ao tamanho do sistema leve ao escape do fóton [151].

O impacto da introdução do fator $[1 - T(\nu)]$ sobre o espectro de emissão varia de acordo com o regime de redistribuição de frequência. No cenário sem colisões (cenário II), a finitude

⁽³⁾Trata-se da probabilidade de um fóton, com frequência ν , atravessar toda a extensão ℓ do meio (ou seu tamanho adimensional $r_l = N \frac{\sigma(0)}{\phi(0)} L$) sem sofrer espalhamento.

do sistema impõe um corte mais acentuado nas frequências emitidas: fótons que seriam gerados nas asas espectrais no passo n têm maior probabilidade de escapar do vapor antes de sofrer nova interação e, portanto, deixam de contribuir para a formação do espectro no passo $(n + 1)$. Em contraste, no cenário com colisões (cenário III), o espectro é pouco sensível à finitude do sistema, já que a frequência de emissão no referencial do átomo independe da frequência do fóton incidente, devido a perda de “memória” do fóton.

A forma como ocorre a truncagem na distribuição de tamanho de passo $P(r_l)$ difere fundamentalmente entre os cenários II e III. No cenário II, a truncagem em $P(r_l)$ é uma consequência direta da alteração no espectro de emissão $\Theta_n(\nu')$, cujas asas são suprimidas pelo fator de escape $[1 - T(\nu)]$. Como os fótons nas regiões espectrais periféricas são os principais responsáveis por saltos longos, essa supressão desloca o ponto de corte de $P(r_l)$ para valores menores de r_l , reduzindo mais intensamente a ocorrência de grandes saltos do que o faria o afilamento natural do espectro em um sistema infinito. No cenário III, por outro lado, a forma do espectro $\Theta_n(\nu')$ permanece praticamente inalterada mesmo em sistemas finitos, pois a completa redistribuição de frequência no referencial atômico torna a emissão independente da frequência do evento anterior. Contudo, o fator $[1 - T(\nu)]$ ainda reduz a amplitude total do espectro de emissão, embora não altere de forma perceptível o seu perfil. Além disso, a distribuição $P(r_l)$ continua apresentando truncamento, mas essa característica decorre, mais uma vez, de limitações computacionais e numéricas, e não de efeitos físicos intrínsecos ao sistema.

A Figura 3.6 ilustra a evolução do espectro de emissão e da distribuição de tamanho de passo quando o fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$ é incorporado aos cálculos. Os resultados foram obtidos sob os mesmos parâmetros da Figura 3.5, permitindo uma comparação direta do impacto desse fator. No Cenário II (sem colisões), a inclusão do fator $[1 - T(\nu)]$ provoca alterações substanciais. Observa-se uma queda acentuada na probabilidade de emissão nas asas do espectro (Figura 3.6a, à esquerda), mesmo para valores elevados de espalhamentos n . Essa supressão da emissão em frequências afastadas da ressonância se reflete diretamente na distribuição de tamanho de passo (Figura 3.6b, à esquerda), com uma redução significativa na ocorrência de passos longos. Como consequência, a cauda da distribuição $P_n(r_l)$ decai de forma mais rápida. Além

disso, observa-se o surgimento de picos laterais em regiões distantes das principais ressonâncias. Embora pouco expressivos em comparação ao centro de linha, esses picos ilustram a complexidade adicional introduzida pela estrutura hiperfina. Ainda assim, as maiores probabilidades de emissão permanecem concentradas nas frequências correspondentes às principais transições atômicas ($F = 3$ e $F = 4$). Outro efeito notável é a rápida convergência tanto do espectro de emissão quanto da distribuição de tamanho de passo: o estado estacionário é atingido com um número significativamente menor de espalhamentos em comparação ao caso sem o fator de truncagem. Em contraste, o Cenário III (com colisões) apresenta uma sensibilidade muito menor à introdução do fator $[1 - T(\nu)]$, como era esperado. Nesse caso, a completa redistribuição de frequência promovida pelas colisões já atua como um mecanismo eficiente de estabilização espectral. Como resultado, a evolução do espectro de emissão e da distribuição $P_n(r_l)$ se mantém praticamente inalterada, refletindo a menor dependência da trajetória espectral anterior dos fôtons nesse regime.

Em suma, a truncagem devido ao tamanho finito do sistema é uma realidade inescapável em experimentos. O fator $[1 - T(x)]$ fornece uma maneira fisicamente fundamentada de contabilizar a perda de fôtons pelas fronteiras, sendo seu impacto na evolução do espectro da luz espalhada mais acentuado em regimes de espalhamento que preservam a memória de frequência (cenário II) do que em regimes onde a frequência é completamente redistribuída a cada interação (cenário III).

3.2.3.4 Transmissão Difusa Total

Embora a distribuição de probabilidade do tamanho de passo $P(l)$ seja um elemento fundamental para descrever a propagação dos fôtons em múltiplos espalhamentos, o cálculo da transmissão difusa total dos múltiplos espalhamentos, $T_{D,M}$, é consideravelmente mais complexo do que o do espalhamento único, $T_{D,1}$. Isso ocorre porque a trajetória dos fôtons envolve uma sequência de passos interdependentes e aleatórios (caminhada aleatória), dificultando a obtenção de uma expressão analítica simples para $T_{D,M}$. Contudo, sob certas condições e aproximações, é possível estimar a transmissão difusa total da janela de saída.

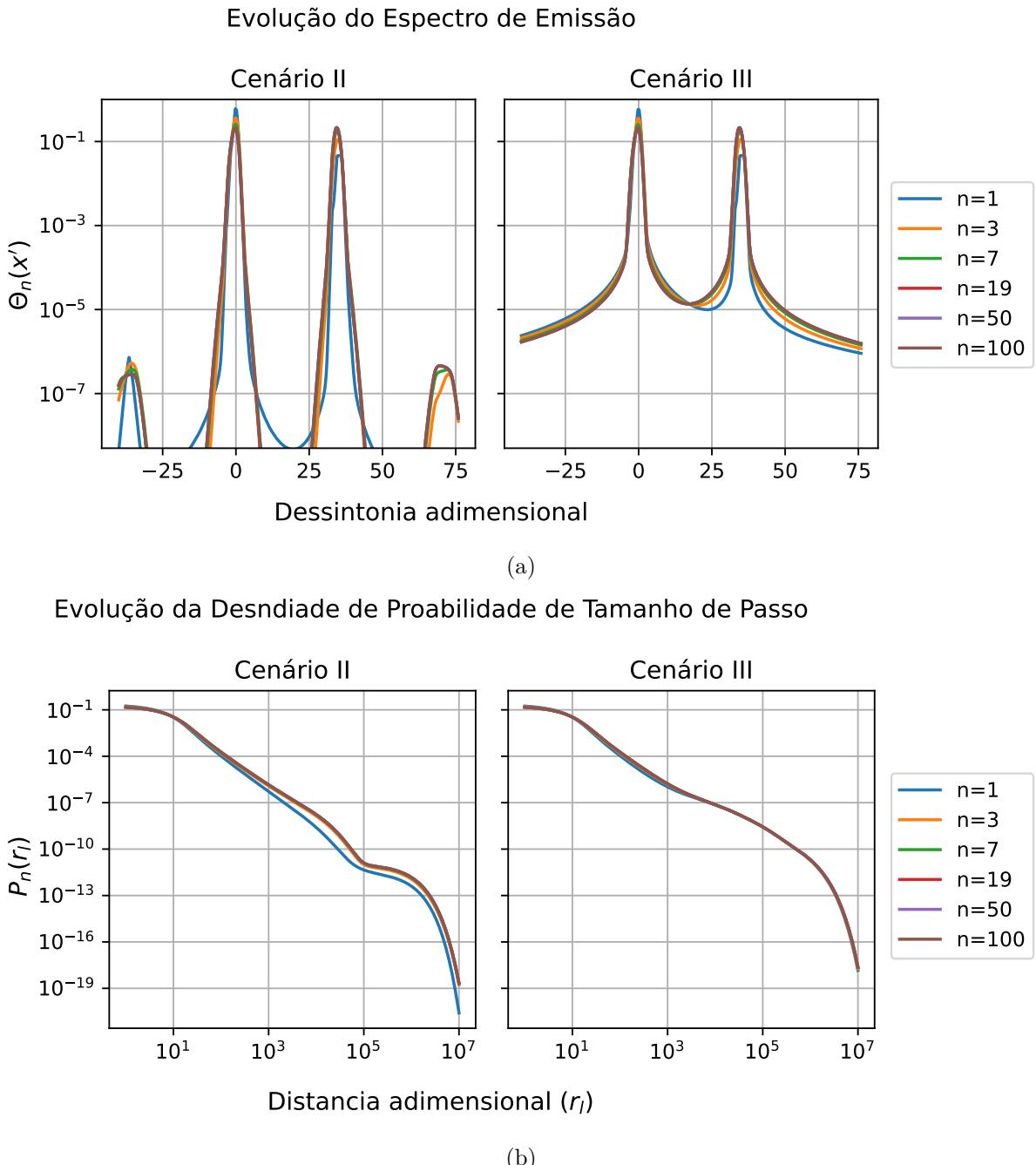


Figura 3.6 – Evolução do espectro de emissão e da distribuição de probabilidade do tamanho de passo com o número de espalhamentos n para o Césio-133 em sua linha D2, considerando o fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$ devido ao tamanho finito do sistema. **(a)** Evolução do espectro de emissão $\Theta_n(x')$ em função da frequência adimensional x' . **(b)** Evolução da distribuição de probabilidade de tamanho de passo $P_n(r_l)$ em função da opacidade r_l . Ambos os painéis comparam os Cenários II (sem colisões, à esquerda) e III (com colisões, à direita), para $n = 1, 3, 7, 19, 50$ e 100 espalhamentos. As curvas foram construídas considerando incidência espectral centrada no máximo do coeficiente de absorção da transição fundamental $F = 4$ da linha D2 do Césio-133 e os mesmos parâmetros da Figura 3.5, com a inclusão do fator $[1 - T(\nu)]$.

Fonte: Autoria própria.

Transmissão pela Janela de Saída

Levando em conta as variáveis já estabelecidas, a transmissão difusa total T_D de um fóton que inicia sua caminhada aleatória na posição z_0 dentro de um vapor atômico de comprimento ℓ , em que z_0 necessariamente está situado no interior do vapor, e que, após executar a caminhada aleatória, emerge pela janela de saída oposta à incidência, como apresentado na Figura 3.2, é dada por [62, 91]:

$$T_D = \left(\frac{z_0}{\ell} \right)^{\frac{\alpha}{2}} \frac{F\left(\frac{\alpha}{2}, 1 - \frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2} + 1, \frac{z_0}{\ell}\right)}{\frac{\alpha}{2} B\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}\right)}, \quad (3.2.15)$$

onde α é o parâmetro que caracteriza a distribuição do tamanho dos passos da caminhada aleatória, $F(a, b, c, d)$ denota a função hipergeométrica e $B(a, b)$ representa a função Beta de Euler. É importante ressaltar que a validade desta equação está condicionada a distribuição de tamanhos de passo decair assintoticamente como $P(\ell) \propto \ell^{-1-\alpha}$ para $\ell \rightarrow \infty$.

Uma consequência importante dessa expressão surge no limite em que o ponto inicial z_0 está muito mais próximo da entrada do que da saída do meio, ou seja, para $\frac{z_0}{\ell} \ll 1$. Nesse caso, a Eq. (3.2.15) reduz-se a uma lei de potência do tipo

$$T_D \propto \left(\frac{z_0}{\ell} \right)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (3.2.16)$$

o que é particularmente relevante, pois permite determinar experimentalmente o parâmetro α e, com isso, caracterizar o regime de transporte envolvido a partir da dependência da transmissão difusa total com a posição inicial normalizada.

3.3 Voos de Lévy

A propagação de fótons em meios espalhadores pode ocorrer sob diferentes regimes de transporte, determinados pelas propriedades ópticas do meio e pela estatística dos saltos realizados [6]. Essa classificação é fundamental para compreender como a luz se espalha, se aprisiona ou se propaga livremente. Nos vapores atômicos aquecidos, em particular, o transporte radiativo frequentemente se manifesta em regimes não convencionais, nos quais os fótons realizam passos com distribuições de cauda pesada, características dos chamados voos de Lévy [3, 6, 89, 91]. Esse comportamento anômalo resulta em propriedades de transmissão e espalhamento significativa-

mente distintas da difusão clássica, tornando essencial a compreensão dos diferentes regimes de transporte que esses sistemas podem assumir.

3.3.1 Regimes de Transporte

Diferentes regimes de transporte podem ser identificados a partir do comportamento estatístico da propagação da luz no meio. Uma métrica amplamente empregada para essa caracterização é a evolução temporal do deslocamento quadrático médio dos fótons, expressa por uma relação de proporcionalidade do tipo [61]:

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t^\gamma, \quad (3.3.17)$$

onde $\langle r^2(t) \rangle$ é o valor esperado do quadrado da distância percorrida após um tempo t e o expoente γ caracteriza o regime de transporte. O valor de γ reflete diretamente a natureza estatística da propagação no meio e permite classificar distintos regimes de transporte [152, 153]:

- Difusivo ($\gamma = 1$): O regime difusivo clássico é caracterizado por múltiplos eventos de espalhamento e uma caminhada aleatória, onde o deslocamento quadrático médio linearmente proporcional ao tempo.
- Superdifusivo ($1 < \gamma < 2$): Assim como o regime difusivo, o superdifusivo é caracterizado por múltiplos espalhamentos, mas a estatística dos passos favorece eventos raros de elevadas amplitudes, o que implica em uma propagação mais rápida que a difusiva.
- Balístico ($\gamma = 2$): Os eventos de espalhamentos são pouquíssimos (na média) ou nenhum, resultando em trajetórias retilíneas. Este caso limite ocorre quando o caminho livre médio é muito maior que as dimensões do sistema, resultando no comportamento quadrático característico do movimento livre.

Outra métrica útil para distinguir os diferentes regimes de transporte é o comportamento assintótico da distribuição de probabilidades dos comprimentos dos passos $P(r)$, que descreve a probabilidade de um fóton percorrer uma distância r entre dois eventos sucessivos de interação. A distribuição de probabilidades dos comprimentos dos passos nesse limite pode ser descrita por

uma lei de potência da forma [92, 153]:

$$P(r) \propto r^{-1-\alpha}, \quad (3.3.18)$$

onde o parâmetro α caracteriza o regime de transporte. No regime difusivo, com $\alpha \geq 2$, a cauda da distribuição $P(r)$ decai rapidamente, o que implica que a maioria dos passos tem comprimento próximo à média. Isso garante a convergência da variância e leva a uma propagação gaussiana ao longo do tempo [154]. Em contraste, nos regimes superdifusivos, com $0 < \alpha < 2$, a distribuição apresenta uma cauda pesada, permitindo a ocorrência de passos longos com probabilidades finitas [154]. Esses eventos raros, mas significativos, aceleram a dispersão da luz no meio, fazendo com que o deslocamento quadrático médio cresça mais rapidamente do que no caso difusivo. Tal comportamento é característico de sistemas com regiões de baixa absorção ou com grandes flutuações espaciais nas propriedades ópticas [87]. Um exemplo notável ocorre na incidência de luz ressonante em vapores atômicos alcalinos homogêneos, onde a distribuição dos passos segue uma lei de potência e o regime de transporte é descrito por voos de Lévy [89]. No regime balístico, por sua vez, praticamente não há interações com o meio, de modo que os fôtons seguem trajetórias retilíneas e não realizam uma caminhada aleatória. Como não há sequência de passos a ser descrita, não se define uma distribuição de tamanho de passo $P(r)$ nesse regime [155].

Em vapores atômicos homogêneos, a absorção da radiação ocorre predominantemente em uma faixa espectral estreita, centrada na frequência de ressonância [6, 113, 138]. Além disso, como tratado na seção anterior, observa-se que existe uma chance não desprezível de que a frequência do fóton emitido se localize nas asas do espectro⁽⁴⁾, possibilitando a ocorrência de passos longos durante a caminhada aleatória dos fôtons [90]. Essa alternância entre passos curtos e, ocasionalmente, muito longos, evidencia um aspecto intrigante da dinâmica radiativa nesses meios: embora a maioria das interações resulte em deslocamentos reduzidos, típicos da difusão clássica, eventos raros de espalhamento a longas distâncias exercem influência desproporcional sobre o transporte global [3, 90]. Esse regime, no qual coexistem escalas de comprimento de passo

⁽⁴⁾Apesar de a emissão continuar sendo muito mais provável nas proximidades da ressonância.

significativas, caracteriza o transporte superdifusivo, adequadamente descrito pelo formalismo dos voos de Lévy [61].

3.3.2 Regime Difusivo

A fim de contextualizar o transporte superdifusivo observado em vapores atômicos, é instrutivo avaliar primeiro o regime difusivo clássico. Este surge como consequência direta do Teorema Central do Limite (TCL) aplicado a caminhadas aleatórias com distribuições de passo de variância finita, e serve como base teórica para entender o comportamento padrão da propagação radiativa em meios dispersivos.

3.3.2.1 Teorema Central do Limite (TCL)

O TCL ocupa posição central na teoria da probabilidade, explicando a frequente ocorrência da distribuição Gaussiana em diversos contextos [156]. Em essência, ele descreve como a soma ou a média de um conjunto de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas tende a uma distribuição normal à medida que o número dessas variáveis cresce [156].

Considere um número natural n e um conjunto de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas x_1, x_2, \dots, x_n , provenientes da mesma distribuição de probabilidade. Supondo que essa distribuição tenha valor esperado $\langle x \rangle$ bem definido e variância finita σ_x^2 , a média amostral é dada por

$$\text{Média}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i.$$

O TCL postula que, à medida que n aumenta, a distribuição da média $\text{Média}(x)$ converge para uma distribuição normal [156]. De forma mais precisa, a variável padronizada

$$Z_n = \sqrt{n}(\text{Média}(x) - \langle x \rangle)$$

converge para uma normal com média zero e desvio padrão σ_x , cuja densidade de probabilidade é

$$f_Z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_x^2}\right),$$

onde $f_Z(z)$ indica a densidade de probabilidade de Z em torno de z , ou seja, para um pequeno intervalo $[z, z + dz]$, a probabilidade de Z estar nesse intervalo é aproximadamente $f_Z(z)dz$.

A força do TCL reside em sua generalidade: ele vale independentemente da forma da distribuição original dos x_i , desde que as condições de independência, distribuição idêntica e variância finita sejam atendidas [157]. Essa propriedade explica a presença generalizada da distribuição normal na modelagem de fenômenos naturais, sobretudo em processos que envolvem a soma de muitos pequenos efeitos aleatórios, como na difusão browniana [158]. Entretanto, quando a condição de variância finita não é satisfeita, o comportamento do processo pode se afastar do regime difusivo clássico. Nesses casos, surgem distribuições com caudas pesadas, como aquelas associadas aos voos de Lévy, que se caracterizam por saltos longos e deslocamentos esporádicos de grande magnitude [159]. Assim, o TCL e o regime difusivo representam uma classe particular de processos estocásticos, enquanto os voos de Lévy ampliam essa visão, permitindo modelar movimentos anômalos observados em diversos sistemas físicos e biológicos [159].

3.3.2.2 Movimento Difusivo

Do ponto de vista físico, a evolução temporal da densidade de probabilidade $P(z, t)$, que representa a probabilidade de encontrar uma partícula na posição z no instante t , é governada pela equação de difusão unidimensional [153]:

$$\frac{\partial P(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(z, t)}{\partial z^2},$$

onde D é o coeficiente de difusão. Para uma condição inicial concentrada em um ponto (como uma delta de Dirac), a solução dessa equação no regime difusivo é uma distribuição Gaussiana centrada na origem. Esse comportamento é esperado, pois o movimento difusivo resulta da soma de muitos pequenos deslocamentos aleatórios e independentes, cenário clássico descrito pelo TCL. Matematicamente, isso significa que

$$P(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{z^2}{4Dt}\right).$$

Como discutido no início desta seção, o segundo momento $\langle z^2(t) \rangle$ é uma métrica fundamental para caracterizar a dispersão estatística. Para a distribuição acima, esse momento é calculado como:

$$\langle z^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} z^2 P(z, t) dz = 2Dt. \quad (3.3.19)$$

Além disso, o valor esperado da posição é

$$\langle z(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} z P(z, t) dz = 0,$$

refletindo a simetria da distribuição em torno da origem. Assim, a variância da posição pode ser expressa como:

$$\text{Var}(z) = \langle z^2(t) \rangle - \langle z(t) \rangle^2 = 2Dt. \quad (3.3.20)$$

A partir da Eq. (3.3.19), confirma-se que o deslocamento quadrático médio cresce linearmente com o tempo, ou seja, $\langle z^2(t) \rangle \propto t$. Isso implica que o expoente temporal γ , definido pela relação geral $\langle z^2(t) \rangle \propto t^\gamma$, é igual a 1.

3.3.3 Fundamentos Estatísticos dos Voos de Lévy

Os Voos de Lévy constituem uma classe de processos estocásticos caracterizados por distribuições de probabilidade com “caudas pesadas” para os tamanhos dos passos [154]. Isso significa que, embora a maioria dos passos individuais seja curta, existe uma probabilidade não desprezível de ocorrência de saltos longos. São justamente esses saltos, raros porém significativos, que dominam o comportamento estatístico do sistema, levando a um regime de transporte superdifusivo [62, 63].

A descrição dos Voos de Lévy está diretamente relacionada às distribuições estáveis de Lévy, que generalizam a distribuição Gaussiana clássica [154]. O parâmetro central dessas distribuições é o índice de estabilidade α , também conhecido como índice de cauda [160]. Esse parâmetro controla o comportamento assintótico da cauda da distribuição de probabilidade dos tamanhos dos passos, conforme a lei de potência expressa na Eq. (3.3.18), e está restrito ao intervalo $\alpha \in (0, 2]$. O caso $\alpha = 2$ corresponde à distribuição Gaussiana, enquanto os valores $0 < \alpha < 2$ descrevem os casos não Gaussianos [63, 160].

Diferentemente do movimento difusivo clássico, em que o TCL se aplica, os Voos de Lévy envolvem distribuições com variância divergente, o que inviabiliza a aplicação do TCL tradicional [152]. Nesses casos, a descrição estatística recorre ao Teorema Central do Limite Generalizado, o qual leva a distribuições estáveis de Lévy [62]. Para esses processos, a escala

característica da posição da partícula evolui conforme $z(t) \propto t^{1/\alpha}$ [161], o que implica:

$$\langle z^2(t) \rangle \propto (t^{1/\alpha})^2 = t^{2/\alpha}.$$

A partir da Eq. (3.3.17), conclui-se que:

$$\gamma = \frac{2}{\alpha}.$$

Como os Voos de Lévy estão definidos para $0 < \alpha < 2$, essa relação permite analisar como diferentes valores de α influenciam o regime de transporte [161]:

- $1 < \alpha < 2$: A variância dos tamanhos dos passos torna-se infinita, embora o valor médio absoluto permaneça finito. A maioria dos deslocamentos é composta por passos moderados, mas saltos longos ocasionais têm impacto estatístico relevante. Assim, o quadrado médio dos deslocamentos diverge ($\langle z^2 \rangle \rightarrow \infty$), inviabilizando a aplicação do TCL e evidenciando a predominância estatística dos grandes saltos.
- $0 < \alpha \leq 1$: Nesse intervalo, até mesmo o valor médio dos deslocamentos é indefinido, refletindo a dominância de eventos extremamente longos. O transporte torna-se altamente irregular e anômalo ($\gamma \geq 2$), o que dificulta o uso de métodos estatísticos convencionais na análise do sistema.

Vale destacar que, quando a variância é infinita, o conceito clássico de desvio padrão deixa de ser aplicável. A lei de potência que governa as caudas da distribuição de passos é a marca registrada dos Voos de Lévy e o parâmetro α quantifica a raridade e a intensidade dos saltos longos: quanto menor o valor de α , mais pesada é a cauda da distribuição, e mais pronunciado é o caráter superdifusivo do sistema. A soma de muitas variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas que obedecem a essa lei de potência não converge para uma Gaussiana, como no TCL clássico, mas sim para uma distribuição estável de Lévy, que mantém a forma da cauda original [62].

3.3.4 Voos de Lévy versus Movimento Difuso: Uma Análise com a Distribuição de Pareto

As diferenças fundamentais entre os Voos de Lévy e o transporte difusivo podem ser aprofundadas ao se considerar que, em ambos os casos, os comprimentos dos passos z podem ser

extraídos de uma distribuição com cauda de lei de potência. Com base nesse princípio, propomos uma abordagem por meio de simulações numéricas para explorar a dinâmica das partículas e evidenciar como a escolha dos parâmetros da distribuição influencia o comportamento estatístico das trajetórias. Essa análise permite ilustrar, de forma visual e quantitativa, as propriedades distintivas associadas a cada tipo de movimento.

3.3.4.1 Distribuição de Pareto

Para a realização das simulações, foi empregada a distribuição de Pareto para modelar os comprimentos dos passos z de partículas que realizam caminhadas aleatórias em um plano. Essa distribuição, caracterizada por sua cauda pesada, descreve fenômenos em que uma pequena fração dos eventos contribui de forma desproporcional para o todo [162, 163]. É amplamente utilizada em diversas áreas, como economia, biologia e física [164–166]. Sua flexibilidade a torna especialmente adequada para representar tanto os Voos de Lévy quanto o movimento difusivo, dependendo da escolha do parâmetro de forma α :

- Para valores mais elevados de α , a ocorrência de passos longos torna-se rara, resultando em trajetórias com comportamento próximo ao regime difusivo clássico;
- Para valores menores de α , a probabilidade de saltos longos aumenta significativamente, caracterizando o regime superdifusivo típico dos Voos de Lévy.

Dessa forma, a distribuição de Pareto oferece um arcabouço versátil e unificado para a análise comparativa entre diferentes regimes de transporte.

PDF, CDF e Função Quantil

A função de densidade de probabilidade (PDF) descreve a distribuição de probabilidade associada aos possíveis valores de uma variável aleatória contínua [167]. No caso da distribuição de Pareto aqui empregada, dois parâmetros a caracterizam: o parâmetro de forma $\alpha > 0$, que controla o decaimento da cauda da distribuição, e o parâmetro de escala $z_m > 0$, que define o

valor mínimo possível dos passos. A expressão da PDF é dada por [168]:

$$P(z) = \begin{cases} \frac{\alpha z_m^\alpha}{z^{\alpha+1}}, & \text{para } z \geq z_m \\ 0, & \text{para } z < z_m \end{cases}, \quad (3.3.21)$$

onde z representa o comprimento do passo entre dois eventos sucessivos de espalhamento. Essa função modela a probabilidade de ocorrência de diferentes comprimentos de passo, sendo que valores maiores de z se tornam progressivamente menos prováveis, conforme determinado pelo valor de α .

Para a implementação das simulações de Monte Carlo, é necessário gerar valores aleatórios que sigam a distribuição de Pareto definida na Eq. (3.3.21). Isso requer, primeiramente, o cálculo da função de distribuição acumulada (CDF) correspondente e, em seguida, de sua inversa, conhecida como função quantil [156]. Essa inversão permite expressar a variável aleatória z como função de variáveis uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 1]$, possibilitando assim a geração de amostras compatíveis com a estatística da distribuição de Pareto. Com isso, valores aleatórios uniformes podem ser sorteados e transformados em amplitudes de passo, definindo os deslocamentos que as partículas devem realizar.

A CDF associada à Eq. (3.3.21) é obtida por meio da integração da PDF no intervalo de z_m até um valor arbitrário z [156], ou seja,

$$F(z) = \int_{z_m}^z P(z') dz'.$$

Após resolver a integral, obtém-se:⁽⁵⁾

$$F(z) = \begin{cases} 1 - \left(\frac{z_m}{z}\right)^\alpha, & \text{para } z \geq z_m \\ 0, & \text{para } z < z_m \end{cases}. \quad (3.3.22)$$

Partindo da Eq. (3.3.22), chega-se à função quantil da distribuição de Pareto dada por:⁽⁶⁾

$$F^{-1}(u) = \begin{cases} \frac{z_m}{(1-u)^{1/\alpha}}, & \text{para } z \geq z_m \\ 0, & \text{para } z < z_m \end{cases}, \quad (3.3.23)$$

⁽⁵⁾Resolvendo a integral: $F(z) = \alpha z_m^\alpha \int_{z_m}^z z'^{-\alpha-1} dz' = \alpha z_m^\alpha \left[\frac{z'^{-\alpha}}{-\alpha} \right]_{z_m}^z = \alpha z_m^\alpha \left(\frac{z^{-\alpha}}{-\alpha} - \frac{z_m^{-\alpha}}{-\alpha} \right) = -z_m^\alpha (z^{-\alpha} - z_m^{-\alpha}) = 1 - \left(\frac{z_m}{z}\right)^\alpha$.

⁽⁶⁾Partindo da Eq. (3.3.22) com $F(x) = u$, onde $u \in (0, 1)$ é uma variável aleatória uniformemente distribuída: $u = 1 - \left(\frac{z_m}{z}\right)^\alpha \rightarrow \left(\frac{z_m}{z}\right)^\alpha = 1 - u \rightarrow \frac{z_m}{z} = (1 - u)^{1/\alpha} \rightarrow z = \frac{z_m}{(1-u)^{1/\alpha}}$.

onde u representa uma variável aleatória uniforme sorteada a cada evento de espalhamento. O valor correspondente de z , obtido pela função quantil, determina o comprimento do passo que a partícula deverá executar.

A Figura 3.7 apresenta as curvas da PDF e da CDF para a distribuição de Pareto, considerando a amplitude mínima de passo $z_m = 1$ e três valores distintos do expoente α : 0.5, 1.5 e 3.0. Esses valores foram escolhidos para ilustrar diferentes regimes de comportamento da distribuição:

- Curva verde ($\alpha = 3.0$): Observa-se um decaimento rápido da probabilidade associada a passos de grande amplitude. Nesse regime, a chance de ocorrência de deslocamentos longos é bastante reduzida, concentrando a maior parte dos eventos em torno de valores menores de z . A CDF correspondente reflete esse comportamento ao crescer rapidamente e atingir valores próximos de 1 já para amplitudes de passo moderadas, indicando que quase todos os eventos ocorrem dentro de uma faixa limitada de comprimentos.
- Curva laranja ($\alpha = 1.5$): A distribuição apresenta uma cauda mais pesada em comparação com o caso anterior. A probabilidade de ocorrência de passos longos, embora ainda decrescente, torna-se significativamente maior. Esse regime pode ser considerado intermediário: deslocamentos extremos são mais frequentes do que no cenário difusivo clássico, mas ainda não dominam completamente a dinâmica, como ocorre em regimes de transporte fortemente anômalo. A CDF cresce de forma mais lenta do que no caso $\alpha = 3.0$, refletindo a maior contribuição dos passos longos para a probabilidade total acumulada.
- Curva azul ($\alpha = 0.5$): A distribuição exibe uma cauda extremamente pesada. A probabilidade de ocorrência de passos muito longos é substancialmente alta, caracterizando um regime em que deslocamentos de grande amplitude dominam a dinâmica do sistema. A CDF correspondente apresenta o crescimento mais lento entre os três casos considerados, revelando que uma fração considerável da probabilidade está associada a eventos de grande escala.

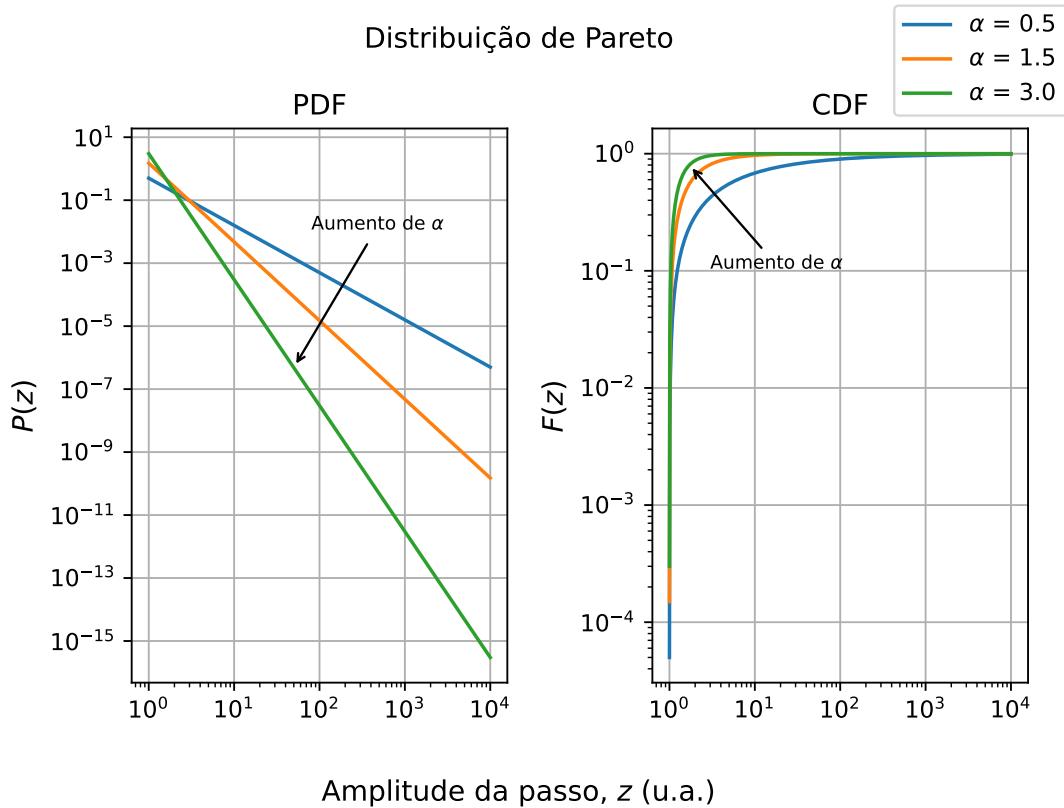


Figura 3.7 – Função Densidade de Probabilidade (PDF, à esquerda) e Função de Distribuição Acumulada (CDF, à direita) para uma distribuição de Pareto com $z_m = 1$ e diferentes valores do expoente α . Para $\alpha = 3.0$ (verde), a distribuição apresenta movimentos difusivos, onde a probabilidade de passos longos decai rapidamente. Com $\alpha = 1.5$ (laranja), a probabilidade de ocorrência de passos longos é maior em comparação com $\alpha = 3.0$, indicando uma chance significativamente maior de eventos raros e extremos, o que é característico de Voos de Lévy. Para $\alpha = 0.5$ (azul), a probabilidade de passos muito longos torna-se substancialmente alta, comportamento típico de Voos de Lévy e processos comumente associados a movimentos superdifusivos. A CDF ilustra a probabilidade acumulada $F(z) = P(Z \leq z)$, mostrando que para valores menores de α , uma maior proporção da probabilidade total está concentrada em valores maiores de z .

Fonte: Autoria própria.

Valor Esperado da Amplitude Passo

O valor esperado da amplitude do passo, $\langle z \rangle$, de uma distribuição é calculado pela integral

$$\langle z \rangle = \int_{z_m}^{\infty} z \cdot P(z) dz.$$

No caso da distribuição de Pareto dada pela Eq. (3.3.21), tem-se:

$$\langle z \rangle = \alpha z_m^\alpha \int_{z_m}^{\infty} z^{-\alpha} dz = \alpha z_m^\alpha \left[\frac{z^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{z_m}^{\infty} = \frac{\alpha z_m^\alpha}{1-\alpha} \left(\lim_{z \rightarrow \infty} z^{1-\alpha} - z_m^{1-\alpha} \right).$$

A partir desse ponto, a convergência da média depende do valor de α :

- Para $\alpha > 1$: Como $1 - \alpha < 0$, temos $\lim_{z \rightarrow \infty} z^{1-\alpha} = 0$. Substituindo esse resultado na expressão para $\langle z \rangle$ e simplificando, obtém-se

$$\langle z \rangle = \frac{\alpha z_m}{\alpha - 1}. \quad (3.3.24)$$

- Para $\alpha \leq 1$: Se $\alpha < 1$, então $1 - \alpha > 0$, o que implica $\lim_{z \rightarrow \infty} z^{1-\alpha} = \infty$. Se $\alpha = 1$, a primitiva de $z^{-\alpha} = z^{-1}$ é $\ln z$, e a avaliação do limite $[\ln z]_{z_m}^{\infty}$ também resulta em divergência para ∞ . Consequentemente, para todo $\alpha \leq 1$, tem-se $\langle z \rangle \rightarrow \infty$, ou seja, o valor esperado da amplitude do passo diverge.

Conclui-se, assim, que a média da distribuição de Pareto é finita somente para $\alpha > 1$; caso contrário, o valor esperado da amplitude do passo é infinito. Esse resultado está em concordância com as discussões apresentadas ao longo desta subseção.

Variância da Amplitude Passo

Para a distribuição de Pareto, já foi demonstrado que, para o parâmetro de forma $\alpha > 1$, a média é finita e dada pela Eq. (3.3.24). Contudo, ainda não foi determinado o valor de $\langle z^2 \rangle$. A integral que define esse valor esperado é

$$\langle z^2 \rangle = \int_{z_m}^{\infty} z^2 \cdot P(z) dz.$$

Substituindo a função densidade de probabilidade da distribuição de Pareto (Eq. (3.3.21)), tem-se:

$$\langle z^2 \rangle = \int_{z_m}^{\infty} z^2 \cdot \frac{\alpha z_m^{\alpha}}{z^{\alpha+1}} dz = \alpha z_m^{\alpha} \int_{z_m}^{\infty} z^{1-\alpha} dz = \alpha z_m^{\alpha} \left[\frac{z^{2-\alpha}}{2-\alpha} \right]_{z_m}^{\infty} = \frac{\alpha z_m^{\alpha}}{2-\alpha} \left(\lim_{z \rightarrow \infty} z^{2-\alpha} - z_m^{2-\alpha} \right).$$

Novamente, dependendo do valor de α , $\langle z^2 \rangle$ pode ou não convergir:

- Para $\alpha > 2$: Como $2 - \alpha < 0$, temos $\lim_{z \rightarrow \infty} z^{2-\alpha} = 0$. Utilizando este resultado na expressão para $\langle z^2 \rangle$ e simplificando, obtém-se

$$\langle z^2 \rangle = \frac{\alpha z_m^2}{\alpha - 2}. \quad (3.3.25)$$

Combinando esse resultado com a média, Eq. (3.3.24), a variância da amplitude dos passos é dada por⁽⁷⁾

$$Var(z) = \frac{\alpha z_m^2}{(\alpha - 2)(\alpha - 1)^2}. \quad (3.3.26)$$

- Para $\alpha \leq 2$: Se $\alpha < 2$, então $2 - \alpha > 0$, o que implica $\lim_{z \rightarrow \infty} z^{2-\alpha} = \infty$. Se $\alpha = 2$, a primitiva de $z^{1-\alpha} = z^{-1}$ é $\ln z$, e a avaliação do limite $[\ln z]_{z_m}^\infty$ também resulta em divergência para ∞ . Consequentemente, para todo $\alpha \leq 2$, tem-se $\langle z^2 \rangle \rightarrow \infty$, ou seja, o valor esperado do quadrado da amplitude do passo diverge. Dessa forma, a variância também diverge.

Esses resultados evidenciam que, assim como a média, a variância da distribuição de Pareto depende criticamente do valor de α . A variância é finita somente para $\alpha > 2$, diverge para valores menores ou iguais a esse limite, reforçando a distinção entre regimes de transporte determinados por diferentes valores de α , conforme discutido ao longo desta subseção.

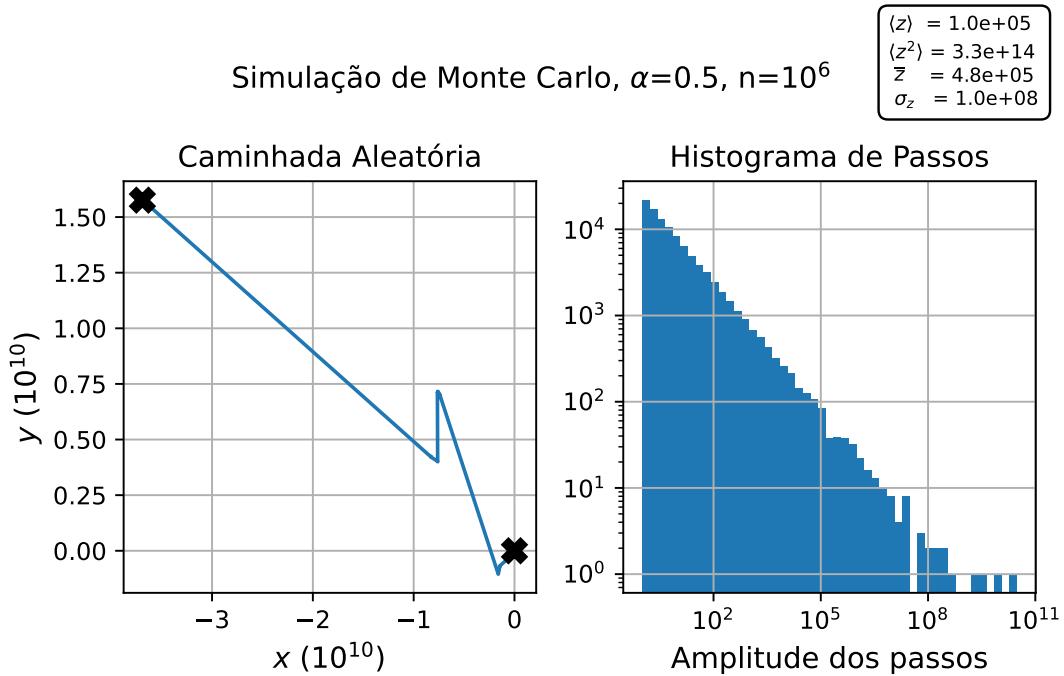
3.3.4.2 Simulações de Monte Carlo Bidimensionais

Foram realizadas simulações de Monte Carlo bidimensionais para modelar o movimento de partículas cujos comprimentos de passo seguem uma distribuição de Pareto. As simulações consideraram três valores distintos para o parâmetro de forma α : 0.5, 1.5 e 3.0, com o objetivo de explorar diferentes regimes de transporte, desde casos com forte ocorrência de saltos longos até aproximações do comportamento difusivo clássico.

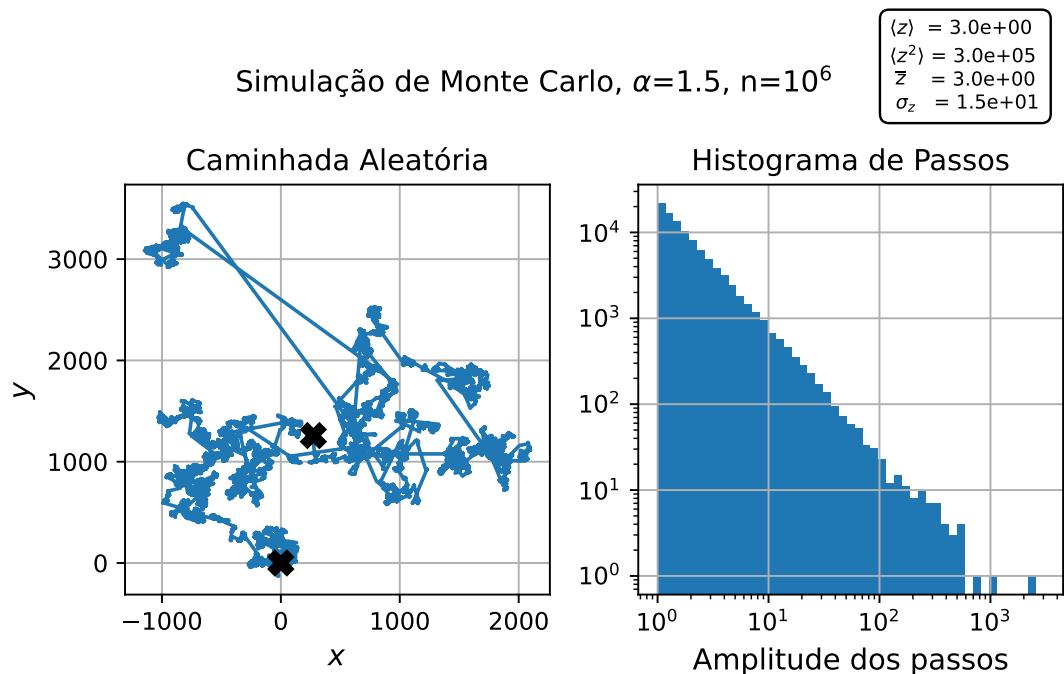
Os resultados dessas simulações estão apresentados na Figura 3.8. Cada painel corresponde a uma caminhada aleatória bidimensional composta por $n = 10^6$ passos, na qual a amplitude dos passos é determinada por uma distribuição de Pareto com amplitude mínima $z_m = 1$ u.a., variando-se apenas o expoente α . O programa utilizado para gerar os dados apresentados nesta seção foi desenvolvido em Python 3 e está disponível no anexo B.

Os painéis 3.8a, 3.8b e 3.8c apresentam as simulações para $\alpha = 0.5$, $\alpha = 1.5$ e $\alpha = 3.0$, respectivamente. Em cada um deles, o gráfico à esquerda mostra a trajetória da partícula ao

⁽⁷⁾Substituindo os resultados das Eqs. (3.3.24) e (3.3.25) na expressão da variância: $Var(z) = \langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 = \frac{\alpha z_m^2}{\alpha - 2} - \left(\frac{\alpha z_m}{\alpha - 1} \right)^2 = \frac{\alpha z_m^2}{\alpha - 2} - \frac{\alpha^2 z_m^2}{(\alpha - 1)^2} = \alpha z_m^2 \left(\frac{1}{\alpha - 2} - \frac{\alpha}{(\alpha - 1)^2} \right) = \alpha z_m^2 \frac{(\alpha - 1)^2 - \alpha(\alpha - 2)}{(\alpha - 2)(\alpha - 1)^2} = \frac{\alpha z_m^2}{(\alpha - 2)(\alpha - 1)^2}.$



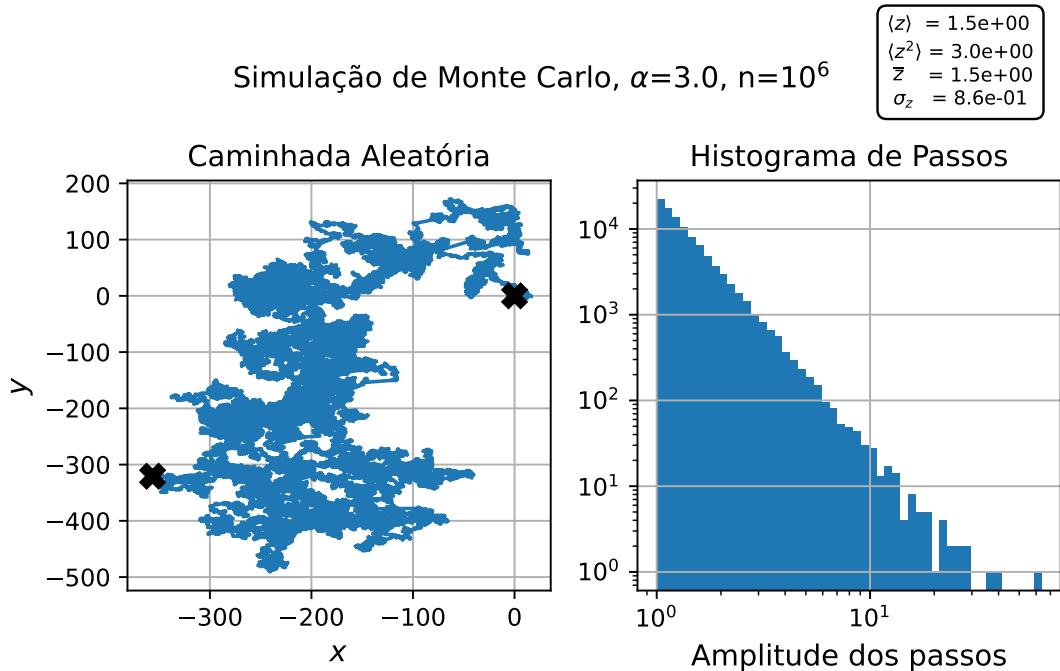
(a) Os eixos x e y estão em unidades de 10^{10} ; principais dados estatísticos da simulação: $\langle z \rangle = 1.0 \times 10^5$, $\langle z^2 \rangle = 3.3 \times 10^{14}$, $\bar{z} = 4.8 \times 10^5$ e $\sigma_z = 1.0 \times 10^8$.



(b) Principais dados estatísticos da simulação: $\langle z \rangle = 3.0$, $\langle z^2 \rangle = 3.0 \times 10^5$, $\bar{z} = 3.0$ e $\sigma_z = 1.5 \times 10^1$.

Figura 3.8

longo da caminhada aleatória, com os marcadores em X preto indicando a posição inicial $(0, 0)$ e a posição final após os 10^6 passos. Já os gráficos à direita exibem os histogramas das amplitudes dos passos registrados durante a simulação, com ambos os eixos (frequência e amplitude) em escala logarítmica. Além disso, no canto superior direito de cada painel, um quadro informativo



(c) Principais dados estatísticos da simulação: $\langle z \rangle = 1.5$, $\langle z^2 \rangle = 3.0$, $\bar{z} = 1.5$ e $\sigma_z = 8.6 \times 10^{-1}$.

Figura 3.8 – Simulações de Monte Carlo bidimensionais das trajetórias aleatórias de três partículas, cada uma regida por uma distribuição de Pareto com $z_m = 1$ u.a., $n = 10^6$ passos e com valores distintos do expoente α : (a) 0.5, (b) 1.5 e (c) 3.0. No gráfico esquerdo de cada subfigura, é apresentada a trajetória aleatória executada pela respectiva partícula no plano xy . Marcadores 'X' em preto indicam as posições inicial ($(0,0)$) e final (após 10^6 passos). Nos gráficos da direita, são exibidos os histogramas da amplitude dos passos dados durante cada simulação; ambas as escalas, vertical (frequência) e horizontal (amplitude dos passos), são logarítmicas. Adicionalmente, na parte superior direita de cada subfigura, um quadro informativo resume os seguintes dados estatísticos: o valor esperado dos passos ($\langle z \rangle$) e do quadrado dos passos ($\langle z^2 \rangle$), sendo estes os valores teóricos (analíticos) da distribuição de Pareto; bem como a média dos passos observados na simulação (\bar{z}) e o respectivo desvio padrão (σ_z).

Fonte: Autoria própria.

resume as principais variáveis estatísticas obtidas: o valor esperado da amplitude dos passos $\langle z \rangle$ e do quadrado da amplitude $\langle z^2 \rangle$, calculados numericamente a partir da distribuição teórica, bem como a média amostral dos passos \bar{z} observados na simulação e seu desvio padrão σ_z . Enquanto $\langle z \rangle$ e $\langle z^2 \rangle$ representam os momentos esperados da distribuição ideal calculados analiticamente ou numericamente, \bar{z} e σ_z refletem os valores efetivamente obtidos a partir das simulações da caminhada aleatória.

A variação do parâmetro α da distribuição de Pareto afeta profundamente as características das caminhadas aleatórias. Os gráficos de cada simulação evidenciam claramente essa

influência:

- Caminhada aleatória: Para $\alpha = 0.5$, a dinâmica é dominada por saltos longos, responsáveis pela maior parte do deslocamento da partícula. Essa característica resulta em uma exploração maior do plano e de longo alcance, típica dos voos de Lévy. Para $\alpha = 1.5$, ainda são observados passos consideravelmente longos, embora com menor frequência e intensidade que no caso anterior. A trajetória torna-se mais densa, refletindo uma predominância crescente de passos menores. Já para $\alpha = 3.0$, os passos longos praticamente desaparecem e a trajetória passa a ser compacta e homogênea, indicando um comportamento mais difusivo, com variância finita.
- Histograma da amplitude dos passos: Os histogramas confirmam essas observações. Com $\alpha = 0.5$, a distribuição apresenta uma cauda extremamente pesada, estendendo-se de 1 até 10^{11} , revelando a ocorrência significativa de passos muito grandes. Para $\alpha = 1.5$, a cauda ainda é pesada, porém com decaimento mais rápido, abrangendo até 10^3 . Por fim, para $\alpha = 3.0$, a distribuição é concentrada em valores pequenos (em torno de 1), com a cauda decaindo rapidamente e não se estendendo muito além de 10.

Os dados estatísticos incluídos nas figuras, $\langle z \rangle$, $\langle z^2 \rangle$, \bar{z} e σ_z , são essenciais para a interpretação dos resultados. A seguir, algumas conclusões importantes:

- Valor esperado dos passos ($\langle z \rangle$): Para $\alpha = 0.5$, o valor teórico é infinito e o valor numérico de referência apresentado na figura ($\langle z \rangle = 1.0 \times 10^5$) serve apenas como uma aproximação. A média observada na simulação ($\bar{z} = 4.8 \times 10^5$) é muito maior que esse valor, refletindo a presença de passos extremamente grandes. Nesse regime, \bar{z} não converge com o aumento do número de passos. Para $\alpha = 1.5$, o valor esperado teórico calculado pela Eq. (3.3.24) é $\langle z \rangle = 3.0$ (assumindo $z_m = 1$), e a média simulada coincide com esse valor. O mesmo ocorre para $\alpha = 3.0$, com $\langle z \rangle = \bar{z} = 1.5$ (também assumindo $z_m = 1$), convergindo para o valor teórico.
- Desvio padrão (σ_z) e variância ($\text{Var}(z)$): Para $\alpha = 0.5$, a variância teórica também é infinita, o que se manifesta nos altos valores de $\sigma_z = 1.0 \times 10^8$ e $\langle z^2 \rangle = 3.3 \times 10^{14}$ (valor

numérico de referência na figura), evidenciando enorme dispersão. Para $\alpha = 1.5$, a variância teórica permanece infinita, embora os valores $\sigma_z = 1.5 \times 10^1$ e $\langle z^2 \rangle = 3.0 \times 10^5$ (valores numéricos de referência) sejam menores, indicando menor, porém ainda significativa, variabilidade. Por outro lado, para $\alpha = 3.0$, a variância é finita e pode ser calculada teoricamente pela Eq. (3.3.26), resultando em $\text{Var}(z) = 0.75$ (assumindo $z_m = 1$). Isso corresponde a um desvio padrão teórico $\sigma_z \approx 0.86$, muito próximo do valor obtido na simulação ($\sigma_z = 0.87$).

Esses resultados evidenciam que o expoente α da distribuição de Pareto é o parâmetro fundamental que governa todo o processo. Ao controlar a probabilidade de ocorrência de passos longos, α define diretamente a natureza da caminhada aleatória e, por consequência, determina se o regime de transporte resultante será difusivo ou superdifusivo.

3.3.5 Transmissão Difusa e Voos de Lévy

Na intrincada caminhada aleatória executada pelos fótons em um vapor atômico, marcada por múltiplos eventos de absorção e reemissão, emerge um fenômeno estatístico que governa a natureza do transporte de radiação: passos longos, embora raros, que se desviam significativamente da média. A ocorrência desses saltos, mesmo que infrequentes, acarreta consequências profundas para as estatísticas globais do transporte radiativo no meio:

- O transporte da radiação e a difusão espacial dos fótons passam a ser desproporcionalmente influenciados, e, em certos regimes, até dominados, por esses raros eventos de saltos longos.
- A distribuição dos comprimentos de passo assume uma forma de “cauda pesada”, o que implica, do ponto de vista estatístico, na possível divergência da variância ($\langle l^2 \rangle$).
- Em casos ainda mais extremos, dependendo da lentidão com que decai a probabilidade de ocorrência de passos longos, até mesmo o valor médio dos comprimentos de passo ($\langle l \rangle$) pode divergir.

Essas características, transporte dominado por saltos raros e longos, e a divergência da variância dos tamanhos de passo, constituem a assinatura de um regime de transporte anô-

mal, mais especificamente o regime superdifusivo, conforme discutido nesta na seção. Assim, o aprisionamento radiativo em vapores atômicos, sob condições que favorecem a emissão nas asas espectrais, configura-se como um sistema físico que naturalmente exibe os chamados voos de Lévy.

A conexão matemática formal com os voos de Lévy é estabelecida por meio da análise do comportamento assintótico da distribuição de tamanhos de passo $P(l)$ para $l \rightarrow \infty$. Modelos teóricos e evidências experimentais indicam que, no limite de múltiplos espalhamentos e após a estabilização do espectro de emissão, $P(l)$ frequentemente decai segundo uma lei de potência, conforme a Eq. (3.3.18) [92]. Nesse contexto, se $P_n(l)$ for conhecida, o parâmetro de Lévy que caracteriza o regime de transporte pode ser determinado a partir da relação

$$\log(P(l)) \sim -(1 + \alpha) \log(l),$$

cuja derivada fornece:

$$-1 - \alpha \sim \frac{d \log(P(l))}{d \log(l)}. \quad (3.3.27)$$

Essa relação fornece uma ferramenta prática para a caracterização estatística do regime de transporte: ao determinar $P(l)$ em uma escala log-log e calcular a inclinação assintótica da curva, obtém-se diretamente o expoente α , que determina a natureza do processo.

A Figura 3.9 apresenta a evolução do parâmetro de Lévy, expresso como $-1 - \alpha$, em função do comprimento do passo l . Esta análise permite uma interpretação detalhada da estatística do transporte em diferentes regimes e condições. Primeiramente, analisando os resultados para um sistema infinito (curvas tracejadas), nota-se que o cenário III (CFR, em verde) é praticamente independente do número de espalhamentos n , como esperado para um processo com perda total de memória. Em contrapartida, o cenário II (PFR, em vermelho) exibe uma forte evolução, com as curvas convergindo progressivamente para a do cenário III à medida que n aumenta. Este comportamento demonstra que, após múltiplos espalhamentos, o espectro da PFR desenvolve asas Lorentzianas, e a estatística de seus saltos longos passa a ser a mesma do regime com colisões. A introdução do fator de finitude do sistema $[1 - T(\nu)]$ (curvas pontilhadas) tem um impacto notável, especialmente no cenário II. A convergência para um perfil estacionário é atingida muito mais rapidamente, pois o escape de fótons nas asas do espectro, desde os primei-

ros espalhamentos, impede a lenta evolução observada no caso infinito. Em relação ao cenário III, não há diferenças perceptíveis, estando as curvas, inclusive, sobpostas.

Além disso, em ambos os cenários, seja o sistema finito ou infinito, observa-se uma subida abrupta da inclinação $-1 - \alpha$ em $l > 1$, evidenciando a truncagem da distribuição $P(l)$. No entanto, o significado físico dessa truncagem deve ser interpretado com cautela. No caso do cenário II finito (todas as curvas pontilhadas vermelhas) e dos primeiros espalhamentos desse mesmo cenário com sistema infinito (curvas tracejadas vermelhas correspondentes a $n = 1$ e 3), essa truncagem reflete um efeito físico genuíno: ela decorre da limitação geométrica da célula, que impede a ocorrência de passos mais longos devido à fuga dos fótons. Por outro lado, nas demais curvas, a truncagem resulta de limitações computacionais e numéricas do cálculo, uma vez que o modelo físico prevê uma cauda de lei de potência com decaimento lento, incompatível com o corte observado. Assim, nesse caso, a truncagem não corresponde à física real do sistema.

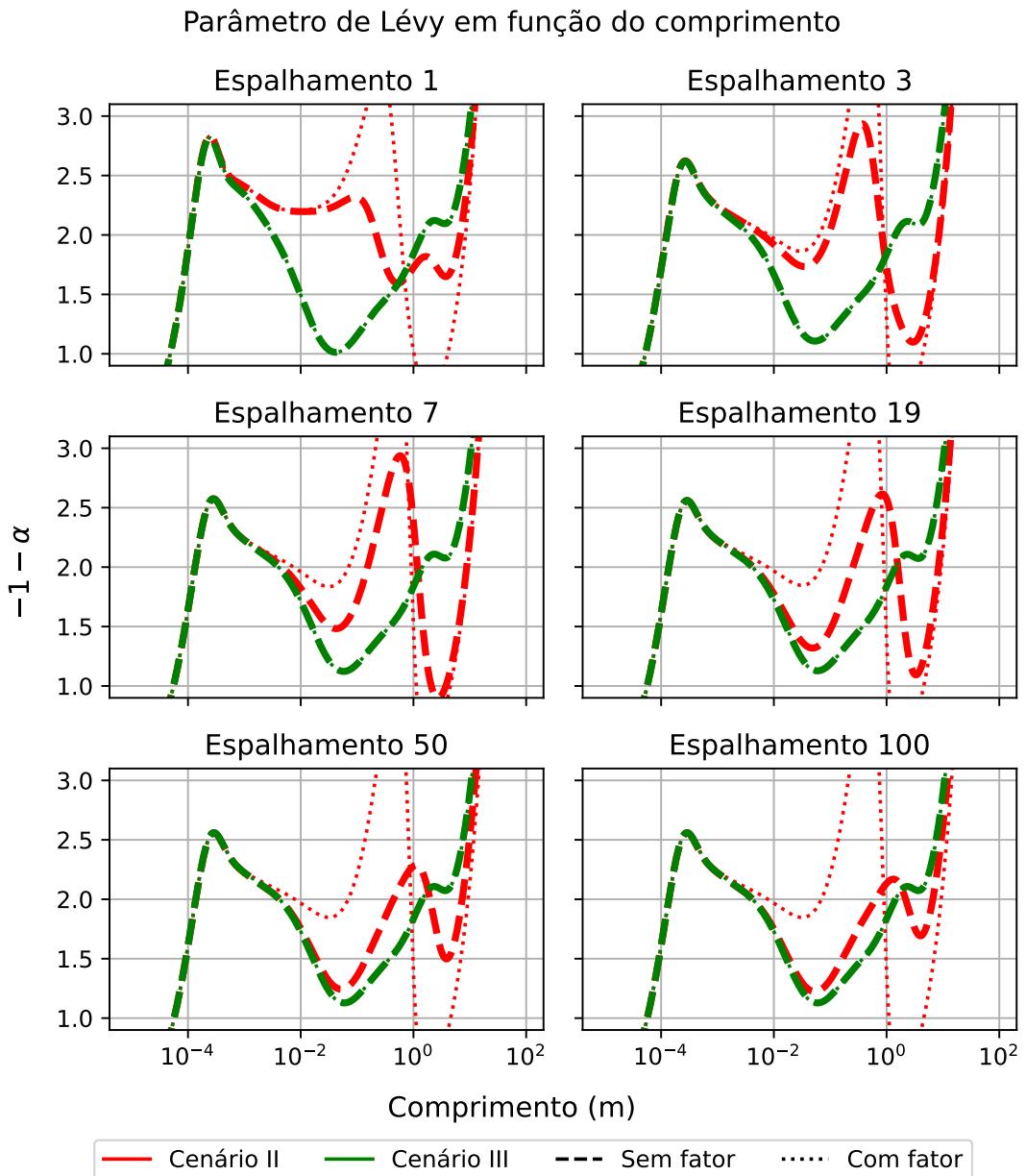


Figura 3.9 – Evolução do parâmetro de Lévy, obtido a partir da inclinação da distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$ em escala monolog no eixo horizontal para diferentes ordens de espalhamento n . Cada painel corresponde a um valor específico de n (1, 3, 7, 19, 50 e 100) e apresenta as curvas de $-1 - \alpha$ como função do comprimento l , comparando os Cenários II e III (curvas vermelhas e verdes, respectivamente), com e sem a aplicação do fator de escape $[1 - T(\nu)]$ (curvas tracejadas e pontilhadas, respectivamente). As curvas foram construídas a partir das distribuições de tamanho de passo exibidas nas Figuras 3.5b e 3.6b.

Fonte: Autoria própria.

EXECUÇÃO TÉCNICA DO ESTUDO: LABORATÓRIO E ALGORÍTIMOS

4 Abordagens Experimentais

Este capítulo detalha a execução técnica do estudo, estabelecendo a ponte entre o arcabouço teórico dos capítulos anteriores e a investigação experimental do aprisionamento radiativo. A primeira parte descreve os componentes essenciais do aparato, incluindo as propriedades do vapor de césio-133, as especificações geométricas das células de vapor e a construção dos fornos para o controle térmico. Subsequentemente, são apresentadas as metodologias experimentais empregadas para as medições de transmissão difusa a 90° e 10° , juntamente com o protocolo de tratamento de dados, que abrange desde as calibrações e correções de sinal até o ajuste da lei de potência para a extração do expoente de Lévy, α . Por fim, o capítulo culmina com a seção de Resultados e Discussão, onde os dados experimentais são analisados e confrontados com os modelos teóricos, permitindo a elucidação dos regimes de transporte.

4.1 Células de Vapor de Césio com Fornos Integrados

Para o estudo experimental do aprisionamento radiativo em vapor atômico, é necessário ter controle de três parâmetros experimentais fundamentais: a substância que compõe o vapor e seu nível de pureza, a geometria do sistema, bem como as temperaturas do reservatório e da janela. A escolha da substância, geralmente um metal alcalino como césio ou rubídio, define as propriedades quânticas da interação luz-matéria, enquanto a pureza do vapor é essencial para a validade dos resultados, pois impurezas podem suprimir o aprisionamento através de colisões não radiativas ou alargar as linhas espectrais. A geometria da célula, por sua vez, determina as condições de contorno para o transporte dos fótons e a probabilidade de escape da radiação, sendo crucial para a comparação com modelos teóricos. Finalmente, a temperatura do reservatório e da janela são os principais parâmetros de controle: a temperatura do reservatório regula a densidade atômica, que define a profundidade óptica do meio e a intensidade do aprisionamento radiativo; já a temperatura da janela regula a distribuição de velocidade dos átomos. Experimentalmente, mantém-se a janela pelo menos 10°C mais quente que o reservatório para evitar que o césio

condense em sua superfície, o que comprometeria as medidas.

4.1.1 Césio-133

O césio é um metal alcalino e seu único isótopo estável, o césio-133 (^{133}Cs , $m = 2.206 \times 10^{-25}$ kg), desempenha um papel fundamental em diversas áreas da física e engenharia, especialmente em espectroscopia e metrologia [139, 169–172]. Por ser um metal alcalino, ele possui uma estrutura eletrônica semelhante à do hidrogênio, permitindo a descrição precisa de seus estados energéticos por modelos teóricos bem estabelecidos. Além disso, suas linhas especiais são bem definidas e há uma facilidade de ressonância em frequências ópticas acessíveis. Essas características conferem-lhe propriedades ideais para estudos de interação luz-matéria, tornando-o um excelente modelo para investigações teóricas e experimentais.

O uso experimental do ^{133}Cs é particularmente vantajoso para espectroscopia óptica e estudos de interação luz-matéria, tanto pela simplicidade de sua estrutura quanto pela precisão que permite [172, 173]. Em primeiro lugar, sua configuração eletrônica do tipo $S_{1/2}$ no estado fundamental reduz os efeitos de acoplamento com campos externos, conferindo grande estabilidade às transições observadas [174]. Além disso, seu momento quadrupolar nuclear é praticamente nulo ($B \approx 0$), o que simplifica consideravelmente a separação entre os níveis da estrutura hiperfina [175]. Essas características contribuem para uma divisão clara e bem resolvida entre os níveis $F = 3$ e $F = 4$, permitindo o acesso a transições com intensidades relativas bem definidas [176]. Ademais, as transições ópticas correspondentes às linhas D1 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$, ~ 894 nm) e D2 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{3/2}$, ~ 852 nm) ocorrem em comprimentos de onda acessíveis a diodos laser comerciais [172, 174]. Adicionalmente, as fortes constantes de dipolo nessas transições favorecem alta eficiência de absorção e emissão, mesmo em baixas densidades atômicas, o que é particularmente útil para medições sensíveis de interação luz-matéria [172, 173].

Linha D2 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{3/2}$)

A linha D2 do átomo de césio corresponde à transição eletrônica do estado fundamental $6^2S_{1/2}$ para o estado excitado $6^2P_{3/2}$, cujas propriedades, como comprimento de onda e largura de linha natural, estão resumidas na Tabela 1. A interação hiperfina desdobra esses níveis de

energia: o estado fundamental divide-se nos subníveis $F = 3$ e $F = 4$, enquanto o estado excitado se divide em quatro subníveis, $F' = 2, 3, 4$ e 5 . A configuração detalhada desses níveis, incluindo suas separações em frequência e as forças de oscilador relativas para cada transição permitida, é ilustrada no diagrama da Figura 4.1. Conforme as regras de seleção, o sistema possui duas transições de ciclo fechado⁽¹⁾, $F = 4 \rightarrow F' = 5 \rightarrow F = 4$ e $F = 3 \rightarrow F' = 2 \rightarrow F = 3$.

Tabela 1 – Resumo dos parâmetros para a linha D2 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{3/2}$) do Césio-133. Os valores apresentados são os necessários para o tratamento de dados e a avaliação das previsões teóricas desenvolvidas neste trabalho.

Comprimento de onda no vácuo de transição (λ_0)	852.34 nm
Largura de linha natural (FWHM) (Γ_0)	5.22 MHz
Intensidade de saturação (I_{sat})	1.65 mW/cm ²
Elemento da matriz de dipolo efetivo ($e^- \left\langle \frac{1}{2} \hat{\mathbf{r}}_\varepsilon \frac{3}{2} \right\rangle$)	3.80×10^{-29} C·m
Coeficiente de alargamento colisional (β)	9×10^{-8} Hz·cm ³

Fonte: Valores retirados de [112, 113, 177]

4.1.2 Células de Vapor Atômico

Células de vapor atômico são recipientes hermeticamente selados que contêm uma pequena quantidade de átomos, os quais, sob condições controladas, se encontram na fase gasosa. Esse confinamento do vapor permite a investigação de fenômenos como o aprisionamento radiativo e a difusão de fôtons, tornando as células componentes fundamentais para experimentos em óptica e física atômica. De modo geral, elas possuem dois principais componentes: o reservatório, onde a grande maioria dos átomos está depositada, e a janela, que permite a passagem do feixe de laser para interagir com o vapor, possibilitando a observação dos fenômenos de interesse. Na Figura 4.2 apresenta-se a geometria completa de uma célula de vapor atômico. À esquerda da figura, mostra-se o reservatório, onde o césio é aquecido até vaporizar e preencher o corpo cilíndrico (colorido em azul). O feixe laser incidente, destacado em vermelho vivo, ingressa pela janela da célula e penetra no vapor. Conforme o feixe avança, seu perfil cromático vai se tornando progressivamente mais claro, refletindo a diminuição de intensidade causada

(1) Entende-se por “ciclo fechado” que, na ausência de interações que perturbem a fase do fôton durante o período de excitação, a emissão ocorrerá no mesmo nível hiperfino que foi inicialmente absorvido, de acordo com as regras de seleção.

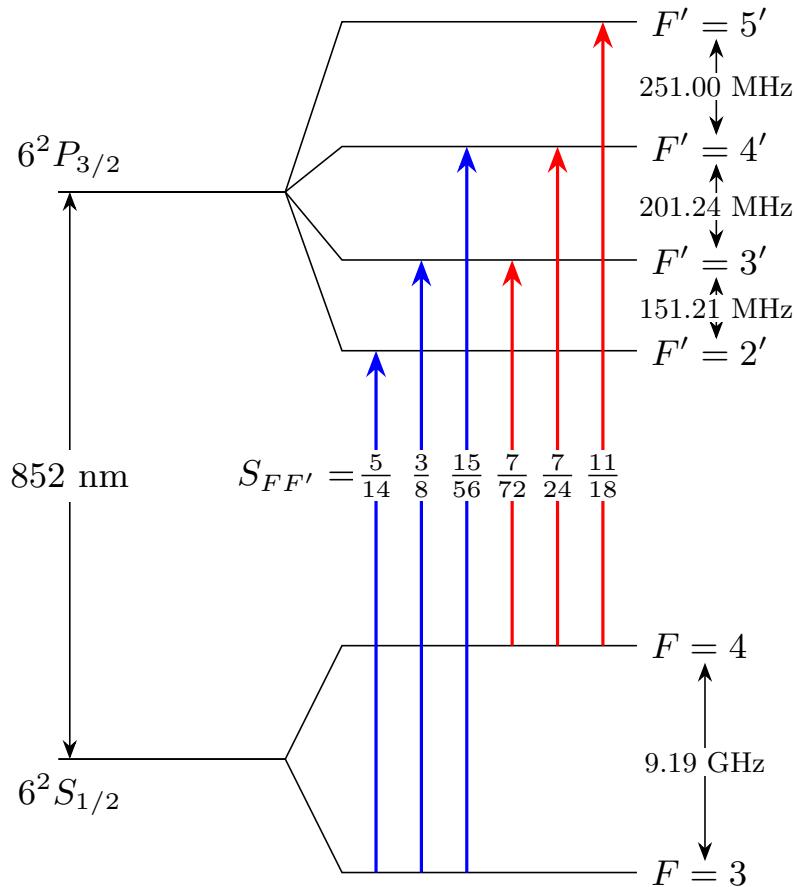


Figura 4.1 – Diagrama hiperfino da linha D2 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{3/2}$) do césio-133. São mostrados (à esquerda) os níveis finos do estado fundamental e do estado excitado e (à direita) seus subníveis hiperfinais F e F' , com as separações energéticas indicadas em MHz (para $6^2P_{3/2}$) e GHz (para $6^2S_{1/2}$), bem como os fatores de força de dipolo elétrico $S_{FF'}$. Valores retirados de [113].

Fonte: Autoria própria.

pela absorção e pelo espalhamento dos fótons pelos átomos, seguindo a lei de Beer-Lambert, apresentada no capítulo 2 e, matematicamente, expressa pela Eq. (2.1.22). A vista projetada à direita ilustra essa atenuação gradativa: o vermelho intenso do feixe inicial torna-se mais pálido, indicando a fração a componente balística que atravessa a célula.

4.1.2.1 Descrição Geométrica

Na execução dos experimentos, foram utilizadas três células com geometrias distintas, o que permitiu explorar a influência do formato e tamanho no comportamento do sistema. Dessa forma, teve-se maior flexibilidade na investigação do aprisionamento radiativo e seus reflexos. O diagrama de cada uma delas é apresentado na figura 4.3.

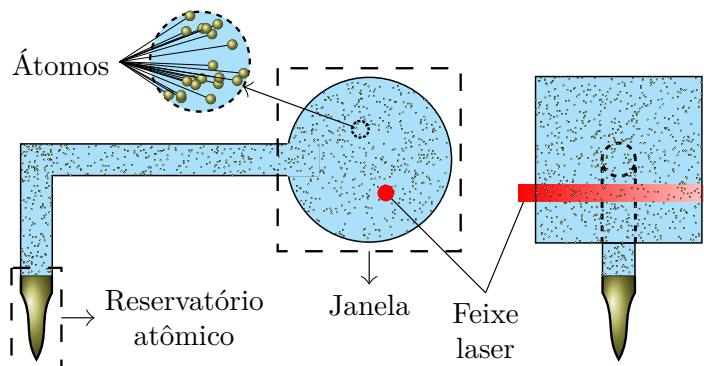


Figura 4.2 – Ilustração esquemática de uma célula de vapor atômico e da interação da luz com o meio. A figura detalha os componentes principais da célula (região na cor azul): o reservatório atômico e a janela de interação. Um feixe laser incidente, representado em vermelho, propaga-se através da janela e interage com os átomos do vapor (pontos amarelos). Durante essa travessia, a intensidade do feixe é progressivamente atenuada devido à absorção e ao espalhamento dos fótons pelos átomos. A vista projetada da figura ilustra precisamente este efeito, mostrando a atenuação da componente balística do feixe através da diminuição da intensidade da cor da esquerda para a direita.

Fonte: Autoria própria.

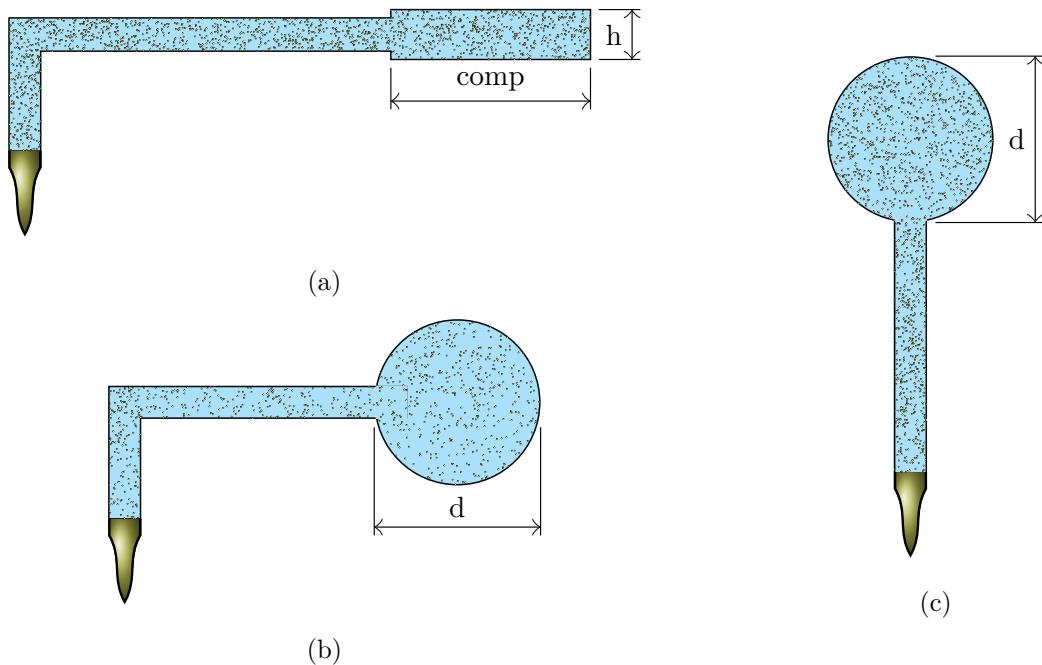


Figura 4.3 – Diagramas esquemáticos das células de vapor atômico utilizadas nos experimentos. Em (a), célula com geometria prismática de base retangular e espessura de 2,00 mm. Em (b) e (c), células com geometria cilíndrica e comprimentos longitudinais de 1,000 cm e 2,000 cm, respectivamente. O design de todas as células isola o reservatório de Cs-133 da janela de medição para aprimorar a estabilidade térmica do sistema.

Fonte: Autoria própria.

A célula mostrada na figura 4.3a possui uma geometria prismática de base retangular, com dimensões $comp = 4.000 \pm 0.005$ cm e $h = 1.000 \pm 0.005$ cm, além de espessura $\ell = 2.00 \pm 0.05$ mm. As outras duas células, representadas nas figuras 4.3c e 4.3b, possuem geometria cilíndrica, com diâmetros $d = 4.500 \pm 0.005$ cm e $d = 2.000 \pm 0.005$ cm, e comprimentos longitudinais $\ell = 1.000 \pm 0.005$ cm e $\ell = 2.000 \pm 0.005$ cm, respectivamente. As dimensões das células foram aferidas com um paquímetro de precisão de 0.05 mm. Vale destacar que as células utilizadas foram projetadas para isolar o reservatório de Cs-133 da janela, onde ocorre o aprisionamento radiativo, conforme ilustrado nos diagramas da figura 4.3. Essa configuração aprimora o isolamento térmico do reservatório, minimizando o impacto das variações térmicas durante as medições. Como resultado, obtém-se condições térmicas mais estáveis e previsíveis, o que contribui para maior confiabilidade nos resultados obtidos.

4.1.2.2 Pureza Atômica

Experimentalmente, a pureza dos átomos confinados em células de vapor é essencial para a confiabilidade dos resultados [178]. Nesse contexto, contaminantes não intencionais surgem por desgaseificação inadequada das paredes antes da vedação ou pela presença de espécies estranhas diluídas na amostra atômica que será utilizada [179–181]. Essas impurezas podem suprimir o aprisionamento radiativo, alterando as taxas de decaimento induzidas pelas extinção não-radiativa por colisões [182–184], e modificar a forma das linhas espectrais, levando a alterações no regime de transporte [90, 183, 185–187]. Além disso, a longo prazo, essas espécies podem reagir quimicamente com as paredes da célula, degradando seu material e comprometendo as medições [188]. Diante de impactos tão profundos, a análise da pureza da célula é indispensável para a validação dos resultados experimentais sobre transporte radiativo e para garantir que os modelos teóricos utilizados sejam fisicamente representativos do sistema real.

A metodologia adotada para essa verificação de pureza baseou-se na análise da largura de linha (FWHM) das transições atômicas; gases residuais na célula atuam como um gás “tampão” de baixa pressão, causando um alargamento colisional que aumenta a FWHM medida em relação ao valor teórico esperado para um sistema livre de colisões [189–191]. A análise foi conduzida através de um experimento de espectroscopia de absorção saturada em condições rigorosamente

controladas. O estudo foi focado na linha D1 do Césio-133, analisando-se especificamente os picos correspondentes às transições do estado fundamental $F=4$ para os estados excitados $F'=4$ e $F'=3$. Os detalhes técnicos do arranjo experimental, do procedimento de medição e da análise dos dados encontram-se no Apêndice C. A tabela 2 resume os valores de largura de linha (FWHM) medidos para cada célula a partir desta análise.

Tabela 2 – Valores medidos da FWHM, em MHz, para as transições hiperfinas da linha D1 do Césio-133. As colunas $43'$ e $44'$ correspondem às transições do estado fundamental $F=4$ para os estados excitados $F'=3$ e $F'=4$, respectivamente, para cada uma das três células experimentais.

Comprimentos (cm)	FWHM (MHz)	
	43'	44'
0.200	16.0 ± 0.5	16.1 ± 0.4
1.000	10.6 ± 0.5	10.4 ± 0.5
2.000	10.6 ± 0.2	10.6 ± 0.4

Observa-se na tabela 2 que os valores medidos para a FWHM estão entre 11 e 13 MHz, sendo consideravelmente superiores à largura de linha natural esperada para a transição D1 do Césio, que é de $\Gamma_0/2\pi = 4.56$ MHz [113]. Essa discrepância pode ser explicada pela presença de contaminantes no vapor ou à contribuição dominante da largura de linha da própria fonte de laser. Este efeito de alargamento instrumental é um resultado comum em espectroscopia de alta resolução⁽²⁾ [190, 191]. Portanto, levando em conta que parte dessa largura advém do laser, que os espectros atômico e do laser são independentes e que ambos possuem perfis do tipo Lorentz [89, 191], o sinal medido corresponde a convolução de duas Lorentizanas, que, como visto no Apêndice A, tem largura total

$$\Gamma_{\text{laser},0} = \Gamma_{\text{laser}} + \Gamma_0, \quad (4.1.1)$$

onde Γ_{laser} é a largura espectral do laser. Nesse sentido, a largura de linha do laser, Γ_{laser} , foi determinada de forma independente por meio da técnica do “discriminador de frequência” através de um interferômetro Fabry-Pérot (FPI, do inglês *Fabry-Pérot Interferometer*) como referência estável. O arranjo experimental e o procedimento adotado nesta medição estão detalhados no

⁽²⁾Em trabalhos similares que também utilizaram espectroscopia de absorção saturada, larguras de linha de 15 MHz foram medidas para o rubídio-85/87 e a diferença para o valor natural ($\Gamma_0/2\pi = 5.75$ MHz) foi atribuída principalmente ao “ruído de frequência da fonte de laser” [190]

Apêndice C. A tabela 3 resume os resultados desta análise, apresentando os valores da largura de linha do laser, Γ_{laser} , para diferentes tempos de amostragem.

Tabela 3 – Resultados da medição da largura espectral do laser (Γ_{laser}). Os valores foram determinados experimentalmente através da técnica do discriminador de frequência para três tempos de amostragem distintos e são apresentados em MHz.

	Tempo total (ms)			
	1	10	100	Média
Largura de linha (MHz)	6.1 ± 0.2	6.0 ± 0.2	6.0 ± 0.1	6.0 ± 0.3

Com a largura de linha do laser, Γ_{laser} , devidamente caracterizada, é possível isolar a contribuição puramente atômica, Γ_0 , para cada célula, utilizando a Eq. (4.1.1). Subtraindo-se o valor médio da largura do laser, $\Gamma_{\text{laser}} = 6.0$ MHz (Tabela 3), dos valores de FWHM medidos para cada célula (Tabela 2), obtém-se então os valores reais da largura atômica. Esses resultados são apresentados na Tabela 4, onde é possível constatar que as células de 1 e 2 cm estão em excelente concordância com a largura de linha natural teórica da linha D1 do Césio-133 ($\Gamma_0/2\pi = 4.56$ MHz), indicando que estas células possuem um alto grau de pureza, com alargamento colisional por contaminantes desprezível. Em contrapartida, a largura atômica da célula de 2 mm é quase o dobro do valor esperado, o que evidencia um significativo alargamento por pressão causado pela presença de gases residuais, confirmando que esta célula não possui o mesmo grau de pureza das demais.

Tabela 4 – Estimativa da largura de linha atômica (Γ_0) para a verificação da pureza de cada uma das células de Césio-133 a serem utilizadas nos experimentos. Os valores foram calculados subtraindo a largura de linha média do laser $\Gamma_{\text{laser}} \approx 6.0$ MHz, Tabela 3) da FWHM total medida para as transições 43' e 44' (Tabela 2), de acordo com a Eq. (4.1.1).

Comprimentos (cm)	FWHM (MHz)	
	43'	44'
0.200	10.0 ± 0.6	10.1 ± 0.5
1.000	4.6 ± 0.6	4.4 ± 0.6
2.000	4.6 ± 0.4	4.6 ± 0.4

4.1.3 Fornos Integrados

Cada célula foi equipada com um forno próprio na janela e no reservatório, projetados para garantir o controle preciso, estável e independente da temperatura de cada componente, assegurando que o vapor atômico permaneça nas condições desejadas ao longo das medições. Essa separação no controle térmico é fundamental para os experimentos, pois a temperatura da janela regula a distribuição de velocidades dos átomos, enquanto a do reservatório afeta a densidade atômica do vapor. Dessa forma, o comportamento do vapor atômico é mantido sob as condições ideais, o que aumenta a precisão e confiabilidade das medições. Nas figuras 4.4a, 4.4b e 4.4c, são apresentadas fotos das células de 2 mm, 1 cm e 2 cm, respectivamente, acopladas aos seus fornos.

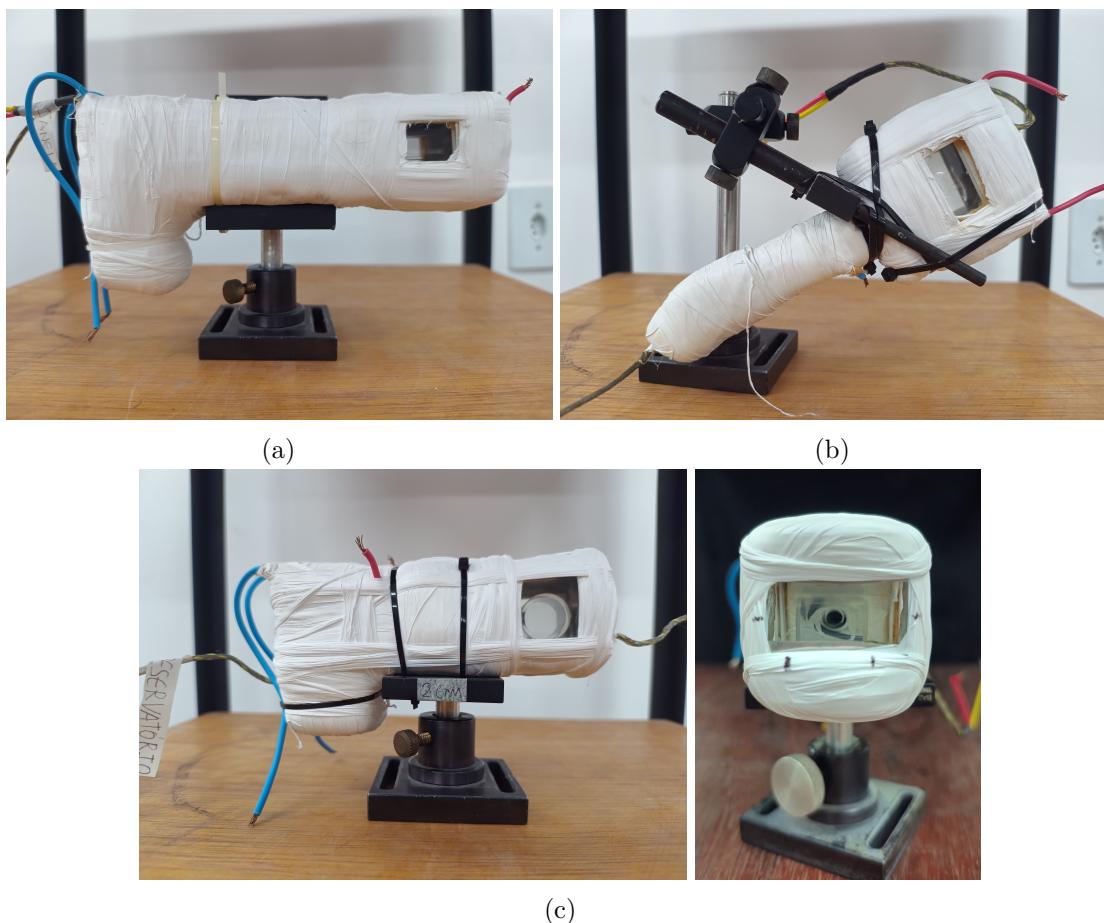


Figura 4.4 – Fotografias das células de vapor atômico de césio acopladas aos seus respectivos fornos. Em (a), a célula prismática de 2 mm; em (b), a célula cilíndrica de 1 cm; e em (c), vistas lateral e frontal da célula cilíndrica de 2 cm.

Fonte: Autoria própria.

A estrutura do forno foi construída a partir de uma chapa de alumínio, moldada para

se ajustar à geometria de cada célula e com uma abertura na região da janela para a passagem do feixe laser. A fim de promover o aquecimento, dois segmentos de fio de cobre esmaltado foram enrolados de forma sobreposta nas regiões da janela e do reservatório. Suas extremidades foram conectadas a uma fonte elétrica, permitindo a passagem de corrente e, por efeito Joule, o aquecimento dessas regiões. Com essa configuração, a regulação da corrente na fonte controla diretamente a temperatura dos fios e, consequentemente, do forno. Vale destacar que, para anular possíveis campos magnéticos provenientes desse arranjo, os fios foram enrolados em duas camadas com o mesmo número de voltas, mas com as correntes fluindo em sentidos opostos.

Um diagrama da configuração descrita é mostrado na figura 4.5a.

Para a aferição e o controle preciso da temperatura, foram utilizados termopares do Tipo K independentes, cujas pontas de medição foram posicionadas em contato direto com as superfícies da janela e do reservatório. As extremidades de cada termopar foram conectadas a um multímetro, que registra a diferença de potencial gerada pela junção termoelétrica. A temperatura correspondente é então obtida por meio da calibração padrão desse tipo de termopar. Por fim, toda a estrutura foi preenchida com fibra de vidro e enrolada com fita PTFE (veda rosca) para garantir o isolamento térmico do sistema, mantendo-se a abertura da janela para permitir a passagem do feixe laser. Uma ilustração de toda estrutura é exibido na figura 4.5b.

4.2 Técnicas Experimentais e Tratamento de Dados

Para a correta interpretação física dos experimentos principais de transmissão difusa (a 10° e 90°), é essencial a realização de um conjunto de medições auxiliares destinadas à caracterização do sistema e à obtenção dos parâmetros de entrada necessários para a modelagem teórica. Igualmente importante é o tratamento subsequente dos dados, uma vez que a extração precisa das grandezas de interesse, tanto nas medições principais quanto nas auxiliares, são indispensáveis para assegurar a validade e a confiabilidade das conclusões deste trabalho.

4.2.1 Diagrama Experimental e Sinais Captados

O arranjo experimental utilizado para as medições de transmissão difusa é composto por um experimento principal e um conjunto de experimentos de suporte, executados em paralelo

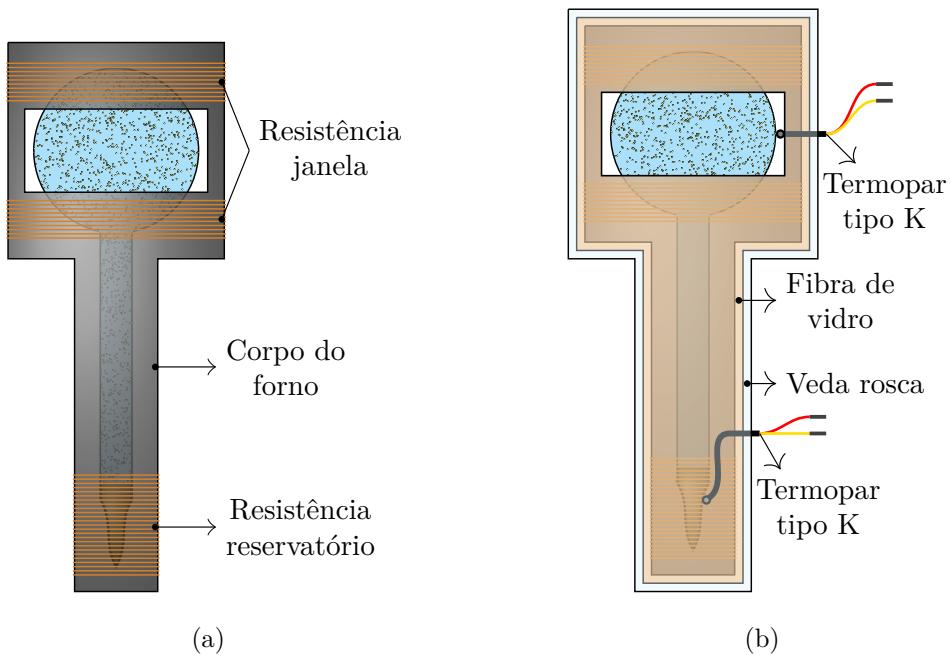


Figura 4.5 – Diagrama esquemático da construção do forno. Em (a), ilustra-se o corpo de alumínio com o enrolamento bifilar (não indutivo) das resistências de aquecimento para a janela e para o reservatório. Em (b), o mesmo conjunto após a aplicação dos materiais de isolamento térmico: fibra de vidro e fita de PTFE (veda rosca).

Fonte: Autoria própria.

conforme ilustrado no diagrama da Figura 4.6. O feixe de um laser de diodo, sintonizado na transição D2 do Césio-133, é dividido para alimentar os diferentes módulos. O procedimento que antecede cada aquisição segue uma ordem rigorosa para garantir a reprodutibilidade dos resultados. Primeiramente, o diâmetro do feixe laser é medido com uma câmera CCD (*Charge-Coupled Device*, em inglês); como os pixels da câmera possuem um tamanho conhecido de 2.2 μm , a contagem de quadros em cada dimensão permite uma conversão direta para uma medida de distância, garantindo uma aferição precisa do diâmetro. Apenas se o diâmetro aferido for maior que o desejado, uma íris é empregada para reduzi-lo e, assim, assegurar a condição de interação pontual no centro da célula. Na sequência, o reservatório e a janela da célula de vapor atômico são aquecidos até as temperaturas de operação desejadas. Este controle térmico é alcançado através da regulagem precisa da corrente nas fontes que alimentam as resistências de aquecimento de cada componente. Quando o equilíbrio térmico é atingido, as temperaturas nominais do reservatório (T_r) e da janela (T_j) são registradas. Com a célula na temperatura correta, a potência do feixe é medida e, com base neste valor e no diâmetro previamente aferido,

a intensidade é ajustada para o nível desejado através do conjunto de lâmina de meia onda ($\lambda/2$) e cubo polarizador.

Somente após esta sequência de caracterização e ajuste, a aquisição dos dados é iniciada. A medição em si consiste em uma varredura da frequência do laser, ou seja, uma variação controlada da frequência do laser ao longo do tempo. Esse processo é realizado fisicamente pela aplicação de uma rampa de tensão a um atuador piezoelétrico, que altera o ângulo da grade de difração da cavidade e, consequentemente, a frequência emitida pelo laser. Durante esta varredura, enquanto o feixe principal atravessa a célula para os experimentos de transmissão difusa (o experimento de interesse) e coerente (ou balística), derivações do mesmo feixe são direcionadas simultaneamente para os setups de rampa de potência e espectroscopia de absorção saturada. O objetivo dessa configuração é registrar, em um único osciloscópio, todos os sinais que, em conjunto, permitem a completa caracterização do sistema. Estes, por sua vez, possibilitam: obter o espectro da transmissão difusa (sinal de interesse), corrigir a influência da variação de potência do laser, estabelecer a calibração absoluta em frequência e determinar a densidade atômica do meio a partir do sinal de transmissão coerente. Adicionalmente, antes de iniciar e após finalizar a aquisição, parte do feixe é direcionado ao interferômetro de Fabry-Pérot para verificar a estabilidade do laser.

Essa arquitetura de medição, que integra o sinal de interesse a um conjunto de diagnósticos simultâneos, é fundamental para a robustez da análise. Cada um dos braços experimentais que operam em paralelo desempenha, portanto, um papel indispensável:

- **Rampa de potência:** A varredura em frequência do laser de diodo, descrita anteriormente, introduz uma variação colateral em sua potência de saída, tornando a medição da rampa de potência fundamental para isolar o fenômeno de transmissão da influência dessa flutuação. A principal origem dessa variação está no mecanismo de *feed-forward*, no qual uma variação na corrente do diodo é aplicada em sincronia com a rampa de tensão enviada ao atuador piezoelétrico da grade de difração. Essa modulação de corrente, que é fundamental para garantir uma varredura de frequência contínua e livre de saltos de modo, é a principal responsável pelo perfil de potência variável observado. Adicionalmente, o próprio

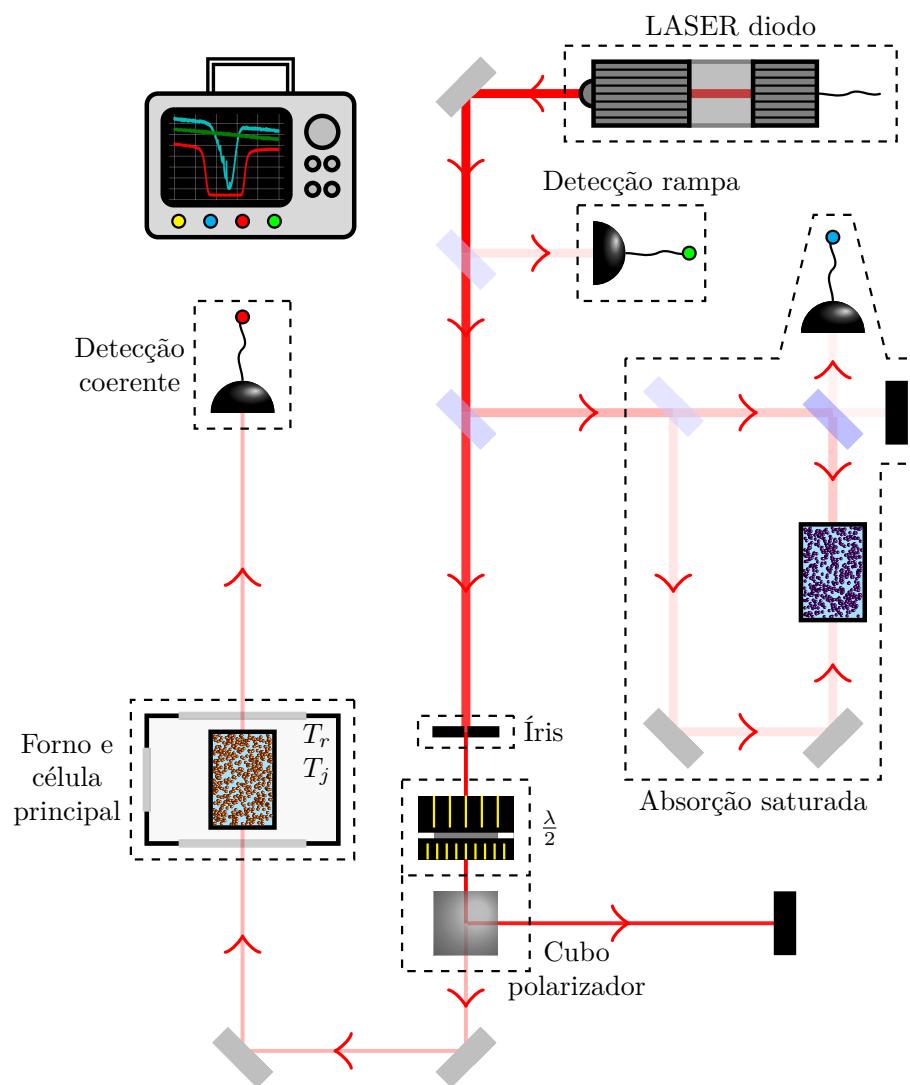


Figura 4.6 – Diagrama esquemático da montagem experimental utilizada para as medições de transmissão difusa e para a caracterização do sistema. O feixe de um laser de diodo, sintonizado na transição D2 do Césio-133, é dividido em diferentes braços para alimentar os experimentos de suporte e o principal. Uma pequena fração do feixe é direcionada à **Detecção rampa** para monitorar a variação de potência do laser. Outra parte alimenta o módulo de **Absorção saturada**, onde um arranjo de bombeio-prova em uma célula de referência gera um sinal preciso para a calibração da frequência. O feixe principal passa então por componentes de controle: uma **íris**, para reduzir o diâmetro do feixe, se necessário, e o conjunto formado por uma **lâmina de meia onda** ($\lambda/2$) e um **cubo polarizador**, utilizado para ajustar a potência final do feixe antes de incidir na célula principal acoplada ao seu forno, que se encontra em equilíbrio térmico. A luz transmitida sem espalhamento é captada pela **Detecção coerente**, cujo sinal é utilizado para determinar a densidade atômica do meio. Todos os sinais são registrados simultaneamente em um osciloscópio para uma análise completa e contextualizada de cada medida.

Fonte: Autoria própria.

movimento da grade pode modificar sutilmente o alinhamento da cavidade externa, mas sua contribuição para a variação de potência é consideravelmente menor em comparação ao efeito do *feed-forward*. Se não fosse corrigida, essa flutuação da fonte se sobreporia ao sinal de transmissão, mascarando a resposta atômica. Portanto, o sinal captado pela *Detecção rampa* serve como uma referência da intensidade do laser, que é utilizada para normalizar os dados de transmissão e remover este artefato experimental, assegurando a precisão da análise.

- **Espectroscopia de Absorção Saturada:** A espectroscopia de absorção saturada é a técnica utilizada para realizar a calibração absoluta do eixo horizontal da medida, convertendo a base de número de pontos do osciloscópio em uma escala de frequência precisa. Conforme o arranjo na Figura 4.6, uma parte do feixe do laser é dividida em dois: um feixe forte, chamado de bombeio, e um feixe fraco, chamado de prova. Ambos atravessam uma célula de Césio de referência em direções opostas e se sobrepõem. O feixe de bombeio é intenso o suficiente para excitar e saturar a transição atômica para os átomos com um vetor velocidade específico. Quando o feixe de prova, contrapropagante, interage com esse mesmo grupo de átomos já excitados, a absorção é reduzida, gerando picos de transmissão muito estreitos exatamente nas frequências de ressonância atômica. Além dos picos de ressonância principais, o espectro de absorção saturada também exibe ressonâncias de *crossover*, que são um recurso intrínseco da técnica. Estes picos adicionais surgem quando duas transições atômicas, ν_1 e ν_2 , que partem de um mesmo estado fundamental, estão separadas por uma frequência menor que a largura de linha Doppler [115]. Uma ressonância de *crossover* ocorre quando a frequência do laser, ν_L , está precisamente no ponto médio entre as duas transições, $\nu_L = (\nu_1 + \nu_2)/2$. Nessa frequência, um grupo de átomos com velocidade $+v_z$ se torna ressonante com o feixe de bombeio na frequência ν_1 (devido ao desvio Doppler), enquanto outro grupo com velocidade $-v_z$ se torna ressonante com o mesmo feixe na frequência ν_2 . O feixe de bombeio satura, assim, ambas as classes de velocidade. O feixe de prova, por sua vez, interage com os mesmos dois grupos de átomos, mas com os desvios Doppler invertidos. Como os átomos em ambas as classes de

velocidade já foram excitados, a absorção do feixe de prova é significativamente reduzida, resultando em um pico de transmissão na frequência intermediária. O conjunto completo dos picos de ressonância e de *crossover* serve, portanto, como um conjunto de marcadores de frequência precisos para a calibração do espectro.

- **Transmissão Coerente (Balística):** O experimento de transmissão coerente, ou balística, tem como objetivo determinar a densidade atômica N do vapor de Césio na célula principal a cada temperatura do reservatório. Como mostra a Figura 4.6, o feixe principal do laser atravessa o “Forno e célula principal” e sua intensidade transmitida é medida pelo detector de “Detecção coerente”. A atenuação do laser ao passar pelo vapor é governada pela lei de Beer-Lambert, Eq. (2.1.22), que relaciona a intensidade transmitida com o coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$, Eq. (2.2.38), que é variável da densidade atômica. Ao ajustar uma curva teórica, baseada na lei de Beer-Lambert, sobre a curva de transmissão experimental obtida, é possível inferir o valor da densidade atômica N que melhor descreve a medição.
- **Interferômetro de Fabry-Pérot:** A operação de um laser em “multimodos” significa que sua cavidade óptica sustenta a emissão simultânea de luz em várias frequências discretas, porém muito próximas entre si [192, 193]. Cada uma dessas frequências corresponde a um “modo” de ressonância específico permitido pela geometria da cavidade [194]. Nesse sentido, o impacto de uma operação multimodo em um experimento de espectroscopia pode ser profundo e prejudicial, pois cada modo do feixe que penetra no meio interage com os átomos de forma independente. Assim, o sinal final captado pelo detector é a sobreposição de múltiplos espectros gerados por cada modo. Como resultado, a resolução e a interpretabilidade dos dados podem ser comprometidas. Por essa razão, torna-se necessária a verificação da operação monomodo do laser, antes e após cada medição, a fim de garantir que toda a operação ocorra em monomodo. Para essa verificação, comumente utiliza-se o interferômetro de Fabry-Pérot.

O FPI é uma cavidade óptica ressonante, geralmente composta por dois espelhos paralelos de alta refletividade, e seu princípio de funcionamento baseia-se na interferência

de múltiplos feixes de luz refletidos dentro da cavidade [195]. A transmissão através do FPI é significativa somente para frequências que satisfazem a condição de ressonância, ou seja, que formam uma onda estacionária na cavidade [196]. Como resultado, ao varrer a frequência do laser através do FPI, obtém-se um espectro de transmissão composto por uma série de picos nítidos e igualmente espaçados. Uma operação monomodo ideal produz um único conjunto de picos limpo e periódico, enquanto uma operação multimodo gera um padrão complexo, resultante da sobreposição de múltiplos conjuntos de picos [161, 194]. Essa distinção visual permite ajustar o laser à condição monomodo antes de cada medição e verificar a ausência de saltos de modo, garantindo a qualidade e a validade dos dados experimentais.

A Figura 4.7 consolida os resultados dessa abordagem multifacetada, exibindo os quatro sinais adquiridos simultaneamente durante uma única varredura de frequência em torno das transições do estado fundamental $F=4$ da linha D2 do Césio-133. A sobreposição desses traços permite uma análise contextualizada e revela a interdependência entre os diagnósticos e a medição principal. O sinal da rampa de potência (em verde) apresenta uma leve inclinação descendente, que evidencia a variação intrínseca da potência do laser durante a varredura e serve como referência para normalização. Essa inclinação da fonte se reflete diretamente na linha de base dos sinais de absorção saturada (azul) e transmissão coerente (vermelho). O espectro de absorção saturada funciona como uma régua de frequência absoluta, onde os vales de absorção correspondem às transições hiperfinas (linhas tracejadas pretas - esquerda 43', central 44' e direita 45') e às ressonâncias de crossover (linhas tracejadas violeta - esquerda 43'/44', central 43'/45' e direita 44'/45'). A curva de transmissão coerente revela o perfil de absorção do feixe balístico. Na região central deste sinal, a curva atinge o valor zero, indicando absorção total; nesta condição de alta densidade óptica, os fótons com frequências ressonantes são submetidos a múltiplos espalhamentos (caminhada aleatória) e não atingem o detector. Finalmente, o sinal do interferômetro de Fabry-Pérot (amarelo) confirma a operação monomodo do laser, caracterizada pela série de picos nítidos e uniformemente espaçados. Adicionalmente, a variação na amplitude máxima desses picos acompanha a rampa de potência, confirmando que a resposta

do interferômetro é, como esperado, proporcional à intensidade do laser.

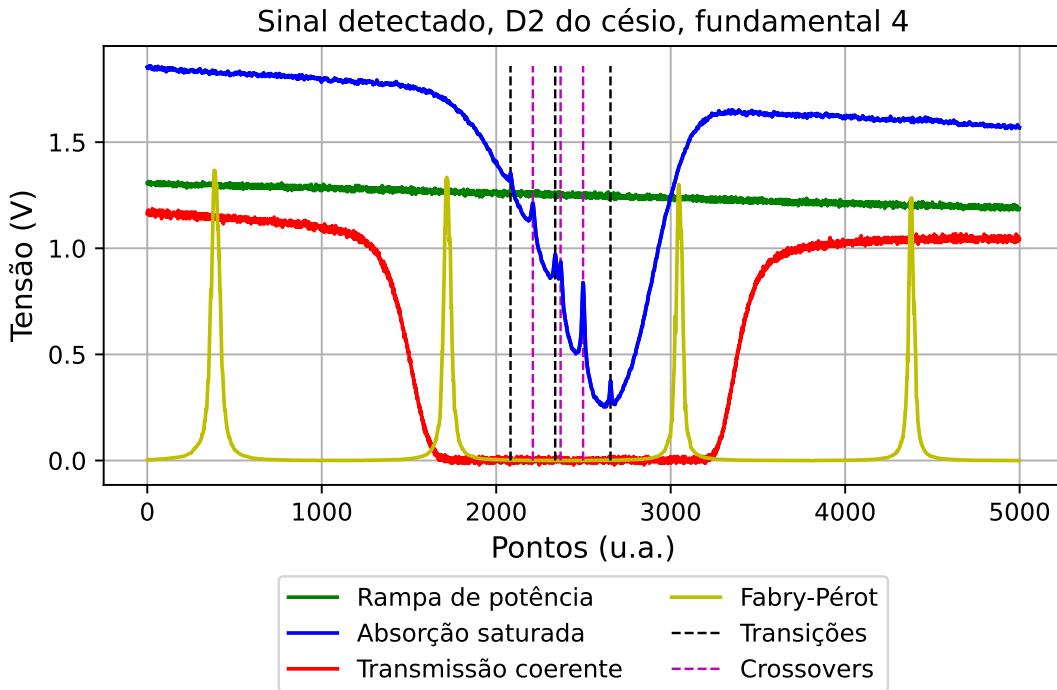


Figura 4.7 – Sinais experimentais adquiridos simultaneamente durante a varredura da frequência do laser em torno das transições do estado fundamental $F=4$ da linha D2 do Césio-133. A curva Rampa de potência (verde) monitora a potência de saída do laser. O espectro de Absorção saturada (azul) fornece os marcadores de frequência a partir das ressonâncias de Transições (linhas tracejadas pretas - esquerda 43', central 44' e direita 45') e de Crossovers (linhas tracejadas violeta - esquerda 43'/44', central 43'/45' e direita 44'/45'). A Transmissão coerente (vermelho) mede a atenuação do feixe principal pelo vapor, exibindo uma região de absorção total. O sinal do Fabry-Pérot (amarelo) confirma a operação monomodo do laser através de seus picos periódicos e consistentes.

Fonte: Autoria própria.

4.2.2 Detecção da Transmissão Difusa

O estudo experimental do aprisionamento radiativo, em sua essência, consiste em medir a luz espalhada para compreender como ela se propaga pelo vapor atômico [20]. Isso é feito adotando-se diferentes configurações angulares de detecção, pois cada ângulo revela facetas distintas do processo estocástico. A partir dos sinais coletados em cada configuração, emprega-se um tratamento físico-estatístico para elucidar os mecanismos de transporte. Essa análise permite avaliar a influência das colisões no espectro de transmissão e extrair os parâmetros estatísticos, como o expoente de Lévy α , que caracterizam fundamentalmente o fenômeno.

Para garantir a correta interpretação dos dados espalhados, a geometria de interação entre a luz

e o vapor atômico deve ser precisa e reproduzível. Por essa razão, ambos os experimentos de transmissão difusa partem de um mesmo protocolo de alinhamento para o feixe principal (o que interage com a célula de vapor). Primeiramente, esse feixe é ajustado para que sua propagação seja perfeitamente paralela à bancada óptica. Em seguida, a célula é posicionada de forma que sua janela de entrada estabeleça um ângulo exato de 90° com o feixe incidente. Cumprido esse procedimento, os arranjos de detecção são implementados.

4.2.2.1 Transmissão Difusa à 90°

O objetivo deste experimento é investigar o espectro da luz espalhada em um regime onde, em média, os fótons sofrem um único evento de espalhamento. A escolha de uma geometria de detecção a 90° é estratégica para este fim e a sua vantagem reside na forma como o efeito Doppler se manifesta. O processo pode ser entendido em duas etapas: primeiro, o feixe de laser incidente interage preferencialmente com átomos que possuem uma componente de velocidade paralela a sua direção, v_{\parallel} . Em seguida, quando esse átomo excitado reemite um fóton, a frequência detectada sofre um novo desvio Doppler, que depende da projeção da velocidade do átomo na direção de observação.

Ao detectar a 90° , o desvio de frequência na emissão passa a depender da componente de velocidade v_{\perp} . Como em um gás térmico as componentes v_{\perp} e v_{\parallel} são estatisticamente independentes, a “memória Doppler” da absorção é efetivamente quebrada. É esse desacoplamento que torna as assinaturas espectrais dos Cenários II (sem colisões) e III (com colisões) marcadamente distintas, permitindo sua diferenciação. Em contraste, em um espalhamento para frente, onde a emissão também dependeria de v_{\parallel} , essa memória Doppler tornaria ambos os cenários muito semelhantes. Com essa justificativa, a análise dos espectros a 90° permite uma comparação direta e mais clara com os cenários teóricos de transmissão difusa, Eq. (3.2.9), buscando identificar qual descrição melhor condiz com os dados observados sob diferentes condições de densidade atômica e intensidade do laser.

Nestas medições foi utilizada exclusivamente a célula cilíndrica de 2 cm de comprimento. Conforme ilustrado na Figura 4.8, o feixe laser, devidamente alinhado e condicionado em potência, incide exatamente no centro geométrico da célula cilíndrica. A detecção é realizada

perpendicularmente à direção de propagação do feixe incidente. As medições foram sistematicamente repetidas para um amplo conjunto de densidades atômicas, através do controle da temperatura do reservatório, T_r , e da janela, T_j . Os parâmetros adotados em cada medição estão detalhados na Tabela 5.

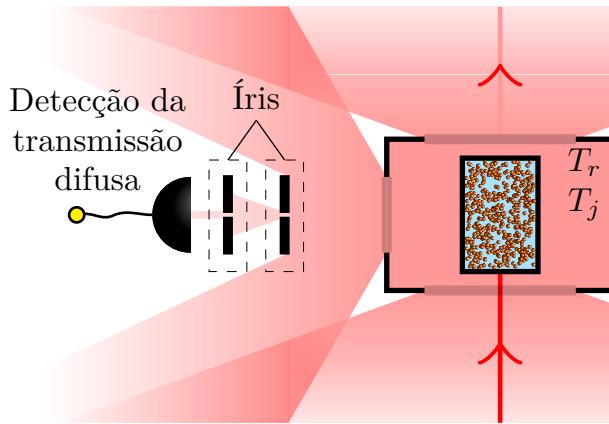


Figura 4.8 – Diagrama esquemático da configuração experimental utilizada para a detecção da fluorescência (luz espalhada) a 90° . O feixe laser incide no centro da célula de vapor atômico e a luz espalhada é coletada perpendicularmente ao eixo de incidência pelo sistema de detecção, composto por duas íris e um fotodetector.

Fonte: Autoria própria.

Um aspecto fundamental deste arranjo é o sistema de detecção, que, como detalhado na Figura 4.8, é composto por duas íris e um fotodetector. As íris são fechadas ao máximo possível, resultando em uma abertura de aproximadamente 1 mm de diâmetro. Essa medida foi realizada com um paquímetro de resolução de 0,05 mm. Essa configuração atua como um colimador, garantindo que apenas os fótons emitidos em um ângulo muito próximo de 90° em relação ao feixe incidente sejam captados. A posição do ponto de coleta da luz espalhada foi escolhida na metade do comprimento longitudinal da célula, a $\ell/2 \approx 1$ cm. Esta decisão implica que os centros das íris foram posicionados também em $\ell/2 \approx 1$ cm, sendo esta medida verificada com um paquímetro de resolução de 0,05 mm. Essa escolha minimiza efeitos de borda associados às janelas da célula e define um volume de interação bem localizado.

Tabela 5 – Parâmetros experimentais utilizados nas medições a de transmissão difusa a 90°. São apresentadas a potência média de incidência do laser, as temperaturas do reservatório (T_r) e da janela (T_j) e largura Doppler (Γ_D) calculada através da Eq. (2.3.54) para cada série de medições.

Medição	Potência de incidência média (μW)	Temperatura °C		Γ_D (MHz)
		Reservatório	Janela	
1	302.2 ± 0.1	30.5 ± 0.5	34.0 ± 0.5	230.0
2	302.2 ± 0.1	34.0 ± 0.5	39.5 ± 0.5	232.0
3	305.8 ± 0.1	38.0 ± 0.5	44.0 ± 0.5	233.7
4	306.2 ± 0.1	43.0 ± 0.5	51.0 ± 0.5	236.3
5	309.2 ± 0.1	52.0 ± 0.5	61.0 ± 0.5	239.9
6	306.2 ± 0.1	55.5 ± 0.5	65.5 ± 0.5	241.5
7	305.4 ± 0.1	67.5 ± 0.5	78.5 ± 0.5	246.1
8	306.0 ± 0.1	78.0 ± 0.5	89.5 ± 0.5	249.9
9	304.4 ± 0.1	87.0 ± 0.5	98.5 ± 0.5	253.0
10	302.4 ± 0.1	99.0 ± 0.5	110.0 ± 0.5	256.9

Adendo sobre Bombeio Óptico

Neste experimento, optou-se por utilizar um feixe laser de alta potência, pois o sinal de transmissão difusa, no geral, é intrinsecamente muito pequeno e o aumento da potência foi crucial para melhorar a resolução das medições. Como resultado, a intensidade do feixe laser incidente tornou-se significativamente maior que a intensidade de saturação das transições atômicas de interesse. Em sistemas ópticos em que a intensidade do laser excede a saturação, a taxa de absorção de fótons torna-se muito alta [181]. Isso significa que os átomos são excitados a uma taxa considerável, o que pode levar a uma grande fração da população atômica a ser transferida para estados específicos, alterando o equilíbrio das populações dos níveis de energia atômicos [181]. Essa condição dá origem ao bombeio óptico, que em sua dinâmica pode modificar o coeficiente de absorção, introduzindo fatores temporais na resposta do meio [113, 117, 197].

O bombeio óptico é um processo fundamental em que a luz, por meio de absorção e re-emissão, redistribui a população de átomos entre seus diferentes estados de energia, resultando em uma alteração das propriedades do conjunto atômico [117, 181]. Em altas intensidades, os

efeitos do bombeio óptico influenciam diretamente o aprisionamento radiativo, que se manifesta na alteração da dinâmica da caminhada aleatória dos fótons e na consequente modificação dos espectros transmitidos [183, 198]. O mecanismo subjacente a essa influência está ligado à saturação óptica: a alta intensidade do feixe laser satura os átomos ao longo de sua trajetória, criando um “canal” de menor absorção que permite à luz de bombeio penetrar mais profundamente no vapor [181, 183, 199]. A fluorescência emitida isotropicamente pelos átomos nesse canal saturado propaga-se para as regiões vizinhas do vapor, que não estão saturadas e, portanto, permanecem opticamente densas. Consequentemente, essa fluorescência é eficientemente reabsorvida pelo vapor circundante, o que aumenta o volume efetivo de aprisionamento e o tempo de permanência dos fótons no meio.

Apesar dos possíveis impactos do bombeio óptico no aprisionamento radiativo em consequência da alta intensidade do campo de incidência, observa-se que, nas asas espetrais, a interação entre os fótons e os átomos se torna tão fraca que os efeitos de absorção são minimizados a ponto de serem praticamente desprezíveis [200]. Consequentemente, os possíveis desdobramentos do bombeio óptico também são minimizados a ponto de serem praticamente desprezíveis. Além disso, experimentos demonstram que, mesmo com intensidade acima da saturação, o alargamento Doppler pode limitar significativamente a fração de átomos excitados, o que permite negligenciar os efeitos complexos do bombeio óptico [201]⁽³⁾. Dessa forma, este experimento ficará restrito à análise das asas espetrais, garantindo, assim, que os efeitos complexos decorrentes da alta intensidade do feixe de incidência sejam desprezíveis.

4.2.2.2 Transmissão Difusa à 10°

Diferentemente da configuração a 90°, este experimento foi concebido para investigar o regime de múltiplos espalhamentos, onde os fótons atravessam o meio atômico por meio de uma caminhada aleatória. O objetivo principal é analisar o espectro de transmissão difusa, medido em um pequeno ângulo frontal (10°), para, a partir dele, determinar experimentalmente o valor do parâmetro de Lévy (α) e, consequentemente, enquadrar o sistema no cenário de transmissão

⁽³⁾Em particular, o artigo menciona a negligência do espalhamento inelástico correspondente ao Tripleto de Mollow, um fenômeno característico do bombeio óptico em forte campo ressonante, nas asas espetrais.

que melhor se ajusta: II (sem colisões) ou III (com colisões).

Para esta investigação, foram utilizadas as três células de vapor descritas anteriormente: a prismática de 2 mm e as cilíndricas de 1 cm e 2 cm. O arranjo experimental, esquematizado na Figura 4.9, consiste em posicionar o aparato de detecção em um ângulo de 10° em relação à direção de propagação do feixe incidente. As medições foram realizadas para diversas densidades atômicas e intensidades do feixe incidente, permitindo mapear a dependência do parâmetro de Lévy com essas condições experimentais para cada uma das geometrias de célula. Os parâmetros adotados em cada medição para as células de 2 mm, 1 cm e 2 cm de comprimento estão detalhados na Tabela 6.

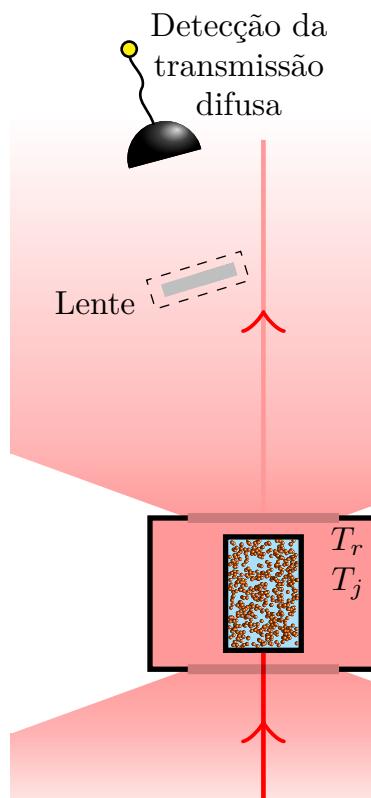


Figura 4.9 – Diagrama esquemático do arranjo para a medição da transmissão difusa a 10° . Uma lente convergente, posicionada a 10° do eixo de propagação, coleta a luz espalhada (representada pelas áreas em vermelho) e a focaliza no fotodetector, com o objetivo de analisar o regime de múltiplos espalhamentos.

Fonte: Autoria própria.

Um componente crucial neste arranjo, como destacado na Figura 4.9, é a lente convergente posicionada antes do fotodetector. A função desta lente é focalizar a luz espalhada no

Tabela 6 – Parâmetros experimentais utilizados nas medições de transmissão difusa, consolidados para as células com comprimentos ℓ de 0.2 cm, 1.0 cm e 2.0 cm. São apresentados para cada medição: a potência média de incidência do laser, as temperaturas do reservatório (T_r) e da janela (T_j), e a respectiva largura Doppler (Γ_D) calculada através da Eq. (2.3.54).

ℓ (cm)	Medição	Potência média de incidência (μW)	Temperatura $^{\circ}\text{C}$		Γ_D (MHz)
			Reservatório	Janela	
0.2	1	1.4 \pm 0.1	77.5 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	252.5
	2	4.2 \pm 0.1	77.5 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	3	6.2 \pm 0.1	77.5 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	4	9.4 \pm 0.1	77.5 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
1.0	1	1.4 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	2	4.0 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	3	6.2 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	4	9.0 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
2.0	1	1.4 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	259.7
	2	4.2 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	3	6.2 \pm 0.1	77.5 \pm 0.5	96.5 \pm 0.5	
	4	9.6 \pm 0.1	78.0 \pm 0.5	97.0 \pm 0.5	
	5	3.6 \pm 0.1	92.5 \pm 0.5	118.5 \pm 0.5	
	6	4.0 \pm 0.1	103.5 \pm 0.5	131.5 \pm 0.5	
	7	3.6 \pm 0.1	114.0 \pm 0.5	143.5 \pm 0.5	

detector, aumentando, assim, de forma significativa a resolução e a intensidade do sinal captado, o que é fundamental para a análise em um regime de baixos sinais. Para garantir a consistência das medições, a lente foi alinhada para que seu centro óptico estivesse na mesma altura do feixe de laser. Além disso, ela foi posicionada de forma a “enxergar” e coletar a luz espalhada proveniente de todo o eixo longitudinal da célula, integrando assim as emissões que ocorrem ao longo de todo o percurso do feixe principal.

4.2.3 Tratamento de Dados

Um passo fundamental no tratamento de dados, realizado previamente à análise do sinal de fluorescência, é a caracterização da potência de saturação, P_{sat} . Este parâmetro é

definido pela relação $P_{\text{sat}} = I_{\text{sat}} A_{\text{eff}}$, onde A_{eff} é a área efetiva do feixe laser, que precisa ser medida experimentalmente. Para isso, o perfil espacial do feixe é capturado com uma câmera CCD, realizando-se uma série de medidas com diferentes tempos de exposição. Essa variação no tempo de exposição garante que a intensidade captada não sature o sensor da câmera, o que distorceria o perfil real, e permite verificar a consistência do cálculo da área em diferentes condições de aquisição. O resultado de uma captura individual, antes de qualquer tratamento computacional, pode ser observado na Figura 4.10a. Cada imagem capturada é então processada computacionalmente: ajusta-se uma função Gaussiana aos seus perfis de intensidade ortogonais (horizontal e vertical) para determinar os raios do feixe na largura correspondente a $1/e$ da intensidade máxima. Assumindo que o feixe possui um perfil elíptico, a área efetiva é calculada como $A_{\text{eff}} = \pi(\text{raio vertical}) \times (\text{raio horizontal})$. A Figura 4.10b ilustra a aplicação completa deste método em uma única imagem. Finalmente, o valor de P_{sat} para a medição é obtido através da média estatística dos resultados de todas as imagens analisadas, assegurando um parâmetro final robusto e preciso. A Tabela 7 apresenta os valores da razão entre a intensidade estimada do feixe e a intensidade de saturação para cada medição.

Tabela 7 – Resumo dos valores da razão entre a intensidade do feixe e a intensidade de saturação (I/I_{sat}) para cada medição experimental. Os dados estão organizados de acordo com as diferentes configurações utilizadas, incluindo o comprimento da célula de vapor (2 mm, 1 cm, 2 cm) e sua orientação angular (10° e 90°).

Medição	I/I_{sat}			
	10°			90°
	2 mm	1 cm	2 cm	
1	0.12 ± 0.01	0.12 ± 0.01	0.11 ± 0.01	12.99 ± 0.01
2	0.37 ± 0.01	0.38 ± 0.01	0.37 ± 0.01	12.99 ± 0.01
3	0.54 ± 0.01	0.52 ± 0.01	0.52 ± 0.01	13.16 ± 0.01
4	0.81 ± 0.01	0.80 ± 0.01	0.84 ± 0.01	13.17 ± 0.01
5	-	-	0.32 ± 0.01	13.30 ± 0.01
6	-	-	0.31 ± 0.01	13.17 ± 0.01
7	-	-	0.31 ± 0.01	13.14 ± 0.01
8	-	-	-	13.16 ± 0.01
9	-	-	-	13.09 ± 0.01
10	-	-	-	13.01 ± 0.01

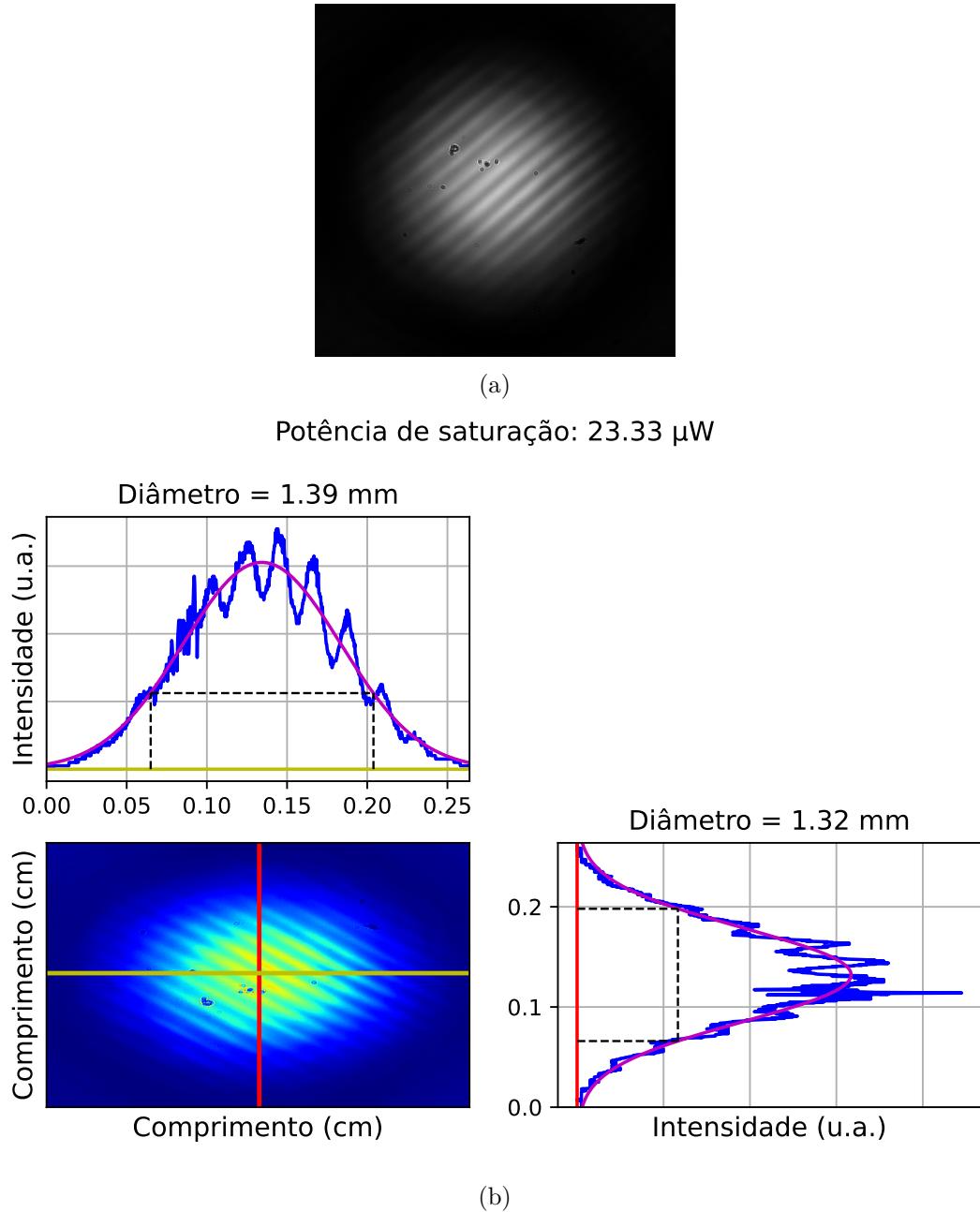


Figura 4.10 – Ilustração do procedimento para determinação da potência de saturação (P_{sat}). Em (a), é mostrado um exemplo da imagem bruta do perfil espacial do feixe, capturada pela câmera. Em (b), apresenta-se a análise computacional de uma imagem similar: o painel inferior esquerdo exibe o mapa de intensidade 2D com as linhas de extração dos perfis; os painéis superior e direito mostram os perfis de intensidade horizontal e vertical (em azul) com seus respectivos ajustes Gaussianos (em rosa), indicando os diâmetros calculados e o valor final da potência de saturação para a medida.

Fonte: Autoria própria.

Uma vez caracterizados os parâmetros do feixe, o foco se volta para a detecção do sinal da transmissão difusa. A natureza extremamente tênue deste sinal impõe desafios significativos, resultando em uma baixa razão sinal-ruído na qual flutuações da eletrônica podem mascarar

a informação física de interesse. Para superar essa limitação, utilizou-se um fotorreceptor de femtowatt (fW) (*Newport*, Modelo 2151 [202]), cuja alta sensibilidade é ideal para a tarefa. Contudo, ao atingir tal sensibilidade, obtida através de um amplificador com altíssimo ganho de transimpedância, a velocidade de resposta do detector torna-se limitada. Operando no modo DC (*Direct Current*, em português “corrente contínua”), adotado nas medições, o detector possui uma largura de banda de 750 Hz, o que corresponde a uma resolução de tempo de aproximadamente 1 ms. Esta característica impõe uma condição estrita sobre a velocidade da varredura de frequência do laser: o tempo de aquisição entre pontos consecutivos do espectro deve ser superior ao tempo de resposta do detector. Consequentemente, todas as varreduras foram realizadas em uma velocidade deliberadamente lenta. Especificamente, em cada medida a 10°, foram capturados 5000 pontos ao longo de 6.0 segundos, enquanto que nas medidas a 90° foram obtidos 3000 pontos em 4.8 segundos.

Mesmo com o uso de fotodetectores de alta sensibilidade e da implementação de arranjos para otimizar a captação, como o uso de uma lente convergente, o sinal de fluorescência coletado ainda é intrinsecamente fraco e continua apresentando uma baixa razão sinal-ruído. Dessa forma, o tratamento dos dados baseia-se na média de múltiplas aquisições, técnica utilizada para atenuar os efeitos do ruído e extrair com fidedignidade a informação física de interesse. Nesse contexto é importante destacar a distinção entre os termos utilizados: uma “medição” representa o experimento completo (um determinado comprimento de célula, sob condições operacionais específicas), enquanto uma “medida” corresponde a cada varredura individual de frequência que será posteriormente tratada e utilizada no processo de média. Após a aquisição de pelo menos 200 medidas, que duram entre 1 e 2 horas devido a baixa velocidade de varredura, a medição é finalizada e o tratamento computacional dos espectros iniciado.

O protocolo de tratamento inicia-se com a etapa de calibração do eixo horizontal de cada medida, convertendo a base de tempo do osciloscópio em uma escala de dessintonia em frequência. Para tal, utiliza-se o espectro de absorção saturada, adquirido simultaneamente em cada medida, como uma régua de frequência absoluta. As posições bem definidas dos picos de ressonância, em particular a transição de ciclo fechado $F = 4 \rightarrow F' = 5$ e o sub-Doppler de

crossover entre as transições $F = 4 \rightarrow F' = 4$ e $F = 4 \rightarrow F' = 5$, servem como pontos de referência para essa calibração, conforme exemplificado na Figura 4.11.

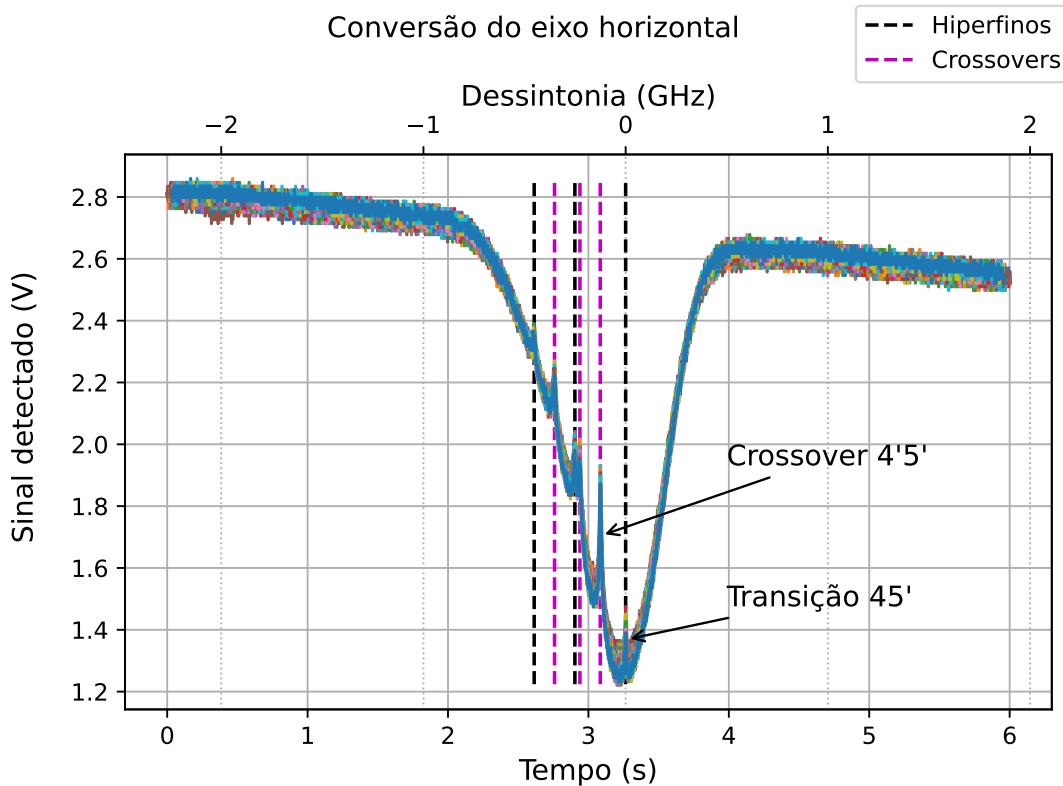


Figura 4.11 – Ilustração do processo de calibração em frequência para os espectros de absorção saturada, referentes à primeira medição de transmissão difusa a 10° na célula de 1 cm. O eixo temporal original, medido em segundos (eixo inferior), é convertido para uma escala de dessintonia, em GHz (eixo superior). As posições conhecidas da transição atômica $F = 4 \rightarrow F' = 5$ (Transição 45') e da ressonância de *crossover* (4'5') são utilizadas como pontos de referência para realizar a conversão.

Fonte: Autoria própria.

Dado o extenso tempo de aquisição de cada medição, o sistema experimental torna-se suscetível a diversas fontes de instabilidade, tornando imperativa uma rigorosa etapa de validação dos dados brutos. Assim, após a calibração em frequência e a interpolação de cada espectro para um eixo de dessintonia comum, cada medida individual é submetida a um protocolo de verificação quantitativo. O primeiro critério baseia-se na análise da largura do espectro de transmissão coerente (balística), que é particularmente eficaz para identificar desvios causados por instabilidades térmicas ⁽⁴⁾. O procedimento para determinar essa largura, ilustrado na Figura

⁽⁴⁾Este espectro é descrito pela lei de Beer-Lambert, Eq. (2.1.22), que depende intrinsecamente do coeficiente de absorção do meio, tornando-a função da densidade atômica que é extremamente sensível a quaisquer flutuações de temperatura ocorridas ao longo do experimento.

4.12, inicia-se com a seleção de um ponto de dessintonia fixo, localizado na borda ascendente da curva de transmissão (a região destacada na figura). Para cada medida individual, a amplitude (tensão) nesse ponto de dessintonia é registrada. Em seguida, o algoritmo busca, na borda descendente do mesmo espectro, a frequência que corresponde a esse mesmo valor de amplitude. A “largura detectada” é então definida como a diferença entre essas duas posições no eixo da frequência. Este processo é repetido para todo o conjunto de medidas, gerando uma população de valores de largura. A partir dessa população, calcula-se a média e o desvio padrão (σ_{LC}), e qualquer medida cuja largura se afaste da média em mais de $2\sigma_{LC}$ é automaticamente descartada.

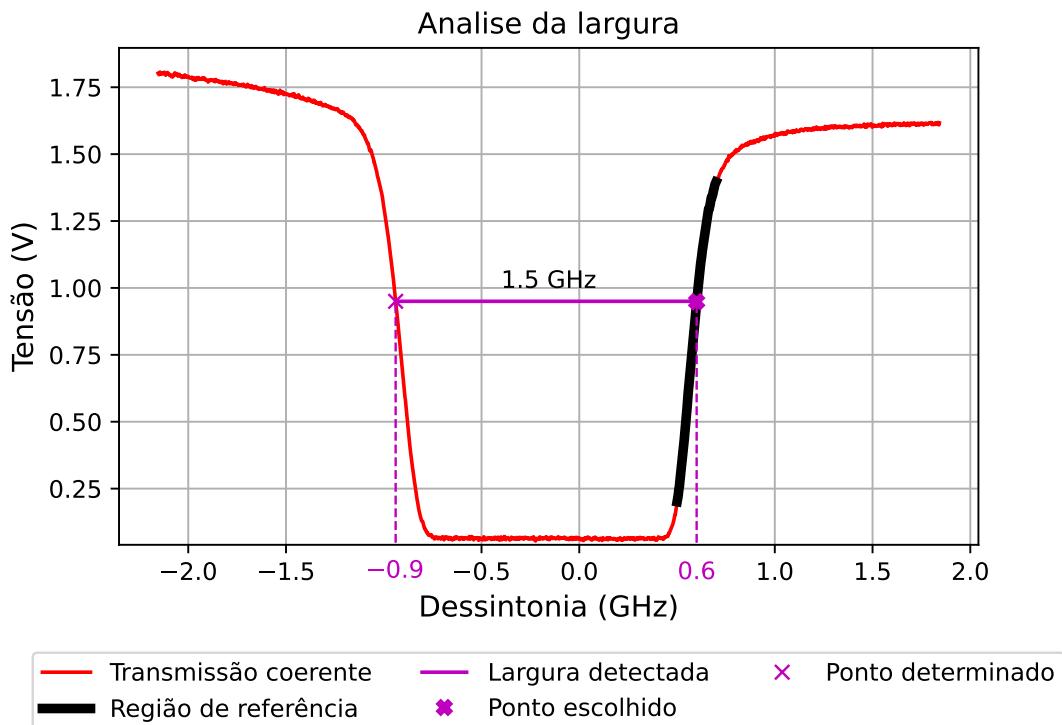


Figura 4.12 – Ilustração do método numérico utilizado para a validação dos dados através da análise da largura do espectro de transmissão coerente. O procedimento inicia-se com a seleção de um ponto de dessintonia fixo (neste caso, em 0.6 GHz) na região de referência da curva (em preto), denominado “Ponto escolhido”. A tensão (V) neste ponto é registrada e o algoritmo determina a frequência correspondente a essa mesma tensão na borda oposta do espectro (“Ponto determinado”), que nesta abordagem foi -0.9 GHz. A “Largura detectada” corresponde à diferença entre as dessintonias (em GHz) desses dois pontos, que, no exemplo da figura, é de 1.5 GHz. Este valor de largura é calculado para cada medida individual e utilizado como critério estatístico para descartar curvas que apresentem instabilidades térmicas.

Fonte: Autoria própria.

Adicionalmente, um segundo critério baseado em correlação é aplicado para identificar

anomalias transientes não necessariamente ligadas à temperatura, como vibrações no ambiente, o cruzamento eventual de poeira no percurso do feixe ou falhas no acionamento (*trigger*) do osciloscópio. Para isso, o coeficiente de correlação de Pearson é calculado para cada medida em relação a um espectro de referência⁽⁵⁾. Esse parâmetro estabelece correspondência linear entre duas curvas, de modo que quando o coeficiente é +1, a correspondência é considerada perfeita [203]. O cálculo é feito através da expressão [203]:

$$\text{Pearson} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}}$$

onde X_i e Y_i são os pontos de intensidade dos dois espectros a serem comparados (a medida individual e a de referência, respectivamente), e \bar{X} e \bar{Y} são seus respectivos valores médios de intensidade.

Com base nesse critério, o algoritmo de análise retorna uma lista ordenada da similaridade de cada curva com o espectro de referência. A partir desta lista, os 100 melhores espectros para o experimento a 10° e os 70 melhores para o de 90° são selecionados para a etapa final do pré-processamento: a média. O resultado é um conjunto de quatro espectros médios (transmissão difusa, absorção saturada, transmissão coerente e rampa de potência) com uma razão sinal-ruído significativamente melhorada e representativo de um sistema sob condições experimentais estáveis.

Apesar da robustez deste processo automatizado, realiza-se uma inspeção visual final para garantir a qualidade da média obtida. Esta verificação consiste em sobrepor graficamente o espectro médio resultante a um subconjunto das medidas individuais. Na Figura 4.13, que ilustra este procedimento, observa-se não apenas a consistência entre os espectros de cada medida (curvas coloridas) e as médias (curvas pretas sobrepostas nas coloridas), mas também visualizar o quanto irrisório é o sinal da transmissão difusa. É importante destacar que essa baixa amplitude persiste mesmo com o emprego de um detector de alta sensibilidade e de uma lente convergente, utilizada para ampliar a captação de fôtons espalhados em múltiplas direções. Contudo, caso seja observada qualquer distorção ou inconsistência que não tenha sido filtrada pelo processo

⁽⁵⁾Este espectro de referência é uma das próprias medidas do conjunto, selecionada por inspeção visual com base na ausência de distorções evidentes e na alta qualidade do sinal, servindo como modelo para as demais.

automático, a seleção de medidas é feita manualmente para garantir a máxima fidedignidade dos dados finais.

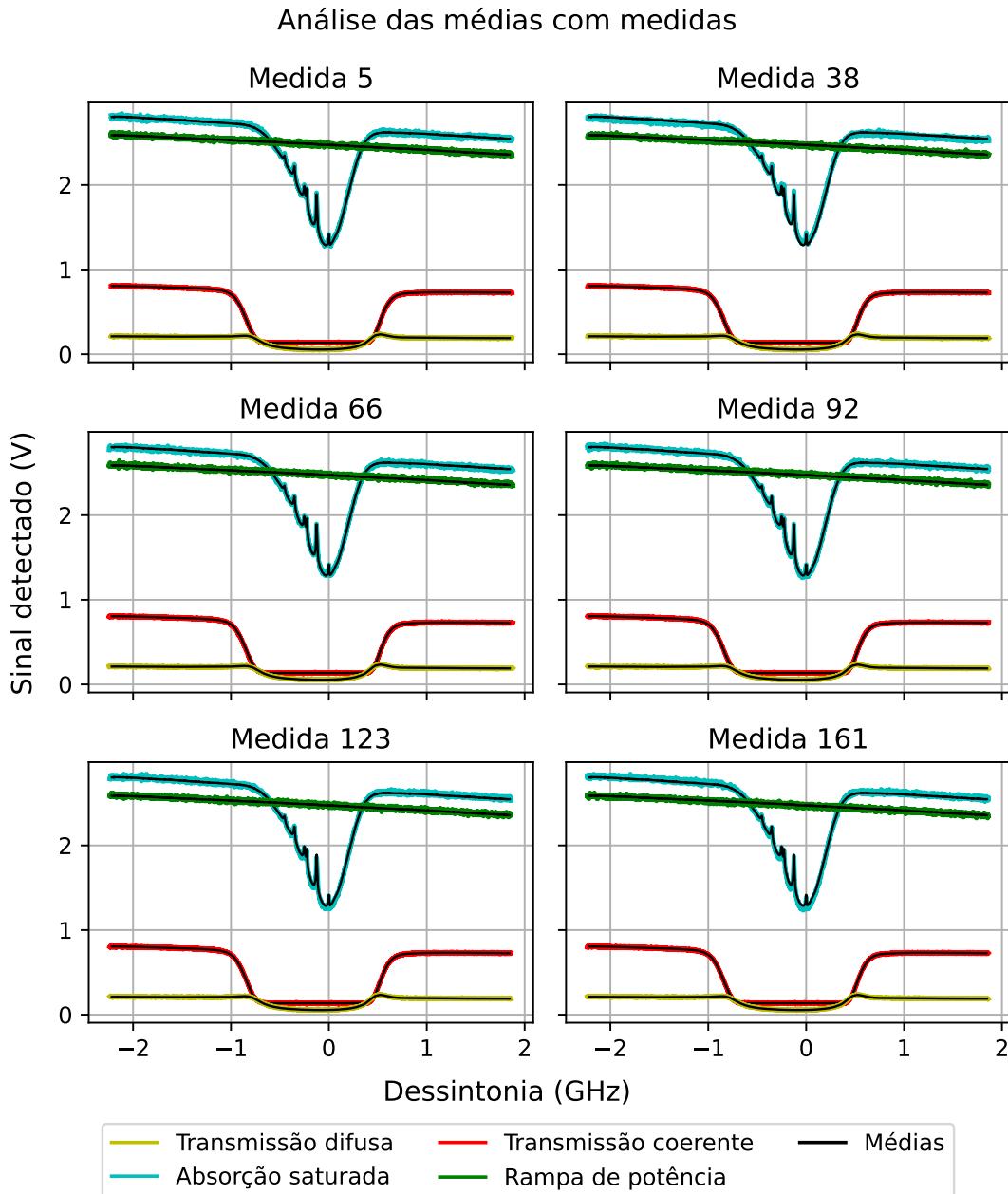


Figura 4.13 – Comparação visual entre uma seleção de medidas individuais (curvas coloridas) e os espectros médios resultantes (curvas pretas sobrepostas), referentes à primeira medição de transmissão difusa a 10° na célula de 1 cm. Cada um dos seis painéis exibe uma medida individual distinta para os quatro canais, transmissão difusa, absorção saturada, transmissão coerente e rampa de potência, permitindo uma inspeção da consistência dos dados que compõem a média final. Esta etapa de validação garante que o processo represente fidedignamente o conjunto de dados.

Fonte: Autoria própria.

Uma vez obtidos os espectros médios, procede-se à normalização e correção dos sinais. A

primeira correção consiste na subtração do sinal de fundo (*offset*), o qual é determinado experimentalmente antes de cada medição: com a saída do laser bloqueada, cada detector registra um espectro de referência que corresponde à luz ambiente. Nessa etapa do tratamento, esse espectro de fundo é subtraído do seu respectivo espectro de sinal. Este procedimento é fundamental, pois garante a correta calibração em amplitude. Especialmente para o espectro de transmissão coerente, isso assegura a determinação precisa da densidade atômica, que será abordada adiante, enquanto para o espectro difuso, permite a extração fidedigna dos dados de transporte radiativo.

A etapa seguinte visa mitigar os efeitos da variação de potência do laser durante a varredura em frequência. Para isso, os espectros são normalizados por um procedimento que envolve a criação de uma rampa de referência customizada para cada sinal. Primeiramente, a curva da rampa de potência, previamente ajustada por uma função linear, é normalizada para que sua amplitude na extremidade inicial seja 1. Em seguida, a rampa de referência é individualmente multiplicada por um fator que corresponde à amplitude inicial do espectro que se deseja normalizar (seja o de transmissão difusa ou coerente). Finalmente, o espectro original é dividido pela rampa customizada. Essa normalização garante que a forma de linha final represente apenas a resposta atômica, livre de artefatos instrumentais, cujo resultado pode ser visualizado na Figura 4.14.

Finalizado essa etapa do tratamento dos dados, determina-se a densidade atômica ((N)) de cada medição a partir do espectro de transmissão coerente médio. O método consiste em ajustar um modelo teórico, fundamentado na lei de Beer-Lambert, Eq. 2.1.22, à curva de transmissão experimental, utilizando (N) como o único parâmetro livre do ajuste. O modelo teórico adotado para calcular o coeficiente de absorção contabiliza individualmente os efeitos de todas as transições hiperfinas (Eq. (2.4.60)) permitidas da linha D2 do Césio. O ajuste é realizado através de um processo iterativo para garantir a autoconvergência do resultado. A cada iteração, um valor para a densidade atômica (N) é obtido. Com base na curva teórica gerada por este valor, o espectro experimental é suavemente renormalizado para corrigir possíveis desvios residuais na linha de base. Essa renormalização é feita de forma análoga à normalização realizada pela rampa de potência. Neste caso, porém, uma reta de correção é calculada utilizando a

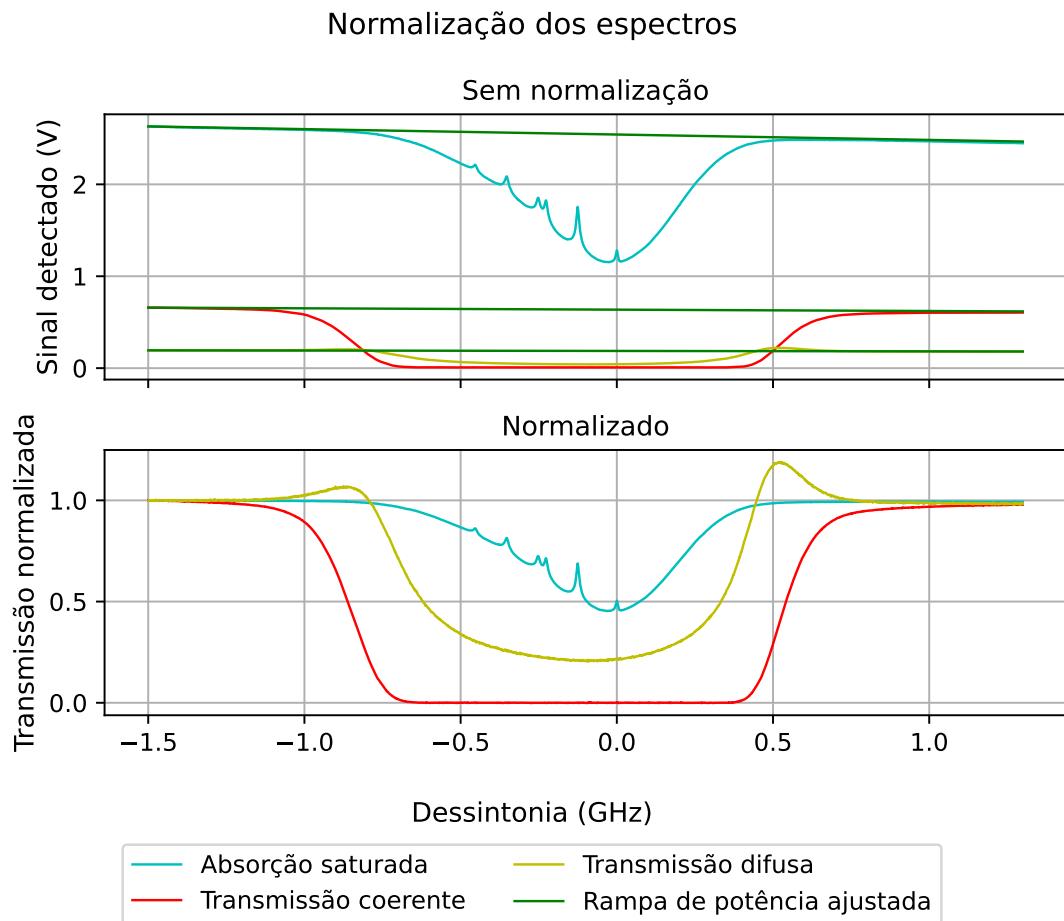


Figura 4.14 – Ilustração do processo de normalização dos espectros pela rampa de potência, referentes à primeira medição de transmissão difusa a 10° na célula de 1 cm. O painel superior (“Sem normalização”) exibe os espectros médios onde a linha de base é afetada pela inclinação da rampa de potência (curva verde). O painel inferior (‘Normalizado’) apresenta os espectros após a correção, com a linha de base devidamente ajustada para uma amplitude unitária, isolando a resposta atômica dos artefatos instrumentais.

Fonte: Autoria própria.

inclinação presente nas extremidades do espectro teórico recém-ajustado. Determinada a reta, o espectro experimental original é então multiplicado por esta nova reta, gerando uma curva com uma linha de base aprimorada para a próxima iteração do ajuste. O processo é repetido e se encerra quando a diferença relativa entre os valores de N obtidos em duas iterações consecutivas se torna inferior a uma tolerância preestabelecida de 0.1%. A evolução deste processo é ilustrada na Figura 4.15. O valor final convergido é, então, adotado como a densidade atômica daquela medição específica. Os resultados deste procedimento para todas as medições realizadas neste trabalho estão compilados na Tabela 8 e verificou-se que os valores obtidos seguem as previsões

teóricas estabelecidas em [113]. A partir das condições de cada medição, foram também determinadas a largura colisional, Γ_c , e a probabilidade de colisão atômica, P_c . Os resultados para estes parâmetros estão compilados na Tabela 9.

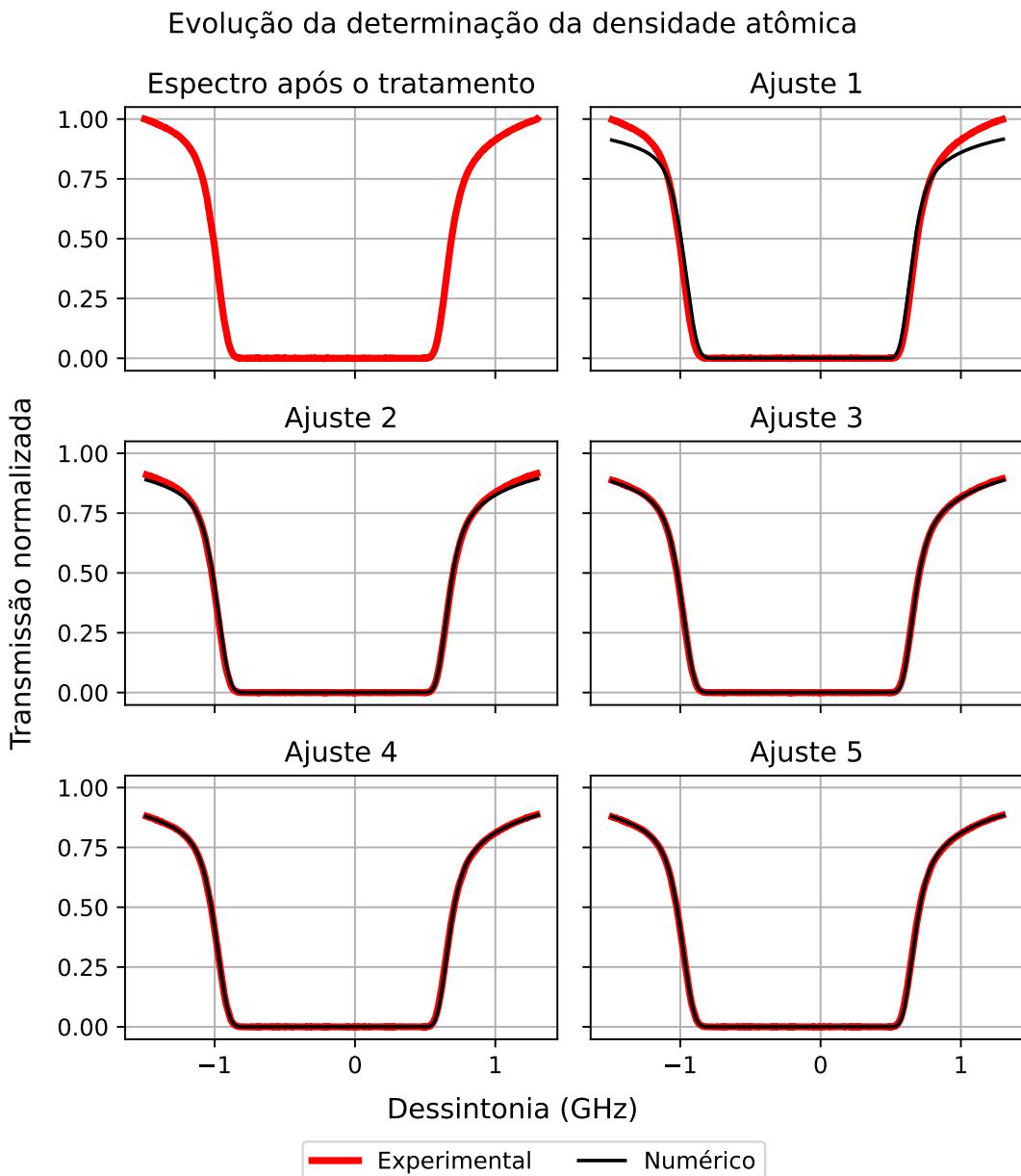


Figura 4.15 – Evolução do processo iterativo para a determinação da densidade atômica, referentes à quinta medição de transmissão difusa a 10° na célula de 2 cm. O painel superior esquerdo mostra o espectro de transmissão coerente experimental após o tratamento inicial. Os painéis subsequentes (“Ajuste 1” à “Ajuste 5”) ilustram as iterações do ajuste, mostrando a convergência entre o modelo numérico (curva preta) e o espectro experimental renormalizado (curva vermelha). A sutil modificação na curva experimental entre as etapas evidencia o processo de correção da linha de base, que utiliza a própria solução teórica para refinar os dados de entrada da iteração seguinte.

Fonte: Autoria própria.

Tabela 8 – Resumo dos valores da densidade atômica (N), em m^{-3} , determinados experimentalmente para cada medição. Os resultados estão organizados de acordo com a configuração experimental: transmissão difusa a 10° , para as três geometrias de célula (2 mm, 1 cm e 2 cm) e transmissão difusa a 90° .

Medição	Densidade atômica ($\times 10^{18} \text{ m}^{-3}$)			
	10°			90°
	2 mm	1 cm	2 cm	
1	3.53 ± 0.01	3.55 ± 0.05	3.61 ± 0.07	$(7.37 \pm 0.02) \times 10^{-2}$
2	3.37 ± 0.03	3.49 ± 0.04	3.77 ± 0.02	$(9.40 \pm 0.01) \times 10^{-2}$
3	3.43 ± 0.02	3.51 ± 0.04	3.53 ± 0.02	$(1.34 \pm 0.02) \times 10^{-1}$
4	3.47 ± 0.03	3.57 ± 0.04	3.72 ± 0.03	$(2.18 \pm 0.03) \times 10^{-1}$
5	-	-	10.5 ± 0.4	$(4.87 \pm 0.04) \times 10^{-1}$
6	-	-	24.7 ± 0.1	$(6.12 \pm 0.01) \times 10^{-1}$
7	-	-	44.0 ± 0.1	1.66 ± 0.02
8	-	-	-	3.50 ± 0.01
9	-	-	-	6.87 ± 0.02
10	-	-	-	17.6 ± 0.3

Particularidade do Experimento à 90°

A determinação da densidade atômica para as medições de transmissão difusa a 90° exigiu uma adaptação na metodologia experimental padrão. Nesses experimentos, a alta intensidade do laser, empregada para maximizar o sinal de fluorescência, induz efeitos de bombeamento óptico que deformam o espectro de transmissão coerente nas proximidades das transições atômicas. Visto que o modelo teórico para o coeficiente de absorção adotado neste trabalho não contempla tais efeitos, o ajuste direto sobre o espectro deformado tornou-se impraticável. Para contornar essa limitação, antes do início e após o término da medição principal de alta intensidade, reduziu-se significativamente a potência do feixe para um nível muito inferior à de saturação e algumas medidas foram realizadas. A densidade atômica de cada medição foi, então, obtida a partir da análise destes espectros auxiliares de baixa intensidade, garantindo uma caracterização precisa do meio.

Tabela 9 – Parâmetros relevantes para cada medição. A largura colisional Γ_c foi determinada através da Eq. (2.2.31), utilizando o coeficiente de alargamento por pressão β apresentado na Tabela 1. A probabilidade de colisão P_c foi calculada com a Eq. (2.3.50).

Experimento	Medição	Γ_c (MHz)	P_c (%)
90°	1	0.0	0.1
	2	0.0	0.2
	3	0.0	0.2
	4	0.0	0.3
	5	0.0	0.8
	6	0.1	1.0
	7	0.1	2.8
	8	0.3	5.7
	9	0.6	10.6
	10	1.6	23.3
10°	1, 2, 3 e 4 das células de 2 mm, 1 cm e 2 cm	0.3	5.7
	2 cm	5	0.9
		6	2.2
		7	4.0

Particularidade do Tratamento à 10°

Uma particularidade das medições a 10° é a necessidade de se corrigir o sinal de transmissão difusa da contribuição originada pelo espalhamento de luz nas janelas da célula e do forno. Devido ao pequeno ângulo de detecção, uma fração da componente balística do feixe pode atingir a lente de detecção. Essa contribuição indesejada é o que torna as asas do espectro não nulas, manifestando-se como um valor constante que mascara o sinal de fluorescência de interesse. A remoção deste artefato é feita, portanto, subtraindo-se a componente de transmissão coerente do sinal difuso total. Contudo, este procedimento levanta um desafio crucial: como garantir que a correção seja exata, sem subestimar ou superestimar a contribuição espúria, o que levaria a resultados e interpretações imprecisas.

A solução para este desafio reside na condução proposital dos experimentos em um regime de absorção total, uma vez que a análise se concentra justamente na região espectral próxima às

ressonâncias, onde o múltiplo espalhamento é dominante. Neste regime de alta densidade óptica, a transmissão de fótons balísticos no centro da linha é, por definição, nula. Isso fornece um ponto de referência inequívoco para validar a correção: qualquer sinal detectado no canal difuso é, necessariamente, atribuível apenas ao artefato de espalhamento. Para executar a subtração sem adicionar ruído ao sinal difuso, utiliza-se o espectro coerente teórico (a curva sem ruído obtida do ajuste de densidade) garantindo uma remoção precisa da contaminação do espectro difuso sem degradar a razão sinal-ruído. O resultado final deste protocolo é exemplificado na Figura 4.16.

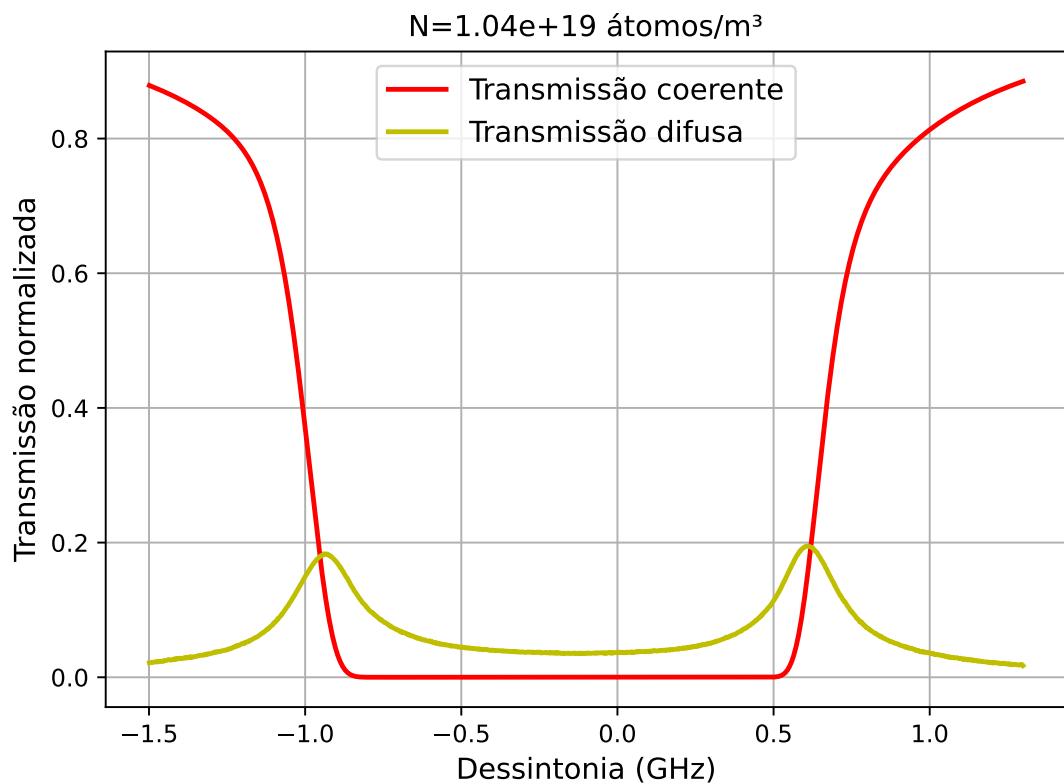


Figura 4.16 – Exemplo dos espectros finais após a aplicação de todo o protocolo de tratamento de dados para uma medição a 10° com densidade atômica de $N \approx 1.04 \times 10^{19}$ átomos/m³. Esses espectros são da quinta medição da célula de 2 cm. A curva vermelha representa o espectro de transmissão coerente teórico, onde se destaca a transmissão nula na região próxima ao centro de linha (o máximo do coeficiente de absorção é aproximadamente em 65MHz), caracterizando o regime de absorção total. A curva amarela representa o espectro de transmissão difusa experimental, já corrigido das contribuições de espalhamento nas janelas.

Fonte: Autoria própria.

4.2.3.1 Ajuste da Lei de Potência

Conforme discutido no capítulo 1, existem diversas abordagens experimentais para se determinar o parâmetro de Lévy (α) em vapores atômicos, que vão desde a medição direta da distribuição do tamanho do passo até a análise de leis de escala macroscópicas. Um método particularmente poderoso, expresso na Eq. (3.2.16), estabelece que o expoente pode ser extraído medindo-se como a transmissão difusa total (T_D) varia com a geometria e a profundidade óptica do sistema. Este é um princípio geral de transporte, mas sua aplicação pode seguir diferentes estratégias.

Abordagens tradicionais frequentemente focavam em variar a profundidade óptica do meio, r_l , geralmente alterando um parâmetro físico como a densidade atômica. A partir da relação de escala $T_D \propto r_l^{-\alpha/2}$, o valor de α era então determinado. Um exemplo típico desta abordagem é ilustrado na Figura 4.17, que foi retirada do artigo de Macedo et al. [3].

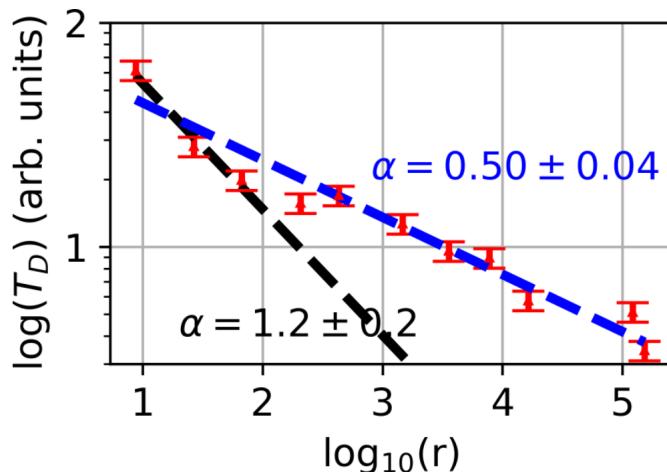


Figura 4.17 – Exemplo de determinação do expoente de Lévy (α) a partir do ajuste da transmissão difusa total (T_D) em função da profundidade óptica da amostra (r), conforme metodologia de Macedo et al. (2021) [3]. Os dados experimentais são plotados em escala log-log, onde a relação de lei de potência $T_D \propto r^{-\alpha/2}$ (com $r \equiv r_l$) se manifesta como uma reta [3]. O gráfico evidencia uma transição no regime de transporte: para baixas opacidades, o ajuste resulta em $\alpha = 1.2 \pm 0.2$ (consistente com o regime Doppler), enquanto para altas opacidades, obtém-se $\alpha = 0.50 \pm 0.04$ (consistente com o regime Lorentziano) [3].

Fonte: [3].

Nesta tese, adota-se a metodologia desenvolvida por Lopez et al. [91], abordagem concebida no âmbito do grupo de pesquisa do qual o autor desta tese faz parte. Trata-se de uma

generalização e aplicação prática da Eq. (3.2.16), cuja inovação consiste em utilizar a própria frequência da fonte de excitação (ν) como uma ferramenta para varrer os pontos de partida. Como a profundidade de penetração média, $1/\kappa(\nu)$, é uma função direta da dessintonia, uma única varredura espectral permite explorar uma vasta gama de valores de $1/\kappa(\nu)$ sob densidade constante. Desta forma, o espectro de transmissão difusa em função da frequência é remapeado em uma curva de $T_D(\nu)$ versus $1/\kappa(\nu)\ell$. A análise é então realizada ajustando-se uma lei de potência a estes dados, que no limite assintótico $1/\kappa(\nu)\ell \ll 1$ segue a relação

$$T_D(\nu) \propto \left(\frac{1}{\kappa(\nu)\ell} \right)^{\alpha/2}. \quad (4.2.2)$$

O ajuste é feito em uma escala log-log, onde o coeficiente angular da reta resultante permite extrair diretamente o valor de α , associado ao regime de transporte dos fótons.

Um exemplo prático deste procedimento, referente à primeira medição realizada com a célula de 2 mm, é apresentado na Figura 4.18. O painel esquerdo da figura exibe o espectro de transmissão difusa experimental (curva amarela). O eixo horizontal inferior indica a dessintonia absoluta do laser em GHz. O eixo superior, por sua vez, representa a dessintonia relativa em unidades da largura Doppler, ν/Γ_D , cujo ponto zero está alinhado ao máximo do coeficiente de absorção da transição de interesse (localizado em aproximadamente -70 MHz). A região de dados utilizada para o ajuste, localizada nas proximidades das ressonâncias hiperfinas (marcadores em “x” na cor azul), é destacada em vermelho. No painel direito, estes mesmos pontos de dados são remapeados em uma escala log-log. Nesta nova representação, o eixo horizontal inferior corresponde à profundidade de penetração normalizada, $1/(\kappa(\nu)\ell)$, que por sua vez está diretamente relacionada à posição média do primeiro espalhamento, $\langle z_0 \rangle$, indicada no eixo superior. Os pontos em vermelho representam os dados experimentais neste novo formato, sobre os quais se realiza um ajuste linear (linha preta), correspondente à lei de potência da Eq. (4.2.2). Para este caso específico, o coeficiente angular do ajuste forneceu um expoente de Lévy de $\alpha = 0.77$.

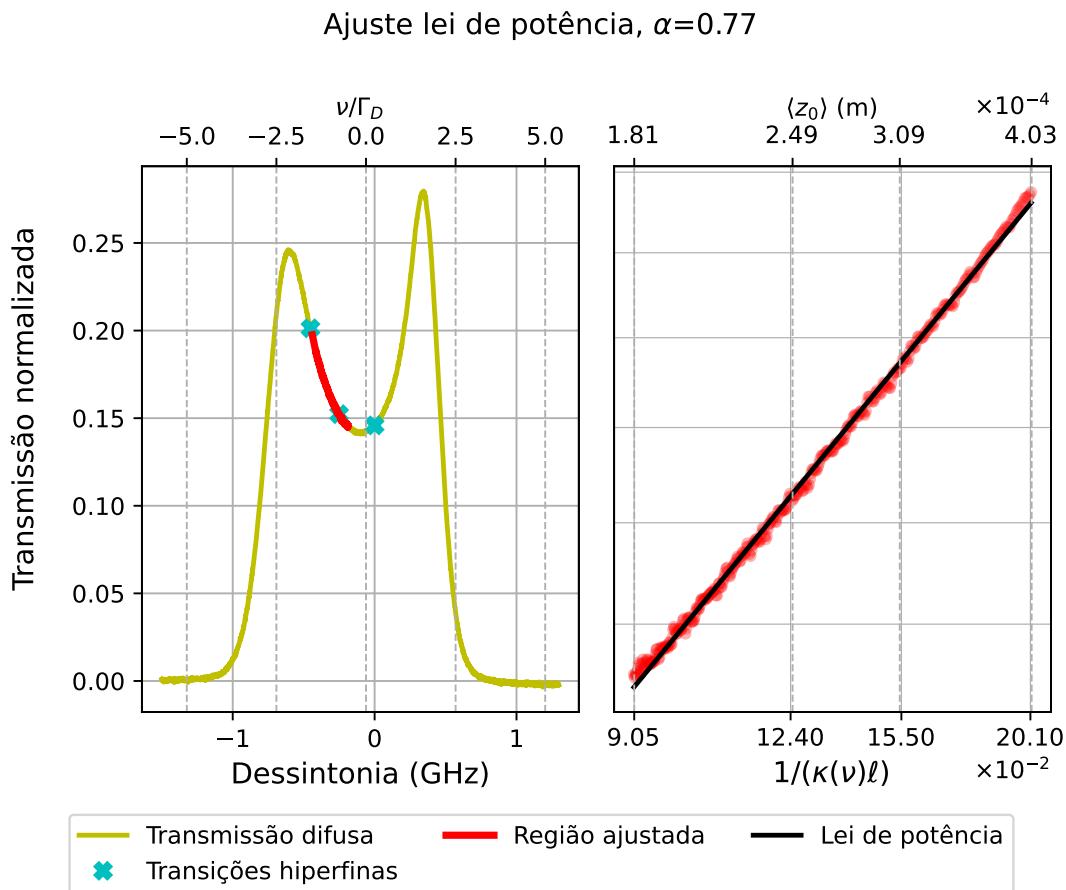


Figura 4.18 – Ilustração do processo de ajuste da lei de potência para a determinação do expoente de Lévy α , referente à primeira medição da célula de 2 mm. Painel esquerdo: Espectro de transmissão difusa (curva amarela). O eixo inferior mostra a dessintonia absoluta em GHz, enquanto o superior exibe a dessintonia relativa ν/Γ_D , cujo ponto zero está posicionado sobre o máximo do coeficiente de absorção (em ≈ -70 MHz). A seção em vermelho, localizada entre as transições hiperfinas (marcadores em “x” na cor azul), indica a região de dados selecionada para o ajuste. Painel direito: Dados da região selecionada remapeados em escala log-log. O gráfico mostra a transmissão difusa $T_D(\nu)$ em função da profundidade de penetração normalizada $1/(\kappa(\nu)\ell)$ (eixo inferior). O eixo superior indica a correspondente posição média do primeiro espalhamento, $\langle z_0 \rangle$. A linha preta representa o ajuste da potência sobre os dados experimentais (pontos vermelhos), cujo coeficiente angular resulta em $\alpha = 0.77$ para esta medição. Esse ajuste foi feito entre $0.5\Gamma_D$ e $1.5\Gamma_D$ (aproximadamente, -180 MHz e -440 MHz, respectivamente).

Fonte: Autoria própria.

Região Sondada

É importante ressaltar a abordagem prática adotada para definir a região de ajuste da lei de potência. Conforme justificado por Lopez et al. [91], como a transição entre o regime de redistribuição de frequência e o de correlação entre passos não é uma fronteira nítida, adota-se um limite prático e conservador para a análise. Desta forma, o ajuste da lei de potência é restrito

à região espectral de aproximadamente duas larguras Doppler ($2\Gamma_D$) em torno do máximo do coeficiente de absorção. Os autores demonstram que esta escolha é uma aproximação razoável do limite teórico mais complexo, garantindo assim que a extração do expoente α seja realizada em uma faixa de dessintonias onde as premissas do modelo de voos de Lévy sem correlações são fidedignamente atendidas.

Além de delimitar a largura da região espectral para o ajuste, é crucial decidir qual lado do espectro, em relação ao máximo de absorção, será utilizado. Em princípio, a lei de potência poderia ser aplicada tanto no lado de dessintonia azul (mais energético, à direita do máximo) quanto no lado vermelho (menos energético, à esquerda). A escolha, contudo, é ditada pelo modelo teórico adotado (descrito no capítulo 3), pois a validade da Eq. (3.2.16) e, por consequência, de sua generalização na Eq. (4.2.2), baseia-se na premissa de que a transmissão difusa seja dominada por múltiplos espalhamentos.

A decisão de qual lado do espectro é mais adequado para o ajuste foi, portanto, guiada pela análise da contribuição do primeiro espalhamento, ilustrada na Figura 4.19. Este gráfico exibe a transmissão difusa teórica para o primeiro evento de espalhamento, calculada pela Eq. (3.2.11) para um ângulo de detecção de 10° , considerando as condições da primeira medição de cada comprimento de célula. Ao avaliar a região no entorno do centro de linha, observa-se uma forte assimetria com uma contribuição significativamente mais proeminente no lado azul do espectro, um comportamento já documentado por Lopez et al. [91].

É pertinente notar que, enquanto o cálculo teórico avalia a contribuição para um ângulo fixo, a medição experimental integra os sinais sobre o ângulo sólido da lente de detecção. Para minimizar efeitos de borda e possíveis aberrações ópticas, o diâmetro da lente foi limitado por uma íris, resultando em um raio efetivo de $R_l = 3.000 \pm 0.005$ cm, medido com um paquímetro. A distância entre os centros geométricos das células e a lente, aferida com uma régua, foi de $d_{\text{lente/célula}} = 65.0 \pm 0.1$ cm. Com base nesses parâmetros, o ângulo sólido de coleta foi de aproximadamente⁽⁶⁾ 0.0067 sr. Dado que este valor é pequeno, o cálculo teórico para um ângulo fixo representa uma aproximação válida. Portanto, considerando que a presença dominante

⁽⁶⁾O ângulo sólido da lente foi estimado assumindo geometria cônica: $\Omega_{\text{lente}} = 2\pi(1 - \cos\theta_{\text{lente}})$, com $\theta_{\text{lente}} = \arctan(R_{\text{lente}}/d_{\text{lente/célula}})$; para $R = 3.000$ cm e $d = 65.0$ cm, obtém-se $\Omega_{\text{lente}} \approx 0.0067$ sr.

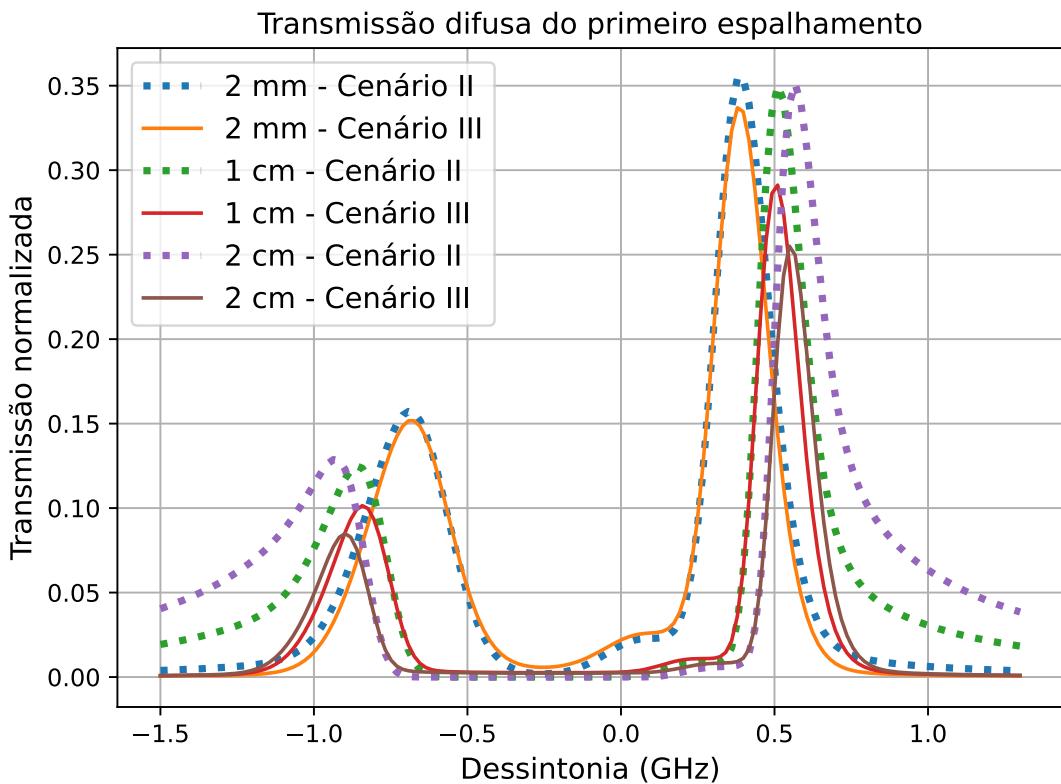


Figura 4.19 – Análise teórica da contribuição do primeiro evento de espalhamento para a transmissão difusa, em função da dessintonia em frequência. As curvas foram calculadas utilizando a Eq. (3.2.11) para um ângulo de detecção de 10° , empregando-se os parâmetros experimentais (densidade e temperatura) extraídos da primeira medição realizada para cada comprimento de célula: 2 mm, 1 cm e 2 cm. Para cada comprimento, são apresentados os dois regimes de interação: o Cenário II (curvas pontilhadas), que corresponde ao espalhamento sem colisões (resultando em redistribuição parcial de frequência), e o Cenário III (curvas sólidas), que considera o efeito de colisões frequentes (levando à completa redistribuição de frequência). O resultado principal evidenciado pelo gráfico é a forte assimetria do espectro, com um pico de transmissão significativamente mais proeminente no lado de dessintonia azul (positivo). Esta observação é a principal justificativa para a escolha da região de dessintonia vermelha para a análise subsequente da lei de potência, de modo a minimizar a influência deste primeiro evento de espalhamento e garantir a validade do modelo de múltiplos espalhamentos.

Fonte: Autoria própria.

do primeiro espalhamento no lado azul viola a premissa de múltiplos espalhamentos do modelo, optou-se por realizar a análise da lei de potência exclusivamente na região de dessintonia vermelha para todas as medições, garantindo maior fidedignidade ao modelo teórico empregado.

Por fim, embora a lei de potência seja notória na região $1/\kappa(\nu)\ell \ll 1$, os pontos de dados correspondentes às menores profundidades de penetração, ou seja, aqueles no entorno imediato do máximo do coeficiente de absorção, podem apresentar desvios do comportamento linear em

uma escala log-log. Uma demonstração prática deste efeito é apresentada na Figura 4.20, que utiliza os dados da primeira medição da célula de 2 mm. Na figura, a análise foi intencionalmente realizada em uma região que inclui estes pontos, com o ajuste compreendido entre o máximo do coeficiente de absorção (em ≈ 70 MHz) e um desvio de $1.5\Gamma_D$ (em ≈ -440 MHz). O painel direito, que exibe os dados em escala log-log, evidencia que os pontos mais à esquerda (menores profundidades de penetração) se curvam e desviam da reta de ajuste. Este comportamento justifica a decisão de, por rigor, negligenciar uma região espectral de meia largura Doppler ($0.5\Gamma_D$) em torno do máximo de absorção em todas as análises, garantindo que o expoente α seja extraído da região onde o modelo é mais fidedigno.

4.3 Resultados e Discussão

Os dados experimentais obtidos para as configurações de transmissão difusa a 90° e 10° são apresentados e discutidos. A análise confronta os resultados medidos com as previsões dos modelos teóricos de transporte radiativo, com o objetivo de elucidar os mecanismos físicos em diferentes regimes de interação. A investigação foca-se, inicialmente, no espalhamento único para, em seguida, caracterizar o transporte no regime de múltiplos espalhamentos através da determinação do expoente de Lévy, α .

4.3.1 Transmissão à 90°

As Figuras 4.21 e 4.22 apresentam uma comparação detalhada entre os espectros de transmissão difusa a 90° , obtidos experimentalmente, e as curvas teóricas correspondentes, calculadas com base na Eq. (3.2.9). Esta análise abrange um conjunto de dez medições, cada uma realizada sob uma densidade atômica distinta, variando de $N \approx 7.4 \times 10^{16}$ até $N = \approx 1.8 \times 10^{19}$ m $^{-3}$. A comparação visa determinar qual dos dois modelos teóricos, Cenário II (ausência de colisões, resultando em PFR) ou Cenário III (presença de colisões, levando à CFR), descreve com maior precisão o regime de espalhamento único no vapor de césio.

Ao inspecionar a Figura 4.21, torna-se imediatamente evidente que, na região central do espectro (em torno de $\nu \approx 0$ GHz), os dados experimentais exibem uma estrutura complexa que não é reproduzida por nenhum dos modelos teóricos de primeiro espalhamento. Tal divergência,

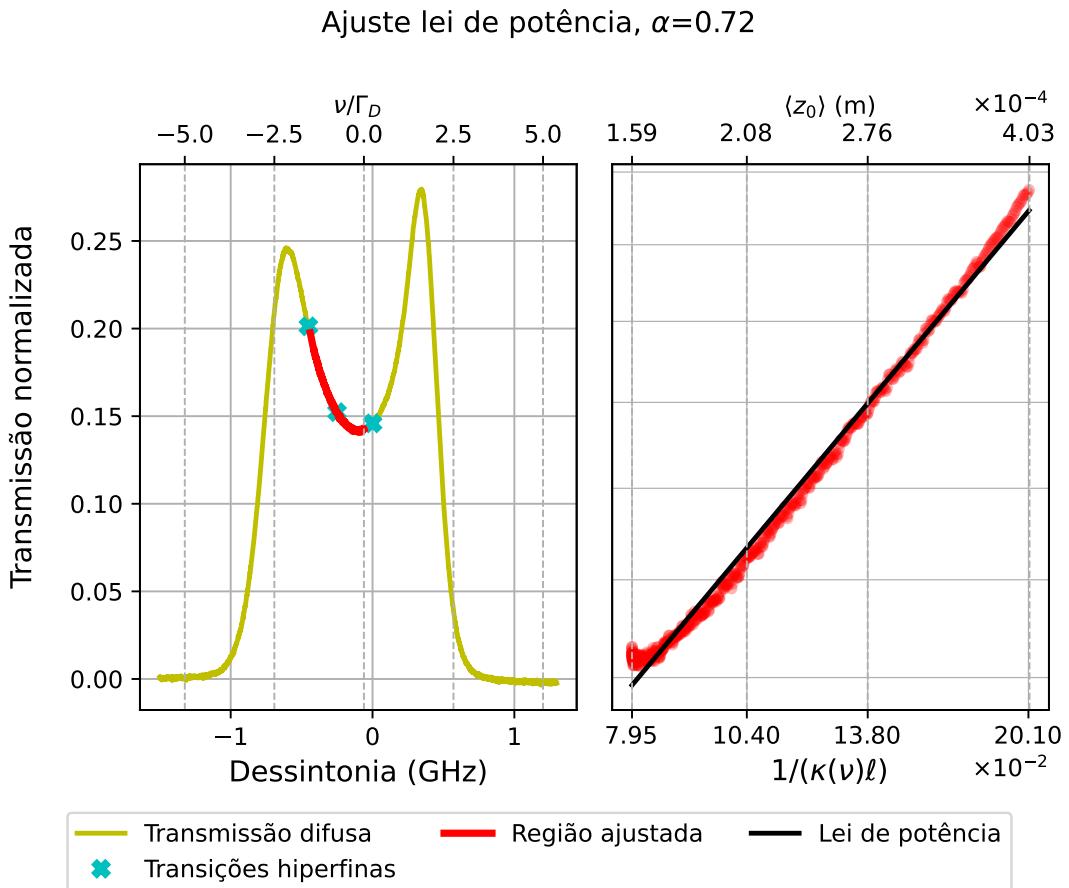


Figura 4.20 – Ilustração do desvio do comportamento de lei de potência, exemplificado com os dados da primeira medição da célula de 2 mm. Painel esquerdo: Espectro de transmissão difusa (curva amarela) em função da dessintonia, em GHz (eixo inferior) e em unidades da largura Doppler ν/Γ_D (eixo superior, com zero posicionado sobre o máximo do coeficiente de absorção em ≈ -70 MHz). A seção em vermelho destaca a região de ajuste, compreendida entre o máximo de absorção e um desvio de $1.5\Gamma_D$. Painel direito: Dados da região selecionada remapeados em escala log-log, mostrando $T_D(\nu)$ em função da profundidade de penetração normalizada $1/(\kappa(\nu)\ell)$ (eixo inferior) e da correspondente posição média do primeiro espalhamento $\langle z_0 \rangle$ (eixo superior). A linha preta representa o ajuste linear, que resulta em $\alpha = 0.72$. É notável que na região inferior esquerda do gráfico, correspondente às menores profundidades de penetração, os dados experimentais (pontos vermelhos) desviam-se visivelmente do comportamento de lei de potência, justificando a exclusão desta região no processo de ajuste padrão.

Fonte: Autoria própria.

contudo, é esperada e atribuível a dois fatores físicos preponderantes:

- Primeiramente, o modelo teórico da Eq. (3.2.9) foi desenvolvido para descrever exclusivamente a contribuição de fótons que sofrem um único evento de espalhamento. No entanto, próximo à ressonância, a profundidade óptica do meio torna-se extremamente elevada, e o transporte de radiação passa a ser dominado por múltiplos espalhamentos. Nessas con-

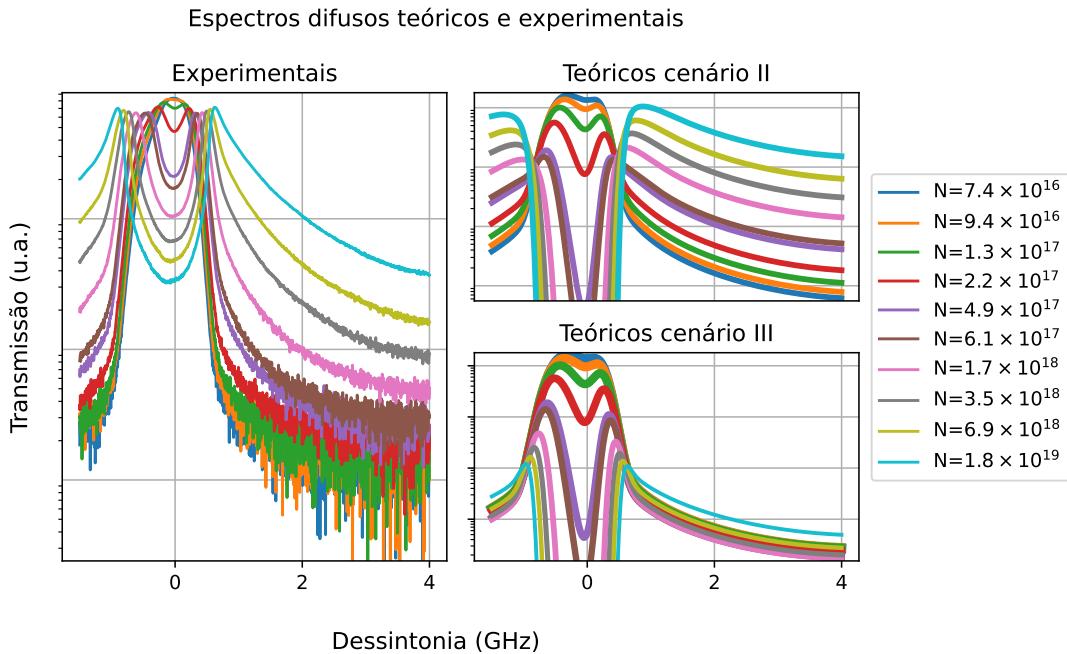


Figura 4.21 – Comparativo entre os espectros de transmissão difusa a 90° em uma ampla faixa de dessintonia. O painel esquerdo exibe os espectros experimentais para dez densidades atômicas distintas, de $N \approx 7.4 \times 10^{16}$ até $N \approx 1.8 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$. Cada cor representa uma densidade atômica específica, e essa correspondência de cores é mantida nos três painéis para permitir uma comparação direta. Os painéis à direita superior e inferior, mostram, respectivamente, as previsões teóricas para o Cenário II (PFR, sem colisões) e Cenário III (CFR, com colisões), calculadas com a Eq. (3.2.9) para o mesmo conjunto de densidades das medições experimentais. Nota-se uma forte discrepância entre os modelos teóricos de primeiro espalhamento e os dados experimentais na região central do espectro ($\nu \approx 0 \text{ GHz}$, no entorno do centro de linha). Contudo, nas asas espectrais ($\nu > 2 \text{ GHz}$), observa-se uma notável concordância qualitativa entre os dados experimentais e o Cenário II.

Fonte: Autoria própria.

dições, os fôtons são aprisionados e executam uma caminhada aleatória, o que invalida a premissa do espalhamento único e torna o modelo inadequado para descrever a emissão no centro da linha.

- Em segundo lugar, como abordado na Subseção 4.2.2.1, o experimento foi conduzido sob um regime de alta intensidade do laser, uma condição necessária para maximizar o sinal de fluorescência. Essa alta intensidade induz efeitos de bombeamento óptico, que redistribuem as populações atômicas e introduzem não-linearidades no coeficiente de absorção do meio. Visto que o modelo teórico empregado não contempla tais efeitos, a resposta experimental na região central diverge fundamentalmente das previsões.

Por essas razões, a análise quantitativa prossegue focando-se nas asas espectrais, região na qual o modelo de espalhamento único é aplicável e a resposta do sistema pode ser comparada diretamente com as previsões teóricas.

Focando nas regiões das asas espectrais, a Figura 4.21 revela uma excelente concordância qualitativa entre os resultados experimentais e as previsões teóricas do Cenário II (PFR). Observa-se que, em ambos os casos, a amplitude da transmissão difusa aumenta monotonicamente com o aumento da densidade atômica. Em forte contraste, o Cenário III (CFR) prevê uma evolução distinta e não monotônica da transmissão difusa. Para este cenário, a intensidade inicialmente cresce com a densidade, atinge um máximo e, em seguida, decai, para finalmente voltar a crescer em densidades muito elevadas.

A origem do comportamento não monotônico observado nas asas espectrais, um efeito exclusivo do Cenário III, reside na competição entre dois fatores. Conforme visto no capítulo 3, a transmissão difusa é, em essência, proporcional ao produto da probabilidade de absorção inicial e da probabilidade de escape subsequente. Para analisar este fenômeno, a evolução do sinal com o aumento da densidade atômica é observada em uma frequência fixa dentro desta região (por exemplo, na faixa de 3.0 a 3.5 GHz) e pode ser detalhada em três regimes distintos:

- Crescimento inicial na amplitude: Em baixas densidades ($N = 7.4 \times 10^{16}$ e $9.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$), o meio é praticamente transparente para o fóton reemittido, então a probabilidade de escape é próxima de 1. O sinal é, portanto, dominado pela probabilidade de absorção do fóton incidente, que é proporcional a $\kappa(\nu)$ e, consequentemente, a N . Assim, o sinal cresce inicialmente com a densidade.
- Redução na amplitude: À medida que a densidade aumenta para o regime intermediário ($N = 1.3 \times 10^{17}$ à $1.7 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$), a diferença entre os cenários torna-se evidente. No Cenário III, as colisões tornam-se frequentes o suficiente para induzir a CFR. No entanto, neste regime de densidade, a CFR atua principalmente “aprisionando” os fótons: o espetro de reemissão passa a espelhar o perfil de absorção, o que concentra a esmagadora maioria das emissões no centro da linha espectral, onde o coeficiente de absorção $\kappa(\nu')$ é máximo. A probabilidade de emissão nas asas distantes, embora exista, ainda é muito

baixa. Consequentemente, a probabilidade de escape lateral desses fótons, agora reemitidos na região mais opaca do vapor, despenca drasticamente. Este comportamento contrasta fundamentalmente com o do Cenário II (PFR). Na ausência de colisões, a emissão permanece correlacionada, ocorrendo nas asas. Nessa região de baixa absorção, a probabilidade de escape se mantém alta e, por essa razão, a transmissão no Cenário II continua a crescer monotonicamente com a densidade.

- Novo crescimento na amplitude: Ao chegar em uma determinada densidade atômica ($N = 3.5 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ em diante), o cenário muda novamente. Embora a emissão continue sendo mais provável no centro, o grande número de centros espalhadores (proporcional a N) fazem com que a probabilidade absoluta de emissão nas asas distantes, onde o vapor é transparente, se torne significativa. Nesse caso, mesmo que a probabilidade de escape seja quase nula para fótons reemitidos perto da ressonância, esses “canais de escape” nas asas permanecem abertos. Esses “canais de escape” agora sendo mais povoados, começam a dominar o processo, fazendo com que o número total de fótons que escapam volte a crescer, superando o efeito de reabsorção e levando ao novo aumento do sinal.

Enquanto a análise anterior justifica a complexa dinâmica prevista pelo Cenário III e sua incompatibilidade com os dados experimentais, a Figura 4.22 oferece a confirmação quantitativa da validade do Cenário II. Ao apresentar uma visão ampliada das asas do espectro na faixa de dessintonia de 3.0 à 3.5 GHz, essa figura permite uma comparação rigorosa nesta região. Observa-se que a concordância entre os dados experimentais e as previsões do Cenário II é não apenas qualitativa, mas também quantitativa, com as formas das curvas e suas amplitudes relativas em função da densidade atômica sendo reproduzidas com notável fidelidade. Em contrapartida, as curvas do Cenário III mostram um comportamento claramente distinto, tanto em forma quanto em evolução com a densidade, que não corresponde ao observado experimentalmente. Isso sugere fortemente que, para os fótons que sofrem um único espalhamento e escapam lateralmente, a interação é dominada pelo espalhamento correlacionado no referencial do átomo. Este resultado é fisicamente esperado, uma vez que as densidades utilizadas nos experimentos correspondem a um regime de baixas colisões, no qual a largura colisional (Γ_c) é pequena em

comparação com a largura de linha natural ($\Gamma_0 = 5.22$ MHz), conforme pode ser verificado na Tabela 9.

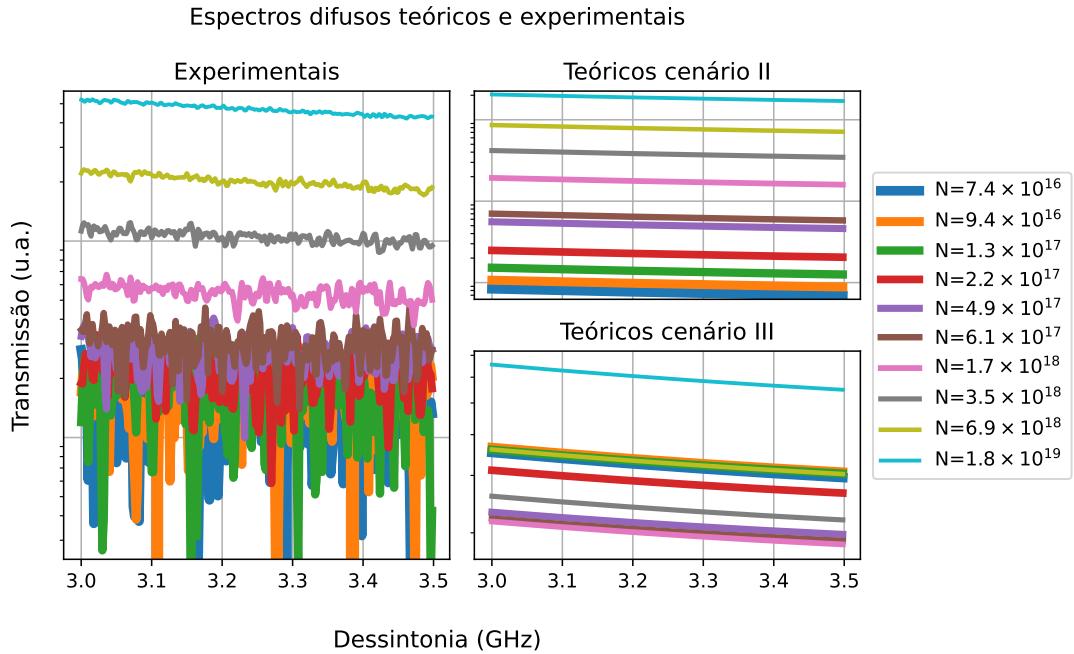


Figura 4.22 – Análise detalhada das asas espectrais da transmissão difusa a 90° , com foco na região de dessintonia entre 3.0 e 3.5 GHz. A organização dos painéis é a mesma da Figura 4.21: dados experimentais (esquerda), teoria do Cenário II (centro) e teoria do Cenário III (direita). Nesta escala ampliada, a concordância quantitativa entre a forma e a amplitude relativa das curvas experimentais e as previsões do Cenário II torna-se evidente, reforçando que este modelo descreve com precisão o comportamento do espalhamento nas asas. Em contrapartida, as curvas do Cenário III exibem um comportamento distinto, que não condiz com os resultados observados.

Fonte: Autoria própria.

4.3.2 Transmissão à 10°

Para caracterizar a natureza do transporte radiativo no regime de múltiplos espalhamentos, investigou-se o expoente de Lévy, α , para cada uma das medições de transmissão difusa a 10° . A análise teórica, que serve de base para a comparação, foi construída individualmente para cada condição experimental de densidade atômica N e comprimento da célula ℓ . Especificamente, para cada caso, foi calculada a distribuição de probabilidade do tamanho do passo, $P(\ell)$, e, a partir dela, a derivada logarítmica, conforme a Eq. (3.3.27), que define o parâmetro de Lévy localmente, $-1 - \alpha$. É crucial ressaltar que, para refletir as condições experimentais de um sistema finito, o fator de escape balístico $[1 - T(\nu)]$ foi incorporado na regra de recorrência

do espectro de emissão, como detalhado no capítulo 3. A aplicação do procedimento de ajuste, detalhado na seção anterior, que considera as restrições metodológicas como a seleção da região espectral e a exclusão do centro de linha, permitiu a extração dos valores do expoente de Lévy (α) para cada uma das medições realizadas. Estes resultados experimentais estão compilados na Tabela 10.

Tabela 10 – Valores do expoente de Lévy (α) para cada medição, determinados a partir do ajuste da lei de potência à curva de transmissão difusa em função da profundidade de penetração, conforme metodologia descrita. Os resultados estão agrupados por configuração experimental (geometria da célula).

Medição	α		
	2 mm	1 cm	2 cm
1	0.755 ± 0.002	0.786 ± 0.001	0.621 ± 0.003
2	0.772 ± 0.002	0.797 ± 0.005	0.662 ± 0.002
3	0.793 ± 0.002	0.798 ± 0.004	0.729 ± 0.001
4	0.811 ± 0.001	0.833 ± 0.002	0.746 ± 0.002
5	-	-	0.352 ± 0.003
6	-	-	0.368 ± 0.005
7	-	-	0.453 ± 0.003

A determinação de cada expoente α e de sua respectiva incerteza foi realizada através de um procedimento estatístico para garantir a robustez do resultado. Para cada medição, foram executados 50 ajustes de lei de potência em intervalos espetrais ligeiramente distintos, sorteados de uma distribuição uniforme (com início variando entre $0.4\Gamma_D$ e $0.7\Gamma_D$, e fim entre $1.4\Gamma_D$ e $1.7\Gamma_D$). O valor final de α foi então definido como a média dos expoentes obtidos e a sua incerteza, como o desvio padrão correspondente. A sensibilidade do método em distinguir diferentes regimes de transporte é demonstrada visualmente na Figura 4.23. A figura revela que cada condição experimental resulta em uma inclinação marcadamente diferente na escala log-log, confirmando que o método é suficientemente sensível para resolver as variações de α com os parâmetros do sistema e conferindo alta confiabilidade aos resultados experimentais.

Uma hipótese central desta análise é a de que, no regime de múltiplos espalhamentos, a memória da direção e polarização do fóton incidente é perdida, de modo que os fótons confinados no meio passam a se distribuir de forma efetivamente isotrópica. O cálculo do coeficiente de

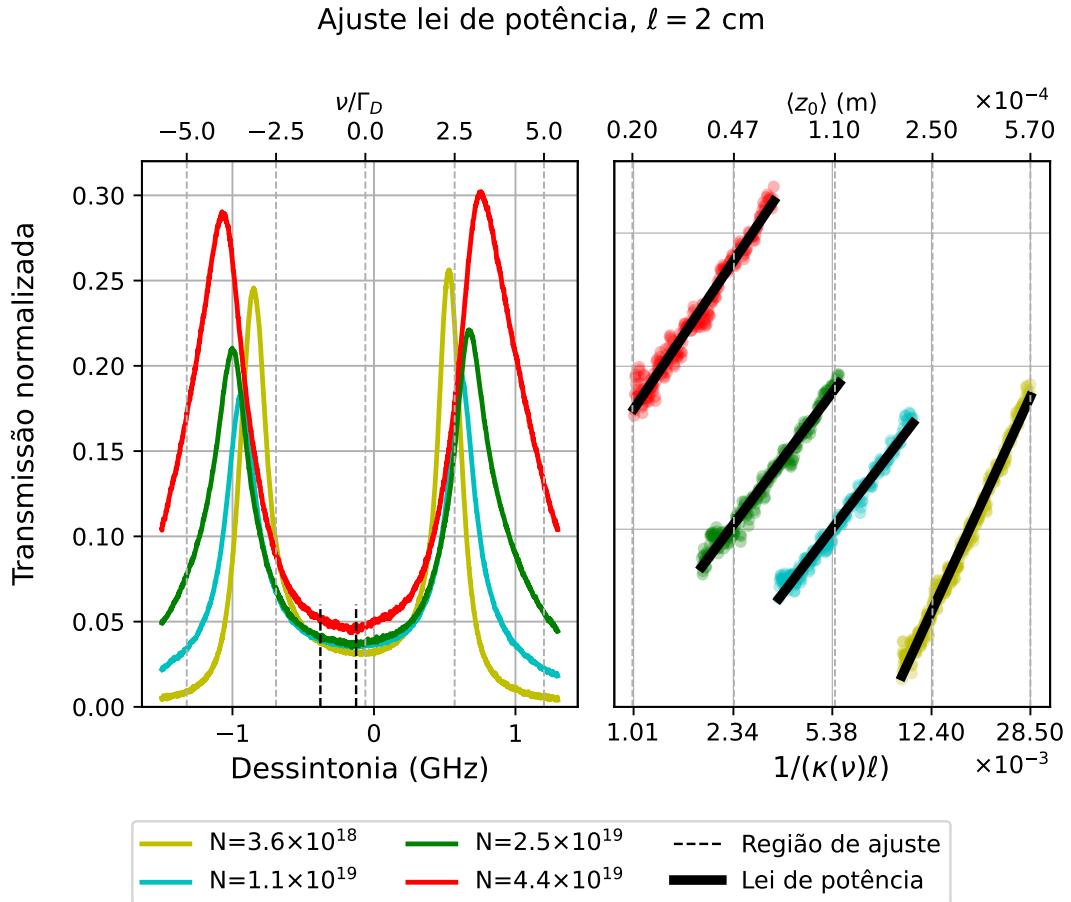


Figura 4.23 – Demonstração visual da sensibilidade do método de ajuste para extrair o expoente de Lévy α , utilizando as medições 1, 5, 6 e 7 da célula de 2 cm. O painel esquerdo apresenta os espectros de transmissão difusa normalizada em função da dessintonia, indicada em GHz no eixo inferior e normalizada pela largura Doppler (ν/Γ_D) no eixo superior. A região entre as linhas tracejadas indica o intervalo de ajuste utilizado nesta ilustração (entre $0.5\Gamma_D$ e $1.5\Gamma_D$). O painel direito remapeia os dados desta região em uma escala log-log, mostrando a transmissão em função da profundidade de penetração $1/(\kappa(\nu)\ell)$ (eixo inferior) e da correspondente posição média do primeiro espalhamento, $\langle z_0 \rangle$, em metros (eixo superior). A separação nítida e as inclinações marcadamente distintas das retas de ajuste (em preto) para cada densidade comprovam inequivocavelmente que o método é suficientemente sensível para resolver as variações no expoente α com os parâmetros do sistema, conferindo alta confiabilidade aos resultados.

Fonte: Autoria própria.

absorção padrão, $\kappa(\nu)$, é fundamentado no momento de dipolo efetivo para luz com polarização linear, cujo valor para a transição D2 do césio é apresentado na Tabela 1. Essa abordagem é precisa, pois descreve a absorção do feixe laser incidente que, pela construção do arranjo experimental, possui polarização linear⁽⁷⁾. Como consequência, a polarização linear restringe

⁽⁷⁾ A polarização linear do feixe incidente é assegurada por um conjunto óptico composto por uma lâmina de meia onda posicionada entre dois cubos polarizadores, assegurando a polarização linear.

a interação a apenas um dos três componentes do momento de dipolo, o que equivale, pela simetria esférica atômica, a um terço da força total de interação. Contudo, no regime isotrópico, um fóton reabsorvido interage com todos os componentes do dipolo. A interação passa a ser governada pelo momento de dipolo total, resultando em um coeficiente de absorção efetivo três vezes maior que o $\kappa(\nu)$ padrão. Essa amplificação altera a estatística dos tamanhos de passo e, consequentemente, o valor do expoente α . Para testar essa hipótese, os valores teóricos de α foram calculados em dois cenários distintos: um utilizando o coeficiente de absorção padrão e outro incorporando essa amplificação por um “fator multiplicador de 3”⁽⁸⁾.

Para conduzir a análise deste estudo, os valores de α obtidos experimentalmente são confrontados com as previsões teóricas em uma comparação minuciosa, apresentada na Figura 4.24. Ela oferece um panorama detalhado, exibindo a evolução do parâmetro de Lévy local, $-1 - \alpha$, em função do comprimento do passo ℓ para os cenários teóricos II e III. Sobre estas curvas teóricas, os valores experimentais de α são sobrepostos como pontos discretos, permitindo uma avaliação visual direta de qual modelo teórico melhor descreve o regime de transporte em diferentes escalas de comprimento. De forma complementar, a Tabela 11 sintetiza essa análise, quantificando o valor de α previsto por cada modelo para as diferentes condições experimentais, o que possibilita uma comparação numérica rigorosa com os dados da Tabela 10.

A análise visual e quantitativa revela uma conclusão marcante: os valores experimentais de α alinham-se de forma significativamente melhor com as previsões do Cenário III, mas somente quando o efeito de isotropização é incorporado ao modelo. Sem esta correção, a teoria padrão falha em descrever consistentemente os dados. A importância do efeito pode ser ilustrada na medição 5 da célula de 2 cm: enquanto o valor experimental é $\alpha = 0.352$, a previsão padrão do Cenário III para este comprimento é $\alpha = 0.695$. Ao aplicar a correção de isotropização, o que equivale a avaliar a curva teórica em um comprimento efetivo aumentado por um fator de 3, a previsão se ajusta para $\alpha = 0.262$, aproximando-se consideravelmente do resultado experimental. Essa tendência geral valida a inclusão da isotropização como um ingrediente

⁽⁸⁾Uma vez que o transporte radiativo escala com a profundidade óptica do meio (proporcional ao produto $\Phi(\nu)/\kappa(\nu)\ell$), um aumento no coeficiente de absorção é matematicamente equivalente a um aumento na escala de comprimento do sistema. Portanto, o comportamento do transporte em uma célula de comprimento ℓ com absorção triplicada é previsto pela teoria padrão em um comprimento efetivo de 3ℓ .

Tabela 11 – Valores teóricos do expoente de Lévy (α) para diferentes condições experimentais.

A tabela compara as previsões para o Cenário II (PFR, sem colisões) e Cenário III (CFR, com colisões), considerando o cálculo com o coeficiente de absorção padrão (“Sem fator 3”) e com o coeficiente reduzido pela isotropização do campo de radiação (“Com fator 3”). Os valores de α foram extraídos do platô assintótico das curvas teóricas de $-1 - \alpha$ mostradas na Figura 4.24.

Medição	α			
	Sem fator 3		Com fator 3	
	Cenário II	Cenário III	Cenário II	Cenário III
2 mm, medição 1	1.462	1.449	1.253	1.215
1 cm, medição 1	1.178	1.133	1.114	0.862
2 cm, medição 1	1.118	1.010	1.040	0.642
2 cm, medição 5	1.027	0.695	0.993	0.262
2 cm, medição 6	0.935	0.352	1.404	0.263
2 cm, medição 7	0.945	0.193	1.750	0.373

fundamental na descrição do transporte. O fato de que essa correção melhora drasticamente o acordo com os dados experimentais fornece uma forte evidência de que a combinação de colisões (CFR) e, crucialmente, o efeito de isotropização por múltiplos espalhamentos, governa o regime de transporte nessa configuração, validando o modelo de voos de Lévy com os parâmetros físicos aqui descritos.

É importante, contudo, analisar o caso da célula de 2 mm, que apresenta a maior discrepância entre o valor experimental de α e as previsões teóricas, mesmo quando o fator de isotropização é considerado (conforme Tabela 11). Essa divergência pode ser justificada por dois aspectos principais. O primeiro está relacionado ao menor grau de pureza desta célula, como verificado experimentalmente. A largura de linha atômica medida para esta célula foi de aproximadamente 10 MHz, quase o dobro do valor natural esperado de 4.56 MHz, indicando um significativo alargamento colisional por contaminantes. Esse alargamento adicional modifica o perfil do coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$ e a própria função de redistribuição de frequência, fazendo com que os modelos teóricos, que assumem um vapor puro, não representem com a mesma fidelidade as condições físicas desta célula.

A segunda contribuição relevante refere-se à influência não desprezível do primeiro espalhamento. Devido ao seu menor comprimento, a célula de 2 mm é opticamente menos espessa em

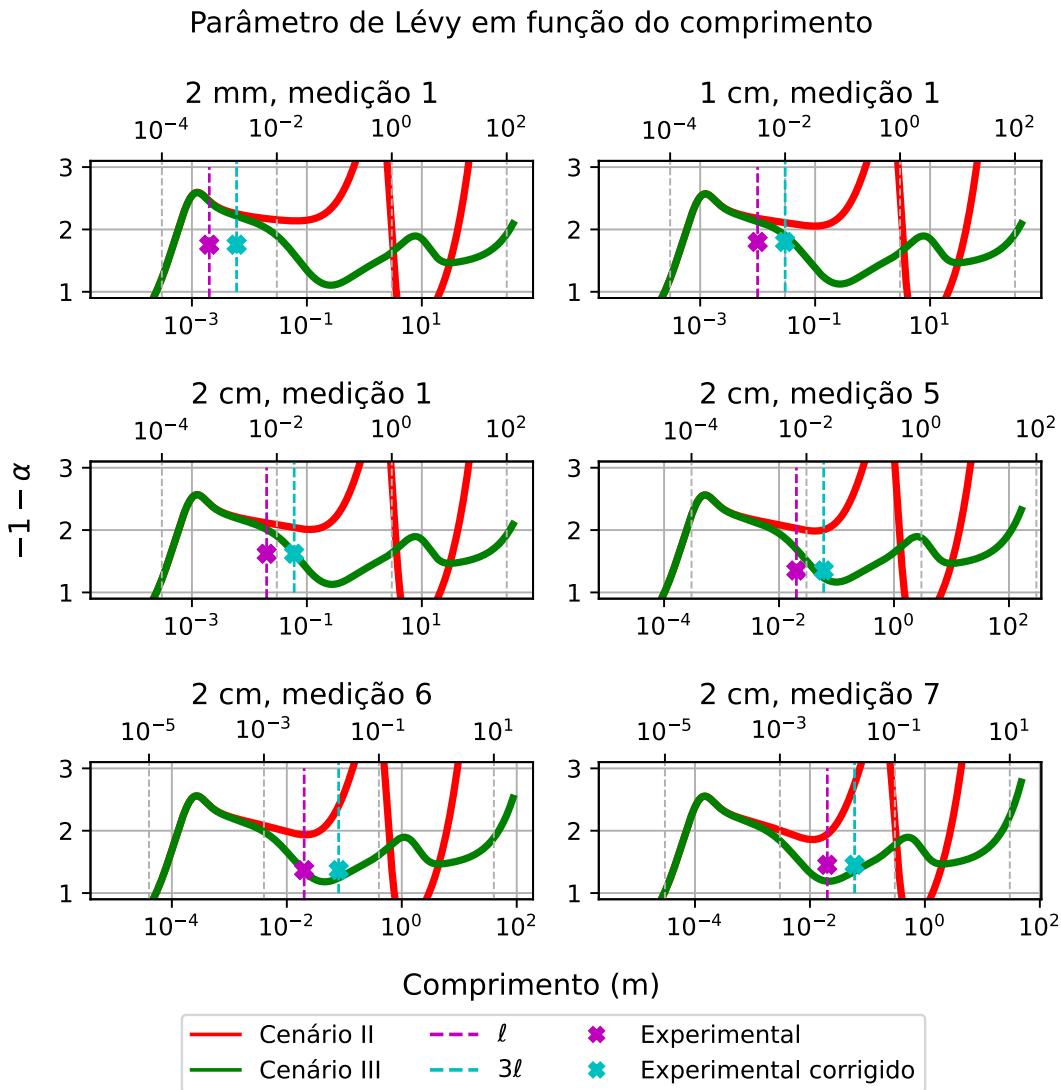


Figura 4.24 – Comparação entre os valores experimentais do expoente de Lévy e as previsões teóricas para seis condições distintas de aprisionamento. Cada painel, correspondente a uma medição específica, plota o valor de $1 + \alpha$ (eixo vertical) em função do comprimento característico do meio ℓ em metros (eixo horizontal). As curvas contínuas representam as previsões teóricas para o Cenário II (vermelho) e o Cenário III (verde, com colisões/CFR). Os marcadores “x” representam o valor de α extraído dos dados experimentais. O marcador roxo (“Experimental”) constrói o resultado no comprimento físico real do meio, para comparação com a teoria padrão, enquanto o marcador azul (“Experimental Corrigido”) constrói o mesmo resultado no comprimento efetivo 3ℓ . Este deslocamento para a direita representa a correção teórica que leva em conta a isotropização do campo de radiação, cujo efeito é triplicar o coeficiente de absorção. A proximidade do marcador azul com a curva teórica do Cenário III (verde) demonstra o excelente acordo do modelo quando o efeito de isotropização é incluído na análise.

Fonte: Autoria própria.

comparação com as outras. Como demonstrado na análise teórica da Figura 4.19, a contribuição do primeiro espalhamento para a transmissão a 10° é muito mais significativa em sistemas

menores. A metodologia de extração de α baseia-se na premissa de que o sinal de transmissão difusa é dominado por múltiplos espalhamentos. A contaminação do sinal por uma componente estruturada e relevante de primeiro espalhamento viola essa premissa, distorcendo a relação de lei de potência e, consequentemente, levando a um valor de α que não reflete puramente o regime de voos de Lévy. A combinação desses dois efeitos, impureza do vapor e a contribuição do primeiro espalhamento, justifica, portanto, a divergência observada para a célula de 2 mm.

Adicionalmente, a análise sistemática dos dados experimentais, compilados na Tabela 10, permite extrair duas conclusões inéditas e de grande relevância para a compreensão do transporte radiativo, que constituem uma contribuição original desta tese: a dependência do expoente de Lévy, α , tanto com o comprimento característico do meio, ℓ , quanto com a densidade atômica, N .

- Primeiramente, ao comparar medições com densidades atômicas semelhantes em células de diferentes comprimentos (por exemplo, a medição 1 para as três células), observa-se uma clara tendência: o valor de α diminui à medida que o comprimento ℓ aumenta. Para $N \approx 3.6 \times 10^{18}$ átomos/m³, o expoente passa de $\alpha \approx 0.78$ na célula de 1 cm para $\alpha \approx 0.62$ na célula de 2 cm. Isso indica que, para uma mesma densidade, sistemas fisicamente maiores favorecem um transporte mais superdifusivo (menor α), pois a maior distância até as fronteiras permite que a estatística dos saltos longos se manifeste de forma mais proeminente antes que o fóton escape.
- Em segundo lugar, para um mesmo comprimento de célula, nota-se que o aumento da densidade atômica também conduz a uma redução do expoente α . Analisando os dados da célula de 2 cm, o valor de α decai de 0.621 (medição 1, $N \approx 3.6 \times 10^{18}$ átomos/m³) para 0.352 (medição 5, $N \approx 1.0 \times 10^{19}$ átomos/m³). Este comportamento evidencia que, ao tornar o meio mais opaco, a frequência de colisões e os eventos de reabsorção aumentam, intensificando a redistribuição de frequência para as asas espectrais e, consequentemente, a probabilidade de ocorrência de saltos “anormalmente longos”, caracterizando um voo de Lévy mais acentuado. Ambas as observações demonstram, de forma quantitativa, como os parâmetros do vapor atômico governam diretamente a natureza estatística do transporte

de luz.

Por fim, a tese investiga o impacto da intensidade do feixe de laser, I , sobre a natureza do transporte superdifusivo. Para esta análise, foram consideradas as medições 1 ($I/I_{\text{sat}} \approx 0.12$), 2 ($I/I_{\text{sat}} \approx 0.37$), 3 ($I/I_{\text{sat}} \approx 0.53$) e 4 ($I/I_{\text{sat}} \approx 0.82$) para cada uma das três células, onde a intensidade foi sistematicamente variada enquanto a densidade atômica foi mantida aproximadamente constante para cada geometria. Os resultados, compilados na Tabela 10, revelam uma tendência inequívoca e consistente para as três células: o expoente de Lévy, α , aumenta com o aumento da intensidade do laser.

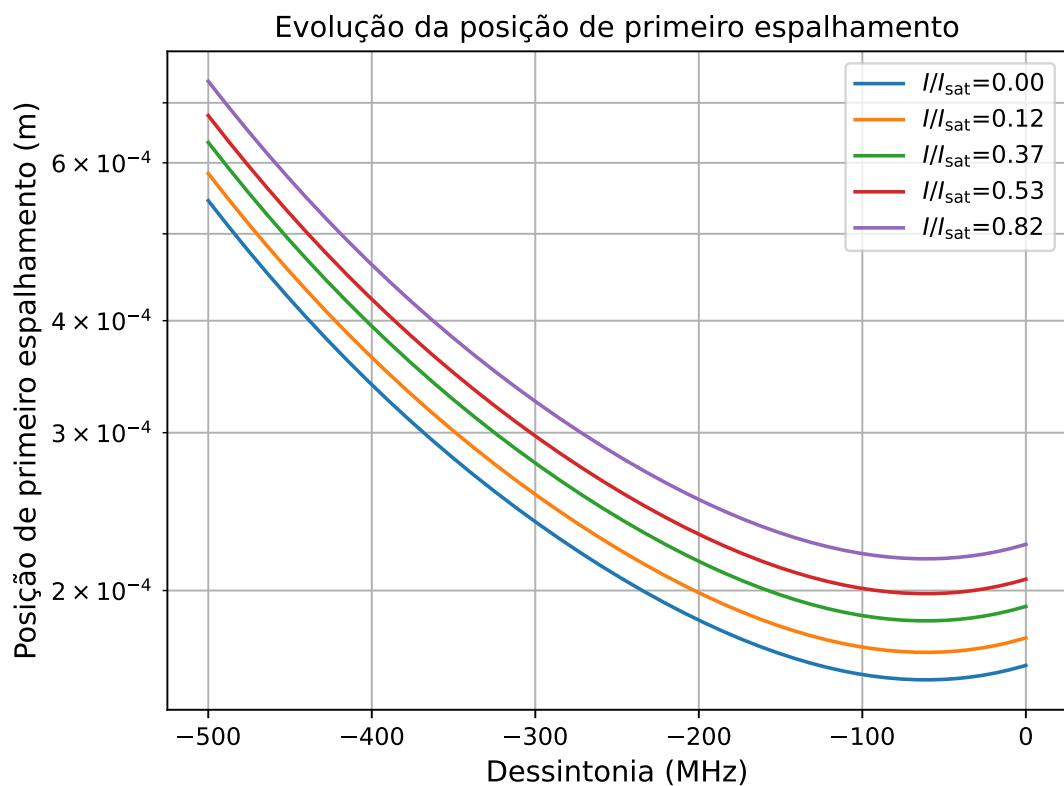


Figura 4.25 – Evolução teórica da posição média do primeiro espalhamento, $\langle z_0 \rangle$, em função da dessintonia para diferentes intensidades de saturação (I/I_{sat}). O aumento da intensidade reduz o coeficiente de absorção (efeito de saturação), permitindo que os fôtons penetrem mais profundamente no vapor antes do primeiro espalhamento, o que desloca $\langle z_0 \rangle$ para valores maiores. É importante destacar que estes valores foram calculados considerando o efeito da intensidade através da Eq. (2.4.60), que modela a saturação, mas negligencia os possíveis desdobramentos do bombeamento óptico.

Fonte: Autoria própria.

Uma possível explicação para este comportamento se inicia com os efeitos não lineares da interação luz-matéria. Com o aumento da intensidade do feixe, a transição atômica tende à

saturação, o que resulta em uma diminuição do coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$. A consequência direta deste efeito é que os fôtons incidentes penetram, em média, mais profundamente no vapor antes de sofrerem o primeiro espalhamento. Este aumento na profundidade de penetração, $\langle z_0 \rangle$, é ilustrado na Figura 4.25. Contudo, a conexão entre este aumento de $\langle z_0 \rangle$ e o aumento observado no expoente α não é direta e necessita de uma investigação teórica mais aprofundada, possivelmente através de simulações de Monte Carlo que incorporem os efeitos de saturação. Os resultados aqui apresentados, portanto, estabelecem um importante ponto de referência experimental para o desenvolvimento e validação de tais modelos teóricos. Independentemente do mecanismo exato, a tendência experimental observada confirma que a saturação da transição atômica modula ativamente as propriedades estatísticas do transporte radiativo.

Uma última e sutil confirmação deste mecanismo pode ser extraída da análise fina das medições de maior densidade da célula de 2 cm (5, 6 e 7). Nesses casos, os valores experimentais de α são consistentemente um pouco maiores do que as respectivas previsões teóricas do Cenário III modificado, como pode ser visto na Figura 4.24 e na Tabela 11. Essa pequena, porém sistemática, divergência não representa uma falha, mas sim uma validação adicional deste mecanismo. As curvas teóricas foram calculadas no limite de baixa intensidade $I/I_{\text{sat}} \rightarrow 0$, enquanto essas medições específicas foram realizadas com uma intensidade não desprezível, na ordem de $I/I_{\text{sat}} \approx 0.3 \sim 0.4$. Portanto, o fato de os valores experimentais de α estarem ligeiramente acima das previsões teóricas de intensidade nula é exatamente o comportamento esperado, corroborando de forma notável a sensibilidade da estatística do transporte à intensidade do campo de luz.

4.4 Conclusão do Capítulo

A conclusão que emerge da análise conjunta dos experimentos de transmissão difusa é que a natureza do transporte radiativo em vapores de césio é multifacetada, dependendo intrinsecamente da região espectral sondada, mesmo para uma mesma densidade atômica. A análise da transmissão a 90° , que privilegia a sondagem nas asas espectrais onde o espalhamento único é dominante, demonstra que o transporte é governado pelo Cenário II (PFR), onde a correlação de

frequência entre os fótons absorvidos e emitidos é preservada. Em contrapartida, sob as mesmas condições de densidade, a investigação no centro de linha a 10° , que explora o regime de múltiplos espalhamentos, revela um comportamento distinto, precisamente descrito pelo Cenário III (CFR), contanto que a isotropização do campo de radiação interno seja considerada.

Além de estabelecer essa dualidade de regimes, outro resultado singular destes experimentos é a demonstração explícita da dependência quantitativa do expoente de Lévy, α , com os parâmetros do sistema. Em vez de uma tendência simples, demonstrou-se que α exibe uma dependência complexa e não monotônica com a densidade atômica (N) e o comprimento da célula (ℓ). Conforme previsto teoricamente e observado nos dados (por exemplo, entre as medições 6 e 7 da célula de 2 cm), após atingir um valor mínimo, o expoente α volta a aumentar com a densidade. Este achado, em conjunto com a observada, porém não compreendida, dependência com a intensidade (I), indica que o caráter superdifusivo do transporte não é fixo. Portanto, o transporte de luz em vapores atômicos representa um sistema complexo cuja estatística pode serativamente controlada através dos parâmetros experimentais, transitando entre diferentes regimes de interação de acordo com a escala de observação.

Contudo, a análise de qual regime de interação melhor descreve o sistema revela um questionamento central e inesperado. A expectativa inicial, fundamentada nas baixas taxas de colisão do sistema ($\Gamma_c \ll \Gamma_0$), era que o transporte de luz difusa a 10° fosse predominantemente governado pelo Cenário II (espalhamento correlacionado, sem colisões). No entanto, os dados experimentais para o expoente de Lévy α alinharam-se de forma muito mais consistente com o Cenário III modificado, um modelo que, por definição, incorpora colisões. Isso gera uma aparente contradição que se torna o ponto focal desta investigação: por que um modelo colisional descreve melhor um sistema físico em um regime onde as colisões são eventos raros?

Uma hipótese para resolver este paradoxo reside na complexa interação entre a isotropização do campo de radiação e os diferentes mecanismos de escape. Como foi estabelecido, a isotropização aumenta o coeficiente de absorção efetivo, suprimindo a ocorrência de passos longos de forma geral. Essa supressão pode se tornar quase total no Cenário II, onde as pequenas mudanças de frequência do efeito Doppler se mostram insuficientes para o escape de um meio

mais opaco. Em contrapartida, no Cenário III, os raros, porém potentes, saltos em frequência da Completa Frequência de Redistribution (CFR) poderiam se tornar o principal, ainda que improvável, mecanismo de escape. Adicionalmente, a dependência de α com a intensidade do laser, um efeito que não foi elucidado, adiciona outra camada de complexidade via efeitos de saturação.

Testar a validade desta competição de efeitos e investigar a fundo o impacto da saturação são tarefas que transcendem a capacidade dos modelos analíticos. Portanto, o desenvolvimento de uma simulação de Monte Carlo se torna a ferramenta indispensável para validar estas hipóteses, desvendar a interação entre os múltiplos fenômenos físicos e, finalmente, construir um modelo preditivo completo para o transporte radiativo neste sistema.

5 Caminhada Aleatória dos Fótons: Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é uma classe abrangente de algoritmos computacionais que se baseia em amostragem aleatória repetida para obter resultados numéricos [12, 204]. Sua designação, uma referência ao famoso cassino de Mônaco, alude à sua natureza fundamentalmente estocástica. A essência do método reside em utilizar a aleatoriedade para resolver problemas que, em princípio, podem ser determinísticos [12, 205]. Devido à sua flexibilidade e robustez, tornou-se uma ferramenta indispensável em diversas áreas, como engenharia [206–209], física [210–213], finanças [214–216] e computação gráfica [217, 218].

O capítulo inicia-se com a descrição das simulações de Monte Carlo no contexto do aprisionamento radiativo, detalhando os passos do ciclo de espalhamento e as vantagens do método. Na sequência, abordam-se as rotinas computacionais desenvolvidas, apresentando-se duas abordagens: um método fundamental, com seleção explícita da velocidade atômica e um método otimizado que utiliza matrizes de redistribuição de frequência, cuja validação é demonstrada. Detalha-se também como as condições de contorno e a detecção da transmissão difusa são implementadas. Por fim, na seção de resultados, os dados das simulações são empregados para validar o modelo teórico do fator de truncagem, analisar a transmissão a 90° e a transmissão para a frente, com o objetivo de determinar numericamente o expoente de Lévy, α .

5.1 Simulações de Monte Carlo no Aprisionamento Radiativo

Quando aplicado a problemas de transporte, o princípio fundamental do método de Monte Carlo é simular o percurso individual de um grande número de partículas e, a partir da estatística acumulada de suas trajetórias, inferir as propriedades do sistema [204, 219]. No contexto do aprisionamento radiativo, o método consiste em seguir a “caminhada aleatória” de fótons individuais desde sua criação até sua eventual fuga do meio ou absorção definitiva [7, 220]. Cada etapa da trajetória de um fóton, como a distância percorrida entre interações, a frequência reemitida após uma absorção e a nova direção de propagação, é determinada por sorteios de

números aleatórios, que são ponderados por distribuições de probabilidade ditadas pelas leis físicas da interação luz-matéria.

5.1.1 Descrição das Simulações

O algoritmo de simulação é, em sua essência, um laço computacional que modela o ciclo de vida de um único fóton dentro do vapor. Este ciclo é repetido de forma iterativa, onde cada iteração corresponde a um evento de espalhamento completo: da absorção do fóton por um átomo até a sua subsequente reemissão. Embora as rotinas computacionais específicas para a execução de cada etapa possam variar entre diferentes implementações, a sequência lógica de operações para simular o aprisionamento radiativo é, no geral, a mesma. A seguir, descrevem-se os passos fundamentais que compõem um ciclo de espalhamento típico:

1. As simulações do aprisionamento radiativo iniciam com a injeção de um fóton na célula de vapor, com as características de frequência e direção do feixe de laser do experimento;
2. O primeiro evento probabilístico é o sorteio da profundidade em que ocorrerá a primeira absorção. Essa distância é comumente proporcional a um sorteio a partir da distribuição de probabilidade exponencial dada pela lei de Beer-Lambert;
3. Uma vez definida a posição da absorção, realiza-se um novo sorteio para selecionar a velocidade do átomo absorvedor, cujas componentes paralela e perpendicular à direção do fóton são sorteadas de distribuições que levam em conta tanto o movimento térmico (distribuição de Maxwell-Boltzmann) quanto o perfil de ressonância atômica;
4. Com o átomo excitado, o próximo passo é determinar a natureza da reemissão, em que é feito um novo sorteio probabilístico e estabelece-se se fóton seguirá o Cenário II (PFR) ou o Cenário III (CFR). Baseado nesse resultado, a frequência do fóton reemittido é então sorteada da função de redistribuição correspondente.
 - Antes da reemissão, uma verificação de extinção é realizada, onde um sorteio determinará se o átomo excitado sofreu extinção não radiativa através de uma colisão com

outro átomo ou com as paredes da célula. Em caso afirmativo, a trajetória do fóton é encerrada (essa etapa não é contabilizada em nosso modelo);

5. Em seguida, a nova direção tridimensional de emissão é sorteada, geralmente a partir de uma distribuição isotrópica ou dipolar.
6. Definida a nova frequência e direção do fóton, o comprimento do passo que o fóton reaizará é sorteado da mesma forma que o primeiro, ou seja, a partir de uma distribuição exponencial baseada no coeficiente de absorção para a nova frequência do fóton.
7. Ao final de cada passo, a posição do fóton é atualizada e o algoritmo verifica se ele cruzou alguma das fronteiras geométricas da célula: se o fóton escapa do meio, sua trajetória é encerrada e suas propriedades são registradas; caso contrário, ele é considerado reabsorvido por um novo átomo, e todo o ciclo de sorteios é repetido.

Ao executar este ciclo completo para milhões de fótons, a simulação acumula estatísticas sobre os fótons que escapam do vapor. Esses dados permitem a reconstrução de grandezas, como os espectros de transmissão difusa em um determinado ângulo em relação a incidência e a distribuição de tamanho de passo, viabilizando a determinação do expoente de Lévy, α . Os resultados obtidos numericamente podem, então, ser diretamente comparados com os dados experimentais, validando as interpretações físicas do transporte radiativo no sistema.

5.1.2 Vantagens e Desvantagens do Método

A aplicação do método de Monte Carlo ao transporte radiativo é especialmente vantajosa devido à complexidade inerente ao fenômeno. Enquanto soluções analíticas para a equação de transporte radiativo são, em geral, restritas a geometrias simples e aproximações de que todas as emissões estejam sujeitas apenas CFR, como no modelo proposto por Holstein [42, 43], as simulações de Monte Carlo oferecem a flexibilidade necessária para investigar cenários mais realistas. O método permite incorporar, de forma direta, geometrias complexas, distribuições não uniformes de átomos absorvedores e emissores, e os efeitos de redistribuição de frequência, seja ela parcial (PFR), completa (CFR) ou uma combinação de ambas. Além disso, outra

vantagem desta abordagem é a capacidade de extrair informações detalhadas, muitas vezes inacessíveis tanto experimentalmente quanto por meio de uma equação de transporte, como a distribuição de velocidade dos átomos excitados, os espectros de emissão e a própria distribuição do tamanho de passo dos fótons.

Contudo, apesar de sua flexibilidade, a implementação apresenta desafios computacionais e conceituais significativos. O primeiro desafio é o seu alto custo computacional. Como o método depende da simulação de um número estatisticamente grande de fótons para garantir a precisão dos resultados, ele pode se tornar excessivamente lento, especialmente para os múltiplos ciclos iterativos⁽¹⁾ exigidos em simulações. Essa necessidade de uma vasta amostragem é particularmente crítica para reduzir as flutuações estatísticas e capturar eventos raros, mas fisicamente importantes, como a emissão de fótons nas asas do perfil espectral, que, sem o uso de técnicas de ponderação ou um número proibitivo de partículas, seriam subamostrados.

Outro desafio reside na simulação correta dos processos físicos. A seleção da velocidade do átomo que absorve o fóton, por exemplo, não é trivial, pois a probabilidade de absorção depende de uma complexa distribuição que é o produto do perfil Lorentziano atômico com a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann [7, 220]. De forma análoga, a geração da nova frequência do fóton após a absorção, requer algoritmos de sorteio sofisticados para simular fidedignamente as intrincadas funções de redistribuição. Finalmente, a modelagem de meios opticamente muito espessos impõe uma dificuldade adicional, já que o grande número de eventos de espalhamentos por fóton antes do escape demanda mais tempo de computação.

5.2 Rotinas Computacionais

As rotinas computacionais para as simulações de Monte Carlo foram desenvolvidas integralmente em linguagem Python, aproveitando a robustez de seu ecossistema científico para modelagem numérica. Para construir o espectro de transmissão difusa, a simulação é executada para um conjunto de frequências de incidência (ν) discretas, que varrem a região espectral de interesse. Em cada um desses pontos de frequência, um grande número de fótons é processado.

⁽¹⁾Cada espalhamento corresponde a um novo ciclo iterativo.

Uma característica central da implementação foi a abordagem vetorizada, viabilizada pelas bibliotecas NumPy e SciPy. Em vez de simular a trajetória de um único fóton por vez em um laço iterativo, uma abordagem que seria computacionalmente proibitiva, o código foi estruturado para processar o conjunto completo de fótons de forma simultânea. Essa estratégia permite que operações como o sorteio de frequências, direções e comprimentos de passo sejam aplicadas a vetores que representam todos os fótons ativos, resultando em um ganho de performance substancial e tornando viável a simulação de até dezenas de milhões de trajetórias em um tempo razoável. Todas as simulações consideram que as células possuían geometria cilíndrica.

A base de qualquer simulação de Monte Carlo é a qualidade e a eficiência do gerador de números aleatórios. Para este trabalho, optou-se pela interface moderna da biblioteca NumPy, instanciando-se um gerador através da função `numpy.random.default_rng()`. Esta abordagem constitui a prática recomendada atualmente, pois fornece um gerador de bits (PCG64) com propriedades estatísticas superiores e maior performance em comparação com as funções legadas [221]. A utilização de um objeto gerador dedicado (`rng`) também aprimora a reproduzibilidade dos resultados, quando necessário, permitindo o controle explícito da semente aleatória. Ao mesmo tempo, ao omitir a semente, o gerador produz sequências diferentes a cada execução, garantindo a variabilidade estatística esperada para simulações de Monte Carlo. Este equilíbrio entre reproduzibilidade e aleatoriedade controlada é essencial para a validação rigorosa e a robustez estatística dos resultados obtidos.

5.2.1 Método com Seleção de Velocidade

A primeira abordagem computacional implementada para simular o aprisionamento radiativo baseia-se no método de Monte Carlo que capta a interação luz-matéria à partir de seus princípios fundamentais. Este script simula a caminhada aleatória do fóton sorteando, a cada evento de interação (espalhamento), as variáveis que governam o processo. O núcleo desta metodologia é a determinação explícita e probabilística da classe de velocidade do átomo absorvedor, o que permite uma investigação mais profunda dos mecanismos de correlação e redistribuição de frequência.

O algoritmo simula a trajetória de um grande conjunto de fótons, seguindo uma sequência

de passos lógicos que representam os ciclos de confinamento dos fótons no meio. A simulação opera da seguinte forma:

1. **Inicialização e Parâmetros de Entrada:** O script é inicializado com um conjunto de parâmetros que definem as condições físicas e geométricas do experimento. Estes incluem as dimensões da célula de vapor (comprimento e diâmetro), a densidade atômica e a temperatura, que determinam a largura Doppler e o alargamento colisional. Também são especificados os parâmetros do feixe de laser incidente, como seu perfil espectral (Lorentziano ou monocromático), largura de linha, intensidade e geometria (posição e direção de entrada).
2. **Injeção dos Fótons e Primeiro Evento de Absorção:** Para cada frequência de incidência analisada, um conjunto de fótons é criado. A posição inicial de cada fóton na face de entrada da célula é sorteada de uma distribuição Gaussiana bidimensional, simulando o perfil do feixe. A frequência individual de cada fóton também é sorteada, de acordo com o perfil espectral estabelecido para o laser. A profundidade em que ocorre o primeiro evento de absorção, z_0 , é então determinada probabilisticamente para cada fóton. O método consiste em sortear um valor de uma distribuição exponencial padrão e dividi-lo pelo coeficiente de absorção $\kappa(\nu)$ correspondente à frequência daquele fóton, o que equivale a amostrar a distância de acordo com a lei de Beer-Lambert. O cálculo de $\kappa(\nu)$ leva em conta a estrutura hiperfina completa e o alargamento por potência. Fótons cuja distância de absorção sorteada excede o comprimento da célula são contados como transmitidos balisticamente e suas trajetórias são encerradas.
3. **Sorteio do Estado Excitado:** Uma vez que o conjunto de fótons é absorvido, determina-se para qual transição hiperfina específica ($F_1 \rightarrow F'$) cada um foi induzido. A probabilidade de excitação para um subnível F' particular não é uniforme, sendo proporcional à força relativa daquela transição no coeficiente de absorção total, $\kappa(\nu)$, na frequência do fóton. O script calcula a probabilidade relativa de cada transição permitida e, por meio de um sorteio de número aleatório sobre a distribuição cumulativa dessas probabilidades, seleciona

o estado excitado F' final para cada fóton.

4. Seleção da Velocidade Atômica: Após a definição das transições, realiza-se a seleção das velocidades dos átomos absorvedores. Este é um passo crucial e computacionalmente exigente. Em vez de empregar o método da rejeição, comumente utilizado em simulações similares, esta rotina adota a amostragem por transformada inversa. Para cada fóton, a Função Densidade de Probabilidade (PDF) da velocidade paralela é construída e, a partir dela, calcula-se sua respectiva Função de Distribuição Acumulada (CDF), conceitos estatísticos previamente detalhados no Capítulo 3. Um número aleatório é então sorteado e, através da interpolação na CDF inversa, a velocidade específica de cada átomo é determinada. Este processo é realizado em duas etapas:

- Componente Paralela (v_{\parallel}): A componente da velocidade atômica paralela à direção de propagação do fóton é sorteada de uma distribuição de probabilidade, $P(v_{\parallel})$, que é o produto da distribuição de Maxwell-Boltzmann com o perfil de ressonância Lorentziano do átomo, dada por [7]:

$$P(v_{\parallel}) \propto \frac{e^{-\frac{v_{\parallel}^2}{u^2}}}{1 + 4 \frac{\left(\nu_{F_1 F'} - \nu \frac{v_{\parallel}}{c}\right)^2}{\Gamma_{0,c}^2}}. \quad (5.2.1)$$

Essa abordagem garante a seleção preferencial de átomos cujas velocidades, devido ao efeito Doppler, os tornam ressonantes com o fóton incidente.

- Componente Perpendicular (v_{\perp}): A componente perpendicular da velocidade é sorteada de uma distribuição de Maxwell-Boltzmann bidimensional, refletindo a natureza isotrópica do movimento térmico no plano transversal.

5. Redistribuição de Frequência e Reemissão: Após a seleção das velocidades, determinam-se a frequência e a direção de cada fóton reemisso.

- Cenário de Interação: Um sorteio probabilístico define se a emissão de cada fóton ocorrerá sob o Cenário II (PFR, sem colisões) ou Cenário III (CFR, com colisões), com base na probabilidade de colisão P_c .

- Sorteio do Estado Fundamental Final (F_2): A estrutura hiperfina permite que um átomo no estado excitado F' decaia para um dos múltiplos subníveis do estado fundamental, F_2 . A transição específica que ocorrerá é determinada por um novo sorteio probabilístico para cada fóton, ponderado pelas razões de ramificação de cada canal de decaimento permitido.
- Nova Direção de Reemissão: A nova direção de propagação de cada fóton é sorteada de uma distribuição espacial isotrópica tridimensional.
- Nova Frequência (ν'): A determinação da nova frequência depende do cenário de interação sorteado para cada fóton:
 - PFR (Espalhamento Correlacionado): Neste caso, a frequência é conservada no referencial do átomo em movimento. A nova frequência no laboratório, ν' , é então obtida ao se transformar a frequência de volta para o referencial do laboratório, o que incorpora um novo desvio Doppler que depende da nova direção de reemissão.
 - CFR (Espalhamento Não Correlacionado): A memória da frequência original é perdida e a nova frequência, ν' , é sorteada de um perfil de emissão Lorentziano, centrado na frequência da transição atômica.

Em seguida, o deslocamento de frequência da transição hiperfina para o estado final sorteado, $\nu_{F'F_2}$, é somado a esta frequência base. Por fim, a frequência resultante no referencial do átomo é transformada de volta para o referencial do laboratório, aplicando-se o desvio Doppler que depende da nova direção de reemissão. Este valor final é a nova frequência ν' do fóton.

- **Amplitude do Passo:** Por fim, com a nova frequência ν' de cada fóton determinada, o comprimento do próximo passo é sorteado de uma distribuição exponencial baseada no novo coeficiente de absorção, $\kappa(\nu')$.

6. Propagação e Condições de Contorno: A partir da direção e amplitude de passo de cada fóton, suas posições espaciais são atualizadas. O algoritmo então verifica se as novas posições estão fora dos limites geométricos da célula. Os fótons que permanecem

confinados constituem o conjunto ativo para a próxima rodada da simulação. Aqueles que escapam (pelas janelas frontal ou traseira, ou pelas paredes laterais) têm suas propriedades finais registradas e são removidos do conjunto de fótons ativos.

O processo é repetido para todos os fótons e a estatística acumulada dos fótons que escapam permite construir os espectros de transmissão difusa e analisar as propriedades do transporte radiativo. Para visualizar a complexidade da trajetória individual, a Figura 5.1 ilustra a caminhada aleatória de um único fóton, simulada sob condições específicas. A rotina computacional utilizada encontra-se no Apêndice D.

5.2.2 Método com Matriz Redistribuição de Frequência

A segunda abordagem computacional desenvolvida, de autoria própria, representa uma otimização estratégica do método de Monte Carlo. Esta rotina foi concebida para contornar o principal gargalo computacional da simulação anterior: o sorteio da velocidade atômica a cada interação. Ao substituir este passo intensivo por uma consulta a matrizes de redistribuição de frequência pré-calculadas, o método alcança um aumento de performance de várias ordens de magnitude. Essa otimização não apenas acelera drasticamente as simulações, mas também permite simplificar o problema, tratando a caminhada aleatória do fóton de forma eficaz em uma única dimensão ao longo do eixo de propagação.

Para que esta abordagem seja viável, é necessário que as matrizes de redistribuição, $R(\nu', \nu)$ (Eqs. (2.4.66) e (2.4.67)), sejam previamente calculadas para cada conjunto específico de condições experimentais (densidade atômica e temperatura). O fluxo da simulação acontece da seguinte maneira:

Para que esta abordagem seja viável, é imperativo que as matrizes de redistribuição, $R(\nu', \nu)$, sejam previamente calculadas para cada conjunto específico de condições experimentais (densidade atômica e temperatura). A principal limitação deste método reside precisamente nesta etapa: como as matrizes são pré-calculadas e armazenadas, a simulação opera sobre uma “grade” de frequências discreto. A determinação da probabilidade de redistribuição para uma frequência arbitrária em tempo real anularia o ganho de performance, tornando o método com-

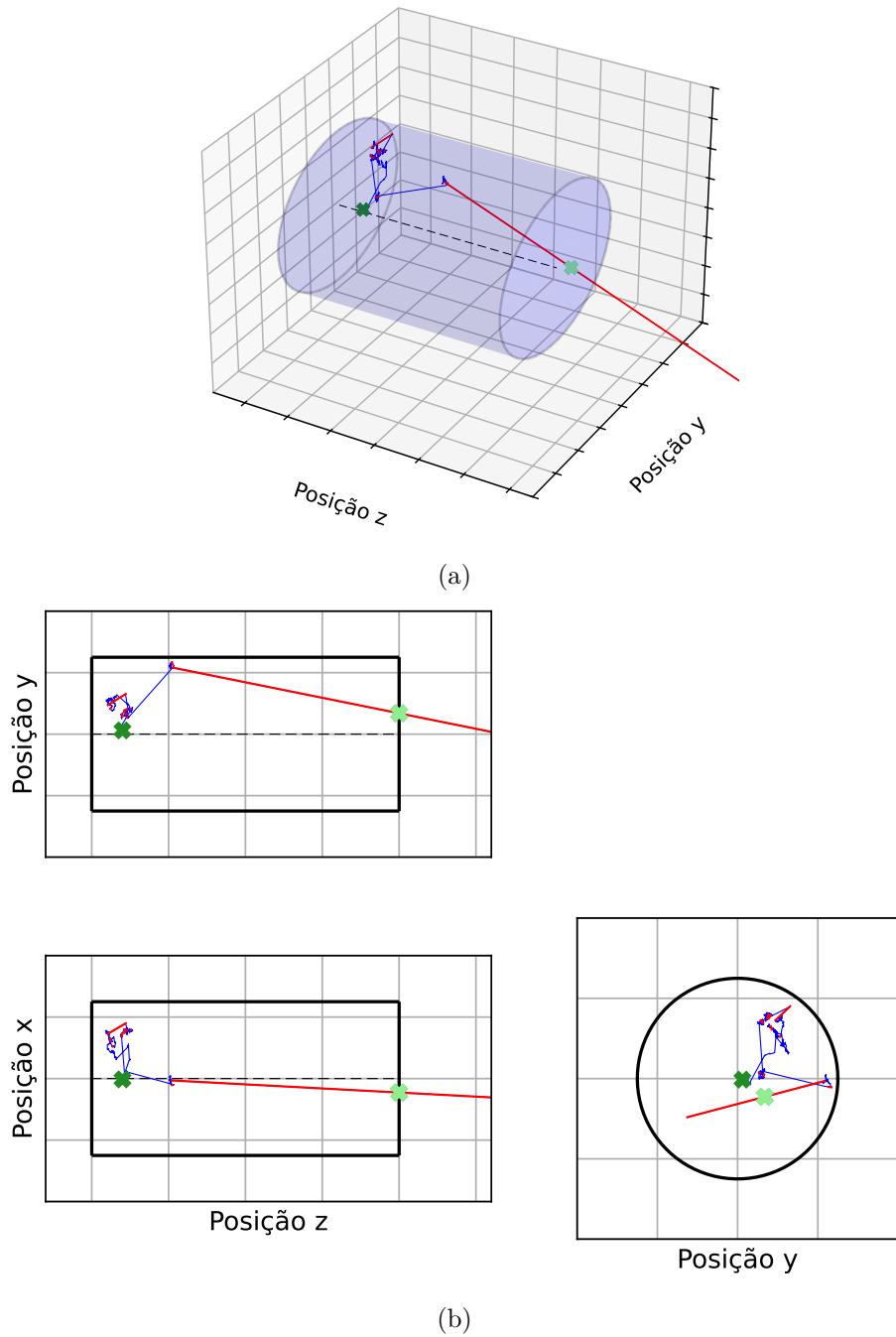


Figura 5.1 – Simulação de Monte Carlo da caminhada aleatória de um único fóton em um vapor atômico a 60 °C ($P_c = 1.55\%$), aprisionado em uma célula cilíndrica. As linhas azuis e vermelhas representam os passos individuais executados sob o Cenário II (PFR) e o Cenário III (CFR), respectivamente. O marcador ‘x’ em verde indica a posição do primeiro evento de absorção, enquanto o marcador ‘x’ em verde claro aponta o local onde o fóton escapa da célula. (a) Visualização tridimensional da trajetória completa. (b) Projeções da mesma trajetória nos planos cartesianos para melhor detalhamento do percurso.

Fonte: Autoria própria.

putacionalmente equivalente à abordagem de seleção de velocidade. Contudo, ao utilizar uma “grade” pouco espaçada, esta discretização representa uma aproximação excelente, permitindo uma análise robusta com uma otimização substancial. O fluxo da simulação, sob esta condição, acontece da seguinte maneira:

1. Inicialização e Carregamento de Dados: Em vez de calcular os parâmetros atômicos em tempo real, o script inicia carregando as matrizes de redistribuição de frequência, $R(\nu', \nu)$, e o espectro do coeficiente de absorção, $\kappa(\nu)$. Estes dados, previamente salvos, são específicos para as condições de densidade e temperatura em análise.

2. Injeção e Primeira Absorção: A injeção do conjunto de fótons segue a mesma lógica do método anterior: as posições e frequências iniciais de cada fóton são sorteadas de acordo com os perfis do feixe e do laser. As profundidades da primeira absorção são então determinadas para todo o conjunto, utilizando-se os valores de $\kappa(\nu)$ obtidos do espectro carregado para sortear as distâncias a partir de uma distribuição exponencial.

3. Redistribuição de Frequência via Matriz: Esta etapa constitui a principal inovação do método. Para o conjunto de fótons que permanecem confinados, o algoritmo realiza as seguintes operações de forma vetorizada:

- Primeiramente, determinam-se os cenários de interação (II ou III) para cada fóton através de um sorteio ponderado pela probabilidade de colisão P_c .
- Em seguida, o script utiliza as frequências de absorção ν de todo o conjunto de fótons para selecionar as linhas correspondentes nas matrizes de redistribuição $R(\nu', \nu)$ apropriadas. Cada linha da matriz funciona como uma PDF discreta para as possíveis frequências de emissão.
- As novas frequências dos fótons, ν' , são então diretamente sorteadas a partir de suas respectivas PDFs. Este único passo, baseado em uma busca em tabela, substitui eficientemente o complexo e custoso processo de sorteio de velocidade e cálculo de desvios Doppler.

4. Propagação Tridimensional e Condições de Contorno: Com as novas frequências ν' definidas para todo o conjunto de fôtons, os comprimentos dos próximos passos, l , são sorteados de distribuições exponenciais governadas pelos respectivos $\kappa(\nu')$. As direções de propagação são então determinadas para cada fôton por meio de sorteios isotrópicos tridimensionais. As posições dos fôtons no espaço (x, y, z) são atualizadas de acordo com seus passos e direções. O algoritmo então verifica quais fôtons cruzaram as fronteiras geométricas da célula. Aqueles que escapam têm suas trajetórias finalizadas e seus dados registrados, enquanto os que permanecem confinados repetem o ciclo de redistribuição via matriz.

Ao eliminar a necessidade de resolver as integrais de velocidade em tempo real, este método permite a análise de um número muito maior de fôtons e de eventos de espalhamento, sendo particularmente poderoso para investigar o regime de múltiplos espalhamentos. A rotina computacional correspondente encontra-se no Apêndice [D](#).

5.2.2.1 Validação do Método

Como o uso de matrizes de redistribuição pré-calculadas para sortear diretamente a frequência de reemissão representa uma nova abordagem metodológica, torna-se necessário validar sua precisão. A validação do método é dupla. Primeiramente, compara-se o espectro de emissão simulado com a previsão teórica, descrita na Subseção [3.2.3](#). Para isso, foram construídos os histogramas da frequência de reemissão dos fôtons após um determinado número de espalhamentos, e sobre cada um deles foi sobreposta a curva teórica correspondente, $\Theta_n(\nu')$ (Eq. [\(3.2.14\)](#)). Em segundo lugar, e de forma complementar, a distribuição do tamanho dos passos, $P_n(l)$ (Eq. [\(3.2.12\)](#)), obtida da simulação, é também comparada com sua respectiva curva teórica, calculada a partir do espectro $\Theta_n(\nu')$. Esta análise conjunta permite verificar se a amostragem probabilística a partir das matrizes reproduz fidedignamente não apenas o espectro de emissão, mas também a estatística de voo resultante a cada passo da caminhada aleatória.

Para todas as validações apresentadas, a frequência de incidência foi fixada no máximo do coeficiente de absorção da transição partindo de $F=4$ (aproximadamente -70 MHz) e o perfil

espectral do feixe foi considerado um delta de Dirac (monocromático), ou seja, sem largura de linha. O meio simulado possui uma geometria cilíndrica com 2.00 cm de comprimento e 1.00 cm de raio. As matrizes de redistribuição foram construídas para uma temperatura de 100 °C e uma densidade atômica de $1.47 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$, o que corresponde a uma probabilidade de colisão de $P_c = 20.2\%$. A grade de frequência utilizada na construção das matrizes possui limites entre -25 GHz e 34 GHz, com um passo de aproximadamente 25 MHz.

A Figura 5.2 apresenta a validação para o Cenário II, no qual a probabilidade de colisão foi propositalmente definida como nula ($P_c = 0$). Nos painéis da esquerda de cada figura, observa-se que os histogramas do espectro de emissão, $\Theta_n(\nu')$, obtidos pela simulação, são perfeitamente descritos pelas curvas teóricas correspondentes. A mesma concordância é verificada nos painéis da direita para a distribuição do tamanho dos passos, $P(l)$. A evolução do primeiro para o quinto espalhamento evidencia a capacidade do método em capturar a sutil modificação no espectro, como o surgimento de picos secundários resultantes da estrutura hiperfina.

De forma análoga, a Figura 5.3 demonstra a validação para o Cenário III, onde as colisões induzem uma completa redistribuição de frequência e a probabilidade de colisão foi definida como $P_c = 1$. Novamente, a sobreposição entre os histogramas simulados e as curvas teóricas é notável, tanto para $\Theta_n(\nu')$ quanto para $P(l)$. O acordo em ambos os cenários confirma que o método de sorteio a partir das matrizes de redistribuição é uma ferramenta robusta e precisa para simular o transporte radiativo.

As análises apresentadas nas Figuras 5.2 e 5.3 representam os casos limites do transporte radiativo, impondo probabilidades de colisão $P_c = 0$ e $P_c = 1$, respectivamente. Contudo, como proposto pioneiramente por Zantra [41] e posteriormente sintetizado por Payne et al. [56], um cenário mais realista frequentemente envolve uma coexistência de ambos os mecanismos de espalhamento. Para validar o método também sob esta condição híbrida, foi realizada uma simulação, cujos resultados são exibidos na Figura 5.4. A excelente concordância observada entre os dados simulados e a curva teórica do Cenário Resultante (que é, esta sim, a soma ponderada das teorias dos Cenários II e III) reforça a validade e a versatilidade da abordagem baseada em matrizes. Vale reforçar que a simulação desta condição intermediária não utiliza uma matriz de

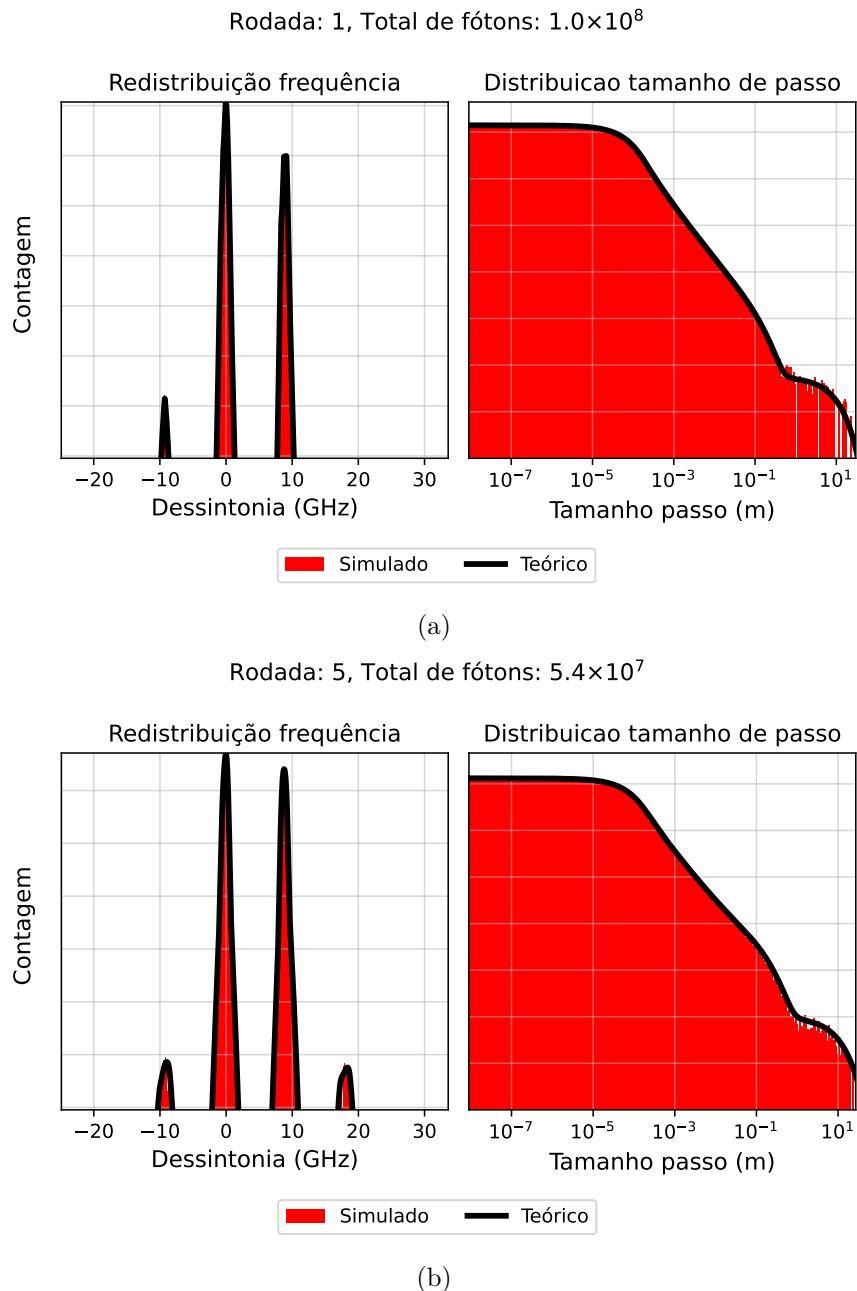
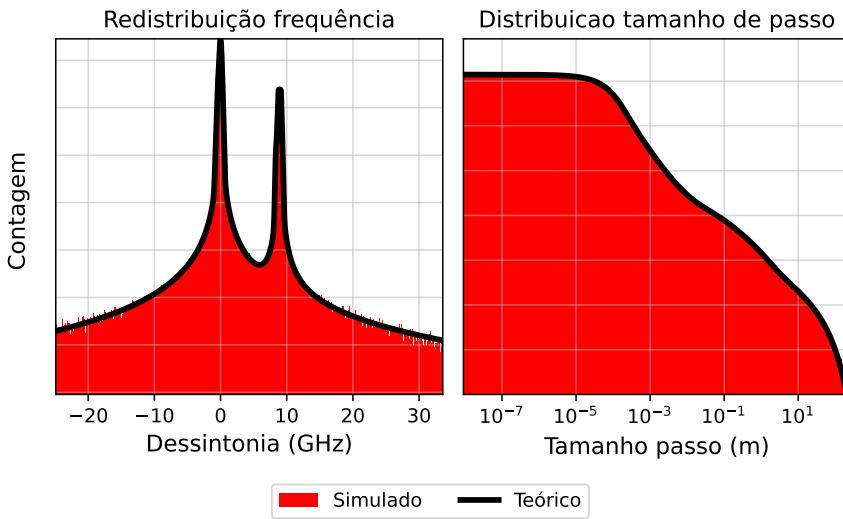


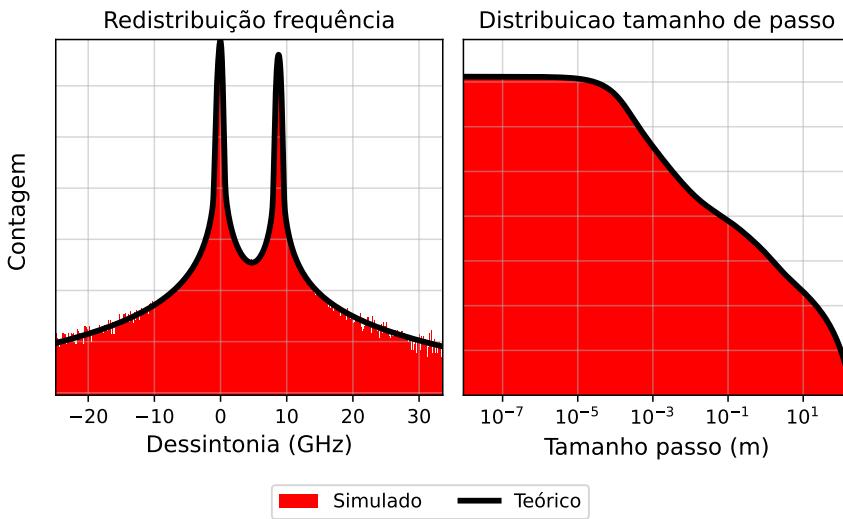
Figura 5.2 – Validação do método de simulação utilizando as matriz de redistribuição de frequência para o Cenário II (PFR), comparando os resultados da simulação (histogramas em vermelho) com as previsões teóricas (curvas em preto). São mostrados o espetro de emissão $\Theta_n(\nu')$ e a distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$ para (a) o primeiro espalhamento ($n=1$) e (b) o quinto espalhamento ($n=5$).

Fonte: Autoria própria.

redistribuição previamente ponderada. Em vez disso, a cada evento de espalhamento, o destino de cada fóton é decidido individualmente: um sorteio aleatório, baseado na probabilidade de colisão P_c , determina se a reemissão daquele fóton específico seguirá a estatística do Cenário II (sem colisão) ou do Cenário III (com colisão). A nova frequência é, então, sorteada da matriz

Rodada: 1, Total de fótons: 1.0×10^8 

(a)

Rodada: 5, Total de fótons: 5.3×10^7 

(b)

Figura 5.3 – Validação do método de simulação utilizando as matriz de redistribuição de frequência para o Cenário III (CFR), comparando os resultados da simulação (histogramas em vermelho) com as previsões teóricas (curvas em preto). São mostrados o espetro de emissão $\Theta_n(\nu')$ e a distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$ para (a) o primeiro espalhamento ($n=1$) e (b) o quinto espalhamento ($n=5$).

Fonte: Autoria própria.

correspondente ao cenário escolhido.

É importante ressaltar que a robustez do método foi testada para além das condições específicas aqui apresentadas. Foram realizadas simulações adicionais variando-se extensivamente os parâmetros de entrada. Testou-se uma ampla faixa de temperaturas (entre 70 °C e 150 °C),

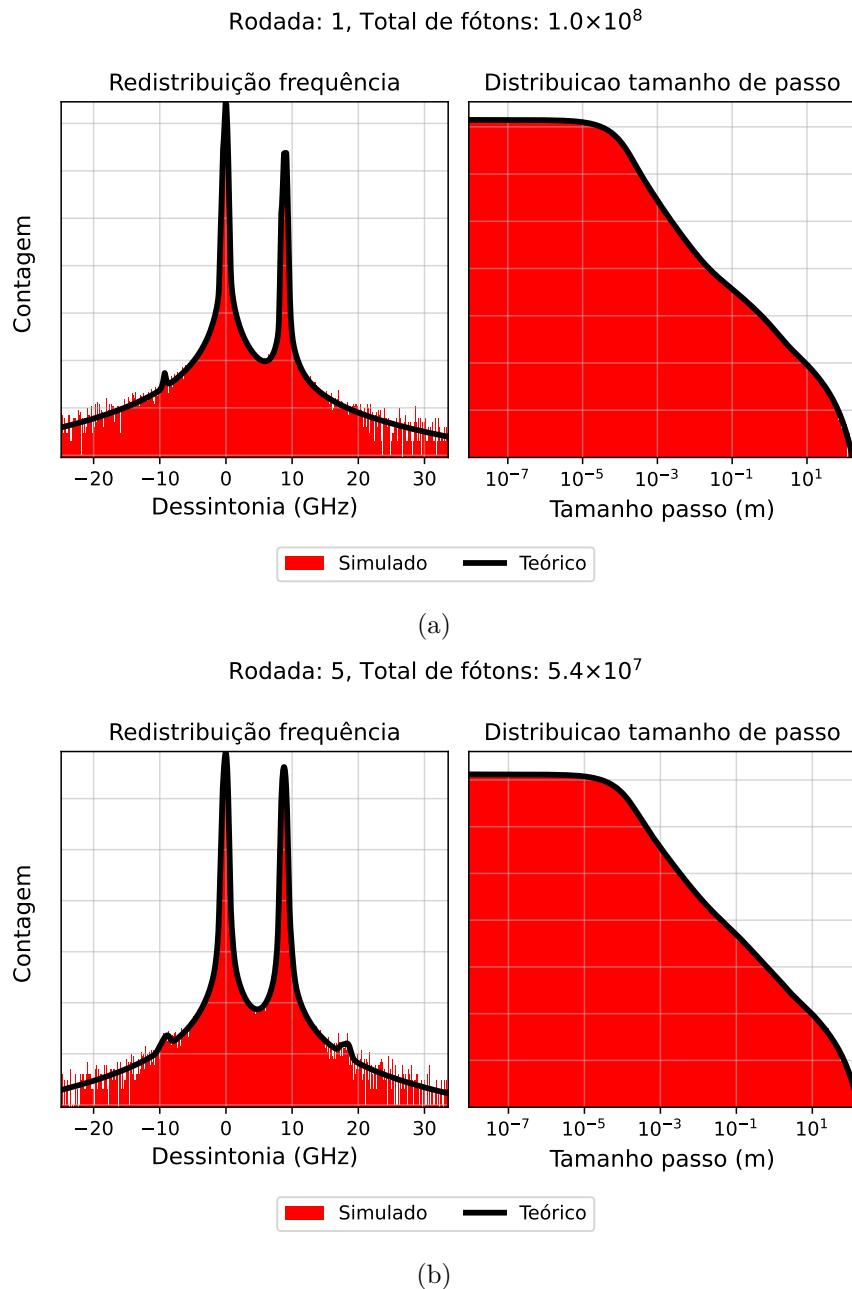


Figura 5.4 – Validação do método de simulação utilizando as matriz de redistribuição de frequência para o Cenário Resultante, onde a reemissão é uma combinação ponderada dos Cenários II e III. A comparação entre os resultados da simulação (histogramas em vermelho) e as previsões teóricas (curvas em preto) é mostrada para (a) o primeiro espalhamento ($n=1$) e (b) o quinto espalhamento ($n=5$).

Fonte: Autoria própria.

com as consequentes variações na densidade atômica, e exploraram-se diferentes grades especiais, chegando a limites de -50 GHz à 59 GHz. Adicionalmente, a frequência de incidência do laser foi deslocada para pontos distantes do centro de linha (até $\pm 4\Gamma_D$) e o perfil do feixe foi modelado como Lorentziano com larguras de linha variáveis. Em todas essas diversas condições,

a convergência entre os resultados simulados para $\Theta_n(\nu')$ e $P_n(l)$ e suas respectivas curvas teóricas manteve-se com a mesma fidelidade demonstrada nas figuras, atestando a validade geral do método.

5.2.3 Condições de Contorno e Transmissão Difusa

A trajetória de cada fóton é monitorada em um espaço tridimensional e suas condições de contorno são definidas pela geometria cilíndrica da célula de vapor. Ao final de cada passo da caminhada aleatória, a nova posição do fóton é calculada. Uma verificação é então realizada para determinar se o fóton cruzou alguma das fronteiras. Para a célula cilíndrica, de comprimento ℓ e raio R , um fóton é considerado confinado se sua posição longitudinal z estiver no intervalo $0 < z < \ell$ e sua posição radial satisfizer a condição $x^2 + y^2 < R^2$. Qualquer fóton que não satisfaça estas condições é classificado como “escapado” ou “transmitido”, a depender de sua posição espacial, e sua trajetória é encerrada.

Transmissão Difusa a 90°

Para simular a transmissão difusa a 90° , o objetivo é registrar os fótons que escapam lateralmente da célula, de forma análoga à detecção experimental de fluorescência. Contudo, replicar numericamente a coleta de luz em um único ponto ou em um ângulo sólido muito pequeno é computacionalmente inviável, pois exigiria a simulação de um número proibitivo de fótons para se obter uma estatística significativa. Nesse sentido, foi implementada uma condição de detecção que modela um detector virtual posicionado a uma distância fixa do eixo longitudinal da célula. O processo de seleção ocorre em etapas: primeiramente, o algoritmo pré-seleciona os fótons cujo passo os leva para uma posição radialmente fora da célula ($x^2 + y^2 > R^2$) e cuja absorção inicial tenha ocorrido dentro de um intervalo longitudinal de interesse. Para este subconjunto de fótons, uma projeção geométrica é calculada para determinar onde a trajetória de escape intersectaria o plano do detector virtual. Um fóton é, então, definitivamente contabilizado no sinal a 90° apenas se sua coordenada longitudinal, projetada neste plano, estiver dentro dos limites da área de detecção.

Transmissão Difusa para Frente

De forma semelhante, a simulação da transmissão difusa para frente, que busca analogia com a detecção experimental a 10° , também enfrenta limitações computacionais que impedem a modelagem exata de uma lente de coleta. A estatística necessária para resolver um pequeno ângulo de detecção específico seria impraticável. Por essa razão, a abordagem adotada na simulação é mais abrangente: quando o passo de um fóton o leva para além da fronteira de saída (em $z = \ell$), sua trajetória é interpolada para determinar o ponto de intersecção exato na janela. Se a posição radial deste ponto estiver dentro dos limites da célula, o fóton é contabilizado como parte do sinal de transmissão difusa para frente. A Figura 5.1 exemplifica claramente o fenômeno da transmissão descrito.

5.3 Resultados e Discussão

Os resultados numéricos, obtidos a partir das simulações de Monte Carlo, são apresentados e discutidos. A análise confronta os dados simulados tanto com as previsões dos modelos teóricos quanto com os resultados experimentais e tem como objetivo de validar as abordagens desenvolvidas e elucidar os mecanismos de transporte. A investigação foca-se, inicialmente, na validação do fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$. Em seguida, as simulações para a transmissão a 90° e para a frente são utilizadas para analisar o regime de espalhamento sondado experimentalmente e para determinar o expoente de Lévy, α , respectivamente.

5.3.1 Fator $[1-T(\nu)]$

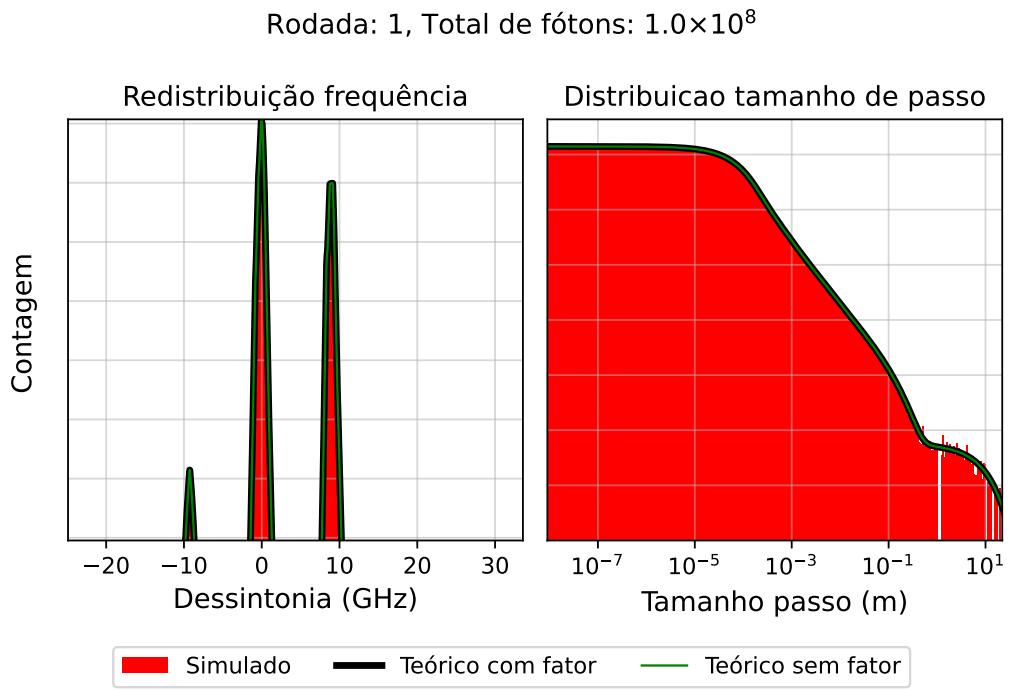
A introdução do fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$ na regra de recorrência do espectro de emissão, conforme detalhado na subseção 3.2.3.3, representa uma correção teórica fundamental para descrever de forma mais realista o transporte radiativo em sistemas de dimensões finitas. Para validar a pertinência e a precisão desta abordagem, os resultados de uma série de simulações de Monte Carlo, que empregaram o método com matrizes de redistribuição de frequência, foram comparados com as previsões teóricas dos modelos com e sem o fator de truncagem. A Figura 5.5 apresenta essa comparação para o Cenário II (PFR), exibindo a evolução do espectro de emissão

$\Theta_n(\nu')$ e da distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$ após $n=1$, $n=5$ e $n=10$ espalhamentos. Em cada painel, os histogramas em vermelho correspondem aos dados gerados pela simulação de Monte Carlo (Simulado”), enquanto as curvas contínuas representam as previsões teóricas para o modelo com o fator $[1 - T(\nu)]$ (“Teórico com fator”, em preto) e para o modelo idealizado de sistema infinito (“Teórico sem fator”, em verde).

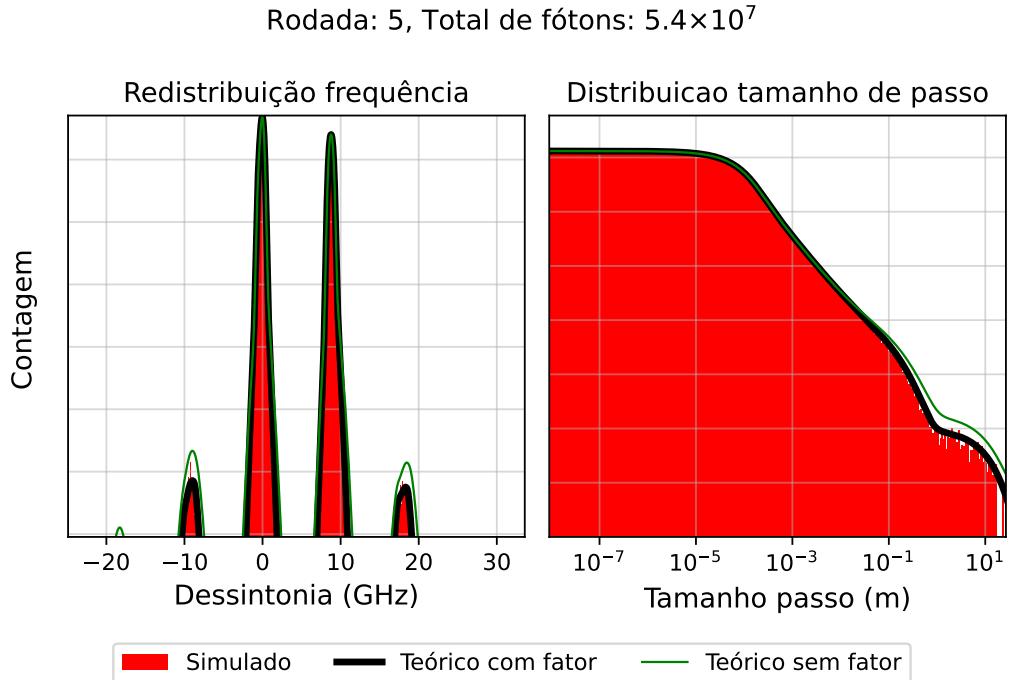
As simulações apresentadas na Figura 5.5 foram realizadas sob as mesmas condições físicas detalhadas na análise da Figura 5.2 (geometria cilíndrica de 2.00 cm de comprimento e 1.00 cm de raio, temperatura de 100 °C, densidade atômica de $1.47 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ e incidência monocromática na ressonância da transição $F=4$), embora se trate de uma execução computacional distinta. A análise foi focada exclusivamente no Cenário II (PFR), pois, como visto anteriormente, este é o regime que sofre o maior impacto do fator de truncagem. Tal escolha o torna, portanto, o caso ideal para demonstrar e validar a necessidade da correção teórica.

Analizando os espectros de redistribuição de frequência (painéis à esquerda), a concordância entre os dados simulados (vermelho) e a teoria que incorpora o fator de truncagem (preto) é notável e inequívoca. Na Figura 5.5a, referente ao primeiro espalhamento ($n=1$), observa-se que as duas curvas teóricas, com e sem o fator de truncagem, são perfeitamente idênticas. Isso ocorre, como esperado, porque o fator $[1 - T(\nu)]$ age sobre o espectro do passo anterior que, para $n=1$, é o próprio feixe de laser monocromático, o mesmo para ambos os modelos. O histograma da simulação sobrepõe-se perfeitamente a estas curvas teóricas, reproduzindo com alta fidelidade tanto as posições e amplitudes dos picos de ressonância principais quanto a emergência do pico secundário decorrente da estrutura hiperfina. A distinção entre os modelos teóricos torna-se clara à medida que o número de espalhamentos aumenta, como visto nas Figuras 5.5b ($n=5$) e 5.5c ($n=10$). Nestes casos, o modelo sem o fator de truncagem (verde) começa a divergir, prevendo um espalhamento cada vez maior de frequência para as asas, enquanto os dados da simulação, que intrinsecamente modelam o escape de fótons em um sistema finito, continuam a ser precisamente descritos pela teoria corrigida (preto).

Essa mesma validação é corroborada pela análise da distribuição de tamanho de passo $P_n(l)$, apresentada nos painéis à direita. A probabilidade de um fóton executar um passo de



(a) Resultados para o primeiro espalhamento $n=1$. O total de fótons simulados foi de 1.0×10^8 .



(b) Resultados para o quinto espalhamento $n=5$. O total de fótons simulados foi de 5.4×10^7 .

Figura 5.5

um determinado comprimento l , obtida da simulação (vermelho), alinha-se perfeitamente com a previsão teórica que considera o fator de truncagem (preto). Por outro lado, o modelo de sistema infinito (verde) prevê consistentemente uma maior probabilidade para a ocorrência de passos longos a medida que o número de espalhamentos aumenta. A simulação, no entanto,

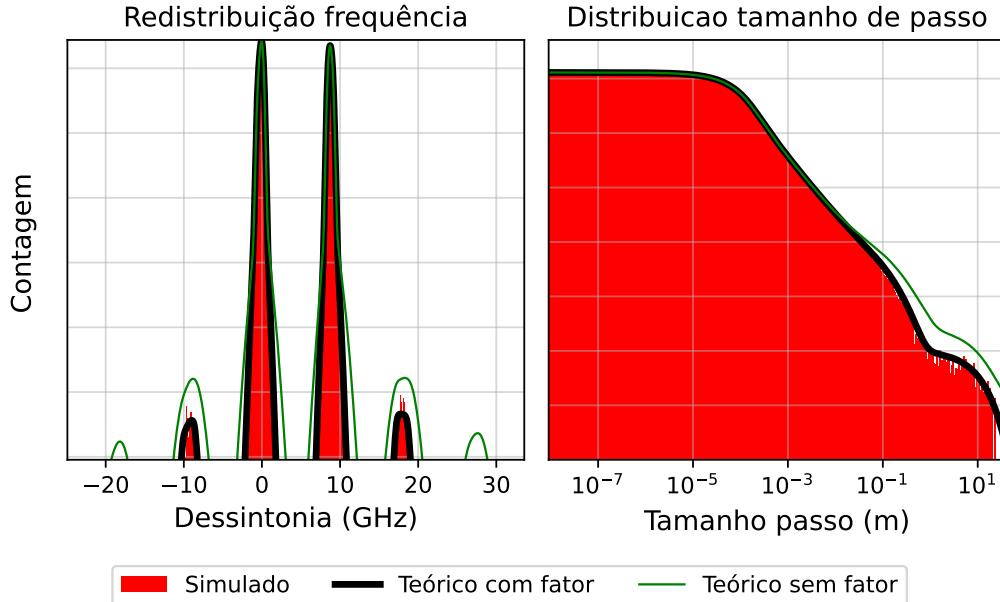
Rodada: 10, Total de fótons: 3.7×10^7 (c) Resultados para o décimo espalhamento $n=10$. O total de fótons simulados foi de 3.7×10^7 .

Figura 5.5 – Validação do fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$ para o Cenário II (PFR). A figura compara os resultados da simulação (histogramas em vermelho) com as previsões teóricas do modelo que inclui o fator de truncagem (curva preta) e do modelo para um sistema infinito que o exclui (curva verde). Cada subfigura exibe, à esquerda, o espectro de emissão $\Theta_n(\nu')$ com eixo vertical em escala logarítmica (monolog) e, à direita, a distribuição de probabilidade do tamanho de passo $P_n(l)$ com ambos os eixos em escala logarítmica (log-log). Em (a), para o primeiro espalhamento ($n=1$), ambos os modelos teóricos são idênticos e concordam perfeitamente com a simulação. Em (b), para $n=5$, e (c), para $n=10$, os modelos teóricos divergem: o modelo sem o fator (verde) superestima a emissão nas asas e a probabilidade de passos longos, enquanto o modelo corrigido (preto) continua a descrever com precisão os dados da simulação, validando a necessidade da correção teórica.

Fonte: Autoria própria.

demonstra que o escape físico dos fótons nas fronteiras da célula efetivamente “trunca” a cauda da distribuição de tamanho de passo, um efeito que apenas o modelo com o fator $[1 - T(\nu)]$ consegue capturar.

Sendo assim, a análise comparativa detalhada evidencia de forma conclusiva que a introdução do fator $[1 - T(\nu)]$ trata-se de uma correção necessária para a modelagem teórica do aprisionamento radiativo em geometrias finitas. A excelente concordância em múltiplos eventos de espalhamento valida o emprego deste fator, confirmando que ele representa adequadamente o mecanismo físico de escape que limita tanto a redistribuição espectral para as asas quanto a

ocorrência de saltos excessivamente longos.

5.3.2 Transmissão a 90°

As simulações de Monte Carlo foram utilizadas para realizar uma análise detalhada do sinal de transmissão difusa a 90°, com o objetivo de decompor o sinal total e compreender a contribuição relativa dos eventos de primeiro e múltiplos espalhamentos. As simulações foram configuradas para replicar a geometria do arranjo experimental, ou seja, uma célula cilíndrica de 2.00 cm de comprimento e diâmetro, com a detecção virtual posicionada na metade do seu comprimento (1.00 cm). A Figura 5.6 apresenta os espectros simulados para quatro condições de temperatura do reservatório ($T_r = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$, $45\text{ }^{\circ}\text{C}$, $65\text{ }^{\circ}\text{C}$ e $100\text{ }^{\circ}\text{C}$) e, consequentemente, de probabilidades de colisão crescentes ($P_c = 0.07\%$, 0.46% , 2.27% e 20.26%). Para cada condição, são exibidas as curvas de transmissão total (linha tracejada) para os Cenários II (azul), III (vermelha) e Resultante (verde), juntamente com a contribuição isolada do primeiro espalhamento (linha contínua) para cada um desses cenários.

A análise conjunta dos resultados experimentais e das simulações de Monte Carlo para a transmissão difusa a 90° permite extrair uma conclusão fundamental sobre a natureza do transporte radiativo nas asas espectrais. A excelente concordância observada no Capítulo 4, entre os dados experimentais e o modelo teórico de espalhamento único do Cenário II (PFR), é agora não apenas confirmada, mas também justificada em um nível mais profundo pelas simulações. Estas permitem, de forma mais robusta, investigar como a geometria de detecção a 90° atua como um filtro físico, além de elucidar por que os eventos de primeiro espalhamento do cenário II se tornam o mecanismo dominante que governa o sinal detectado naquela região.

A investigação deste fenômeno se inicia com a análise das curvas simuladas na Figura 5.6. Primeiramente, observa-se que as curvas de transmissão que contabilizam todos os espelhamentos (transmissão total) para os três cenários de interação (II, III e Resultante) convergem para os mesmos valores de transmissão nas asas espectrais ($\nu > 1.2 \sim 1.3\text{ GHz}$). A decomposição do sinal aprofunda o entendimento: enquanto a transmissão total para os Cenários II e Resultante é constituída quase que exclusivamente pelo primeiro espalhamento, o sinal do Cenário III é necessariamente construído a partir de múltiplos eventos, uma vez que a CFR torna seu primeiro

Simulações de Monte Carlo

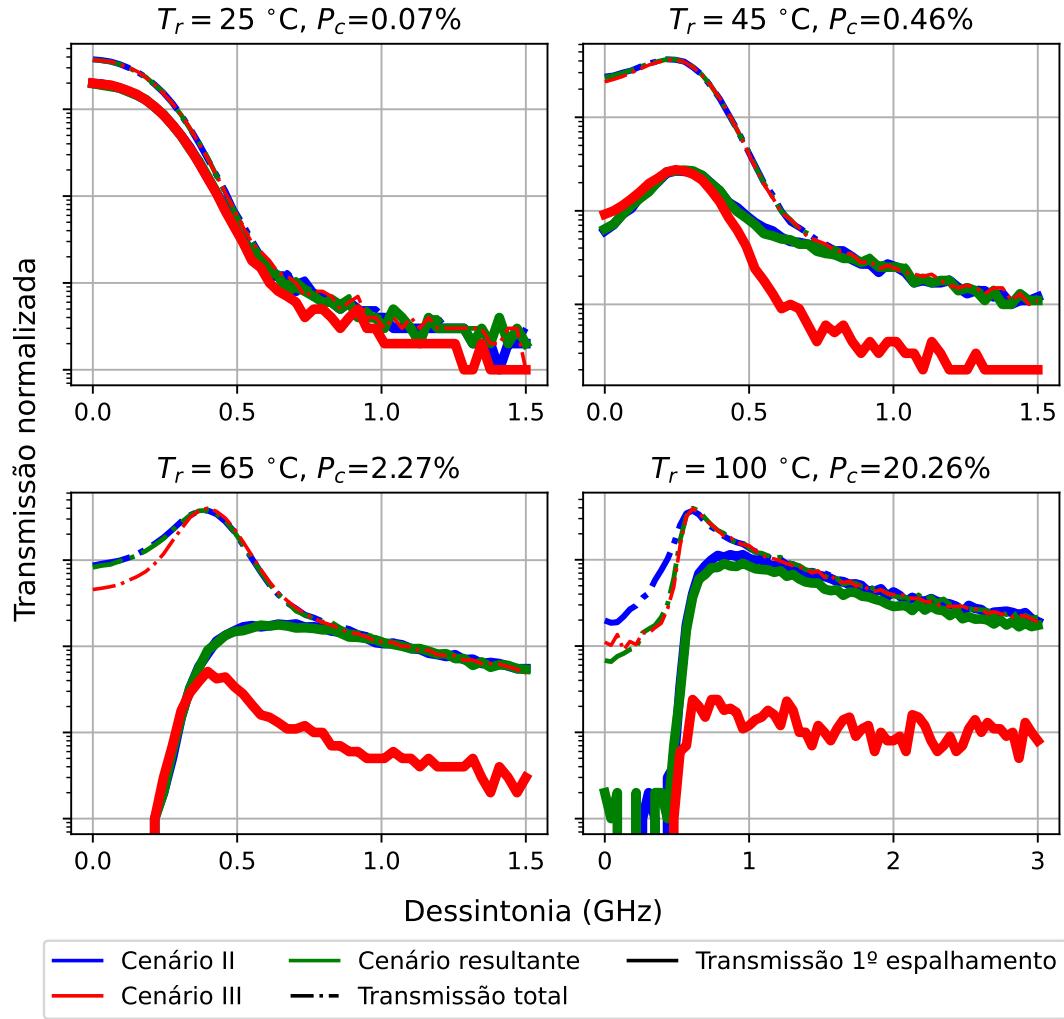


Figura 5.6 – Espectros de transmissão difusa a 90° simulados via Monte Carlo para quatro condições de temperatura do reservatório (T_r) e probabilidade de colisão (P_c). O eixo vertical de transmissão está em escala logarítmica para facilitar a comparação das intensidades nas asas espectrais. As condições geométricas da simulação replicam as do arranjo experimental: uma célula cilíndrica de 2.00 cm de comprimento e 2.00 cm de diâmetro, com a detecção virtual posicionada na metade do comprimento (1.00 cm). Em cada painel, as curvas tracejadas e a contínua representam a transmissão total (contribuição de todos os espalhamentos para o sinal de transmissão) e do primeiro espalhamento, respectivamente, para os Cenários II (azul), III (vermelha) e Resultante (verde). A principal observação é a convergência de todas as curvas de transmissão total nas asas, que por sua vez coincidem com a contribuição do primeiro espalhamento nos cenários com correlação (II e Resultante), demonstrando a dominância do espalhamento único nesta região.

Fonte: Autoria própria.

espalhamento praticamente nulo. Apesar disso, o sinal total do Cenário III converge com o de espalhamento único do Cenário II.

A explicação para esta convergência reside na característica espectral dos fótons emitidos:

emissão nas asas. A excitação no centro geométrico do meio impõe uma forte seletividade ao escape: um fóton reemitido próximo à ressonância tem sua reabsorção como destino quase certo, enquanto o escape se torna um evento viável apenas para aqueles emitidos com grande dessintonia (nas asas). Devido à coerência do espalhamento no cenário II, um fóton absorvido nas asas é reemitido também em uma frequência de asa. Nesse caso, a redistribuição é regida apenas pelo efeito Doppler que, para um único evento, causa um desvio de frequência, geralmente, pequeno frente a dessintonia do fóton incidente e mantém o fóton em uma região de baixa absorção. Como resultado, a probabilidade de escape imediato é tão alta que a contribuição de múltiplos espalhamentos para o sinal torna-se desprezível. Já a contribuição do primeiro espalhamento do cenário III é praticamente nula, pois a CFR tende a reemitir os fótons no centro da linha, onde são imediatamente reabsorvidos na grande maioria das vezes. Apesar disso, os poucos fótons que acessam as asas a cada evento de reemissão, escapam, sendo o sinal observado nesse cenário formado majoritariamente por esses fótons.

Portanto, a análise das simulações valida a abordagem experimental, mas com uma justificativa mais sutil. A concordância com o modelo do Cenário II ocorre porque a geometria de 90° seleciona preferencialmente os fótons que escapam a partir das asas espectrais, sendo este o mecanismo de escape dominante em um sistema essencialmente livre de colisões. Para os cenários com coerência (II e Resultante), este evento corresponde ao primeiro espalhamento. Para o Cenário III, no entanto, ele é o resultado de múltiplos espalhamentos. O evento final de escape da asa é fisicamente o mesmo em todos os casos, o que torna os sinais observados indistinguíveis naquela região.

5.3.3 Transmissão para Frente

A investigação numérica da transmissão difusa para a frente, utilizando tanto o método de Monte Carlo com seleção de velocidade quanto o método otimizado com matriz de redistribuição de frequência, revelou uma inesperada insensibilidade do expoente de Lévy α aos parâmetros do sistema. Contrariamente às observações experimentais, os resultados das simulações não apresentaram uma dependência clara com o comprimento da célula (ℓ) ou com a densidade atômica (N). A Figura 5.7 ilustra os espectros de transmissão obtidos a partir das

simulações padrão. Uma análise quantitativa do ajuste do expoente α é apresentada na Tabela 12, que resume os valores obtidos para algumas das diversas condições simuladas. Observa-se que, para vários comprimentos e densidades, os valores de α calculados pelos dois métodos são praticamente os mesmos. Contudo, uma análise mais fina revela que o método de Monte Carlo mostra uma variação de α em função do cenário de espalhamento (II, III ou resultante), uma sensibilidade que não é observada nos resultados do método da matriz. Mesmo assim, os valores não condizem com o que se espera.

Tabela 12 – Tabela comparativa dos valores do expoente de Lévy (α) obtidos a partir das simulações de Monte Carlo para $N = 4.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ e $N = 2.1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$. Os valores foram extraídos através do ajuste da lei de potência na região espectral entre -400 MHz e 150 MHz, replicando a metodologia aplicada aos dados experimentais. Os resultados são organizados em função da densidade atômica ($N = 4.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ e $N = 2.1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$), do método de simulação (“Matriz” ou “Monte Carlo” com seleção de velocidade), do cenário de espalhamento e da geometria da célula. A tabela evidencia a convergência geral para $\alpha \approx 1$ na maioria das condições, com a notável exceção da célula de 2 mm sob o método de Monte Carlo completo, que, por não assumir um regime de múltiplos espalhamentos, captura de forma mais precisa os efeitos de espalhamento único neste sistema opticamente mais fino.

Densidade atômica (m^{-3})	Método	Cenário	α		
			2 mm	1 cm	2 cm
4.0×10^{18}	Matriz	II	1.06 ± 0.02	1.04 ± 0.03	1.05 ± 0.03
		III	1.03 ± 0.04	0.99 ± 0.03	1.00 ± 0.04
		$P_c = 6.4\%$	1.05 ± 0.03	1.06 ± 0.04	1.05 ± 0.03
	Monte Carlo	II	1.84 ± 0.06	1.06 ± 0.08	1.01 ± 0.09
		III	0.55 ± 0.04	0.47 ± 0.05	0.47 ± 0.06
		$P_c = 6.4\%$	1.77 ± 0.08	0.98 ± 0.08	0.97 ± 0.07
2.1×10^{19}	Matriz	II	0.99 ± 0.03	1.00 ± 0.02	1.00 ± 0.03
		III	0.92 ± 0.01	0.89 ± 0.01	0.88 ± 0.03
		$P_c = 26.6\%$	0.98 ± 0.03	0.95 ± 0.03	0.98 ± 0.03
	Monte Carlo	II	0.97 ± 0.02	1.00 ± 0.05	0.97 ± 0.02
		III	0.58 ± 0.03	0.56 ± 0.04	0.57 ± 0.04
		$P_c = 26.6\%$	0.77 ± 0.02	0.78 ± 0.03	0.77 ± 0.02

A chave para a compreensão destes resultados reside em um mecanismo de transporte não antecipado pelo modelo de detecção frontal: o espalhamento para trás. A análise detalhada revelou que, para as condições investigadas, a posição do primeiro espalhamento ocorre muito

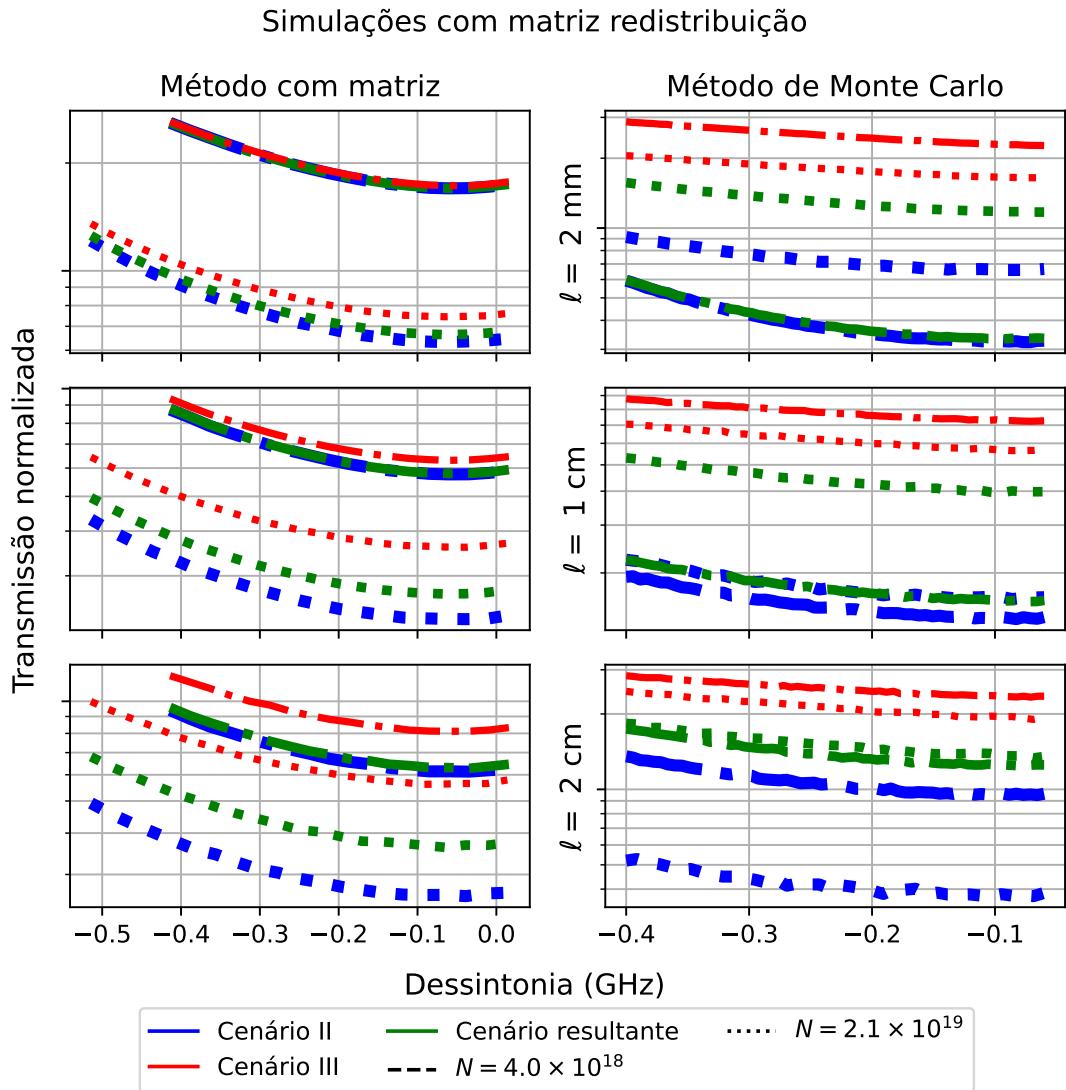


Figura 5.7 – Comparação entre os espectros de transmissão frontal obtidos por simulações com matrizes de redistribuição de frequência e com Monte Carlo, para $N = 4.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ (linhas tracejadas) e $N = 2.1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ (linhas pontilhadas). O eixo vertical de transmissão normalizada está em escala logarítmica. Os painéis estão organizados com os resultados do “Método com matriz” na coluna da esquerda e do Método de Monte Carlo” (com seleção de velocidade) na coluna da direita, enquanto cada linha corresponde a uma geometria de célula (2 mm, 1 cm e 2 cm). Os resultados aqui exibidos foram selecionados para uma comparação direta e, portanto, utilizam as condições físicas da primeira medição experimental de cada célula. Devido ao alto custo computacional, as simulações foram executadas apenas na região espectral de interesse para o ajuste do expoente de Lévy, compreendida entre -400 MHz e -70 MHz. Em cada painel, são apresentadas as curvas para os três cenários de espalhamento (II, III e Resultante), onde se observa a forte convergência dos resultados. Esta convergência indica que, no modelo de transmissão para a frente, o espectro simulado é largamente insensível aos parâmetros do sistema, um resultado que diverge das observações experimentais.

Fonte: Autoria própria.

próxima à janela de entrada da célula ($z = 0$). Consequentemente, há uma alta probabilidade de que o fóton, após esta primeira interação, seja reemisso na direção oposta ao feixe incidente e escape imediatamente do vapor, sem sofrer interações subsequentes. Este canal de escape para trás torna-se o processo dominante, sobrepondo-se à estatística de transporte difuso para a frente. A comprovação desta hipótese foi obtida através de uma série de testes numéricos onde a posição do primeiro espalhamento foi artificialmente deslocada para o interior da célula, suprimindo o escape imediato. Nessas condições, a estatística de transporte e o valor de α foram alterados, embora a dependência com os parâmetros do sistema não tenha sido restabelecida, confirmando que o espalhamento para trás é, de fato, o mecanismo regulador.

Outro ponto que reforça esta hipótese é a divergência entre os resultados obtidos pelo método da matriz e pelo método de Monte Carlo, visível na Tabela 12. Essa diferença pode ser entendida como uma consequência da física que cada modelo descreve. O método da matriz de redistribuição de frequência é formulado sob a premissa de um regime de múltiplos espalhamentos e, por construção, não contabiliza adequadamente a física do primeiro evento de espalhamento. Como há fortes indícios de que o transporte seja regulado predominantemente pelo escape para trás logo no primeiro evento, a imprecisão do método da matriz para este cenário torna-se mais clara. A discrepância observada entre os dois métodos, portanto, não seria uma falha, mas sim um indício adicional de que o espalhamento para trás no início do percurso do fóton é o mecanismo dominante, sendo que apenas o método de Monte Carlo o captura de forma acurada em todas as condições.

Uma análise mais detalhada dos resultados de Monte Carlo na Tabela 12 revela um caso particularmente elucidativo para a menor densidade ($N = 4.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$). No cenário II, o valor de α para a célula de 2 mm ($\alpha \approx 1.84$) difere significativamente dos valores obtidos para as células de 1 cm ($\alpha \approx 1.06$) e 2 cm ($\alpha \approx 1.01$). De forma análoga, apesar de menos proeminente, uma leve diferença também é percebida no cenário III para a célula de 2 mm em relação aos comprimentos maiores. É importante notar que essa distinção desaparece completamente na densidade mais alta, onde os valores de α se tornam homogêneos para todos os comprimentos de célula, tanto no cenário II quanto no III. Este conjunto de observações se justificam devido

a contribuição do primeiro espalhamento. Como ilustrado na Figura 4.19, que apresenta os espectros de primeiro espalhamento para uma densidade muito próxima da que foi simulada, a contribuição desse primeiro evento para a estatística final é muito mais significativa no regime opticamente mais fino da célula de 2 mm, alterando o valor do α aferido.

É fundamental ressaltar que a construção do código de simulação capaz de revelar tais sutilezas não foi um processo trivial. O desenvolvimento do script demandou um longo período de trabalho, com inúmeros ciclos de implementação, teste e refinamento. A versão atual é o resultado dessa evolução contínua e ainda se encontra em desenvolvimento, refletindo a complexidade do problema físico e o esforço contínuo para aprimorar as ferramentas numéricas de investigação. A presente análise, portanto, representa não um ponto final, mas um avanço significativo na compreensão de um problema complexo, viabilizado por este esforço de desenvolvimento.

5.4 Conclusão do Capítulo

Neste capítulo, foi apresentada uma análise detalhada do transporte radiativo em vapor de célio por meio de um extenso conjunto de simulações de Monte Carlo, cujos resultados foram confrontados com modelos teóricos e dados experimentais. A investigação permitiu não apenas validar componentes teóricos do modelo, mas também revelou mecanismos físicos inesperados que redefiniram a compreensão do problema.

Inicialmente, a abordagem numérica obteve sucesso em duas frentes importantes. Primeiramente, validou de forma inequívoca a introdução do fator de truncagem $[1 - T(\nu)]$ na descrição teórica, demonstrando sua necessidade para a correta modelagem do transporte em sistemas de dimensões finitas. Em segundo lugar, a análise da transmissão difusa a 90° elucidou a natureza do sinal experimental, confirmando que a geometria de detecção seleciona preferencialmente fôtons que escapam a partir das asas espectrais, um evento dominado pelo primeiro espalhamento, justificando assim a excelente concordância com o modelo teórico do Cenário II observada experimentalmente.

O principal avanço, contudo, emergiu da investigação da transmissão para a frente e da tentativa de reproduzir o comportamento do expoente de Lévy, α . A aparente falha das

simulações em replicar a dependência de α com os parâmetros do sistema, uma dependência claramente observada nos experimentos, levou a uma descoberta crucial sobre o comportamento do modelo numérico. Foi demonstrado que, dentro do arcabouço da simulação, o espalhamento para trás se torna um canal de transporte dominante que suprime a sensibilidade aos parâmetros do sistema.

Esta divergência fundamental entre a realidade experimental (onde α depende de ℓ e N) e o comportamento do modelo numérico (dominado pelo espalhamento para trás e insensível a ℓ e N) é uma das conclusões mais significativas deste trabalho. Ela sugere que o problema não reside apenas na geometria de detecção, mas possivelmente em uma lacuna no próprio modelo físico implementado. Considerando que o modelo teórico para o aprisionamento de radiação tem suas bases em trabalhos de quase oitenta anos com algumas implementações e correções pontuais ao longo das décadas, é plausível que ele careça de correções ou de considerações físicas ainda não exploradas para que possa ser implementado de forma mais acurada nas simulações. Mesmo assim, é importante ressaltar que as simulações foram capazes de capturar contribuições físicas importantes, como o efeito do primeiro espalhamento na célula de 2 mm, o que indica que a abordagem está no caminho correto.

6 Conclusão

Este trabalho estabeleceu um entendimento quantitativo da transição entre regimes de transporte radiativo em vapores de césio-133, demonstrando, de forma sistemática, como a dinâmica de voos de Lévy é governada por parâmetros experimentais controláveis. Por meio de uma abordagem integrada que uniu medições de transmissão difusa, um robusto tratamento teórico e simulações de Monte Carlo desenvolvidas para este fim, esta tese elucidou a dependência do expoente de Lévy (α) com a densidade atômica (N), o comprimento da célula (ℓ) e a intensidade do laser (I), caracterizando a transição entre os regimes sem e com colisões (Cenários II e III).

A análise experimental revelou uma notável dualidade no comportamento do vapor. Demonstrou-se que, para a mesma condição de densidade atômica, o regime de transporte depende da escala de observação: a transmissão a 90° , que sonda as asas espectrais, é bem descrita pelo espalhamento com redistribuição parcial de frequência (Cenário II), em acordo com o esperado para um sistema com baixa probabilidade de colisões. Em contrapartida, as medições a 10° , dominadas por múltiplos espalhamentos, mostram um comportamento que diverge das previsões do Cenário II e só se alinha com o Cenário III (CFR) após a inclusão da correção de isotropização do campo de radiação interno. Este achado é profundamente contraintuitivo, pois o regime de baixas colisões do sistema deveria favorecer a descrição pelo Cenário II em ambas as geometrias. Longe de resolver uma contradição, esta descoberta expõe um paradoxo fundamental: o mesmo sistema físico exibe estatísticas de transporte radicalmente diferentes dependendo de quais trajetórias de fôtons são selecionadas pela geometria de detecção e da região espectral sondada. Isso sugere que a natureza da caminhada aleatória do fóton em meios densos é mais intricada do que os modelos atuais conseguem capturar de forma unificada, apontando para uma área rica para investigações futuras.

Além disso, de forma inédita, este trabalho quantificou as leis de escala que regem o expoente de Lévy. Foi demonstrado que o aumento tanto da densidade atômica (N) quanto do comprimento da célula (ℓ) modificando o caráter superdifusivo do transporte, provando que a

natureza do voo de Lévy pode ser ativamente controlada. Adicionalmente, observou-se uma clara dependência de α com a intensidade do laser (I), indicando uma modulação do transporte anômalo pelo próprio campo de luz. O mecanismo físico detalhado por trás desta última observação permanece uma questão em aberto, representando uma direção promissora para investigações futuras.

No campo teórico e computacional, a principal contribuição foi o desenvolvimento e a validação do fator de correção $[1 - T(\nu)]$, que incorpora o efeito de truncagem imposto pela finitude do sistema. Esta correção se mostrou indispensável para aprimorar a precisão dos modelos teóricos, reconciliando-os com a realidade de sistemas confinados. As simulações de Monte Carlo foram cruciais para aprofundar a interpretação física, confirmando que a detecção a 90° atua como um “filtro” que isola o primeiro espalhamento, desde que as interações ocorram, inicialmente, nas asas espectrais.

O avanço mais significativo no campo computacional, no entanto, emergiu da investigação da transmissão para a frente. A tentativa de reproduzir numericamente a rica dependência de α com os parâmetros do sistema, observada experimentalmente, revelou uma profunda divergência. As simulações, baseadas no modelo canônico de transporte, mostraram-se incapazes de replicar os resultados experimentais, prevendo, em vez disso, um expoente α insensível aos parâmetros da célula. A análise numérica revelou que, dentro do arcabouço teórico implementado, este comportamento é uma consequência do espalhamento para trás, um canal de escape que se torna dominante no modelo e suprime a sensibilidade do transporte difuso para a frente.

Esta divergência fundamental entre a realidade experimental, onde α exibe uma clara dependência de ℓ e N , e o comportamento do modelo numérico representa um ponto central da discussão, ainda em evolução. Esta inconsistência sugere que o problema pode não residir apenas em uma limitação da geometria de detecção ou em um artefato da simulação, mas possivelmente em uma lacuna no próprio modelo físico de aprisionamento radiativo. Considerando que as bases teóricas do modelo têm quase oitenta anos, mesmo com correções pontuais ao longo das décadas, é plausível que ele careça de considerações físicas ainda não exploradas, que são essenciais para descrever a rica fenomenologia observada. Apesar desta aparente inconsistência, é crucial

ressaltar que a abordagem teórica, em particular com a incorporação do efeito de isotropização, foi suficiente para descrever os resultados experimentais com notável precisão.

As conclusões desta tese, em especial a divergência fundamental entre os resultados experimentais e o comportamento do modelo numérico, abrem novos caminhos para investigações futuras. As questões que permanecem em aberto, longe de serem falhas, formulam as perguntas precisas que guiarão os próximos passos na compreensão da complexa interação luz-matéria em vapores densos. As principais perspectivas de pesquisa que emergem deste trabalho são:

1. Revisão e Aprimoramento do Modelo Teórico Adotado: A perspectiva mais fundamental é a necessidade de uma revisão crítica das premissas do modelo de aprisionamento radiativo. A incapacidade da simulação atual de descrever a dependência do expoente α com os parâmetros do sistema (ℓ e N) sugere que considerações físicas, possivelmente negligenciadas nas formulações clássicas, precisam ser incorporadas. Investigações futuras devem explorar a inclusão de efeitos não lineares, como a saturação óptica e o bombeamento óptico.
2. Novas Configurações Experimentais: Para testar diretamente a hipótese do espalhamento para trás e sua real contribuição para o sinal medido, novas configurações experimentais podem ser concebidas. Arranjos que utilizem, por exemplo, detecção simultânea para a frente e para trás, ou geometrias de bombeio para manipular a população atômica em diferentes regiões da célula, poderiam fornecer dados cruciais para isolar os diferentes canais de transporte e validar ou refutar as hipóteses levantadas por este trabalho.
3. Otimização e Hibridização das Simulações: Uma perspectiva computacional promissora é o desenvolvimento de um método de simulação híbrido. Como demonstrado, o método de Monte Carlo com seleção de velocidade captura com maior precisão a física dos primeiros eventos de espalhamento, enquanto o método baseado em matrizes de redistribuição é ordens de magnitude mais rápido (aproximadamente 10 vezes) para o regime de múltiplos espalhamentos. Uma abordagem híbrida poderia iniciar a trajetória de cada fóton com o método de seleção de velocidade para os primeiros (e mais críticos) espalhamentos e, após um número predeterminado de interações, transicionar para o método da matriz. Tal

otimização permitiria simular sistemas opticamente muito espessos com maior fidelidade estatística e em um tempo computacional viável, combinando o rigor físico do primeiro método com a eficiência do segundo.

Em suma, as investigações futuras, guiadas pelas descobertas e questionamentos desta tese, prometem não apenas resolver o paradoxo aqui exposto, mas também avançar significativamente a fronteira do conhecimento sobre o transporte anômalo da luz. Portanto, este trabalho estabelece uma base experimental, teórica e computacional sólida. As questões que permanecem em aberto, como a elucidação completa do papel da intensidade e a natureza do transporte para frente, não representam falhas, mas sim novas perspectivas de pesquisa que foram abertas por este estudo. Assim, a tese traz avanços sobre o problema estudado, respondendo questões, validando modelos e, mais importante, formulando as perguntas precisas que guiarão as próximas investigações sobre a complexa interação luz-matéria.

APÊNDICES

A Convolução de duas Lorentzianas

Considere duas funções de Lorentz, dadas por

$$f_1(\delta') = \frac{1}{1 + \frac{4\delta'^2}{\Gamma_1^2}} \quad (\text{A.1})$$

e

$$f_2(\delta') = \frac{1}{1 + \frac{4\delta'^2}{\Gamma_2^2}}, \quad (\text{A.2})$$

onde Γ_1 e Γ_2 representam as larguras à meia altura de cada Lorentziana.

A transformada de Fourier de uma função $f(t)$ é definida como

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (\text{A.3})$$

Para o caso particular de uma função Lorentziana no domínio do tempo,

$$f(t) = \frac{1}{1 + \left(\frac{t}{\alpha}\right)^2},$$

sua transformada de Fourier é calculada como

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{1 + \left(\frac{t}{\alpha}\right)^2} dt.$$

Realizando a substituição de variáveis $u = t/\alpha$ ($dt = \alpha du$), chega-se em

$$F(\omega) = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i(\omega\alpha)u}}{1 + u^2} du.$$

Utilizando a integral conhecida $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{x^2 + 1} dx = \pi e^{-|k|}$, obtém-se

$$F(\omega) = \pi \alpha e^{-|\omega\alpha|}. \quad (\text{A.4})$$

Identificando $\alpha_i = \Gamma_i/2$ para cada Lorentziana ($i = 1, 2$), suas transformadas de Fourier são

$$F_i(\omega) = \frac{\pi \Gamma_i}{2} e^{-\frac{|\omega| \Gamma_i}{2}}.$$

A convolução $I(\delta) = (f_1 * f_2)(\delta)$ no domínio do tempo/frequência corresponde ao produto das transformadas, escrita como

$$H(\omega) = F_1(\omega) F_2(\omega) = \frac{\pi^2 \Gamma_1 \Gamma_2}{4} e^{-|\omega| \left(\frac{\Gamma_1 + \Gamma_2}{2}\right)}.$$

Definindo $\Gamma' = \Gamma_1 + \Gamma_2$ e $\alpha' = \Gamma'/2$, pode-se reescrever a expressão anterior como

$$H(\omega) = \frac{\pi^2 \Gamma_1 \Gamma_2}{4} e^{-|\omega|\alpha'}. \quad (\text{A.5})$$

Assumindo que a convolução de duas Lorentzianas resulta em outra Lorentziana com largura Γ' , ou seja,

$$I(\delta) = \frac{C}{1 + \frac{4\delta^2}{\Gamma'^2}}, \quad (\text{A.6})$$

sua transformada de Fourier, utilizando (A.4), é dada por

$$\mathcal{F}\{I(\delta)\} = \pi\alpha' C e^{-|\omega|\alpha'}.$$

Igualando esta expressão a (A.5), chega-se em

$$\pi\alpha' C = \frac{\pi^2 \Gamma_1 \Gamma_2}{4} \implies C = \frac{\pi \Gamma_1 \Gamma_2}{2(\Gamma_1 + \Gamma_2)}.$$

Substituindo C em (A.6), obtemos o resultado final:

$$I(\delta) = \frac{\pi \Gamma_1 \Gamma_2}{2(\Gamma_1 + \Gamma_2)} \cdot \frac{1}{1 + \frac{4\delta^2}{(\Gamma_1 + \Gamma_2)^2}}. \quad (\text{A.7})$$

B Códigos das Simulações de Monte Carlo com Distribuição de Pareto

Este apêndice apresenta o código-fonte, desenvolvido em Python, da simulação de Monte Carlo utilizada no Capítulo 3 para ilustrar as diferenças fundamentais entre os regimes de transporte difusivo e superdifusivo. A rotina modela uma caminhada aleatória bidimensional na qual os comprimentos dos passos são sorteados de uma distribuição de Pareto, cujo expoente α é variado para gerar trajetórias com características de voos de Lévy ou de difusão clássica.

```
1 import numpy as np # Inicializa o gerador de números aleatórios com NumPy
2 # OUTROS
3 gerador_aleatorio = np.random.default_rng() # Utiliza a nova API de geração de
4 # números aleatórios (Generator)
5 # ENTRADAS
6 r_min = 1 # Comprimento mínimo dos passos (em unidades arbitrárias)
7 alpha_analise = [0.5, 1.5, 3.0] # Lista dos valores do parâmetro alpha da
8 # distribuição de Pareto que serão analisados
9 total_rodadas = 100000 # Número total de passos por simulação
10 # Loop principal sobre cada valor de alpha
11 for alpha in alpha_analise:
12     um_dividido_alpha = 1/alpha # Pré-calcula 1/alpha para uso na geração dos
13     # passos
14     rodada = 1 # Inicializa o contador de passos
15     posicao_x = 0 # Posição inicial em x
16     posicao_y = 0 # Posição inicial em y
17     ##
18     salvar_dados = [] # Lista para armazenar os dados da simulação
19     # Loop da caminhada aleatória
20     while True:
21         passo_rodada = r_min/((1-gerador_aleatorio.random())**um_dividido_alpha) #
22         # Gera o comprimento do passo com base na distribuição de Pareto
23         direcao_passo_rodada = 2*np.pi*gerador_aleatorio.random() # Gera uma direção
24         # aleatória uniformemente distribuída entre 0 e 2π
25         # Atualiza a posição nas coordenadas x e y
26         posicao_x += passo_rodada*np.sin(direcao_passo_rodada)
27         posicao_y += passo_rodada*np.cos(direcao_passo_rodada)
28         #
29         salvar_dados.append([rodada, posicao_x, posicao_y, passo_rodada]) # Armazena
30         # os dados da rodada atual
31         # Verificação de condição de encerramento da simulação (ao atingir o total
32         # de passos estipulados pela variável total_rodadas)
33         if rodada < total_rodadas: #Se não atingiu o máximo de passos, contabiliza-se
34             # mais uma rodadas
35             rodada += 1
36         else: # Se atingiu o total de rodadas, finaliza o loop
```

```
29     break
30
31     # Salva os dados em arquivo CSV com nome específico para cada alpha
32     np.savetxt(
33         'alpha_{:1.1f}.csv'.format(alpha),           # Nome do arquivo
34         salvar_dados,                            # Dados a serem salvos
35         fmt='{:d},{:1.3e},{:1.3e},{:1.3e}',       # Formato de cada coluna
36         delimiter=',',                          # Delimitador de colunas
37         newline='\n',                           # Separador de linhas
38         header='rodada, posicao x, posicao y, passos', # Cabeçalho do CSV
39     )
```

Programa B.1 – Simulação de Monte Carlo com distribuição de Pareto utilizada para construir caminhadas aleatórias de partículas e comparar os regimes de transporte difusivo e superdifusivo.

C Experimento da Pureza Atômica

Este apêndice detalha a metodologia experimental empregada para avaliar a pureza das células de vapor de césio, um procedimento essencial para validar as medições de transporte radiativo. A análise baseia-se na determinação da largura de linha das transições atômicas, uma vez que a presença de gases contaminantes induz um alargamento colisional mensurável. Para isso, foram realizadas medições de espectroscopia de absorção saturada e do laser, cujos resultados e tratamentos são apresentados a seguir.

Linha D1 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$)

Embora os experimentos principais desta tese tenham sido focados na linha D2, a análise de pureza das células foi realizada na linha D1. A escolha desta linha se justifica pela sua estrutura hiperfina, na qual a separação em frequência entre as transições é maior que a largura Doppler do vapor. Essa condição garante que cada pico de ressonância seja espectralmente isolado, evitando a sobreposição com outras transições e, principalmente, a formação de ressonâncias de *crossover*, o que simplifica a medição e permite uma determinação mais direta da largura de linha.

A linha D1 do átomo de césio corresponde à transição eletrônica do estado fundamental $6^2S_{1/2}$ para o estado excitado $6^2P_{1/2}$, cujas propriedades necessárias para a análise da pureza atômica, como comprimento de onda e largura de linha natural, estão resumidas na Tabela 13. A interação hiperfina desdobra esses níveis de energia: o estado fundamental divide-se nos subníveis $F = 3$ e $F = 4$, enquanto o estado excitado divide-se nos subníveis $F' = 3'$ e $F' = 4'$. A configuração detalhada desses níveis, incluindo suas separações em frequência e as forças de oscilador relativas para cada transição permitida, é ilustrada no diagrama da Figura C.1.

Largura de Linha das Transições Atômicas

O experimento para determinar a largura de linha das transições atômicas foi realizado, à temperatura ambiente, por meio de espectroscopia de absorção saturada, utilizando uma razão

Tabela 13 – Parâmetros da linha D1 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$) do Césio-133 relevantes para a análise de pureza.

Comprimento de onda no vácuo de transição (λ_0)	894.59 nm
Largura de linha natural (FWHM) (Γ_0)	4.56 MHz
Intensidade de saturação (I_{sat})	2.50 mW/cm ²

Fonte: Valores retirados de [113]

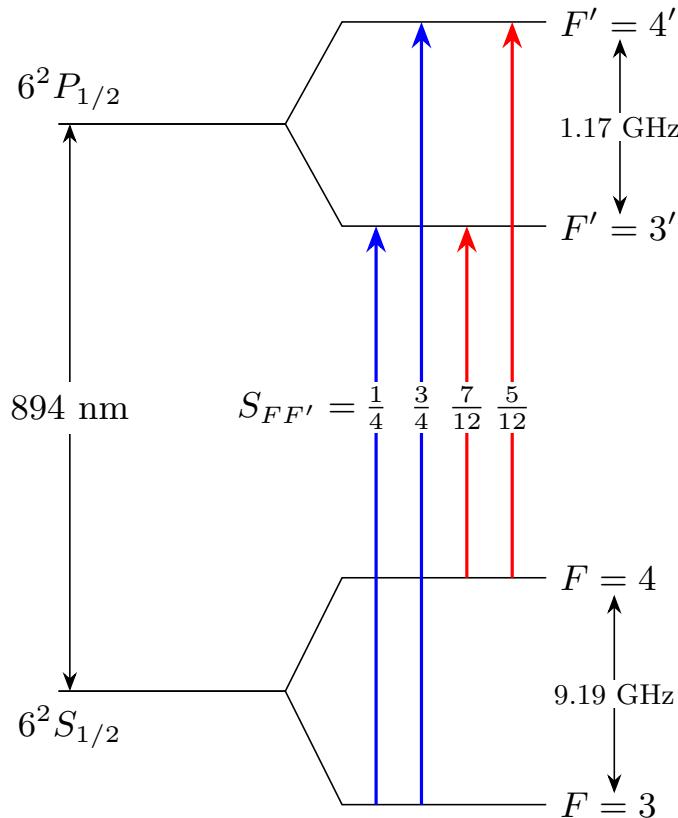


Figura C.1 – Diagrama da estrutura hiperfina da linha D1 ($6^2S_{1/2} \rightarrow 6^2P_{1/2}$) do Césio-133. São indicados os subníveis hiperfinais F e F', as separações em frequência e as forças de oscilador relativas ($S_{FF'}$) das transições.

Fonte: Autoria própria.

de intensidade de 2:1 entre o feixe de bombeio (forte) e o feixe de prova (fraco). O primeiro passo consistiu em determinar a potência de saturação (P_{sat}) da transição. Para isso, o perfil espacial do feixe foi capturado com uma câmera CCD, como exemplificado na Figura C.2a. Uma vez que o tamanho do pixel da câmera é precisamente conhecido (2.2 μm), a contagem de pixels na imagem pode ser diretamente convertida em uma medida de distância. Este método permite, portanto, a determinação acurada do diâmetro do feixe e, consequentemente, o cálculo de sua área efetiva. Contudo, o procedimento de análise, ilustrado na Figura C.2b, consistiu no

ajuste de curvas Gaussianas aos perfis de intensidade do feixe, onde a largura do ajuste em $1/e$ do máximo foi considerada como o diâmetro do feixe naquele eixo. Levando em conta o valor teórico da intensidade de saturação para a linha D1 (2.50 mW/cm^2), a potência de saturação foi então calculada, ficando em $P_{\text{sat}} = 10.97 \pm 0.02$.

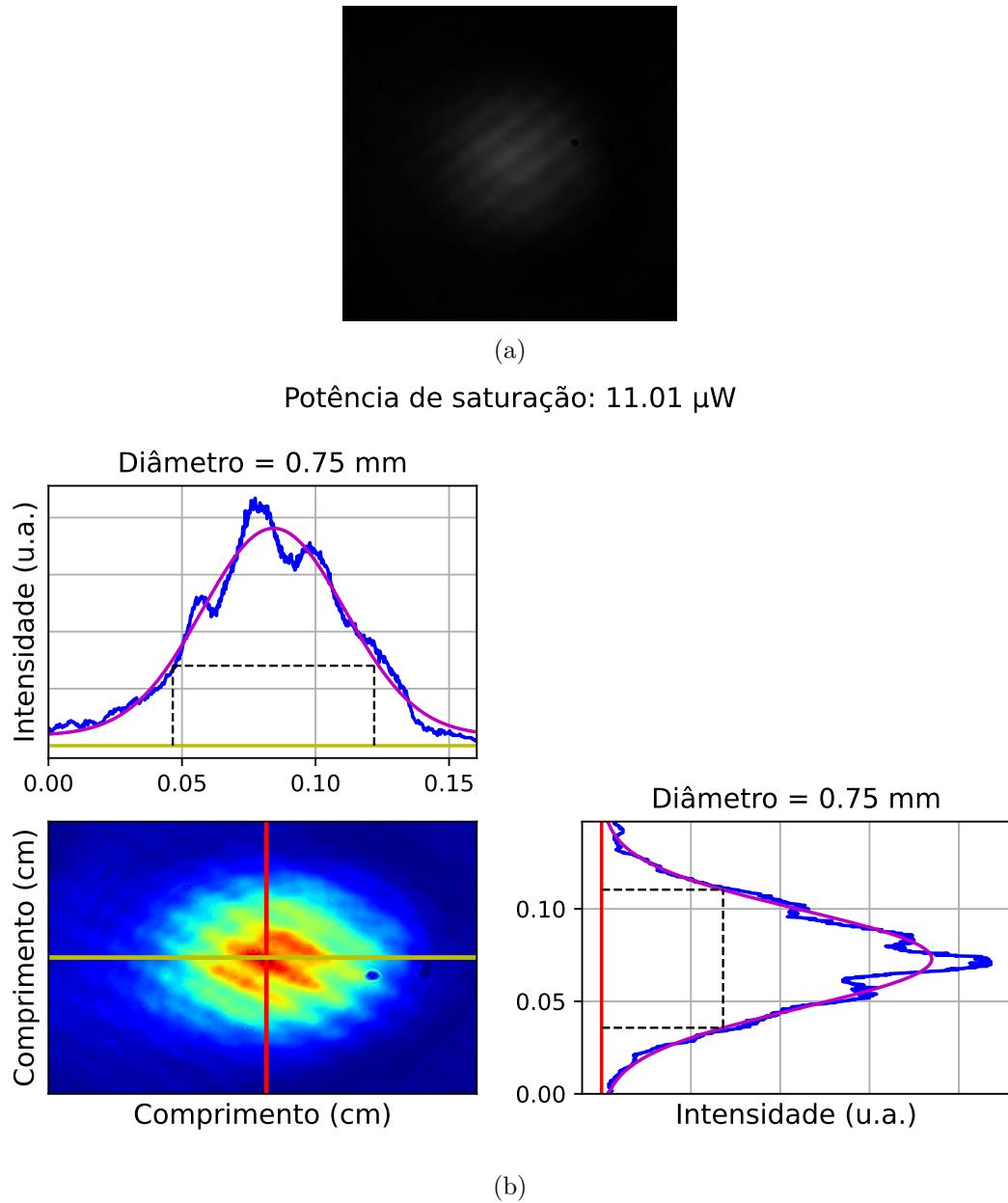


Figura C.2 – Procedimento para determinação da potência de saturação (P_{sat}). Em (a), imagem bruta do perfil espacial do feixe capturada pela câmera CCD. Em (b), a análise computacional correspondente: o painel central exibe o mapa de intensidade 2D; os painéis adjacentes mostram os perfis de intensidade horizontal e vertical (em azul) com seus respectivos ajustes Gaussianos (em rosa), a partir dos quais os diâmetros são extraídos. A área efetiva, combinada com a intensidade de saturação teórica, permite determinar o valor de P_{sat} para a calibração do experimento.

Fonte: Autoria própria.

Na sequência, foi implementado o arranjo experimental exibido na Figura C.3. Um laser de diodo, sintonizado na linha D1 do césio-133, teve seu feixe dividido para realizar simultaneamente a espectroscopia de absorção saturada e a medição da transmissão coerente em uma célula de referência. As transições hiperfinas de interesse para esta análise foram a $F = 4 \rightarrow F' = 4'$ e a $F = 4 \rightarrow F' = 3'$. Com base no valor da potência de saturação, o feixe teve sua potência calibrada para garantir a condição $I/I_{\text{sat}} \rightarrow 0$, assegurando que o alargamento por potência não influenciasse a largura dos picos medidos. Para isso, foi utilizado o conjunto de uma lâmina de meia onda ($\lambda/2$) e um cubo polarizador, como ilustrado no diagrama da Figura C.3.

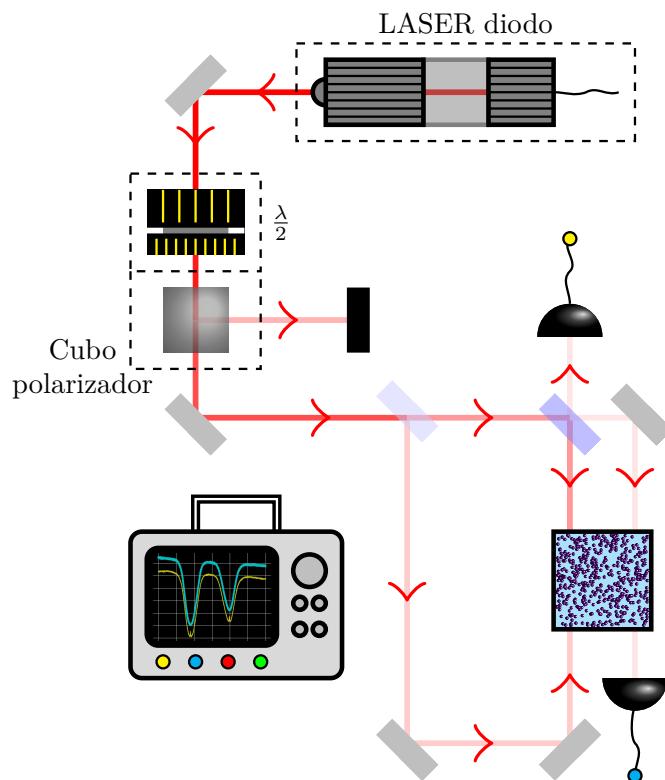


Figura C.3 – Diagrama esquemático do arranjo experimental utilizado para a medição da largura de linha atômica. O feixe de um laser de diodo é dividido para alimentar simultaneamente o experimento de absorção saturada (com feixes de bombeio e prova contrapropagantes) e a detecção da transmissão coerente, ambos utilizando a mesma célula de referência.

O tratamento dos dados, cujo resultado é apresentado na Figura C.4a, inicia-se com a normalização dos espectros de absorção saturada (com bombeio) e de transmissão coerente (sem bombeio) para a mesma amplitude. Em seguida, o espectro coerente é subtraído do de absorção saturada. Esse procedimento é duplamente eficaz: além de isolar os picos de saturação ao

remover o fundo Doppler, ele também corrige a rampa de potência do laser, já que essa variação de intensidade está presente em ambos os sinais. Finalmente, o eixo horizontal, originalmente em tempo (s), é calibrado e convertido para uma escala de dessintonia (GHz). Essa calibração é realizada utilizando os picos de saturação como pontos de referência, uma vez que suas separações em frequência são precisamente conhecidas. O zero da calibração é definido na frequência da transição $F = 3 \rightarrow F' = 4'$.

Por fim, cada um dos picos de saturação é isolado e uma função Lorentziana é ajustada sobre ele, permitindo a extração precisa de sua largura à meia altura (FWHM). Este procedimento, que foi executado para todas as células experimentais, é exemplificado na Figura C.4b. A figura exibe o ajuste para uma das medidas realizadas na célula de 2 cm, demonstrando a excelente concordância entre o pico experimental e o modelo Lorentziano e apresentando os valores de FWHM obtidos.

Largura de Linha do Laser

A determinação da largura de linha de um laser pode ser realizada por meio de diversas técnicas, como a auto-heterodina com atraso de fibra [222, 223], a análise da nota de batimento com um laser de referência [224, 225] ou o uso de um interferômetro Fabry-Pérot (FPI) como discriminador de frequência [226, 227], dentre outros métodos. Para este trabalho, optou-se pelo método do discriminador de frequência, que converte as flutuações de frequência do laser em flutuações de amplitude mensuráveis. O diodo utilizado é do tipo *DBR* (*Distributed Bragg Reflector*), fabricado pela *Thorlabs*.

A metodologia empregada consiste em posicionar a frequência do laser na lateral de uma das franjas de transmissão de um FPI, onde a transmissão é mais sensível a variações de frequência. O espectro de absorção saturada é utilizado como uma referência de amplitude estável para identificar o ponto de operação ideal, que corresponde à intersecção entre a curva do FPI e a da absorção saturada. As flutuações de intensidade transmitidas pelo FPI, resultantes das flutuações de frequência do laser, são então registradas. Para uma análise temporal robusta, foram capturadas múltiplas medidas para três tempos de integração distintos: 1 ms, 10 ms e

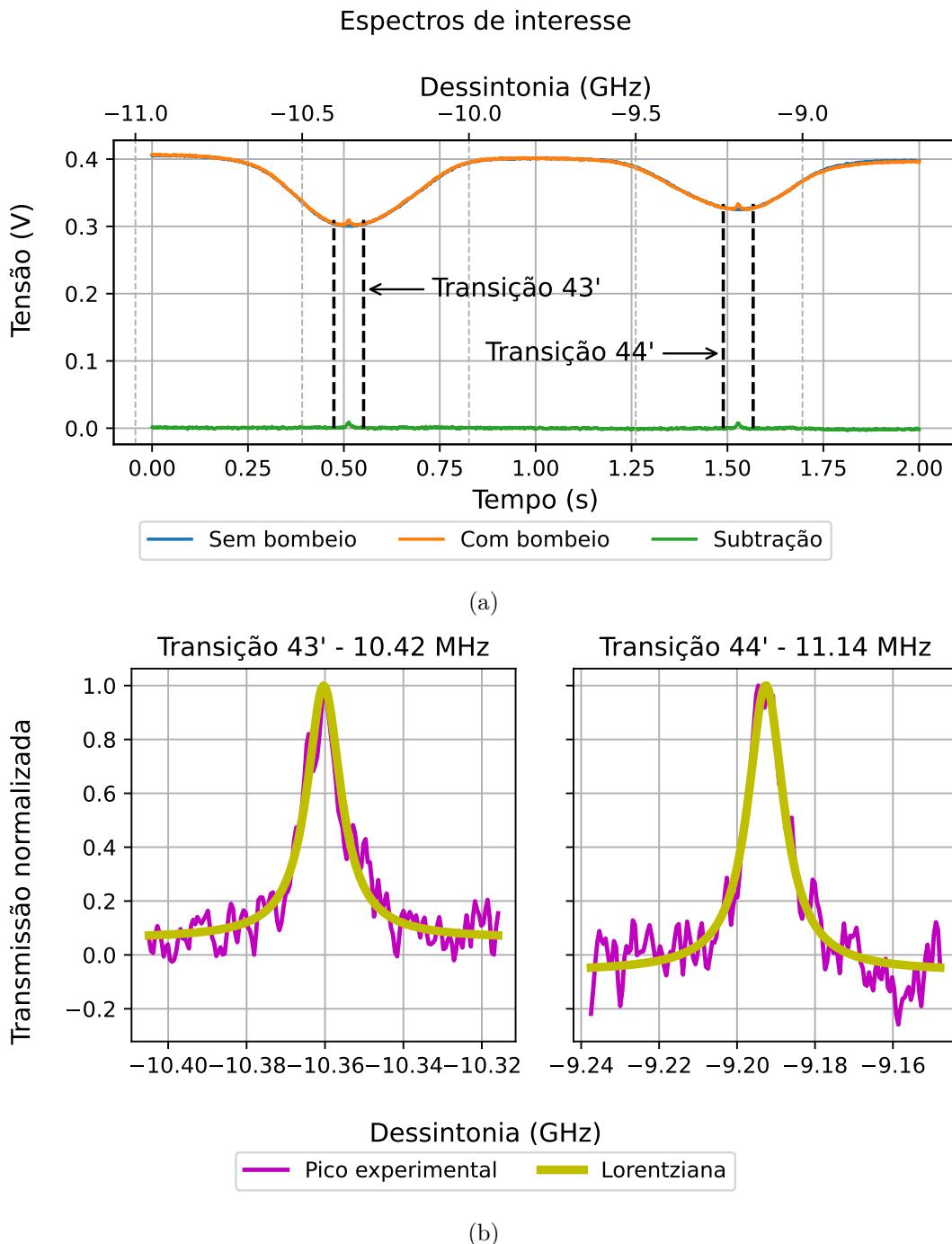


Figura C.4 – Processo de tratamento de dados para a extração da largura de linha atômica. Em (a), ilustra-se a subtração do espectro de transmissão coerente (curva azul) do espectro de absorção saturada (curva laranja) para isolar os picos de saturação (curva verde), com o eixo de frequência já calibrado e as transições de interesse indicadas. Em (b), um exemplo do ajuste Lorentziano (curva amarela) realizado sobre os picos experimentais isolados (curva rosa) para as transições $F = 4 \rightarrow F' = 3'$ e $F = 4 \rightarrow F' = 4'$, a partir do qual a FWHM é determinada.

Fonte: Autoria própria.

100 ms.

O tratamento dos dados, resumido na Figura C.5, é realizado em duas etapas. Primeiramente, a partir de uma varredura do laser em frequência, determina-se o fator de conversão de amplitude (V) para frequência (MHz) na região de máxima inclinação da franja do FPI. Em seguida, com o laser posicionado no ponto de operação fixo, as flutuações de amplitude do sinal transmitido são registradas ao longo do tempo. Aplicando-se o fator de conversão previamente calculado a essas flutuações, obtém-se diretamente a largura de linha do laser.

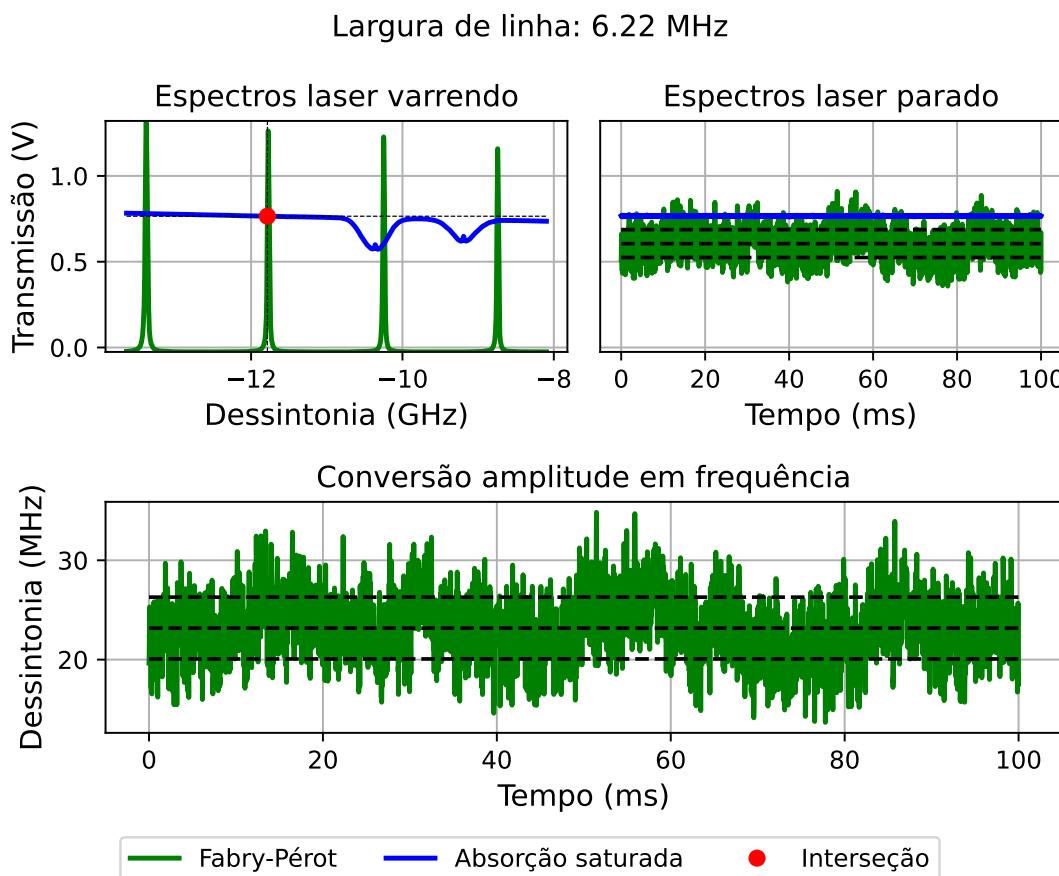


Figura C.5 – Ilustração do tratamento de dados para a medição da largura de linha do laser.

O painel superior esquerdo (“Espectros laser varrendo”) mostra os espectros do Fabry-Pérot e da absorção saturada durante a varredura em frequência, indicando o ponto de intersecção onde o laser é fixado para a medição. O painel superior direito (“Espectros laser parado”) exibe as flutuações de amplitude do sinal do FPI registradas ao longo do tempo. O painel inferior (“Conversão amplitude em frequência”) apresenta essas mesmas flutuações de amplitude já convertidas para uma escala de dessintonia em frequência, a partir da qual se extrai a largura de linha do laser.

D Rotinas Computacionais de Monte Carlo

Este apêndice detalha as rotinas computacionais, desenvolvidas integralmente em linguagem Python, que fundamentam as simulações de Monte Carlo apresentadas nesta tese. Com o intuito de garantir a transparência e a reproduzibilidade da pesquisa, são fornecidos os códigos-fonte dos dois principais métodos de simulação empregados. O primeiro, denominado “Método com Seleção de Velocidade”, simula a caminhada aleatória do fóton a partir de princípios fundamentais. O segundo, “Método com Matriz de Redistribuição de Frequência”, representa uma abordagem otimizada, projetada para acelerar os cálculos em regimes opticamente espessos. A disponibilização destes scripts visa não apenas validar os resultados deste trabalho, mas também servir como um recurso para futuras investigações na área do transporte radiativo.

Método com Seleção de Velocidade

```
1 print("""
2 =====
3 Simulação de Monte Carlo
4 © 2025 Isaac Cazé, Thierry Passerat e Jésus Pávon. Todos os direitos reservados.
5 =====
6 """)
7 ###PACOTES NECESSÁRIOS###
8 import numpy as np
9 import os
10 import time
11 import sys
12 import shutil
13 from scipy.integrate import cumulative_trapezoid, quad_vec
14 from scipy.interpolate import CubicSpline
15 from multiprocessing import Pool, cpu_count
16 #INICIALIZAÇÃO DO GERADOR DE NÚMEROS ALEATÓRIOS
17 gerador_aleatorio = np.random.default_rng()
18 #NÚCLEOS PARA PROCESSAMENTO PARALELO
19 total_nucleos = cpu_count() #Defina de acordo com a quantidade de núcleos que
    ↪ queira dedicar exclusivamente para a simulação
20 #FUNÇÃO UTILIZADA PARA CRIAR UM DIRETÓRIO CASO ELE NÃO EXISTA
21 def criar_diretorio(caminho):
22     if os.path.isdir('{}'.format(caminho)):
23         pass
24     else:
25         os.makedirs('{}'.format(caminho))
26
```

```

27 #####ENTRADAS#####
28 #GERAIS DA SIMULAÇÃO
29 deteccao = ['frente', '90'][['ENTRADA']] #Seleciona o tipo de detecção: 'frente'
   ↪ ([0]) para transmissão ou '90' ([1]) para fluorescência a 90 °.
30 temperatura_janela = 'ENTRADA' #Temperatura da janela da célula em Celsius.
31 densidade_atomica = 'steck' #Densidade atômica do meio. Pode ser um valor
   ↪ numérico ou 'steck' para calcular com base na temperatura levando em
   ↪ conta o modelo proposto por Steck (2003).
32 total_fotons = 'ENTRADA' #Número total de fótons a serem simulados por ponto de
   ↪ dessintonia.
33 intervalo_frequencia_incidencia = ['ENTRADA', 'ENTRADA', 'ENTRADA'] #Define o
   ↪ intervalo de frequências de incidência: [início (Hz), fim (Hz), número de
   ↪ pontos].
34 P_c = 'ENTRADA' #Define o cenário de probabilidade de colisão: 0 (sem colisão),
   ↪ 1 (com colisão), 'calcular' (ponderado pelo  $\Gamma_c$ ).
35 #FEIXE INCIDENTE
36 raio_feixe = 'ENTRADA' #Raio da distribuição espacial do feixe laser (m).
37 fator_intensidade = 'ENTRADA' #Razão entre a intensidade de incidência e a
   ↪ intensidade de saturação ( $I/I_{sat}$ ).
38 laser_incidencia = ['lorentz', 'delta'][['ENTRADA']] #Perfil espectral do laser: '
   ↪ lorentz' ([0]) (Lorentziano) ou 'delta' ([1]) (delta de Dirac).
39 largura_linha_laser = 'ENTRADA' #Largura de linha do laser (Hz), se o perfil for
   ↪ Lorentziano.
40 #Deslocamento da posição do feixe (opcionais)
41 posicao_inicial_feixe_x = 'ENTRADA' #Deslocamento da posição 'x' do feixe em
   ↪ relação ao centro da janela de entrada (m).
42 posicao_inicial_feixe_y = 'ENTRADA' #Deslocamento da posição 'y' do feixe em
   ↪ relação ao centro da janela de entrada (m).
43 posicao_inicial_feixe_z = 'ENTRADA' #Incremento artificial na posição do
   ↪ primeiro espalhamento (m).
44 angulo_direcao_entrada_xz = 'ENTRADA' #Ângulo de incidência do feixe no plano XZ
   ↪ (graus).
45 angulo_direcao_entrada_yz = 'ENTRADA' #Ângulo de incidência do feixe no plano YZ
   ↪ (graus).
46 #CÉLULA
47 largura_celula = 'ENTRADA' #Comprimento longitudinal da célula (m).
48 diametro_celula = 'ENTRADA' #Diâmetro da célula (m).
49 #ENTRADAS NECESSÁRIAS NO EXPERIMENTO A 90°
50 posicao_longitudinal_captacao = 'ENTRADA' #Posição longitudinal da detecção a 90
   ↪ ° (m).
51 diametro_abertura_iris = 'ENTRADA' #Diâmetro de abertura da íris de detecção a 90
   ↪ ° (m).
52 distancia_celula_detector = 'ENTRADA' #Distância perpendicular entre a célula e
   ↪ o detector a 90° (m).
53 #OUTRAS ENTRADAS
54 passo_velocidade = 'ENTRADA' #Passo para o intervalo de velocidades atômicas (m/
   ↪ s).
55 fator_multiplicador_velocidade = 'ENTRADA' #Fator que multiplica a velocidade
   ↪ mais provável para definir os limites do intervalo de velocidades.
56 intervalo_frequencia_emissao = 'ENTRADA' #Intervalo de frequências de emissão
   ↪ para pré-calcular o espetro de absorção (Hz).

```

```

57  passo_frequencia_emissao = 'ENTRADA' #Passo no intervalo de frequências de
   ↵ emissão (Hz).
58
59  ###CONSTANTES###
60  #GERAIS DA FÍSICA
61  e_0 = 8.8542e-12 #Constante de permissividade do vácuo (C2.s2/kg.m3).
62  hbar = 1.0546e-34 #Constante de Planck reduzida (J.s).
63  k_B = 1.3806e-23 #Constante de Boltzmann (J/K).
64  #GERAIS DO CÉSIO 133
65  frequencia_transicao_fundamental_34 = 9.192e9 #Distância, em frequência, entre
   ↵ transições hiperfinas F=3 → F=4 do estado fundamental (Hz).
66  massa_cs = 2.2069e-25 #Massa do isótopo de Césio 133 (kg).
67  #Fatores de degenerescência dos níveis hiperfinos fundamentais:
68  fundamental_3 = 7/16 #F=3.
69  fundamental_4 = 9/16 #F=4.
70  #LINHA D2 CÉSIO 133
71  comprimento_onda_laser = 852.347275e-9 #Comprimento de onda do feixe laser para
   ↵ a linha D2 do Césio (m).
72  momento_dipolo = 2.192e-29 #Momento de dipolo efetivo do Césio na linha D2 (C.m)
   ↵ .
73  Gamma_natural = 5.2227e6 #Largura de linha natural da transição D2 (Hz).
74  #Distância, em frequência, das transição hiperfinas (Hz):
75  frequencia_transicao_excitado_23 = 151.21e6 #F'=2 → F'=3.
76  frequencia_transicao_excitado_34 = 201.24e6 #F'=3 → F'=4.
77  frequencia_transicao_excitado_45 = 251.00e6 #F'=4 → F'=5.
78  #Fatores de força de oscilador (pesos relativos das transições):
79  S_32 = 5/14 #F=3 → F'=2.
80  S_33 = 3/8 #F=3 → F'=3.
81  S_34 = 15/56 #F=3 → F'=4.
82  S_43 = 7/72 #F=4 → F'=3.
83  S_44 = 7/24 #F=4 → F'=4.
84  S_45 = 11/18 #F=4 → F'=5.

85
86  ###CALCULAR###
87  #Cálculo da densidade atômica se 'steck' for escolhido, usando a fórmula de
   ↵ pressão de vapor do Steck (átomos/m3):
88  if densidade_atomica == 'steck':
89      temperatura_reservatorio = temperatura_janela+273.13 #Assume que a temperatura
   ↵ do reservatório é a mesma da janela e converte para Kelvin.
90  if temperatura_reservatorio > 28.5: #Usa a fórmula apropriada para a faixa de
   ↵ temperatura.
91      pressao_tor = 10**((8.22127-(4006.048/temperatura_reservatorio)-(0.00060194*  

   ↵ temperatura_reservatorio)-0.19623*np.log10(temperatura_reservatorio))
92  else: #Usa a fórmula apropriada para a faixa de temperatura.
93      pressao_tor = 10**((-219.48200+(1088.676/temperatura_reservatorio)  

   ↵ -(0.08336185*temperatura_reservatorio)+94.88752*np.log10(  

   ↵ temperatura_reservatorio))
94  densidade_atomica = (pressao_tor*133.322)/(temperatura_reservatorio*k_B) #
   ↵ Converte a pressão para densidade atômica considerando o vapor como gás
   ↵ ideal.
95  #Frequências de ressonância de cada transição hiperfina, relativas à transição F
   ↵ =4 → F'=5 (definida como zero) (Hz):

```

```

96  w_32 = -(frequencia_transicao_excitado_23+frequencia_transicao_excitado_34+
97      ↵ frequencia_transicao_excitado_45-frequencia_transicao_fundamental_34) #F
98      ↵ =3 → F'=2.
99  w_33 = -(frequencia_transicao_excitado_34+frequencia_transicao_excitado_45-
100     ↵ frequencia_transicao_fundamental_34) #F=3 → F'=3.
101  w_34 = -(frequencia_transicao_excitado_45-frequencia_transicao_fundamental_34) #
102      ↵ F=3 → F'=4.
103  w_43 = -(frequencia_transicao_excitado_34+frequencia_transicao_excitado_45) #F=4
104      ↵ → F'=3.
105  w_44 = -frequencia_transicao_excitado_45 #F=4 → F'=4.
106  w_45 = 0 #Define a transição F=4 → F'=5 como a referência de dessintonia zero.
107  #Pesos de referência utilizados para determinar o estado fundamental final para
108      ↵ o qual o átomo decai após o período de excitação:
109  peso_excitado_3_final_3 = S_33/(S_33+S_43) #F'=3 para F=3.
110  peso_excitado_4_final_4 = S_44/(S_34+S_44) #F'=4 para F=4.
111  #Outros:
112  alargamento_total = Gamma_natural+(densidade_atomica*9e-14) #Largura total (Hz).
113  alargamento_total_intensidade = (Gamma_natural*np.sqrt(1+fator_intensidade))+(
114      ↵ densidade_atomica*9e-14) #Largura total considerando o alargamento por
115      ↵ potência (Hz).
116  largura_doppler = velocidade_mais_provavel/comprimento_onda_laser #Largura
117      ↵ Doppler (Hz).
118  velocidade_mais_provavel = np.sqrt((2*k_B*(temperatura_janela+273.15)/massa_cs)
119      ↵ #Velocidade mais provável da distribuição de Maxwell-Boltzmann (m/s).
120  intervalo_velocidade = int(fator_multiplicador_velocidade*
121      ↵ velocidade_mais_provavel) #Define os limites do intervalo de velocidades
122      ↵ a ser considerado na simulação (m/s).
123  if P_c == 'calcular': #Calcula a probabilidade de colisão se a opção 'calcular'
124      ↵ for escolhida.
125  P_c = 1-(Gamma_natural/alargamento_total)
126  #Outras constantes pré-calculadas para otimização do código:
127  Gamma_div_2 = alargamento_total/2
128  dois_div_gamma = 2/alargamento_total
129  dois_div_gamma_quadrado = dois_div_gamma**2
130  dois_div_gamma_lambda = 2/(alargamento_total*comprimento_onda_laser)
131  div_vel_mais_prov_2 = 1/(velocidade_mais_provavel**2)
132  dois_div_gamma_quadrado_intensidade = (2/alargamento_total_intensidade)**2
133  constante_coeficiente_absorcao = 2*densidade_atomica*(momento_dipolo**2)/(np.
134      ↵ sqrt(np.pi)*e_0*hbar*velocidade_mais_provavel*comprimento_onda_laser*
135      ↵ alargamento_total)
136  raio_meio_quadrado = (diametro_celula/2)**2
137  #Constantes geométricas pré-calculadas para a detecção a 90°:
138  distancia_celula_detector_quadrado = distancia_celula_detector**2
139  posicao_longitudinal_captacao_menos = posicao_longitudinal_captacao-
140      ↵ diametro_abertura_iris/2)
141  posicao_longitudinal_captacao_mais = posicao_longitudinal_captacao+(
142      ↵ diametro_abertura_iris/2)
143
144  ####VETORES####
145  Frequencia_espectro_incidencia = np.linspace(intervalo_frequencia_incidencia[0],
146      ↵ intervalo_frequencia_incidencia[1], intervalo_frequencia_incidencia[2])
147      ↵ #Cria vetor com o espectro de frequências de incidência a ser varrido na

```

```

    ↵ simulação.

129 Frequencia_espectro_emissao = np.arange(-intervalo_frequencia_emissao,
    ↵ intervalo_frequencia_emissao+passo_frequencia_emissao,
    ↵ passo_frequencia_emissao) #Cria vetor com as frequências de emissão para
    ↵ pré-cálculo do coeficiente de absorção.

130 pesos_transicoes = np.asarray([fundamental_3*S_32, fundamental_3*S_33,
    ↵ fundamental_3*S_34, fundamental_4*S_43, fundamental_4*S_44, fundamental_4
    ↵ *S_45]) #Vetor com os pesos de cada transição, combinando a população do
    ↵ estado fundamental e a força do oscilador.

131 frequencias_transicoes = np.asarray([w_32, w_33, w_34, w_43, w_44, w_45]) #Vetor
    ↵ com as frequências de ressonância de cada transição.

132 i_estados = np.arange(0,len(frequencias_transicoes),1,dtype=int) #Vetor com os
    ↵ índices para referenciar os estados.

133

134 #####FUNÇÕES PARA SORTEAR AS VELOCIDADES PARALELA E PERPENDICULAR#####
135 #Paralela:
136 intervalo_velocidade_paralela = np.arange(-intervalo_velocidade,
    ↵ intervalo_velocidade+passo_velocidade, passo_velocidade,dtype=float) #
    ↵ Intervalo de velocidades paralelas consideradas.

137 distribuicao_velocidade_paralela_gauss = np.exp(-(intervalo_velocidade_paralela
    ↵ **2)*div_vel_mais_prov_2) #Parte Gaussiana da distribuição de
    ↵ velocidades paralelas para uso consistente em cálculos recorrentes.

138 distribuicao_velocidades_lorentz = intervalo_velocidade_paralela*
    ↵ dois_div_gamma_lambda #Termo da componente Lorentziana pré-calculado,
    ↵ assim como o gaussiano, para uso consistente em cálculos recorrentes.

139 def velocidade_paralela_atomos(i_foton): #Função que sorteia a velocidade
    ↵ paralela de um átomo que absorve um fóton.

140 probabilidade_acumulada_velocidade_paralela = cumulative_trapezoid(
    ↵ distribuicao_velocidade_paralela_gauss/(((dois_div_gamma*(
    ↵ frequencia_fotons_rodada[i_foton]-frequencias_transicoes[
    ↵ i_estados_excitados[i_foton]])-distribuicao_velocidades_lorentz)**2)+1),
    ↵ dx = passo_velocidade,initial = 0) #Calcula a probabilidade acumulada de
    ↵ absorção para o fóton 'i_foton', com dessintonia '
    ↵ frequencia_fotons_rodada[i_foton]', considerando a distribuição de
    ↵ velocidades paralelas dos átomos.

141 probabilidade_acumulada_velocidade_paralela /=
    ↵ probabilidade_acumulada_velocidade_paralela[-1] #Normaliza a
    ↵ probabilidade acumulada de velocidades paralelas.

142 return np.interp(gerador_velocidade_paralela[i_foton],
    ↵ probabilidade_acumulada_velocidade_paralela,
    ↵ intervalo_velocidade_paralela) #Usa o método da transformada inversa para
    ↵ sortear uma velocidade a partir da distribuição.

143 #Perpendicular:
144 intervalo_velocidade_perpendicular = np.arange(0, intervalo_velocidade+
    ↵ passo_velocidade, passo_velocidade, dtype = float) #Cria o vetor de
    ↵ velocidades perpendiculares.

145 distribuicao_maxwell_boltzmann_2D = intervalo_velocidade_perpendicular*np.exp(-(
    ↵ intervalo_velocidade_perpendicular**2)*div_vel_mais_prov_2) #Calcula a
    ↵ distribuição de probabilidade de velocidades perpendiculares (Maxwell-
    ↵ Boltzmann 2D).

146 probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular = cumulative_trapezoid(
    ↵ distribuicao_maxwell_boltzmann_2D, dx=passo_velocidade, initial=0) #

```

```

    ↳ Calcula a probabilidade acumulada para o sorteio da velocidade
    ↳ perpendicular.

147 probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular /=

    ↳ probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular[-1] #Normaliza a
    ↳ probabilidade acumulada de velocidades perpendiculares.

148 #Função de interpolação para sortear eficientemente as velocidades
    ↳ perpendiculares:

149 i_maximo_velocidade_perpendicular = np.flatnonzero(
    ↳ probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular == max(
    ↳ probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular))[0]+1 #Determina-se o
    ↳ ponto no vetor onde a probabilidade acumulada atinge seu valor máximo.

150 intervalo_velocidade_perpendicular = intervalo_velocidade_perpendicular[:

    ↳ i_maximo_velocidade_perpendicular] #Estabelece o novo intervalo de
    ↳ velocidades perpendiculares possíveis baseado em '
    ↳ i_maximo_velocidade_perpendicular'.

151 probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular =
    ↳ probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular[:

    ↳ i_maximo_velocidade_perpendicular] #Estabelece o novo intervalo de
    ↳ probabilidade perpendiculares possíveis baseado em '
    ↳ i_maximo_velocidade_perpendicular'.

152 interpolacao_velocidade_perpendicular = CubicSpline(
    ↳ probabilidade_acumulada_velocidade_perpendicular,
    ↳ intervalo_velocidade_perpendicular) #Função de recorrência para otimizar a
    ↳ seleção de velocidade atômica perpendicular.

153

154 #####INÍCIO#####
155

156 #Cria subdiretórios para organizar os resultados da simulação.
157 diretorio_salva = '{}/{:.1f}_cm'.format(diretorio_densidade, largura_celula*100)
    ↳ #Estabelece o caminho do diretório onde serão salvos os resultados.

158 criar_diretorio('{}/simulacao'.format(diretorio_salva)) #Cria um diretório para
    ↳ salvar os espectros das simulações.

159 criar_diretorio('{}/informacoes_simulacoes'.format(diretorio_salva)) #Cria um
    ↳ diretório para salvar as entradas das simulações.

160

161 coeficiente_absorcao_sem_intensidade_transicoes = [pesos_transicoes[F]*quad_vec(
    ↳ lambda v: np.exp(-(v**2)*div_vel_mais_prov_2)/(1+(
    ↳ Frequencia_espectro_emissao-frequencias_transicoes[F]-(v/
    ↳ comprimento_onda_laser))**2)*dois_div_gamma_quadrado), -
    ↳ intervalo_velocidade, intervalo_velocidade)[0] for F in i_estados] #
    ↳ Calcula a contribuição de cada transição hiperfina para o coeficiente de
    ↳ absorção sem saturação.

162 coeficiente_absorcao_sem_intensidade = np.sum(
    ↳ coeficiente_absorcao_sem_intensidade_transicoes, axis=0)*
    ↳ constante_coeficiente_absorcao #Calcula o coeficiente de absorção total
    ↳ sem saturação através da soma da contribuição de cada transição hiperfina
    ↳ .

163 probabilidades_hiperfinos = (coeficiente_absorcao_sem_intensidade_transicoes/
    ↳ coeficiente_absorcao_sem_intensidade)*constante_coeficiente_absorcao #
    ↳ Calcula as probabilidades relativas de excitação de cada transição
    ↳ hiperfina.

```

```

164 coeficiente_absorcao_com_intensidade = np.sum([pesos_transicoes[F]*quad_vec(
165     ↪ lambda v: np.exp(-(v**2)*div_vel_mais_prov_2)/(1+(
166         ↪ Frequencia_espectro_emissao-frequencias_transicoes[F]-(v/
167             ↪ comprimento_onda_laser))**2)*dois_div_gamma_quadrado_intensidade), -
168         ↪ intervalo_velocidade, intervalo_velocidade)[0] for F in i_estados], axis
169         ↪ =0)*constante_coeficiente_absorcao/np.sqrt(1+fator_intensidade) #Calcula
170         ↪ o coeficiente de absorção total considerando o efeito da saturação por
171         ↪ intensidade.
172
173 ponto = 1 #Contador para os pontos de frequência.
174 #Define o número da simulação atual para salvar os arquivos com nomes únicos.
175 if os.path.isdir('{}/simulacao'.format(diretorio_salva)):
176     simulacao_atual = len(os.listdir('{}/simulacao'.format(diretorio_salva)))+1
177 else:
178     os.makedirs('{}/simulacao'.format(diretorio_salva))
179     simulacao_atual = 1
180 criar_diretorio('{}/informacoes_rodadas/simulacao_{}'.format(diretorio_salva,
181     ↪ simulacao_atual))
182 tempo_inicio = time.time() #Armazena a informação sobre o horário de início da
183     ↪ simulação.
184
185 #Inicializa listas para armazenar os resultados de cada ponto de dessintonia de
186     ↪ incidência:
187 total_fotons_incidencia = [] #Armazena a informação do total de fôtons que
188     ↪ incidiram na célula.
189 total_fotons_escaped_sem_absorcao = [] #Armazena a informação do total de
190     ↪ fôtons que escaparam sem serem absorvidos.
191 fotons_transmitidos = [] #Armazena a informação do total de fôtons considerados
192     ↪ 'transmitidos'.
193
194 #Loop sobre cada ponto de frequência de incidência.
195 for frequencia_incidencia in Frequencia_espectro_incidencia:
196     informacoes_rodadas = [] #Armazena informações de cada rodada de espalhamento.
197     rodada = 1 #Contador de rodadas de espalhamento.
198
199 #Define a direção inicial dos fôtons (direção do feixe laser):
200 direcao_fotons_absorcao_x = np.tan(np.radians(angulo_direcao_entrada_xz)) #
201     ↪ Componente 'x' da direção, a partir do ângulo no plano 'xz'.
202 direcao_fotons_absorcao_y = np.tan(np.radians(angulo_direcao_entrada_yz)) #
203     ↪ Componente 'y' da direção, a partir do ângulo no plano 'yz'.
204 direcao_fotons_absorcao_z = 1 #Componente 'z' fixa, feixe avança ao longo de '
205     ↪ z'
206
207 #Normaliza o vetor direção de propagação dos fôtons incidentes:
208 modulo_direcao_incidencia = np.sqrt((direcao_fotons_absorcao_x**2)+(
209     ↪ direcao_fotons_absorcao_y**2)+(direcao_fotons_absorcao_z**2)) #Módulo do
210     ↪ vetor direção de incidência dos fôtons.
211 direcao_fotons_absorcao_x /= modulo_direcao_incidencia
212 direcao_fotons_absorcao_y /= modulo_direcao_incidencia
213 direcao_fotons_absorcao_z /= modulo_direcao_incidencia
214
215 #Gera as posições iniciais dos fôtons no plano 'xy' segundo uma distribuição
216     ↪ Gaussiana radial, com largura a meia altura (FWHM) definida por '

```

```

197     ↵ raio_feixe', centrada na posição do feixe incidente '
198     ↵ posicao_inicial_feixe_x', 'posicao_inicial_feixe_y'):
199     gerador_raio_feixe_posicao_xy = raio_feixe*gerador_aleatorio.standard_normal(
200     ↵ total_fotons) #Distribuição radial aleatória com perfil Gaussiano (FWHM =
201     ↵ raio_feixe).
202     gerador_angulo_feixe_xy = 2*np.pi*gerador_aleatorio.random(total_fotons) #
203     ↵ Ângulo polar aleatório entre 0 e 2π.
204     posicao_absorcao_x = (gerador_raio_feixe_posicao_xy*np.cos(
205     ↵ gerador_angulo_feixe_xy))+posicao_inicial_feixe_x #Projeta raio em 'x'.
206     posicao_absorcao_y = (gerador_raio_feixe_posicao_xy*np.sin(
207     ↵ gerador_angulo_feixe_xy))+posicao_inicial_feixe_y #Projeta raio em 'y'.
208     posicao_radial_absorcao_quadrado = posicao_absorcao_x**2+posicao_absorcao_y**2
209     ↵ #Posição radial ao quadrado dos fôtons.
210
211     #Filtrar os fôtons que de fato entram na célula (atingem a parede na entrada):
212     i_fotons_incidiram_dentro_celula = np.flatnonzero(
213     ↵ posicao_radial_absorcao_quadrado < raio_meio_quadrado) #Índices dos
214     ↵ fôtons que incidiram na célula.
215     posicao_absorcao_x = posicao_absorcao_x[i_fotons_incidiram_dentro_celula] #
216     ↵ Filtra posições 'x'.
217     posicao_absorcao_y = posicao_absorcao_y[i_fotons_incidiram_dentro_celula]
218     ↵ Filtra posições 'y'.
219     posicao_radial_absorcao_quadrado = posicao_radial_absorcao_quadrado[
220     ↵ i_fotons_incidiram_dentro_celula] #Filtrar distâncias radiais.
221     total_fotons_rodada = len(i_fotons_incidiram_dentro_celula) #Número total de
222     ↵ fôtons que realmente incidiram dentro da célula.
223
224     #Define a frequência de incidência de acordo com o perfil espectral do laser e
225     ↵ coeficiente de absorção de cada fôton:
226     if laser_incidencia == 'lorentz':
227         frequencia_fotons_rodada = (largura_linha_laser*gerador_aleatorio.
228         ↵ standard_cauchy(total_fotons_rodada))+frequencia_incidencia #Sorteia as
229         ↵ frequências dos fôtons a partir de uma distribuição de Cauchy centrada em
230         ↵ 'frequencia_incidencia'.
231         #Calcula o coeficiente de absorção para cada frequência sorteada:
232         condicao_frequencia_menor_intervalo = frequencia_fotons_rodada <
233         ↵ Frequencia_espectro_emissao[0] #Verifica se as frequências sorteadas
234         ↵ estão abaixo do intervalo pré-calculado.
235         condicao_frequencia_maior_intervalo = frequencia_fotons_rodada >
236         ↵ Frequencia_espectro_emissao[-1] #Verifica se as frequências sorteadas
237         ↵ estão acima do intervalo pré-calculado.
238         i_fotons_frequencia_fora_intervalo = np.flatnonzero((
239         ↵ condicao_frequencia_menor_intervalo) | (
240         ↵ condicao_frequencia_maior_intervalo)) #Índices dos fôtons com frequência
241         ↵ fora do intervalo tabulado.
242         if len(i_fotons_frequencia_fora_intervalo) == 0: #Faz-se uma interpolação em
243         ↵ relação aos valores pré-calculados para determinar o coeficiente de
244         ↵ absorção dos fôtons se todas as frequências estiverem no intervalo pré-
245         ↵ calculado.
246         coeficiente_absorcao_rodada = np.interp(frequencia_fotons_rodada,
247         ↵ Frequencia_espectro_emissao, coeficiente_absorcao_com_intensidade)

```

```

219     else: #Calcula diretamente o coeficiente de absorção para frequências fora
220         ↵ do intervalo pré-calculado.
221         coeficiente_absorcao_rodada = np.zeros(total_fotons_rodada) #Inicializa o
222         ↵ vetor de coeficientes de absorção.
223         i_fotons_frequencia_dentro_intervalo = np.flatnonzero((~
224             ↵ condicao_frequencia_menor_intervalo) & (~
225             ↵ condicao_frequencia_maior_intervalo)) #Índices dos fótons com frequência
226             ↵ dentro do intervalo.
227         coeficiente_absorcao_rodada[i_fotons_frequencia_dentro_intervalo] = np.
228             ↵ interp(frequencia_fotons_rodada[i_fotons_frequencia_dentro_intervalo],
229             ↵ Frequencia_espectro_emissao, coeficiente_absorcao_com_intensidade) #
230             ↵ Interpola para os que estão dentro do intervalo.
231         coeficiente_absorcao_rodada[i_fotons_frequencia_fora_intervalo] =
232             ↵ quad_vec(lambda v: np.exp(-(v**2)*div_vel_mais_prov_2)/(1+
233                 ↵ fator_intensidade+((frequencia_fotons_rodada[
234                     ↵ i_fotons_frequencia_fora_intervalo]-(v/comprimento_onda_laser))**2)*
235                     ↵ dois_div_gamma_quadrado_intensidade), -intervalo_velocidade,
236                     ↵ intervalo_velocidade)[0]*constante_coeficiente_absorcao/np.sqrt(1+
237                         ↵ fator_intensidade) #Calcula o coeficiente de absorção diretamente para as
238                         ↵ frequências fora do intervalo pré-calculado.
239         elif laser_incincia == 'delta': #Todos os fótons inicialmente tem a mesma
240             ↵ frequência (Delta de Dirac).
241             frequencia_fotons_rodada = np.full(total_fotons_rodada,frequencia_incincia
242             ↵ ) #Vetor com as frequências dos fótons que incidiram na célula.
243             coeficiente_absorcao_rodada = np.full(total_fotons_rodada,np.interp(
244                 ↵ frequencia_incincia, Frequencia_espectro_emissao,
245                 ↵ coeficiente_absorcao_com_intensidade)) #Vetor com os coeficientes de
246                 ↵ absorção dos fótons que incidiram na célula.
247
248             posicao_absorcao_z = -(np.log(gerador_aleatorio.random(total_fotons_rodada))/
249                 ↵ coeficiente_absorcao_rodada)+posicao_inicial_feixe_z #Sorteia a posição
250                 ↵ do primeiro espalhamento usando a lei de Beer-Lambert (método da
251                 ↵ transformada inversa).
252             #Verifica quais fótons foram absorvidos e quais foram transmitidos diretamente
253             ↵ :
254             condicao_posicao_z_maior_largura_celula = posicao_absorcao_z > largura_celula
255             ↵ #Identifica fótons cuja posição de absorção excede o comprimento da
256             ↵ célula (transmitidos balisticamente).
257             i_fotons_transmitidos = np.flatnonzero(condicao_posicao_z_maior_largura_celula
258             ↵ ) #Índices dos fótons transmitidos sem absorção.
259             i_fotons_confinados = np.flatnonzero(~condicao_posicao_z_maior_largura_celula)
260             ↵ #Índices dos fótons que sofreram ao menos um evento de absorção dentro
261             ↵ da célula.
262
263             #Contabiliza os fótons:
264             if deteccao == '90':
265                 fotons_transmitidos_rodada = 0 #Na detecção a 90 graus, a transmissão direta
266                 ↵ não é contada.
267             else:
268                 fotons_transmitidos_rodada = len(i_fotons_transmitidos) #total de fótons
269                 ↵ transmitidos.

```

```

239     fotons_dentro_meio_rodada = len(i_fotons_confinados) #total de fôtons
240     ↵ confinados.
241 #Armazena as informações da primeira rodada (incidência).
242 if fotons_transmitidos_rodada != 0:
243     informacoes_rodadas.append([total_fotons_rodada, fotons_dentro_meio_rodada,
244     ↵ fotons_transmitidos_rodada, fotons_transmitidos_rodada, 0, 0, 0, np.mean(
245     ↵ posicao_absorcao_z[i_fotons_confinados]), 0, 0, np.mean(
246     ↵ posicao_absorcao_z[i_fotons_transmitidos]), np.mean(posicao_absorcao_z[
247     ↵ i_fotons_transmitidos]), np.mean(posicao_absorcao_z)])
248 else:
249     informacoes_rodadas.append([total_fotons_rodada, fotons_dentro_meio_rodada,
250     ↵ fotons_transmitidos_rodada, fotons_transmitidos_rodada, 0, 0, 0, np.mean(
251     ↵ posicao_absorcao_z[i_fotons_confinados]), 0, 0, 0, np.mean(
252     ↵ posicao_absorcao_z)])
253
254 #Atualiza os vetores para conter apenas os fôtons que foram absorvidos e
255 #continuarão na simulação:
256 frequencia_fotons_rodada = frequencia_fotons_rodada[i_fotons_confinados]
257 posicao_absorcao_x = posicao_absorcao_x[i_fotons_confinados]
258 posicao_absorcao_y = posicao_absorcao_y[i_fotons_confinados]
259 posicao_absorcao_z = posicao_absorcao_z[i_fotons_confinados]
260 posicao_radial_absorcao_quadrado = posicao_radial_absorcao_quadrado[
261     ↵ i_fotons_confinados]
262
263 #Calcula as probabilidades de excitação para cada transição hiperfina para os
264 #fôtons absorvidos:
265 if laser_incidencia == 'lorentz': #Apenas se o laser não for monocromático
266     condicao_frequencia_menor_intervalo = frequencia_fotons_rodada <
267     ↵ Frequencia_espectro_emissao[0] #Condição de frequência abaixo do
268     ↵ intervalo.
269     condicao_frequencia_maior_intervalo = frequencia_fotons_rodada >
270     ↵ Frequencia_espectro_emissao[-1] #Condição de frequência acima do
271     ↵ intervalo.
272     i_fotons_frequencia_fora_intervalo = np.flatnonzero((
273     ↵ condicao_frequencia_menor_intervalo) | (
274     ↵ condicao_frequencia_maior_intervalo)) #Índices dos fôtons com frequência
275     ↵ fora do intervalo.
276     if len(i_fotons_frequencia_fora_intervalo) == 0: #Se todas as frequências
277     ↵ estiverem dentro do intervalo, interpola diretamente as probabilidades
278     ↵ hiperfinas para cada estado F.
279     probabilidades_hiperfinos_rodada = [np.interp(frequencia_fotons_rodada,
280     ↵ Frequencia_espectro_emissao, probabilidades_hiperfinos[F]) for F in
281     ↵ i_estados]
282     else:
283         probabilidades_hiperfinos_rodada = np.zeros((len(i_estados),
284     ↵ fotons_dentro_meio_rodada)) #Inicializa matriz de probabilidades.
285         i_fotons_frequencia_dentro_intervalo = np.flatnonzero((~
286         ↵ condicao_frequencia_menor_intervalo) & (~
287         ↵ condicao_frequencia_maior_intervalo)) #Identifica os fôtons com
288         ↵ frequência dentro do intervalo.
289         probabilidades_hiperfinos_rodada[:, i_fotons_frequencia_dentro_intervalo] =
290         ↵ [np.interp(frequencia_fotons_rodada[i_fotons_frequencia_dentro_intervalo]

```

```

    ↵ ], Frequencia_espectro_emissao, probabilidades_hiperfinos[F]) for F in
    ↵ i_estados] #Preenche a matriz com as probabilidades interpoladas para
    ↵ fôtons dentro do intervalo.
264    probabilidades_hiperfinos_rodada[:,i_fotons_frequencia_fora_intervalo] = [
    ↵ np.full(len(i_fotons_frequencia_fora_intervalo), pesos_transicoes[F]) for
    ↵ F in i_estados] #Para fôtons com frequência fora do intervalo, usa-se os
    ↵ pesos constantes das transições hiperfinas.
265    else: #Se o laser for monocromático, realiza-se uma interpolação em relação
    ↵ aos valores pré-calculados
266        probabilidades_hiperfinos_rodada = [np.full(fotons_dentro_meio_rodada, np.
    ↵ interp(frequencia_incincencia, Frequencia_espectro_emissao,
    ↵ probabilidades_hiperfinos[F])) for F in i_estados]
267
268    #Armazena os totais do ponto de frequência atual:
269    total_fotons_incincencia.append(total_fotons_rodada)
270    total_fotons_escapedparam_sem_absorcao.append(fotons_transmitidos_rodada)
271
272    #Loop de espalhamentos múltiplos (continua enquanto houver fôtons confinados):
273    while True:
274
275        #Sorteia o estado excitado para cada fôton, com base nas probabilidades
        ↵ calculadas:
276        gerador_estados_excitados = gerador_aleatorio.random(
        ↵ fotons_dentro_meio_rodada) #Gera um número aleatório [0,1) para cada
        ↵ fôton confinado (para amostragem inversa).
277        probabilidade_acumulada_estados_excitados = np.cumsum(
        ↵ probabilidades_hiperfinos_rodada, axis=0) #Calcula a soma acumulada das
        ↵ probabilidades ao longo dos estados hiperfinos.
278        i_estados_excitados = np.argmax(np.sign(
        ↵ probabilidade_acumulada_estados_excitados-gerador_estados_excitados),
        ↵ axis=0) #Identifica o menor estado F cuja probabilidade acumulada
        ↵ ultrapassa o aleatório.
279
280        #Sorteia a velocidade do átomo que absorveu o fôton:
281
282        #Componente paralela (paralela a direção de incidência):
283        gerador_velocidade_paralela = gerador_aleatorio.uniform(1e-16, 1,
        ↵ fotons_dentro_meio_rodada) #Gera números aleatórios uniformes no
        ↵ intervalo (0,1).
284        if __name__ == '__main__':
285            with Pool(total_nucleos) as pool: #Usa paralelismo com multiprocessing
        ↵ para acelerar o sorteio das velocidades.
286            velocidade_paralela = np.asarray(pool.map(velocidade_paralela_atomos, np
        ↵ .arange(0, fotons_dentro_meio_rodada))) #Aplica a função de sorteio em
        ↵ paralelo.
287
288        #Componente perpendicular (perpendicular a direção de incidência):
289        gerador_velocidade_perpendicular = gerador_aleatorio.random(
        ↵ fotons_dentro_meio_rodada) #Gera valores aleatórios [0,1) para sorteio da
        ↵ magnitude da componente perpendicular.
290        gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy = 1-2*gerador_aleatorio.random(
        ↵ size=(2, fotons_dentro_meio_rodada)) #Gera vetores aleatórios 2D

```

```

291    ↳ uniformes no intervalo [-1,1].
292    velocidade_perpendicular = interpolacao_velocidade_perpendicular(
293        ↳ gerador_velocidade_perpendicular) #Converte o número aleatório em
294        ↳ velocidade perpendicular via interpolação da PDF de Maxwell-Boltzmann.
295        #Calcula a componente 'z' da direção perpendicular (para garantir
296        ↳ ortogonalidade com o vetor de incidência do fóton):
297        direcao_velocidade_perpendicular_z = -(direcao_fotons_absorcao_x*
298            ↳ gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy[0]+direcao_fotons_absorcao_y*
299            ↳ gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy[1])/direcao_fotons_absorcao_z
300            ↳ #Usa a condição de ortogonalidade:  $\vec{v} \cdot \hat{k}$ .
301            velocidade_perpendicular /= np.sqrt(
302            ↳ gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy[0]**2+
303            ↳ gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy[1]**2+
304            ↳ direcao_velocidade_perpendicular_z**2) #Normaliza o vetor direção da
305            ↳ componente perpendicular da velocidade para aplicar a magnitude sorteada
306            ↳ corretamente.
307
308            #Sorteia uma nova direção de emissão isotrópica para o fóton:
309            gerador_angulo_polar = np.arccos(1-2*gerador_aleatorio.random(
310                ↳ fotons_dentro_meio_rodada)) #Sorteia o ângulo polar  $\theta$  de forma que a
311                ↳ distribuição seja isotrópica em 3D (CDF inversa de  $\cos\theta$  uniforme).
312            gerador_angulo_azimutal = 2*np.pi*gerador_aleatorio.random(
313                ↳ fotons_dentro_meio_rodada)
314            seno_polar = np.sin(gerador_angulo_polar)
315            direcao_fotons_emissao_x = seno_polar*np.cos(gerador_angulo_azimutal) #
316            ↳ Componente 'x' da nova direção.
317            direcao_fotons_emissao_y = seno_polar*np.sin(gerador_angulo_azimutal) #
318            ↳ Componente 'y' da nova direção.
319            direcao_fotons_emissao_z = np.cos(gerador_angulo_polar) #Componente 'z' da
320            ↳ nova direção.
321
322            #Converte a frequência do referencial atômico para o do observador em
323            ↳ repouso, aplicando o desvio Doppler:
324            velocidade_direcao_x = direcao_fotons_absorcao_x*velocidade_paralela+
325            ↳ gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy[0]*velocidade_perpendicular #
326            ↳ Componente 'x' da velocidade total do átomo.
327            velocidade_direcao_y = direcao_fotons_absorcao_y*velocidade_paralela+
328            ↳ gerador_direcao_velocidade_perpendicular_xy[1]*velocidade_perpendicular #
329            ↳ Componente 'y' da velocidade total do átomo.
330            velocidade_direcao_z = direcao_fotons_absorcao_z*velocidade_paralela+
331            ↳ direcao_velocidade_perpendicular_z*velocidade_perpendicular #Componente 'z'
332            ↳ da velocidade total do átomo.
333            direcao_fotons_escalar_velocidade_div_comprimento_onda = (
334                ↳ direcao_fotons_emissao_x*velocidade_direcao_x+direcao_fotons_emissao_y*
335                ↳ velocidade_direcao_y+direcao_fotons_emissao_z*velocidade_direcao_z)/
336                ↳ comprimento_onda_laser #Projeção escalar da velocidade do átomo na
337                ↳ direção da emissão  $\vec{v} \cdot \hat{k}$ , dividida por  $\lambda$ .
338
339            #Sorteia o estado fundamental final após a emissão espontânea:
340            gerador_estados_fundamentais_finais = gerador_aleatorio.random(
341                ↳ fotons_dentro_meio_rodada) #Gera números aleatórios uniformes para
342                ↳ decidir em qual estado fundamental o átomo decai após a emissão.

```

```

312     frequencia_emissao_fundamental = np.zeros(fotons_dentro_meio_rodada) #
313     # Inicializa o vetor que armazenará o deslocamento de frequência associado
314     # à transição final.
315     condicao_excitado_3_final_3 = gerador_estados_fundamentais_finais >
316     peso_excitado_3_final_3 #Define quais fótons que estavam no estado
317     # excitado F'=3 decaem para F=3.
318     condicao_excitado_4_final_4 = gerador_estados_fundamentais_finais <=
319     peso_excitado_4_final_4 #Define quais fótons que estavam em F'=4 decaem
320     # para F=4.
321     #Índices dos fótons na transição:
322     i_334 = np.flatnonzero((i_estados_excitados == 1) & (
323     condicao_excitado_3_final_3)) #Transição 3→3'→4.
324     i_344 = np.flatnonzero((i_estados_excitados == 2) & (
325     condicao_excitado_4_final_4)) #Transição 3→4'→4.
326     i_433 = np.flatnonzero((i_estados_excitados == 3) & (~
327     condicao_excitado_3_final_3)) #Transição 4→3'→3.
328     i_443 = np.flatnonzero((i_estados_excitados == 4) & (~
329     condicao_excitado_4_final_4)) #Transição 4→4'→3.
330     #Atualização dos índices da matriz 'frequencia_emissao_fundamental':
331     frequencia_emissao_fundamental[i_334] = -frequencia_transicao_fundamental_34
332     frequencia_emissao_fundamental[i_344] = -frequencia_transicao_fundamental_34
333     frequencia_emissao_fundamental[i_433] = frequencia_transicao_fundamental_34
334     frequencia_emissao_fundamental[i_443] = frequencia_transicao_fundamental_34
335
336     #Calcula a nova frequência do fóton:
337     if P_c == 0: #Cenário sem colisões (espalhamento coerente no referencial do
338     # átomo).
339         frequencia_fotons_rodada -= (velocidade_paralela/comprimento_onda_laser)
340     elif P_c == 1: #Cenário com colisões (redistribuição completa de frequência).
341         gerador_frequencia_cenário_iii = gerador_aleatorio.random(
342         fotons_dentro_meio_rodada)
343         frequencia_fotons_rodada = Gamma_div_2*np.tan((
344         gerador_frequencia_cenário_iii-0.5)*np.pi)
345     else: #Cenário misto (ponderado por P_c).
346         gerador_cenarios = gerador_aleatorio.random(fotons_dentro_meio_rodada) #
347         # Gera números aleatórios uniformes para decidir em qual cenário cada fóton
348         # se encontra (II, sem colisões; III, com colisões).
349         condicao_cenário = gerador_cenarios > P_c #Define quais fótons colidiram
350         # ou não.
351         i_cenário_ii = np.flatnonzero(condicao_cenário) #Índice dos fótons que não
352         # colidiram.
353         i_cenário_iii = np.flatnonzero(~condicao_cenário) #Índice dos fótons que
354         # colidiram.
355         if len(i_cenário_ii) != 0: #Caso haja algum fóton no cenário II, adiciona
356         # -se a correção da velocidade paralela na frequência
357             frequencia_fotons_rodada[i_cenário_ii] -= (velocidade_paralela[
358             i_cenário_ii]/comprimento_onda_laser)
359         if len(i_cenário_iii) != 0: #Caso haja algum fóton no cenário III,
360         # considera-se que houve redistribuição total de frequência.
361             gerador_frequencia_cenário_iii = gerador_aleatorio.random(len(
362             i_cenário_iii))

```

```

341     frequencia_fotons_rodada[i_cenario_iii] = Gamma_div_2*np.tan((
342         ↪ gerador_frequencia_cenario_iii-0.5)*np.pi)
343     frequencia_fotons_rodada +=
344         ↪ direcao_fotons_escalar_velocidade_div_comprimento_onda+
345         ↪ frequencia_emissao_fundamental #Correção Doppler e do estado fundamental
346         ↪ de decaimento
347
348     #Calcula o coeficiente de absorção para a nova frequência de cada fóton (
349     ↪ exatamente igual ao que é feito na incidência caso o feixe tenha perfil
350     ↪ espectral do tipo 'Lorentziano'):
351     condicao_frequencia_menor_intervalo = frequencia_fotons_rodada <
352         ↪ Frequencia_espectro_emissao[0]
353     condicao_frequencia_maior_intervalo = frequencia_fotons_rodada >
354         ↪ Frequencia_espectro_emissao[-1]
355     i_fotons_frequencia_fora_intervalo = np.flatnonzero((
356         ↪ condicao_frequencia_menor_intervalo) | (
357         ↪ condicao_frequencia_maior_intervalo))
358     if len(i_fotons_frequencia_fora_intervalo) == 0:
359         ↪ coeficiente_absorcao_rodada = np.interp(frequencia_fotons_rodada,
360             ↪ Frequencia_espectro_emissao, coeficiente_absorcao_sem_intensidade)
361     else:
362         ↪ coeficiente_absorcao_rodada = np.zeros(fotons_dentro_meio_rodada)
363         ↪ i_fotons_frequencia_dentro_intervalo = np.flatnonzero((~
364             ↪ condicao_frequencia_menor_intervalo) & (~
365             ↪ condicao_frequencia_maior_intervalo))
366         ↪ coeficiente_absorcao_rodada[i_fotons_frequencia_dentro_intervalo] = np.
367             ↪ interp(frequencia_fotons_rodada[i_fotons_frequencia_dentro_intervalo],
368                 ↪ Frequencia_espectro_emissao, coeficiente_absorcao_sem_intensidade)
369         ↪ coeficiente_absorcao_rodada[i_fotons_frequencia_fora_intervalo] = quad_vec
370             ↪ (lambda v: np.exp(-(v**2)*div_vel_mais_prov_2)/(1+(
371                 ↪ frequencia_fotons_rodada[i_fotons_frequencia_fora_intervalo]-(v/
372                     ↪ comprimento_onda_laser))**2)*dois_div_gamma_quadrado), -
373                 ↪ intervalo_velocidade, intervalo_velocidade)[0]*
374                 ↪ constante_coeficiente_absorcao
375
376     #Sorteia o caminho livre até o próximo espalhamento e calcula a nova posição
377     ↪ :
378     passo_l_rodada = -np.log(gerador_aleatorio.random( fotons_dentro_meio_rodada
379     ↪ ))/coeficiente_absorcao_rodada #Sorteia o próximo passo livre l usando a
380     ↪ distribuição exponencial, via a lei de Beer-Lambert.
381     #Atualização das posições espaciais:
382     posicao_emissao_x = posicao_absorcao_x+passo_l_rodada*
383         ↪ direcao_fotons_emissao_x
384     posicao_emissao_y = posicao_absorcao_y+passo_l_rodada*
385         ↪ direcao_fotons_emissao_y
386     posicao_emissao_z = posicao_absorcao_z+passo_l_rodada*
387         ↪ direcao_fotons_emissao_z
388     posicao_radial_emissao_quadrado = posicao_emissao_x**2+posicao_emissao_y**2
389
390     #Condições de transmissão:
391     condicao_posicao_z_maior_largura_celula = posicao_emissao_z > largura_celula
392         ↪ #Fótons que saem pela face oposta da célula.

```

```

366     if deteccao == '90': #Se trata-se do experimento a 90°.
367         i_fotons_analise_transmissao = np.flatnonzero((posicao_absorcao_z >
368             posicao_longitudinal_captacao_menos) & (posicao_absorcao_z <
369             posicao_longitudinal_captacao_mais) & (posicao_radial_emissao_quadrado >
370             raio_meio_quadrado)) #Fótons com posição radial maior que o raio da
371             célula e que possuem posição longitudinal de absorção na região de
372             detecção.
373             possivel_travamento_programa = np.flatnonzero(seno_polar[
374                 i_fotons_analise_transmissao] <= 1e-9) #Evita divisão por zero no
375                 cálculo posterior.
376             if len(possivel_travamento_programa) > 0:
377                 i_fotons_analise_transmissao = np.delete(i_fotons_analise_transmissao,
378                     possivel_travamento_programa) #Remove os problemáticos.
379                 cosseno_angulo_deteccao = np.cos(np.fabs(np.fabs(np.arctan2(
380                     posicao_absorcao_y[i_fotons_analise_transmissao], posicao_absorcao_x[
381                     i_fotons_analise_transmissao])-gerador_angulo_azimutal[
382                     i_fotons_analise_transmissao])-np.pi)) #Ângulo entre posição de absorção
383                     e direção de emissão.
384                     passo_radial_absorcao_deteccao = np.sqrt(posicao_radial_absorcao_quadrado[
385                         i_fotons_analise_transmissao])*cosseno_angulo_deteccao+np.sqrt(
386                         distancia_celula_detector_quadrado-posicao_radial_absorcao_quadrado[
387                             i_fotons_analise_transmissao]*(1-cosseno_angulo_deteccao**2)) #Cálculo da
388                             distância radial até o detector.
389                             posicao_z_deteccao = posicao_absorcao_z[i_fotons_analise_transmissao]+
390                             passo_radial_absorcao_deteccao*(direcao_fotons_emissao_z[
391                             i_fotons_analise_transmissao]/seno_polar[i_fotons_analise_transmissao]) # #Estimativa da posição 'z' em relação a posição '
392                             passo_radial_absorcao_deteccao'.
393                             i_fotons_transmitidos = np.flatnonzero((posicao_z_deteccao >
394                                 posicao_longitudinal_captacao_menos) & (posicao_z_deteccao <
395                                 posicao_longitudinal_captacao_mais)) #Índice dos fótons que são
396                                 considerados 'transmitidos'.
397                                 if deteccao == 'frente': #Se a transmissão for para os fótons que escaparam
398                                 pela janela de saída.
399                                 i_fotons_analise_transmissao = np.flatnonzero(
400                                     condicao_posicao_z_maior_largura_celula) #Seleciona os que saíram pela
401                                     frente.
402                                     posicao_z_analise_fotons_transmissao = largura_celula-posicao_emissao_z[
403                                         i_fotons_analise_transmissao] #Distância até o plano de saída.
404                                         verificao_transmissao_x = (direcao_fotons_emissao_x[
405                                         i_fotons_analise_transmissao]/direcao_fotons_emissao_z[
406                                         i_fotons_analise_transmissao])*posicao_z_analise_fotons_transmissao+
407                                         posicao_emissao_x[i_fotons_analise_transmissao] #Posição 'x' no plano de
408                                         saída.
409                                         verificao_transmissao_y = (direcao_fotons_emissao_y[
410                                         i_fotons_analise_transmissao]/direcao_fotons_emissao_z[
411                                         i_fotons_analise_transmissao])*posicao_z_analise_fotons_transmissao+
412                                         posicao_emissao_y[i_fotons_analise_transmissao] #Posição 'y' no plano de
413                                         saída.
414                                         verificao_transmissao_posicao_radial_quadrado = (verificao_transmissao_x
415                                         **2)+(verificao_transmissao_y**2) #Distância radial ao quadrado nas
416                                         respectivas posições 'verificao_transmissao_x' e 'verificao_transmissao_y'

```

```

381     ↵ '.
382     i_fotons_transmitidos = i_fotons_analise_transmissao[np.flatnonzero(
383     ↵ verificao_transmissao_posicao_radial_quadrado < raio_meio_quadrado)] # #
384     ↵ Índice dos fótons que saíram pela janela de saída da célula.
385
386     #Determina os fótons que escaparam pela janela de entrada (para trás):
387     condicao_posicao_z_menor_zero = posicao_emissao_z < 0 #Verifica se o fóton
388     ↵ saiu pela face de entrada (z < 0).
389     i_fotons_analise_escalaram_tras = np.flatnonzero(
390     ↵ condicao_posicao_z_menor_zero) #Índices dos candidatos a escapar para
391     ↵ trás.
392     verificao_escalaram_tras_x = (direcao_fotons_emissao_x[
393     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras]/direcao_fotons_emissao_z[
394     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras])*posicao_emissao_z[
395     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras]+posicao_emissao_x[
396     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras] #Posição 'x' na face de entrada.
397     verificao_escalaram_tras_y = (direcao_fotons_emissao_y[
398     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras]/direcao_fotons_emissao_z[
399     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras])*posicao_emissao_z[
400     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras]+posicao_emissao_y[
401     ↵ i_fotons_analise_escalaram_tras] #Posição 'y' na face de entrada.
402     verificao_escalaram_tras_posicao_radial_quadrado =
403     ↵ verificao_escalaram_tras_x**2)+(verificao_escalaram_tras_y**2) #Distância
404     ↵ radial ao quadrado no plano de entrada.
405     i_fotons_escalaram_tras = i_fotons_analise_escalaram_tras[np.flatnonzero(
406     ↵ verificao_escalaram_tras_posicao_radial_quadrado < raio_meio_quadrado)] #
407     ↵ Fótons que realmente atravessaram a janela de entrada.
408
409     i_fotons_confinados = np.flatnonzero((~condicao_posicao_z_menor_zero) & (~
410     ↵ condicao_posicao_z_maior_largura_celula) & (
411     ↵ posicao_radial_emissao_quadrado < raio_meio_quadrado)) #Identifica os
412     ↵ fótons que permanecem confinados na célula.
413
414     #Contabiliza os resultados da rodada de espalhamento:
415     total_fotons_transmissao_rodada = len(i_fotons_transmitidos)
416     total_fotons_confinados_rodada = len(i_fotons_confinados)
417
418     #Calcula estatísticas da rodada:
419     if total_fotons_confinados_rodada == 0:
420         Posicao_media_C = 0
421     else:
422         Posicao_media_C = np.mean(posicao_emissao_z[i_fotons_confinados])
423     if len(i_fotons_analise_transmissao) == 0:
424         Posicao_media_TJ = 0
425         Posicao_media_TF = 0
426         passo_medio_TJ = 0
427         passo_medio_TF = 0
428     else:
429         Posicao_media_TF = np.mean(posicao_absorcao_z[i_fotons_analise_transmissao
430         ↵ ])
431         passo_medio_TF = np.mean(passo_l_rodada[i_fotons_analise_transmissao])
432         if len(i_fotons_transmitidos) == 0:
433

```

```

411     Posicao_media_TJ = 0
412     passo_medio_TJ = 0
413 else:
414     Posicao_media_TJ = np.mean(posicao_absorcao_z[i_fotons_transmitidos])
415     passo_medio_TJ = np.mean(passo_l_rodada[i_fotons_transmitidos])
416 informacoes_rodadas.append([fotons_dentro_meio_rodada,
417     ↪ total_fotons_confinados_rodada, total_fotons_transmissao_rodada, len(
418     ↪ i_fotons_analise_transmissao), len(i_fotons_escalaram_tras), len(
419     ↪ i_fotons_analise_escalaram_tras), fotons_dentro_meio_rodada-
420     ↪ total_fotons_confinados_rodada, Posicao_media_C, Posicao_media_TJ,
421     ↪ Posicao_media_TF, passo_medio_TJ, passo_medio_TF, np.mean(passo_l_rodada)
422     ↪ ])
423
424     fotons_transmitidos_rodada += total_fotons_transmissao_rodada #Atualiza o
425     ↪ número total de fótons transmitidos.
426     fotons_dentro_meio_rodada = total_fotons_confinados_rodada #Atualiza o
427     ↪ número total de fótons ainda confinados.
428     if fotons_dentro_meio_rodada != 0: #Se ainda houver fótons confinados,
429     ↪ prepara para a próxima rodada de espalhamento.
430         #Atualiza os vetores com as propriedades dos fótons confinados:
431         frequencia_fotons_rodada = frequencia_fotons_rodada[i_fotons_confinados]
432         posicao_absorcao_x = posicao_emissao_x[i_fotons_confinados]
433         posicao_absorcao_y = posicao_emissao_y[i_fotons_confinados]
434         posicao_absorcao_z = posicao_emissao_z[i_fotons_confinados]
435         posicao_radial_absorcao_quadrado = posicao_radial_emissao_quadrado[
436         ↪ i_fotons_confinados]
437         direcao_fotons_absorcao_x = direcao_fotons_emissao_x[i_fotons_confinados]
438         direcao_fotons_absorcao_y = direcao_fotons_emissao_y[i_fotons_confinados]
439         direcao_fotons_absorcao_z = direcao_fotons_emissao_z[i_fotons_confinados]
#Recalcula as probabilidades de excitação para a próxima absorção:
440         condicao_frequencia_menor_intervalo = frequencia_fotons_rodada <
441         ↪ Frequencia_espectro_emissao[0]
442         condicao_frequencia_maior_intervalo = frequencia_fotons_rodada >
443         ↪ Frequencia_espectro_emissao[-1]
444         i_fotons_frequencia_fora_intervalo = np.flatnonzero((
445         ↪ condicao_frequencia_menor_intervalo) | (
446         ↪ condicao_frequencia_maior_intervalo))
447         if len(i_fotons_frequencia_fora_intervalo) == 0:
448             probabilidades_hiperfinos_rodada = [np.interp(frequencia_fotons_rodada,
449             ↪ Frequencia_espectro_emissao, probabilidades_hiperfinos[F]) for F in
450             ↪ i_estados]
451         else:
452             probabilidades_hiperfinos_rodada = np.zeros((len(i_estados),
453             ↪ fotons_dentro_meio_rodada))
454             i_fotons_frequencia_dentro_intervalo = np.flatnonzero((~
455             ↪ condicao_frequencia_menor_intervalo) & (~
456             ↪ condicao_frequencia_maior_intervalo))
457             probabilidades_hiperfinos_rodada[:, i_fotons_frequencia_dentro_intervalo]
458             ↪ = [np.interp(frequencia_fotons_rodada[
459             ↪ i_fotons_frequencia_dentro_intervalo], Frequencia_espectro_emissao,
460             ↪ probabilidades_hiperfinos[F]) for F in i_estados]

```

```

440
441     probabilidades_hiperfinos_rodada[:,i_fotons_frequencia_fora_intervalo] =
442         np.full(len(i_fotons_frequencia_fora_intervalo), pesos_transicoes[F])
443         for F in i_estados]
444         rodada += 1 #Incrementa o contador de rodadas.
445     else: #Encerra o loop while se não houver mais fótons confinados.
446         break
447
448     np.savetxt('{}_informacoes_rodadas/simulacao_{}_{}.#{:3.2f}MHz.csv'.format(
449         diretorio_salva, simulacao_atual, ponto, frequencia_incidencia/1e6), np.
450         asarray(informacoes_rodadas), fmt='{:d},{:d},{:d},{:d},{:d},{:d},{:1.3e},{:1.3e}
451         ,{:1.3e},{:1.3e},{:1.3e}', delimiter=',', newline='\n', header='I,C,T,TF,E
452         janela trás,E trás,E,Posição M C (m),Posição M TJ (m),Posição M TF (m),
453         Passo M TJ (m),Passo M TF (m),Passo M (m)', comments='') #Salva as
454         informações detalhadas das rodadas para este ponto de frequência.
455
456     fotons_transmitidos.append(fotons_transmitidos_rodada)
457     ponto += 1 #Adiciona um ao contador de pontos de frequência.
458
459 #Fim do loop de frequências.
460 tempo_fim = time.time() #Armazena a informação sobre o horário que foi
461     finalizada a simulação.
462
463 #Salva um arquivo com as informações gerais e parâmetros da simulação:
464 with open('{}_informacoes_simulacoes/simulacao_{}.csv'.format(diretorio_salva,
465         simulacao_atual), 'w') as dados_simulacao:
466
467     dados_simulacao.write('Probabilidade de colisões:,{:}\n'.format(P_c))
468     dados_simulacao.write('tempo total da simulação (horas):,{:}\n'.format((
469         tempo_fim-tempo_inicio)/3600))
470
471     dados_simulacao.write('CÉLULA\n')
472     dados_simulacao.write('comprimento (m):,{:}\n'.format(largura_celula))
473     dados_simulacao.write('diâmetro (m):,{:}\n'.format(diametro_celula))
474
475     dados_simulacao.write('FEIXE\n')
476     dados_simulacao.write('distribuição espectral:,{:}\n'.format(laser_incidencia))
477     dados_simulacao.write('fator de intensidade:,{:}\n'.format(fator_intensidade))
478     dados_simulacao.write('largura de linha (MHz):,{:}\n'.format(
479         largura_linha_laser/1e6))
480
481     dados_simulacao.write('diâmetro (m):,{:}\n'.format(2*raio_feixe))
482     dados_simulacao.write('posição 'x' de incidência (m):,{:}\n'.format(
483         posicao_inicial_feixe_x))
484
485     dados_simulacao.write('posição 'y' de incidência (m):,{:}\n'.format(
486         posicao_inicial_feixe_y))
487
488     dados_simulacao.write('posição 'z' de incidência (m):,{:}\n'.format(
489         posicao_inicial_feixe_z))
490
491     dados_simulacao.write('ângulo de entrada xz (graus):,{:}\n'.format(
492         angulo_direcao_entrada_xz))
493     dados_simulacao.write('ângulo de entrada yz (graus):,{:}\n'.format(
494         angulo_direcao_entrada_yz))
495
496
497 #Salva o resultado principal da simulação (espectro de transmissão):
498 with open('{}_simulacao/simulacao_{}.csv'.format(diretorio_salva,
499         simulacao_atual), 'w') as simulacao_monte_carlo:
500
501     simulacao_monte_carlo.write('frequência de incidência (Hz),transmissão total,
502         total de fótons que incidiram,fótons que escaparam sem serem absorvidos\n
503         ')
504
505     for i in np.arange(0,len(Frequencia_espectro_incidencia),1):

```

```

471     simulacao_monte_carlo.write('{},{},{}{},{}\n'.format(
472         ↪ Frequencia_espectro_incidencia[i], fotons_transmitidos[i],
473         ↪ total_fotons_incidencia[i], total_fotons_escalaram_sem_absorcao[i]))

```

Programa D.1 – Rotina computacional em Python para a simulação de Monte Carlo baseada no método de seleção explícita de velocidade. Este script simula a caminhada aleatória do fóton a partir de princípios fundamentais, sorteando a cada evento de interação as variáveis do processo, com destaque para a determinação da velocidade do átomo absorvedor via amostragem por transformada inversa. Devido ao seu rigor físico, este método é especialmente preciso para analisar regimes onde os primeiros espalhamentos são dominantes, embora seja computacionalmente intensivo.

Método com Matriz Redistribuição de Frequênciа

```

1  print("""
2  =====
3  Simulação de Monte Carlo
4  © 2025 Isaac Cazé, Thierry Passerat e Jésus Pávón. Todos os direitos reservados.
5  =====
6  """)
7  ###PACOTES NECESSÁRIOS###
8  import numpy as np
9  import os.path
10 import time
11 import sys
12 import shutil
13 import collections
14 from scipy.integrate import simpson
15 from scipy.signal import find_peaks, peak_prominences
16 #CONFIGURAÇÕES INICIAIS
17 gerador_aleatorio = np.random.default_rng() #Inicializa o gerador de números
18     ↪ aleatórios do NumPy, que é o método recomendado para as versões mais
18     ↪ recentes.
19 ###ENTRADAS###
20 #GERAIS DA SIMULAÇÃO
21 comprimento_analise = [2] #Lista de índices para selecionar as dimensões da
21     ↪ célula a serem simuladas a partir de 'dimensao_meio_x'.
22 P_c_analise = 1 #Define o cenário de probabilidade de colisão: 0 (sem colisão),
22     ↪ 1 (com colisão total), ou um valor entre 0 e 1 para um cenário misto.
23 total_fotons = 1_000_000 #Número total de fótons a serem simulados por ponto de
23     ↪ dessintonia de incidência.
24 intervalo_largura_doppler_espectro = [-2, 0.1] #Define o intervalo de
24     ↪ frequências de incidência a ser varrido, em unidades de largura Doppler
24     ↪ (\Gamma_D).
25 laser_incidencia = ['lorentz', 'gauss'][1] #Seleciona o perfil espectral do
25     ↪ laser: 'lorentz' ([0]) ou 'gauss' ([1]).
26 salvar_informacoes_rodadas = ['sim', 'não'][0] #Controla se os dados detalhados
26     ↪ de cada rodada de espalhamento devem ser salvos.

```

```

26 construir_graficos = ['sim', 'não'][0] #Controla se gráficos de validação devem
27   ↪ ser gerados durante a simulação.
28 total_rodadas_construir_plot = 10 #Número de rodadas de espalhamento para as
29   ↪ quais os gráficos de validação serão gerados.
30 #DADOS DA MATRIZ DE REDISTRIBUIÇÃO
31 fator_intensidade = 0.5 #Razão entre a intensidade de incidência e a intensidade
32   ↪ de saturação ( $(I/I_{\text{sat}})$ ).
33 densidade_atomica = 2.10e+19 #Densidade atômica do meio (átomos/m $^3$ ).
34 temperatura_janela = 132 #Temperatura da janela da célula em Celsius.
35 passo_redistribuicao = 0.1 #Passo, em unidades de  $(\Gamma_D)$ , utilizado na
36   ↪ geração das matrizes de redistribuição.
37 int_analise = 50 #Intervalo, em unidades de  $(\Gamma_D)$ , utilizado na geração
38   ↪ das matrizes de redistribuição.
39 #CÉLULA
40 dimensao_meio_x = [0.02, 0.01, 0.002] #Lista com os possíveis comprimentos da
41   ↪ célula (m).
42 dimensao_meio_yz = [0.02, 0.045, 0.02] #Lista com os possíveis diâmetros da
43   ↪ célula (m).
44 #FEIXE
45 largura_linha_laser = 1e6 #Largura de linha do laser (Hz).
46 dimensao_feixe_diametro = 0.0001 #Diâmetro do feixe laser (m).
47 posicao_inicial_feixe_x = [0, 0, 0] #Deslocamento inicial do feixe no eixo 'x' (
48   ↪ m).
49 posicao_inicial_feixe_y = [0, 0, 0] #Deslocamento inicial do feixe no eixo 'y' (
50   ↪ m).
51 posicao_inicial_feixe_z = [0, 0, 0] #Deslocamento inicial do feixe no eixo 'z' (
52   ↪ m).
53
54 ###CONSTANTES E DADOS PRÉ-CALCULADOS###
55 #CONSTANTES FÍSICAS DO CÉSIO 133 (LINHA D2)
56 comprimento_onda_laser = 852.347e-9 #Comprimento de onda da transição (m).
57 Gamma_natural = 5.2227e6 #Largura de linha natural (Hz).
58 massa_cs = 2.2069e-25 #Massa do átomo de Césio (kg).
59 frequencia_transicao_fundamental_34 = 9.192e9 #Separação hiperfina do estado
60   ↪ fundamental ( $F=3 \leftrightarrow F=4$ ) (Hz).
61 frequencia_transicao_excitado_23 = 151.21e6 #Separação hiperfina do estado
62   ↪ excitado ( $F'=2 \leftrightarrow F'=3$ ) (Hz).
63 frequencia_transicao_excitado_34 = 201.24e6 #Separação hiperfina do estado
64   ↪ excitado ( $F'=3 \leftrightarrow F'=4$ ) (Hz).
65 frequencia_transicao_excitado_45 = 251.00e6 #Separação hiperfina do estado
66   ↪ excitado ( $F'=4 \leftrightarrow F'=5$ ) (Hz).
67 k_B = 1.3806e-23 #Constante de Boltzmann (J/K).
68 #CÁLCULOS DERIVADOS
69 largura_doppler = np.sqrt((2 * k_B * (float(temperatura_janela) + 273.15)) /
70   ↪ massa_cs) / comprimento_onda_laser #Largura Doppler  $(\Gamma_D)$  (Hz).
71 #Frequências de ressonância relativas à transição  $F=4 \leftrightarrow F'=5$  (em
72   ↪ GHz).
73 w_32 = -(frequencia_transicao_excitado_23 + frequencia_transicao_excitado_34 +
74   ↪ frequencia_transicao_excitado_45 - frequencia_transicao_fundamental_34) /
75   ↪ 1e9
76 w_33 = -(frequencia_transicao_excitado_34 + frequencia_transicao_excitado_45 -
77   ↪ frequencia_transicao_fundamental_34) / 1e9

```

```

59 w_34 = -(frequencia_transicao_excitado_45 - frequencia_transicao_fundamental_34)
   ↵ / 1e9
60 w_43 = -(frequencia_transicao_excitado_34 + frequencia_transicao_excitado_45) /
   ↵ 1e9
61 w_44 = -frequencia_transicao_excitado_45 / 1e9
62 w_45 = 0 #Define a transição F=4 \(\rightarrow\) F'=5 como referência de
   ↵ dessintonia zero.
63
64 ###CARREGAMENTO E PROCESSAMENTO DOS DADOS###
65 diretorio_abrir_espectros = 'matrizes_redistribuicao/{:.1f}_GHz,passo_{}',
   ↵ densidade_{}:1.2e},temperatura_{}_žC'.format(int_analise,
   ↵ passo_redistribuicao, densidade_atomica, temperatura_janela) #Define o
   ↵ caminho para o diretório onde as matrizes pré-calculadas estão salvas.
66 #Carrega o espectro de absorção pré-calculado.
67 abrir_espectros = np.loadtxt(open('{}1-espectro_coerente_coeficiente_absorcao',
   ↵ intensidade_{}:2f}.csv'.format(diretorio_abrir_espectros,
   ↵ fator_intensidade)), skiprows=1, delimiter=',')
68 frequencia_adimensional = abrir_espectros[:, 0] #Vetor de frequências em
   ↵ unidades de \(\Gamma_D\).
69 div_1_coeficiente_absorcao_sem_intensidade = 1 / abrir_espectros[:, 1] #Inverso
   ↵ do coeficiente de absorção (caminho livre médio) sem saturação.
70 div_1_coeficiente_absorcao_com_intensidade = 1 / abrir_espectros[:, 3] #Inverso
   ↵ do coeficiente de absorção (caminho livre médio) com saturação.
71 #Normalização do coeficiente de absorção para ser usado como uma distribuição de
   ↵ probabilidade.
72 i_passo_minimo = np.argmax(abrir_espectros[:, 1]) #Encontra o índice da
   ↵ frequência com máxima absorção.
73 fator_normalizacao_coef_abs = simpson(abrir_espectros[:, 1], x=abrir_espectros
   ↵ [:, 0]) #Calcula a área sob a curva de absorção para normalização.
74 coef_abs_norm = abrir_espectros[:, 1] / fator_normalizacao_coef_abs #Coeficiente
   ↵ de absorção normalizado.
75 passo_minimo = 0 #Define um passo mínimo, neste caso zerado.
76 conversao_opacidade_comprimento = coef_abs_norm[i_passo_minimo] /
   ↵ abrir_espectros[i_passo_minimo, 1] #Fator de conversão entre opacidade e
   ↵ comprimento físico.
77 #Identificação dos centros de linha das transições.
78 centro_linha_transicao = find_peaks(abrir_espectros[:, 1], prominence=sorted(
   ↵ peak_prominences(abrir_espectros[:, 1], find_peaks(abrir_espectros[:, 1])
   ↵ [0])[0])[-2])[0] #Encontra os picos proeminentes no espectro de absorção.
79 #Conversão de unidades de frequência para MHz e GHz para uso em gráficos e nomes
   ↵ de arquivos.
80 frequencia_MHz = frequencia_adimensional * largura_doppler / 1e6
81 frequencia_GHz = frequencia_adimensional * largura_doppler / 1e9
82 #Carrega e normaliza as matrizes de redistribuição de frequência.
83 matriz_redistribuicao_ii_sem_normalizacao = np.loadtxt(open('{}2-
   ↵ matriz_redistribuicao_frequencia_cenario_ii.csv'.format(
   ↵ diretorio_abrir_espectros)), skiprows=0, delimiter=',') / coef_abs_norm #
   ↵ Carrega a matriz para o cenário II (coerente) e aplica uma correção.
84 matriz_redistribuicao_iii_sem_normalizacao = np.loadtxt(open('{}2-
   ↵ matriz_redistribuicao_frequencia_cenario_iii.csv'.format(
   ↵ diretorio_abrir_espectros)), skiprows=0, delimiter=',') / coef_abs_norm #
   ↵ Carrega a matriz para o cenário III (colisional) e aplica uma correção.

```

```

85 fator_normalizacao_matriz_ii = np.sum(matriz_redistribuicao_ii_sem_normalizacao,
86     ↪ axis=0) #Soma as colunas para obter os fatores de normalização.
86 fator_normalizacao_matriz_iii = np.sum(
87     ↪ matriz_redistribuicao_iii_sem_normalizacao, axis=0) #Soma as colunas para
87     ↪ obter os fatores de normalização.
87 matriz_redistribuicao_ii = (matriz_redistribuicao_ii_sem_normalizacao /
88     ↪ fator_normalizacao_matriz_ii).T #Normaliza a matriz II e a transpõe para
88     ↪ que as linhas representem as probabilidades de emissão para uma dada
88     ↪ frequência de incidência.
88 matriz_redistribuicao_iii = (matriz_redistribuicao_iii_sem_normalizacao /
89     ↪ fator_normalizacao_matriz_iii).T #Normaliza a matriz III e a transpõe.
89 #Cria dicionários para mapear eficientemente a frequência de incidência às
89     ↪ distribuições de probabilidade de emissão.
90 dicionario_frequencia_incidencia_probabilidades_emissao_ii = {
90     ↪ frequencia_adimensional[i]: matriz_redistribuicao_ii[i] for i in range(
90     ↪ len(frequencia_adimensional))}
91 dicionario_frequencia_incidencia_probabilidades_emissao_iii = {
91     ↪ frequencia_adimensional[i]: matriz_redistribuicao_iii[i] for i in range(
91     ↪ len(frequencia_adimensional))}
92 #Define a probabilidade de colisão (P_c) com base na entrada.
93 if P_c_analise == 0:
94     P_c = 0
95 elif P_c_analise == 1:
96     P_c = 1
97 else:
98     P_c = (densidade_atomica * 9e-14) / (Gamma_natural + (densidade_atomica * 9e
98     ↪ -14)) #Calcula P_c como a razão entre a taxa de colisão e a taxa de
98     ↪ decaimento total.
99 #Define o diretório para salvar os resultados da simulação.
100 pasta_salvar = u'matriz-N={:1.2e},T={:.1f},\u03b3C/Pc={:.1f}%'.format(
100     ↪ densidade_atomica, temperatura_janela, P_c * 100)
101 print(colored('{:02}:{:02}:{:02}'.format(time.localtime().tm_hour, time.
101     ↪ localtime().tm_min, time.localtime().tm_sec), 'white', 'on_grey'),
101     ↪ colored('Probabilidade de colisão: {:.1f}%, Perfil espectral: {}'.format(
101     ↪ P_c * 100, laser_incidencia), 'white', 'on_grey'))
102
103 ####INÍCIO DA SIMULAÇÃO####
104 #Loop principal que itera sobre as diferentes geometrias de célula a serem
104     ↪ analisadas.
105
106
107
108 for i_dimensao_meio in comprimento_analise:
109     gc.collect() #Força a coleta de lixo para liberar memória.
110     tempo_inicio = time.time() #Registra o tempo de início da simulação para a
110     ↪ geometria atual.
111     pasta_salvar_2 = '{}-{}-{:1.2e}'.format(pasta_salvar, i_dimensao_meio + 1,
111     ↪ dimensao_meio_x[i_dimensao_meio]) #Cria um subdiretório específico para
111     ↪ os resultados desta geometria.
112     print(colored('{:02}:{:02}:{:02}'.format(time.localtime().tm_hour, time.
112     ↪ localtime().tm_min, time.localtime().tm_sec), 'white', 'on_grey'),
112     ↪ colored('{}-{}, Comprimento: {:.1.2e}'.format(i_dimensao_meio + 1, len(

```

```

    ↵ dimensao_meio_x), dimensao_meio_x[i_dimensao_meio]), 'white', 'on_grey'))
113 #Define o número da simulação atual para salvar os arquivos com nomes únicos.
114 if os.path.isdir('{}/simulacao'.format(pasta_salvar_2)):
115     simulacao_atual = len(os.listdir('{}/simulacao'.format(pasta_salvar_2))) + 1
116 else:
117     os.makedirs('{}/simulacao'.format(pasta_salvar_2))
118     simulacao_atual = 1
119 if salvar_informacoes_rodadas == 'sim' or construir_graficos == 'sim':
120     if os.path.isdir('{}/dados_rodadas/simulacao_{}'.format(pasta_salvar_2,
121     ↵ simulacao_atual)):
122         shutil.rmtree('{}/dados_rodadas/simulacao_{}'.format(pasta_salvar_2,
123     ↵ simulacao_atual)) #Remove diretório antigo se existir.

124 #Define as dimensões da célula para a iteração atual.
125 comprimento_meio = dimensao_meio_x[i_dimensao_meio]
126 raio_meio_quadrado = (dimensao_meio_yz[i_dimensao_meio] / 2)**2
127 raio_feixe = dimensao_feixe_diametro / 2
128 #Filtre o intervalo de frequências de incidência a ser simulado.
129 i_intervalo_frequencia_posicao = np.flatnonzero((frequencia_adimensional >=
130     ↵ intervalo_largura_doppler_espectro[0]) & (frequencia_adimensional <=
131     ↵ intervalo_largura_doppler_espectro[1]))
132 ponto = 1 #Contador para os pontos de frequência.
133 #Se a construção de gráficos estiver ativa, identifica as frequências para as
134     ↵ quais os dados teóricos existem.
135 if construir_graficos == 'sim':
136     frequencias_construir_plots = [float(fre_inc.split('incidencia_')[1]) for
137     ↵ fre_inc in (os.listdir('{}/{:.1f}_cm'.format(diretorio_abrir_espectros,
138     ↵ comprimento_meio * 100)))]
139     i_frequencias_construir_plots = np.searchsorted(frequencia_adimensional,
140     ↵ frequencias_construir_plots)

141 #Inicializa listas para armazenar os resultados.
142 total_fotons_incidencia, offset_transmissao,
143     ↵ fotons_transmitidos_1_espalhamento, fotons_confinados_2_espalhamento,
144     ↵ fotons_transmitidos = [], [], [], [], []
145
146 #Loop secundário que itera sobre cada frequência de incidência.
147 for i_primeiro_espalhamento in i_intervalo_frequencia_posicao:
148     rodada = 1 #Contador de rodadas de espalhamento.
149     comprimento_frase = 1 #Variável para controle da impressão no terminal.
150     if salvar_informacoes_rodadas == 'sim' or construir_graficos == 'sim':
151         os.makedirs('{}/dados_rodadas/simulacao_{}_{:3.2f}_MHz'.format(
152         ↵ pasta_salvar_2, simulacao_atual, ponto, frequencia_MHz[
153         ↵ i_primeiro_espalhamento])) #Cria diretório para salvar dados da rodada.

154     #INICIALIZAÇÃO DOS FÓTONS
155     #Gera a posição radial inicial dos fótons na janela de entrada da célula.
156     gerador_raio_feixe_posicao_y_z = raio_feixe * abs(gerador_aleatorio.
157     ↵ standard_normal(total_fotons))
158     gerador_angulo_feixe_y_z = 2 * np.pi * gerador_aleatorio.random(total_fotons
159     ↵ )

```

```

149     posicao_y = gerador_raio_feixe_posicao_y_z * np.cos(gerador_angulo_feixe_y_z
150     ↪ ) + posicao_inicial_feixe_y[i_dimensao_meio]
151     posicao_z = gerador_raio_feixe_posicao_y_z * np.sin(gerador_angulo_feixe_y_z
152     ↪ ) + posicao_inicial_feixe_z[i_dimensao_meio]
153     #Sorteia a frequência inicial de cada fóton de acordo com o perfil espectral
154     ↪ do laser.
155     if laser_incidencia == 'lorentz':
156         gerador_distribuicao_espectral_laser = (largura_linha_laser /
157         ↪ largura_doppler) * gerador_aleatorio.standard_cauchy(total_fotons) +
158         ↪ frequencia_adimensional[i_primeiro_espalhamento]
159     elif laser_incidencia == 'gauss':
160         gerador_distribuicao_espectral_laser = (largura_linha_laser /
161         ↪ largura_doppler) * gerador_aleatorio.standard_normal(total_fotons) +
162         ↪ frequencia_adimensional[i_primeiro_espalhamento]
163     #Mapeia as frequências sorteadas para os índices do vetor de frequência pré-
164     ↪ calculado.
165     i_dist_espclaser_freq_adm = np.searchsorted(frequencia_adimensional,
166     ↪ gerador_distribuicao_espectral_laser)
167     i_dist_espclaser_freq_adm = np.clip(i_dist_espclaser_freq_adm, 0, len(
168     ↪ frequencia_adimensional) - 1)
169     diferenca_1 = np.abs(gerador_distribuicao_espectral_laser -
170     ↪ frequencia_adimensional[i_dist_espclaser_freq_adm - 1])
171     diferenca_2 = np.abs(gerador_distribuicao_espectral_laser -
172     ↪ frequencia_adimensional[i_dist_espclaser_freq_adm])
173     i_frequencia_posicao_fotons = np.where(diferenca_2 >= diferenca_1,
174     ↪ i_dist_espclaser_freq_adm - 1, i_dist_espclaser_freq_adm)
175     frequencia_fotons_rodada = np.copy(frequencia_adimensional[
176     ↪ i_frequencia_posicao_fotons])
177     #Sorteia a posição do primeiro espalhamento usando a lei de Beer-Lambert (
178     ↪ método da transformada inversa).
179     posicao_x = (-np.log(gerador_aleatorio.random(total_fotons)) *
180     ↪ div_1_coeficiente_absorcao_com_intensidade[i_frequencia_posicao_fotons])
181     ↪ + posicao_inicial_feixe_x[i_dimensao_meio] + passo_minimo
182     #Filtre os fótons que foram de fato absorvidos dentro dos limites da célula.
183     posicao_radial_quadrado = posicao_y**2 + posicao_z**2
184     i_fotons_absorvidos = np.flatnonzero((posicao_x < comprimento_meio) & (
185     ↪ posicao_radial_quadrado < raio_meio_quadrado))
186     total_fotons_rodada = total_fotons - len(np.flatnonzero(
187     ↪ posicao_radial_quadrado > raio_meio_quadrado)) #Total de fótons que
188     ↪ entraram na célula.
189     #Atualiza os vetores para conter apenas os fótons absorvidos.
190     frequencia_fotons_rodada = frequencia_fotons_rodada[i_fotons_absorvidos]
191     posicao_x = posicao_x[i_fotons_absorvidos]
192     posicao_y = posicao_y[i_fotons_absorvidos]
193     posicao_z = posicao_z[i_fotons_absorvidos]
194     fotons_dentro_meio_rodada = len(i_fotons_absorvidos)
195     total_fotons_transmitem_sem_absorcao = total_fotons_rodada -
196     ↪ fotons_dentro_meio_rodada #Fótons transmitidos balisticamente.
197     total_fotons_incidencia.append(total_fotons_rodada)
198     offset_transmissao.append(total_fotons_transmitem_sem_absorcao)
199     fotons_transmitidos_cenario_resultante =
200     ↪ total_fotons_transmitem_sem_absorcao

```

```

179
180     #Loop de espalhamentos múltiplos.
181     while True:
182         #Impressão de status no terminal.
183         if rodada <= 10 or rodada % 10 == 0:
184             # ... (código de impressão de status omitido para brevidade)
185             pass
186
187         #REDISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIA E NOVO ESPALHAMENTO
188         #Sorteia a nova frequência de cada fóton usando as matrizes de
189         #redistribuição.
190         if P_c == 0 or P_c == 1: #Cenários puros (sem ou com colisão total).
191             grupos_i_fotons_frequencias = collections.defaultdict(list)
192             for i_fotons in np.arange(0, fotons_dentro_meio_rodada, 1):
193                 grupos_i_fotons_frequencias[frequencia_fotons_rodada[i_fotons]].append
194                 (i_fotons) #Agrupa fótons por frequência de incidência.
195                 for frequencia_grupo, grupo_i_fotons in grupos_i_fotons_frequencias.
196                 items():
197                     pesos = dicionario_frequencia_incidencia_probabilidades_emissao_ii[
198                     frequencia_grupo] if P_c == 0 else
199                     dicionario_frequencia_incidencia_probabilidades_emissao_iii[
200                     frequencia_grupo]
201                     gerador_frequencia_emissao_grupo = gerador_aleatorio.choice(
202                     frequencia_adimensional, size=len(grupo_i_fotons), p=pesos) #Sorteia a
203                     nova frequência para o grupo.
204                     frequencia_fotons_rodada[grupo_i_fotons] =
205                     gerador_frequencia_emissao_grupo
206                     else: #Cenário misto.
207                         gerador_P_c = gerador_aleatorio.random(fotons_dentro_meio_rodada)
208                         cenarios_emissao_fotons_rodada = np.where(gerador_P_c > P_c, 'ii', 'iii'
209                         ) #Decide o cenário para cada fóton.
210                         # ... (código similar ao anterior, mas separando por cenário 'ii' e 'iii'
211                         ).
212
213         #Sorteia o caminho livre e a nova direção de emissão.
214         passo_1_cenario = (-np.log(gerador_aleatorio.random(
215             fotons_dentro_meio_rodada)) * div_1_coeficiente_absorcao_sem_intensidade[
216             np.searchsorted(frequencia_adimensional, frequencia_fotons_rodada, side='
217             left')]) + passo_minimo
218         gerador_angulo_polar = np.arccos(1 - 2 * gerador_aleatorio.random(
219             fotons_dentro_meio_rodada)) #Sorteio isotrópico do ângulo polar.
220         seno_polar = np.sin(gerador_angulo_polar)
221         gerador_angulo_azimutal = 2 * np.pi * gerador_aleatorio.random(
222             fotons_dentro_meio_rodada)
223         #Calcula as componentes do passo.
224         passo_1_cenario_sentido_x = passo_1_cenario * np.cos(gerador_angulo_polar)
225         passo_1_cenario_sentido_y = passo_1_cenario * seno_polar * np.sin(
226             gerador_angulo_azimutal)
227         passo_1_cenario_sentido_z = passo_1_cenario * seno_polar * np.cos(
228             gerador_angulo_azimutal)
229         #Atualiza a posição dos fótons.
230         posicao_x += passo_1_cenario_sentido_x

```

```

213     posicao_y += passo_l_cenario_sentido_y
214     posicao_z += passo_l_cenario_sentido_z

215
216     #VERIFICAÇÃO DE FRONTEIRAS
217     #Verifica fôtons que saíram pela janela de saída (transmitidos).
218     i_analise_fotons_transmissao_x = np.flatnonzero(posicao_x >
219         comprimento_meio)
220     #Interpola a posição na fronteira para verificar se saíram dentro do raio
221     #da célula.
222     posicao_x_analise_fotons_transmissao = comprimento_meio - posicao_x[
223         i_analise_fotons_transmissao_x]
224     verificao_transmissao_y = (passo_l_cenario_sentido_y[
225         i_analise_fotons_transmissao_x] / passo_l_cenario_sentido_x[
226         i_analise_fotons_transmissao_x]) * posicao_x_analise_fotons_transmissao +
227     posicao_y[i_analise_fotons_transmissao_x]
228     verificao_transmissao_z = (passo_l_cenario_sentido_z[
229         i_analise_fotons_transmissao_x] / passo_l_cenario_sentido_x[
230         i_analise_fotons_transmissao_x]) * posicao_x_analise_fotons_transmissao +
231     posicao_z[i_analise_fotons_transmissao_x]
232     posicao_radial_quadrado_janela_saida = (verificao_transmissao_y**2) + (
233         verificao_transmissao_z**2)
234     i_fotons_transmitidos = np.flatnonzero(
235         posicao_radial_quadrado_janela_saida < raio_meio_quadrado)
236     #Identifica os fôtons que permanecem confinados.
237     posicao_radial_quadrado = (posicao_y**2) + (posicao_z**2)
238     i_fotons_confinados = np.flatnonzero((posicao_x > 0) & (posicao_x <
239         comprimento_meio) & (posicao_radial_quadrado < raio_meio_quadrado))
240     i_fotons_escaped = np.flatnonzero((posicao_x < 0) | (posicao_x >
241         comprimento_meio) | (posicao_radial_quadrado > raio_meio_quadrado))
242     total_fotons_transmissao_rodada = len(i_fotons_transmitidos)
243     total_fotons_confinados_rodada = len(i_fotons_confinados)

244
245     #GERAÇÃO DE GRÁFICOS E SALVAMENTO DE DADOS (se habilitado)
246     if construir_graficos == 'sim' and rodada <= total_rodadas_construir_plot:
247         if i_primeiro_espalhamento in i_frequencias_construir_plots:
248             # ... (código para gerar e salvar gráficos comparativos omitido para
249             brevidade)
250             pass
251             if salvar_informacoes_rodadas == 'sim':
252                 informacoes_rodadas.append([fotons_dentro_meio_rodada,
253                     total_fotons_confinados_rodada, total_fotons_transmissao_rodada,
254                     fotons_dentro_meio_rodada - total_fotons_confinados_rodada -
255                     total_fotons_transmissao_rodada])
256             if rodada == 1:
257                 fotons_transmitidos_1_espalhamento.append(
258                     total_fotons_transmissao_rodada)
259                 fotons_confinados_2_espalhamento.append(total_fotons_confinados_rodada)

260
261     #ATUALIZAÇÃO PARA A PRÓXIMA RODADA
262     fotons_transmitidos_cenario_resultante += total_fotons_transmissao_rodada
263     fotons_dentro_meio_rodada = total_fotons_confinados_rodada

```

```

246     if fotons_dentro_meio_rodada != 0: #Se ainda houver fótons, prepara a
247         ↪ próxima iteração.
248         frequencia_fotons_rodada = frequencia_fotons_rodada[i_fotons_confinados]
249         posicao_x = posicao_x[i_fotons_confinados]
250         posicao_y = posicao_y[i_fotons_confinados]
251         posicao_z = posicao_z[i_fotons_confinados]
252         rodada += 1
253     else: #Se não houver mais fótons, encerra o loop de espalhamento.
254         break
255
256     #Fim do loop while. Salva dados e avança para o próximo ponto de frequênci.
257     if salvar_informacoes_rodadas == 'sim':
258         np.savetxt('{}/dados_rodadas/simulacao_{}/{:3.2f}_MHz/0-informacoes.csv'
259         ↪ .format(pasta_salvar_2, simulacao_atual, ponto, frequencia_MHz[
260         ↪ i_primeiro_espalhamento]), np.asarray(informacoes_rodadas), fmt='%d',
261         ↪ delimiter=',', newline='\n', header='incidentes,confinados,transmitidos,
262         ↪ escaparam', comments='')
263         fotons_transmitidos.append(fotons_transmitidos_cenario_resultante)
264         ponto += 1
265     # ... (código de limpeza e impressão de status omitido)
266
267     #Fim do loop de frequências. Salva os resultados finais da simulação.
268     tempo_fim = time.time()
269     frequencia_primeiro_espalhamento = frequencia_adimensional[
270         ↪ i_intervalo_frequencia_posicao]
271     posicao_x_primeiro_espalhamento = div_1_coeficiente_absorcao_com_intensidade[
272         ↪ i_intervalo_frequencia_posicao]
273     fotons_transmitidos = np.asarray(fotons_transmitidos)
274     #Salva um arquivo com as informações gerais e parâmetros da simulação.
275     if os.path.isdir('{}/informacoes_simulacoes'.format(pasta_salvar_2)):
276         simulacao_atual = len(os.listdir('{}/informacoes_simulacoes'.format(
277         ↪ pasta_salvar_2))) + 1
278     else:
279         os.makedirs('{}/informacoes_simulacoes'.format(pasta_salvar_2))
280         with open('{}/informacoes_simulacoes/simulacao_{}.csv'.format(pasta_salvar_2,
281         ↪ simulacao_atual), 'w') as dados_simulacao:
282             # ... (escrita dos parâmetros da simulação no arquivo)
283             pass
284         #Salva o resultado principal da simulação (espectro de transmissão).
285         with open('{}/simulacao/simulacao_{}.csv'.format(pasta_salvar_2,
286         ↪ simulacao_atual), 'w') as r_min_trans:
287             r_min_trans.write('frequência de incidência (Hz),posição de primeiro
288             ↪ espalhamento (m),transmissão, total de fótons incidindo, total de fótons no
289             ↪ segundo espalhamento,transmissão no primeiro espalhamento,offset
290             ↪ transmissão\n')
291             for i_pos_ini in np.arange(0, len(i_intervalo_frequencia_posicao), 1):
292                 r_min_trans.write('{},{},{},{},{},{},{}\n'.format(
293                 ↪ frequencia_primeiro_espalhamento[i_pos_ini] * largura_doppler,
294                 ↪ posicao_x_primeiro_espalhamento[i_pos_ini], fotons_transmitidos[i_pos_ini]
295                 ↪ ], total_fotons_incidencia[i_pos_ini], fotons_confinados_2_espalhamento[
296                 ↪ i_pos_ini], fotons_transmitidos_1_espalhamento[i_pos_ini],
297                 ↪ offset_transmissao[i_pos_ini]))

```

Programa D.2 – Rotina computacional em Python para a simulação da caminha aleatória do fóton baseada em matrizes de redistribuição de frequência. Este método utiliza matrizes de redistribuição angularmente integradas, $R(\nu', \nu)$, que são précalculadas para cada condição experimental. A nova frequência do fóton é sorteada diretamente destas matrizes, substituindo o custoso passo de seleção de velocidade, o que resulta em um ganho de performance de ordens de magnitude, ideal para simular sistemas opticamente espessos.

Referências

- [1] N. Mercadier, W. Guerin, M. Chevrollier, and R. Kaiser. Lévy flights of photons in hot atomic vapours. *Nature Physics*, 5(8), 2009. <https://doi.org/10.1038/nphys1286>.
- [2] R. Baudouin, Q .and Pierrat, A. Eloy, E. J. Nunes-Pereira, P.-A. Cuniasse, N. Mercadier, and R. Kaiser. Signatures of Lévy flights with annealed disorder. *Physical Review E*, 90(5), 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.052114>.
- [3] A. S. M. Macedo, J. P. Lopez, and T. P. de Silans. Sample size effects for Lévy flight of photons in atomic vapors. *Physical Review E*, 104, 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.054143>.
- [4] A. F. Molisch, G. J. Parker, B. P. Oehry, W. Schupita, and G. Magerl. Radiation trapping with partial frequency redistribution: Comparison of approximations and exact solutions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 53, 1995. [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(95\)90059-4](https://doi.org/10.1016/0022-4073(95)90059-4).
- [5] A. F. Molisch, B. P. Oehry, W. Schupita, and G. Magerl. Radiation trapping in atomic vapours in finite-cylinder vapour cells excited by a laser beam. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 30(8), 1997. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/30/8/007>.
- [6] M. Chevrollier. Radiation trapping and Lévy flights in atomic vapours: An introductory review. *Contemporary Physics*, 53(3), 2012. <https://doi.org/10.1080/00107514.2012.684481>.
- [7] J. C. de A. Carvalho, M. Oriá, M. Chevrollier, H. L. D. de S. Cavalcante, and T. P. de Silans. Redistribution of light frequency by multiple scattering in a resonant atomic vapor. *Physical Review A*, 91(5), 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.053846>.

- [8] W. Falcki, W. Hartmann, and R. Bocksch. New aspects of holstein's treatment of radiation trapping. *Optics Communications*, 83(3-4), 1991. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(91\)90165-A](https://doi.org/10.1016/0030-4018(91)90165-A).
- [9] K. Pfeilsticker, F. Erle, O. Funk, H. Veitel, and U. Platt. First geometrical pathlengths probability density function derivation of the skylight from spectroscopically highly resolving oxygen a-band observations: 1. measurement technique, atmospheric observations and model calculations. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 103(D10), 1998. <https://doi.org/10.1029/98JD00725>.
- [10] W. Zhong and J. D. Haigh. The greenhouse effect and carbon dioxide. *Weather*, 68(4), 2013. <https://courses.seas.harvard.edu/climate/eli/Courses/global-change-debates/Sources/CO2-saturation/more/Zhong-Haigh-2013.pdf>.
- [11] M. W. Blades and G. M. Hieftje. On the significance of radiation trapping in the inductively coupled plasma. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 37(3), 1982. [https://doi.org/10.1016/0584-8547\(82\)80059-1](https://doi.org/10.1016/0584-8547(82)80059-1).
- [12] J. E. Lawler, G. J. Parker, and W. N. G. Hitchon. Radiation trapping simulations using the propagator function method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 49(6), 1993. [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(93\)90006-4](https://doi.org/10.1016/0022-4073(93)90006-4).
- [13] W. Brunner and T. Schlegel. Gain and radiation trapping in laser-produced plasmas. *Laser and Particle Beams*, 6(2), 1988. <https://doi.org/10.1017/S026303460000402X>.
- [14] D. E. Osterbrock. The escape of resonance-line radiation from an optically thick nebula. *Astrophysical Journal*, 135, 1962. <https://doi.org/10.1086/147258>.
- [15] D. Mihalas. *Stellar Atmospheres*. W. H. Freeman and Company, 1978.
- [16] W. Ishibashi, A. C. Fabian, C. Ricci, and A. Celotti. Revisiting the forbiddenregion: Agn radiative feedback with radiation trapping. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 479(3), 2018. <https://doi.org/10.1093/mnras/sty1620>.

- [17] A. F. Molisch, B. P. Oehry, and G. Magerl. The influence of radiation trapping on the measurements of cross sections for excited-atom-excited-atom collisions. *Physica Scripta*, 2000, 2000. <https://doi.org/10.1238/Physica.Topical.086a00055>.
- [18] A. B. Matsko, I. Novikova, M. O. Scully, and G. R. Welch. Radiation trapping in coherent media. *Physical Review Letters*, 87(13), 2001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.133601>.
- [19] A. B. Matsko, I. Novikova, and G. R. Welch. Radiation trapping under conditions of electromagnetically induced transparency. *Journal of Modern Optics*, 49(3-4), 2002. <https://doi.org/10.1080/09500340110088597>.
- [20] A. F. Molisch and B. P. Oehry. *Radiation Trapping in Atomic Vapours*. Oxford University Press, 1998.
- [21] J. M. Proud and L. H. Luessen. *Radiative Processes in Discharge Plasmas*, volume 149. Springer, 1985.
- [22] G. G. Lister. Collisional and radiative processes in fluorescent lamps. *Physics of Plasmas*, 10(5), 2003. <https://doi.org/10.1063/1.1555829>.
- [23] M. Ettenberg, H. F. Lockwood, and H. S. Jr. Sommers. Radiation trapping in laser diodes. *Journal of Applied Physics*, 43(12), 1972. <https://doi.org/10.1063/1.1661068>.
- [24] A. E. Siegman. *Lasers*. University Science Books, 1986.
- [25] V. I. Vinogradov. Effect of radiation trapping on frequency difference in ring laser caused by recombination motion of atoms. *Optics and Spectroscopy*, 110(6), 2011. <https://doi.org/10.1134/S0030400X11060178>.
- [26] T. van der Straaten and M. J. Kushner. A monte-carlo model of xenon resonance radiation transport in a plasma display panel cell: Transition from optically thick to thin regimes. *Journal of Applied Physics*, 87(6), 2000. <https://doi.org/10.1063/1.372244>.

- [27] J. S. Batchelder, A. H. Zewai, and T. Cole. Luminescent solar concentrators. 1: Theory of operation and techniques for performance evaluation. *Applied Optics*, 18(18), 1979. <https://doi.org/10.1364/AO.18.003090>.
- [28] J. S. Batchelder, A. H. Zewail, and T. Cole. Luminescent solar concentrators. 2: Experimental and theoretical analysis of their possible efficiencies. *Applied Optics*, 20(21), 1981. <https://doi.org/10.1364/AO.20.003733>.
- [29] G. Labeyrie, R. Kaiser, and D. Delande. Radiation trapping in a cold atomic gas. *Applied Physics B*, 81(-), 2005. <https://doi.org/10.1007/s00340-005-2015-y>.
- [30] M. N. Berberan-Santos, E. J. Nunes-Pereira, and J. M. G. Martinho. Photonic superdiffusive motion in resonance radiation trapping. *The Journal of Chemical Physics*, 125(17), 2006. <https://doi.org/10.1063/1.2364889>.
- [31] K. T. Compton. Theory of ionization by cumulative action and the low voltage arc. *Physical Review Journals Archive*, 20(4), 1922. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.20.283>.
- [32] E. Milne. The diffusion of imprisoned radiation through a gas. *Journal of the London Mathematical Society*, 1(1), 1926. <https://doi.org/10.1112/jlms/s1-1.1.40>.
- [33] L. J. Hayner. The persistence of the radiation excited in mercury vapor. *Physical Review*, 26(3), 1925. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.26.364>.
- [34] A. S. Eddington. The formation of absorption lines. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 89(-), 1929. <https://doi.org/10.1093/mnras/89.7.620>.
- [35] C. Kenty. On radiation diffusion and the rapidity of escape of resonance radiation from a gas. *Physical Review Journals Archive*, 42(6), 1932. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.42.823>.
- [36] L. Jr. Spitzer. Non-coherent dispersion and the formation of fraunhofer lines. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 96(-), 1936. <https://doi.org/10.1093/mnras/96.8.794>.

- [37] R. R. Woolley. Non-coherent formation of absorption lines. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 98(-), 1938. <https://doi.org/10.1093/mnras/98.8.624>.
- [38] L. G. Henyey. The doppler effect in resonance lines. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 26(1), 1940. <https://doi.org/10.1073/pnas.26.1.50>.
- [39] H. Zanstra. On the weakening of the polarisation effect by collision damping. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 101(-), 1941. <https://doi.org/10.1093/mnras/101.5-6.273>.
- [40] L. Jr. Spitzer. Notes on the theory of noncoherent scattering. *Astrophysical Journal, vol. 99, p. 1*, 99(-), 1944. <https://doi.org/10.1086/144584>.
- [41] H. Zanstra. Non-coherent scattering and the absence of polarization in fraunhofer lines. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 106(3), 1946. <https://doi.org/10.1093/mnras/106.3.225>.
- [42] T. Holstein. Imprisonment of resonance radiation in gases. *Physical Review Journals Archive*, 72(12), 1947. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.72.1212>.
- [43] T. Holstein. Imprisonment of resonance radiation in gases. ii. *Physical Review Journals Archive*, 83(6), 1951. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.83.1159>.
- [44] A. F. Molisch, B. P. Oehry, W. Schupita, and G. Magerl. Radiation-trapping in cylindrical and spherical geometries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 49(4), 1993. [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(93\)90100-V](https://doi.org/10.1016/0022-4073(93)90100-V).
- [45] M. G. Payne and J. D. Cook. Transport of resonance radiation in an infinite cylinder. *Physical Review A*, 2(4), 1970. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.2.1238>.
- [46] A. F. Molisch, B. P. Oehry, and G. Magerl. Radiation-trapping in a plane-parallel slab. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 48(4), 1992. [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(92\)90057-B](https://doi.org/10.1016/0022-4073(92)90057-B).

- [47] H. Zanstra. On scattering with redistribution and radiation pressure in a stationary nebula. *Bulletin of the Astronomical Institutes of the Netherlands*, 11(-), 1949. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1949BAN....11....1Z/abstract>.
- [48] W. Unno. On the radiation pressure in a planetary nebula, ii. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 3(-), 1952. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1952PASJ....3..158U/abstract>.
- [49] W. Unno. Note on the zanstra redistribution in planetary nebulae. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 4(-), 1952. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1952PASJ....4..100U/abstract>.
- [50] D. G. Hummer. Non-coherent scattering: I. the redistribution function with doppler broadening. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 125(1), 1962. <https://doi.org/10.1093/mnras/125.1.21>.
- [51] V. Weisskopf. Zur theorie der resonanzfluoreszenz. *Annalen der Physik*, 401(1), 1931. <https://doi.org/10.1002/andp.19314010103>.
- [52] V. Weisskopf. The intensity and structure of spectral lines. *The Observatory*, 56, 1933. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1933Obs....56..291W/abstract>.
- [53] G. D. Finn. Frequency redistribution on scattering. *Astrophysical Journal*, 147(-), 1967. <https://doi.org/10.1086/149096>.
- [54] A. Omont, E. W. Smith, and J. Cooper. Redistribution of resonance radiation. i. the effect of collisions. *Astrophysical Journal*, 175, 1972. <https://doi.org/10.1086/151548>.
- [55] A. Omont, E. W. Smith, and J. Cooper. Redistribution of resonance radiation. ii. the effect of magnetic fields. *Astrophysical Journal*, 182, 1973. <https://doi.org/10.1086/152136>.
- [56] M. G. Payne, J. E. Talmage, G. S. Hurst, and E. B. Wagner. Effect of correlations between absorbed and emitted frequencies on the transport of resonance radiation. *Physical Review A*, 9(3), 1974. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.9.1050>.

- [57] H. Domke and I. Hubeny. Scattering of polarized light in spectral lines with partial frequency redistribution: General redistribution matrix. *Astrophysical Journal*, 334(-), 1988. <https://doi.org/10.1086/166857>.
- [58] V. Bommier. Master equation theory applied to the redistribution of polarized radiation, in the weak radiation field limit. i. zero magnetic field case. *Astronomy and Astrophysics*, 328(-), 1997. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1997A%26A...328.706B/abstract>.
- [59] V. Bommier. Master equation theory applied to the redistribution of polarized radiation, in the weak radiation field limit. ii. arbitrary magnetic field case. *Astronomy and Astrophysics*, 328(-), 1997. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1997A%26A...328.726B/abstract>.
- [60] E. Pereira, J. M. G. Martinho, and M. N. Berberan-Santos. Photon trajectories in incoherent atomic radiation trapping as Lévy flights. *Physical Review Letters*, 93(12), 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.120201>.
- [61] A. R. Alves-Pereira, E. J. Nunes-Pereira, J. M. G. Martinho, and M. N. Berberan-Santos. Photonic superdiffusive motion in resonance line radiation trapping partial frequency redistribution effects. *The Journal of Chemical Physics*, 126, 2007. <https://doi.org/10.1063/1.2717190>.
- [62] S. V. Buldyrev, M. Gitterman, S. Havlin, A. Y. Kazakov, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, H. E. Stanley, and G. M. Viswanathan. Properties of Lévy flights on an interval with absorbing boundaries. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 302(1-4), 2001. [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(01\)00461-7](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(01)00461-7).
- [63] W. W. Erickson and D. A. Steck. Anatomy of an extreme event: What can we infer about the history of a heavy-tailed random walk? *Physical Review E*, 106(5), 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.106.054142>.
- [64] P. Lévy. *Calcul des Probabilités*. Gauthier-Villars, 1925.

- [65] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, and U. Frisch. *Lévy Flights and Related Topics in Physics*. Springer, 1995.
- [66] B. Mandelbrot. The variation of some other speculative prices. *The Journal of Business*, 40(4), 1967. <https://www.jstor.org/stable/2351623>.
- [67] B. B. Mandelbrot and M. Aizenman. *Fractals: Form, Chance, and Dimension*. AIP Publishing, 1977.
- [68] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature/Revised and Enlarged Edition*. W. H. Freeman and Company, 1983.
- [69] G. M Viswanathan, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, E. J. Murphy, P. A. Prince, and H. E. Stanley. Lévy flight search patterns of wandering albatrosses. *Nature*, 381(6581), 1996. <https://doi.org/10.1038/381413a0>.
- [70] G. M. Viswanathan, E. P. Raposo, and M. G. E. aa Luz. Lévy flights and superdiffusion in the context of biological encounters and random searches. *Physics of Life Reviews*, 5(3), 2008. <https://doi.org/10.1016/j.plrev.2008.03.002>.
- [71] G. M. Viswanathan, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, and H. E. Stanley. *The Physics of Foraging: An Introduction to Random Searches and Biological Encounters*. Cambridge University Press, 2011.
- [72] A. M. Edwards, R. A. Phillips, N. W. Watkins, M. P. Freeman, E. J. Murphy, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, H. E. Stanley, et al. Revisiting Lévy flight search patterns of wandering albatrosses, bumblebees and deer. *Nature*, 449(7165), 2007. <https://doi.org/10.1038/nature06199>.
- [73] M. F. Shlesinger, B. J. West, and J. Klafter. Lévy dynamics of enhanced diffusion: Application to turbulence. *Physical Review Letters*, 58(11), 1987. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.1100>.

- [74] B. Podobnik, A. , Valentini, D. Horvati, and H. E. Stanley. Asymmetric Lévy flight in financial ratios. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(44), 2011. <https://doi.org/10.1073/pnas.1113330108>.
- [75] S. C. Lera and D. Sornette. Gross domestic product growth rates as confined Lévy flights: Towards a unifying theory of economic growth rate fluctuations. *Physical Review E*, 97(1), 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.012150>.
- [76] A. Corral. Universal earthquake-occurrence jumps, correlations with time, and anomalous diffusion. *Physical review letters*, 97(17), 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.178501>.
- [77] M. Baiesi, M. Paczuski, and A. L. Stella. Intensity thresholds and the statistics of the temporal occurrence of solar flares. *Physical Review Letters*, 96(5), 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.051103>.
- [78] E. M. Trotta and G. Zimbardo. Quasi-ballistic and superdiffusive transport for impulsive solar particle events. *Astronomy & Astrophysics*, 530(-), 2011. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201016278>.
- [79] D. Brockmann, L. Hufnagel, and T. Geisel. The scaling laws of human travel. *Nature*, 439(7075), 2006. <https://doi.org/10.1038/nature04292>.
- [80] M. C Gonzalez, C. A Hidalgo, and A.-L. Barabasi. Understanding individual human mobility patterns. *Nature*, 453(7196), 2008. <https://doi.org/10.1038/nature06958>.
- [81] A. Reynolds, E. Ceccon, C. Baldauf, K. T. Medeiros, and O. Miramontes. Lévy foraging patterns of rural humans. *PLoS one*, 13(6), 2018. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0199099>.
- [82] H. K. Janssen, K. Oerding, F. Van Wijland, and H. J. Hilhorst. Lévy-flight spreading of epidemic processes leading to percolating clusters. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 7(1), 1999. <https://doi.org/10.1007/s100510050596>.

- [83] C. J. Tessone, M. Cencini, and A. Torcini. Synchronization of extended chaotic systems with long-range interactions: An analogy to Lévy-flight spreading of epidemics. *Physical Review Letters*, 97(22), 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.224101>.
- [84] T. de Ver Dye, E. Muir, L. Farovitch, S. Siddiqi, and S. Sharma. Critical medical ecology and sars-cov-2 in the urban environment: A pragmatic, dynamic approach to explaining and planning for research and practice. *Infectious Diseases of Poverty*, 9(03), 2020. <https://doi.org/10.1186/s40249-020-00694-3>.
- [85] B. Gross, Z. Zheng, S. Liu, X. Chen, A. Sela, J. Li, D. Li, and S. Havlin. Spatio-temporal propagation of covid-19 pandemics. *Europhysics Letters*, 131, 2020. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/131/58003>.
- [86] J. Li, L. Weng, J. Xie, J. Amrit, and A. Ramiere. Lévy walk of quasiballistic phonons in nanowires. *Physical Review E*, 105(6), 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.105.064123>.
- [87] P. Barthelemy, J. Bertolotti, and D. S. Wiersma. A Lévy flight for light. *Nature*, 453(7194), 2008. <https://doi.org/10.1038/nature06948>.
- [88] J. Bertolotti, K. Vynck, L. Pattelli, P. Barthelemy, S. Lepri, and D. S. Wiersma. Engineering disorder in superdiffusive levy glasses. *Advanced Functional Materials*, 20(6), 2010. <https://doi.org/10.1002/adfm.200902008>.
- [89] N. Mercadier, M. Chevrollier, W. Guerin, and R. Kaiser. Microscopic characterization of Lévy flights of light in atomic vapors. *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 87(6), 2013. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.063837>.
- [90] M. O. Araújo, T. P. de Silans, and R. Kaiser. Lévy flights of photons with infinite mean free path. *Physical Review E*, 103, 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.L010101>.
- [91] J. P. Lopez, A. S. M. Macedo, M. O. Araújo, and T. P. de Silans. Dependence of Lévy-flight transmission on the starting point for photons propagating in atomic vapors. *Physical Review A*, 107, 2023. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.107.013501>.

- [92] I. C. Nunes, M. O. Araújo, J. P. Lopez, and T. P. de Silans. Frequency redistribution and step-size distribution of light scattered by atomic vapor: Applications to Lévy flight random walk. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 343(-), 2024. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2025.109481>.
- [93] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994.
- [94] W. Greiner. *Quantum Mechanics: An Introduction*. Springer, 1989.
- [95] C. J. Foot. *Atomic Physics*, volume 7. Oxford University Press, 2005.
- [96] G. Grynberg, A. Aspect, and C. Fabre. *Introduction to Quantum Optics: From the Semi-Classical Approach to Quantized Light*. Cambridge university press, 2010.
- [97] W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer, 1997.
- [98] R. W. Boyd, A. L. Gaeta, and E. Giese. *Nonlinear Optics*. Springer, 2007.
- [99] A. Zangwill. *Modern Electrodynamics*. Cambridge University Press, 2012.
- [100] E. M. Purcell. *Electricity and Magnetism*. Cambridge university press, 2013.
- [101] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, 1998.
- [102] D. F. Swinehart. The beer-lambert law. *Journal of Chemical Education*, 39(7), 1962. <https://doi.org/10.1021/ed039p333>.
- [103] E. L. Lewis. Collisional relaxation of atomic excited states, line broadening and interatomic interactions. *Physics Reports*, 58(1), 1980. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(80\)90056-3](https://doi.org/10.1016/0370-1573(80)90056-3).
- [104] B. H. Bransden and C. J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. John Wiley & Sons, 1990.

- [105] J. N. Murrell and S. D. Bosanac. *Introduction to the Theory of Atomic and Molecular Collisions*. John Wiley & Sons, 1989.
- [106] W. R. Hindmarsh and J. M. Farr. Collision broadening of spectral lines by neutral atoms. *Progress in Quantum Electronics*, 2, 1973. [https://doi.org/10.1016/0079-6727\(73\)90005-0](https://doi.org/10.1016/0079-6727(73)90005-0).
- [107] N. Allard and J. Kielkopf. The effect of neutral nonresonant collisions on atomic spectral lines. *Reviews of Modern Physics*, 54(4), 1982. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.54.1103>.
- [108] W. Demtröder. *Widths and Profiles of Spectral Lines*, chapter Widths and Profiles of Spectral Lines. Springer, 2008.
- [109] I. I. Sobel'Man, L. A. Vainshtein, and E. A. Yukov. *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*. Springer, 1995.
- [110] A. R. de F. A. Pereira. *Uma abordagem estocástica do aprisionamento radiativo atômico incoerente*. PhD thesis, Universidade do Minho (Portugal), 2007.
- [111] A. Thorne, U. Litzén, and S. Johansson. *Spectrophysics: Principles and Applications*. Springer, 1999.
- [112] V. Vuleti, V. A. Sautenkov, C. Zimmermann, and T. W. Hänsch. Measurement of cesium resonance line self-broadening and shift with doppler-free selective reflection spectroscopy. *Optics Communications*, 99(3), 1993. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(93\)90076-H](https://doi.org/10.1016/0030-4018(93)90076-H).
- [113] D. A. Steck. Cesium d line data, 2003.
- [114] M. L. Boas. *Mathematical Methods in the Physical Sciences*. John Wiley & Sons, 2006.
- [115] V. Jacques, B. Hingant, A. Allafort, M. Pigeard, and J. F. Roch. Nonlinear spectroscopy of rubidium: An undergraduate experiment. *European Journal of Physics*, 30(5), 2009. <https://doi.org/10.1088/0143-0807/30/5/001>.

- [116] S. R. A. Salinas. *Introduction to Statistical Methods*. Springer, 2001.
- [117] A. Omont. Irreducible components of the density matrix. application to optical pumping. *Progress in Quantum Electronics*, 5(2-A), 1977. [https://doi.org/10.1016/0079-6727\(79\)90003-X](https://doi.org/10.1016/0079-6727(79)90003-X).
- [118] I. I. Sobelman. *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, volume 1. Springer, 1996.
- [119] J. Huennekens, R. K. Namiotka, J. Sagle, Z. J. Jabbour, and M. Allegrini. Thermalization of velocity-selected excited-state populations by resonance exchange collisions and radiation trapping. *Physical Review A*, 51(6), 1995. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.51.4472>.
- [120] S. Sahal-Bréchot. Impact theory of the broadening and shift of spectral lines due to electrons and ions in a plasma (continued). *Astronomy and Astrophysics*, 2, 1969. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1969A%26A....2..322S/abstract>.
- [121] G. B. Rybicki and A. P. Lightman. *Radiative Processes in Astrophysics*. John Wiley & Sons, 1979.
- [122] M. I. Mishchenko, L. D. Travis, and A. A. Lacis. *Multiple Scattering of Light by Particles: Radiative Transfer and Coherent Backscattering*. Cambridge University Press, 2006.
- [123] L. L. Foldy. The multiple scattering of waves. i. general theory of isotropic scattering by randomly distributed scatterers. *Physical Review*, 67(3-4), 1945. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.67.107>.
- [124] A. Ishimaru. Diffusion of light in turbid material. *Applied Optics*, 28(12), 1989. <https://doi.org/10.1364/AO.28.002210>.
- [125] A. Ishimaru. *Wave Propagation and Scattering in Random Media*, volume 1. Academic press New York, 1978.
- [126] J. T. Jefferies. *Spectral Line Formation*. Blaisdell Publishing Company, 1968.
- [127] W. Demtroder. *Laser Spectroscopy: Basic Concepts and Instrumentation*. Springer, 1996.

- [128] H. A. Post. Radiative transport at the 184.9-nm hg resonance line. i. experiment and theory. *Physical Review A*, 33(3), 1986. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.33.2003>.
- [129] W. Feller. *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, volume 1. John Wiley & Sons, 1968.
- [130] J.-S. Lee. Monte carlo simulation of emission frequencies from partial frequency redistribution functions. *Astrophysical Journal*, 192(-), 1974. <https://doi.org/10.1086/153078>.
- [131] J.-S. Lee. Simulation of emission frequencies from angle-dependent partial frequency redistributions. *Astrophysical Journal*, 218(-), 1977. <https://doi.org/10.1086/155741>.
- [132] J.-S. Lee. Refined monte-carlo method for simulating angle-dependent partial frequency redistributions. *Astrophysical Journal*, 255(-), 1982. <https://doi.org/10.1086/159829>.
- [133] E. L. Degl'Innocenti and M. Landolfi. *Polarization in Spectral Lines*, volume 307. Kluwe Academic Publishers, 2004.
- [134] J. Oxenius. *Kinetic Theory of Particles and Photons: Theoretical Foundations of Non-LTE Plasma Spectroscopy*, volume 20. Springer, 1986.
- [135] C. J. Cannon. *The Transfer of Spectral Line Radiation*. Cambridge University Press, 2012.
- [136] H. Uitenbroek. Multilevel radiative transfer with partial frequency redistribution. *The Astrophysical Journal*, 557(1), 2001. <https://doi.org/10.1086/321659>.
- [137] E. U. Condon and G. H. Shortley. *The Theory of Atomic Spectra*. Cambridge University Press, 1959.
- [138] D. A. Steck. Rubidium 85 d line data, 2001.
- [139] M. Nakazawa and K. Suzuki. Cesium optical atomic clock: An optical pulse that tells the time. *Optics Letters*, 26(9), 2001. <https://doi.org/10.1364/OL.26.000635>.
- [140] J. Tellinghuisen and M. A. A. Clyne. Role of hyperfine structure in atomic absorption. oscillator strengths in br and i. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics*, 72(0), 1976. <https://doi.org/10.1039/F29767200783>.

- [141] C. Cohen-Tannoudji and S. Reynaud. Dressed-atom description of resonance fluorescence and absorption spectra of a multi-level atom in an intense laser beam. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 10(3), 1977. <https://doi.org/10.1088/0022-3700/10/3/005>.
- [142] D. M. Brink and G. R. Satchler. *Angular Momentum*. Oxford University Press, 1968.
- [143] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1957.
- [144] R. D. Cowan. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. University of California Press, 1981.
- [145] D. A. Steck. Quantum and atom optics, 2007.
- [146] P. Siddons, C. S. Adams, C. Ge, and I. G. Hughes. Absolute absorption on rubidium d lines: Comparison between theory and experiment. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 41(15), 2008. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/41/15/155004>.
- [147] V. V. Tuchin. Light scattering study of tissues. *Physics-Uspekhi*, 40(5), 1997. <https://doi.org/10.1070/PU1997v04n05ABEH000236>.
- [148] G. E. Thomas and K. Stammes. *Radiative Transfer in the Atmosphere and Ocean*. Cambridge University Press, 2002.
- [149] V. Ramanathan and A. M. Vogelmann. Greenhouse effect, atmospheric solar absorption and the earth's radiation budget: From the arrhenius-langley era to the 1990s. *Ambio*, 26(1), 1997. <https://www.jstor.org/stable/4314548>.
- [150] G. B. Thomas, R. L. Finney, M. D. Weir, and F. R. Giordano. *Thomas' calculus*. Addison-Wesley Reading, 2003.
- [151] A. Vezzani, E. Barkai, and R. Burioni. Single-big-jump principle in physical modeling. *Physical Review E*, 100(1), 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.012108>.

- [152] M. A. F. dos Santos. Analytic approaches of the anomalous diffusion: A review. *Chaos, Solitons & Fractals*, 124(-), 2019. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2019.04.039>.
- [153] F. A. Oliveira, R. M. S. Ferreira, L. C. Lapas, and M. H Vainstein. Anomalous diffusion: A basic mechanism for the evolution of inhomogeneous systems. *Frontiers in Physics*, 7(-), 2019. <https://doi.org/10.3389/fphy.2019.00018>.
- [154] R. N Mantegna and H. E. Stanley. Stochastic process with ultraslow convergence to a gaussian: The truncated Lévy flight. *Physical Review Letters*, 73(22), 1994. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.2946>.
- [155] L. Wang, P. P. Ho, C. Liu, G. Zhang, and R. R. Alfano. Ballistic 2-d imaging through scattering walls using an ultrafast optical kerr gate. *Science*, 253(5021), 1991. <https://doi.org/10.1126/science.253.5021.769>.
- [156] S. M. Ross. *Introduction to Probability and Statistics for Engineers and Scientists*. Academic Press, 2009.
- [157] G. Grimmett and D. Stirzaker. *Probability and Random Processes*. Oxford University Press, 2001.
- [158] N. G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, volume 1. Elsevier, 1992.
- [159] R. Durrett. *Probability: Theory and Examples*. Cambridge University Press, 2010.
- [160] J. Klinger, R. Voituriez, and O. Bénichou. Splitting probabilities of symmetric jump processes. *Physical Review Letters*, 129(14), 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.129.140603>.
- [161] A. S. M. Macedo. *Voos de Lévy de fóttons em vapores atômicos*. PhD thesis, Universidade Federal da Paraíba (Brasil), 2022.

- [162] J. D. Holmes and W. W. Moriarty. Application of the generalized pareto distribution to extreme value analysis in wind engineering. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 83(1), 1999. [https://doi.org/10.1016/S0167-6105\(99\)00056-2](https://doi.org/10.1016/S0167-6105(99)00056-2).
- [163] B. C. Arnold. Pareto distribution. *Wiley StatsRef: Statistics Reference Online*, 7(-), 2014. <https://doi.org/10.1002/9781118445112.stat01100.pub2>.
- [164] E. Mahmoudi. The beta generalized pareto distribution with application to lifetime data. *Mathematics and computers in Simulation*, 81(11), 2011. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2011.03.006>.
- [165] P. F. Rasmussen. Generalized probability weighted moments: Application to the generalized pareto distribution. *Water Resources Research*, 37(6), 2001. <https://doi.org/10.1029/2001WR900014>.
- [166] C. W. Groth, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker. Transmission probability through a Lévy glass and comparison with a Lévy walk. *Physical Review E*, 85(2), 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.021138>.
- [167] S. M. Ross, S. M. Ross, S. M. Ross, S. M. Ross, and E.-U. Mathématicien. *A First Course in Probability*. Macmillan New York, 2014.
- [168] F. Merovci and L. Puka. Transmuted pareto distribution. *ProbStat Forum*, 7(1), 2014. <https://probstat.org.in/PSF-2014-01.pdf>.
- [169] C. M. Bell and D. Babitch. A systems analysis of the cesium beam atomic clock. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 17(2), 1968. <https://doi.org/10.1109/TIM.1968.4313687>.
- [170] S. B. Dawes, A. S. Ellaboudy, and J. L. Dye. Cesium-133 solid-state nuclear magnetic resonance spectroscopy of alkalides and electrides. *Journal of the American Chemical Society*, 109(12), 1987. <https://doi.org/10.1021/ja00246a002>.
- [171] A. Bauch. Caesium atomic clocks: Function, performance and applications. *Measurement Science and Technology*, 14(8), 2003. <https://doi.org/10.1088/0957-0233/14/8/301>.

- [172] W. D. Williams, M. T. Herd, and W. B. Hawkins. Spectroscopic study of the 7p1/2 and 7p3/2 states in cesium-133. *Laser Physics Letters*, 15(9), 2018. <https://doi.org/10.1088/1612-202X/aac97e>.
- [173] M. S. Safronova, U. I. Safronova, and C. W. Clark. Magic wavelengths, matrix elements, polarizabilities, and lifetimes of cs. *Physical Review A*, 94(1), 2016. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.012505>.
- [174] A. Ratkata, P. D. Gregory, A. D. Innes, A. J. Matthies, L. A. McArd, J. M. Mortlock, M. S. Safronova, S. L. Bromley, and S. L. Cornish. Measurement of the tune-out wavelength for cs 133 at 880 nm. *Physical Review A*, 104(5), 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.052813>.
- [175] B. Rahaman and S. Dutta. High-precision measurement of the hyperfine splitting and ac stark shift of the 7 d d 3/2 2 state in atomic cesium. *Physical Review A*, 106(4), 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.042811>.
- [176] J. Jiang, X.-J. Li, X. Wang, C.-Z. Dong, and Z. W. Wu. Tune-out wavelengths of the hyperfine components of the ground level of cs 133 atoms. *Physical Review A*, 102(4), 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.102.042823>.
- [177] T. P. de Silans. Determination of atomic density and collisional broadening of an alkali vapor by resonant interferometry. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 51(19), 2018. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/aada99>.
- [178] B. Patton, K. Ishikawa, Y.-Y. Jau, and W. Happer. Intrinsic impurities in glass alkali-vapor cells. *Physical Review Letters*, 99(2), 2007. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.027601>.
- [179] J. Huennekens, H. J. Park, T. Colbert, and S. C. McClain. Radiation trapping in sodium-noble-gas mixtures. *Physical Review A*, 35(7), 1987. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.35.2892>.

- [180] B. Keramati, M. Masters, and J. Huennekens. Excitation-transfer collisions in cesium vapor: $\text{Cs}(5\text{d}5/2) + \text{cs}(6\text{s}1/2)\text{cs}(5\text{d}3/2) + \text{cs}(6\text{s}1/2)$. *Physical Review A*, 38(9), 1988. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.4518>.
- [181] M. V. Romalis. Hybrid optical pumping of optically dense alkali-metal vapor without quenching gas. *Physical Review Letters*, 105(24), 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.243001>.
- [182] F. A. Franz. Enhancement of alkali optical pumping by quenching. *Physics Letters A*, 27(7), 1968. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(68\)90858-X](https://doi.org/10.1016/0375-9601(68)90858-X).
- [183] M. A. Rosenberry, J. P. Reyes, D. Tupa, and T. J. Gay. Radiation trapping in rubidium optical pumping at low buffer-gas pressures. *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 75(2), 2007. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.75.023401>.
- [184] S. E. Thomas, J. H. D. Munns, K. T. Kaczmarek, C. Qiu, B. Brecht, A. Feizpour, P. M. Ledingham, I. A. Walmsley, J. Nunn, and D. J. Saunders. High efficiency raman memory by suppressing radiation trapping. *New Journal of Physics*, 19(6), 2017. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa7534>.
- [185] T. Colbert and J. Huennekens. Radiation trapping in the far wings of the foreign-gas broadened potassium resonance lines. *Physical Review A*, 44(7), 1991. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.4753>.
- [186] M. V. Romalis, E. Miron, and G. D. Cates. Pressure broadening of rb d1 and d2 lines by 3he, 4he, n2, and xe: Line cores and near wings. *Physical Review A*, 56(6), 1997. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.4569>.
- [187] G. A. Pitz, A. J. Sandoval, T. B. Tafoya, W. L. Klemmert, and D. A. Hostutler. Pressure broadening and shift of the rubidium d1 transition and potassium d2 transitions by various gases with comparison to other alkali rates. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 140, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.01.024>.

- [188] P. Knapkiewicz. Alkali vapor mems cells technology toward high-vacuum self-pumping mems cell for atomic spectroscopy. *Micromachines*, 9(8), 2018. <https://doi.org/10.3390/mi9080405>.
- [189] H. Nishino, Y. Furuya, and T. Ono. Micro-fabricated vapor cells with sealed rb atoms by distillation at wafer level and two-step bonding for miniature atomic clocks. *Optics Express*, 29(26), 2021. <https://doi.org/10.1364/OE.442859>.
- [190] A. Laliotis, S. Villalba, and H. Failache. Simple fabrication of miniaturized glass cells for atomic vapor spectroscopy. *Applied Physics A*, 128(5), 2022. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-05569-y>.
- [191] S. Dyer, A. McWilliam, D. Hunter, S. Ingleby, D. P. Burt, O. Sharp, F. Mirando, P. F. Griffin, E. Riis, and J. P. McGilligan. Nitrogen buffer gas pressure tuning in a micro-machined vapor cell. *Applied Physics Letters*, 123(7), 2023. <https://doi.org/10.1063/5.0153881>.
- [192] D. R. Snelling, R. A. Sawchuk, and R. E. Mueller. Single pulse cars noise: a comparison between single-mode and multimode pump lasers. *Applied optics*, 24(17), 1985. <https://doi.org/10.1364/AO.24.002771>.
- [193] S. Kröll, M. Aldén, T. Berglind, and R. J. Hall. Noise characteristics of single shot broadband raman-resonant cars with single-and multimode lasers. *Applied optics*, 26(6), 1987. <https://doi.org/10.1364/AO.26.001068>.
- [194] M. Vaughan. *The Fabry-Perot interferometer: history, theory, practice and applications*. Routledge, 1989.
- [195] S. Khan, S. Le Calvé, and D. Newport. A review of optical interferometry techniques for voc detection. *Sensors and Actuators A: Physical*, 302, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2019.111782>.

- [196] A. Pérot and C. Fabry. On the application of interference phenomena to the solution of various problems of spectroscopy and metrology. *Astrophysical Journal*, 9, 1899. <https://doi.org/10.1086/140557>.
- [197] J. Chorazy, T. Kotowski, and T. Stacewicz. Investigation of resonance radiation trapping for optically saturated $3^2S_{1/2} \rightarrow 3^2P_{1/2}$ transition in sodium vapour. *Optics communications*, 125(1-3), 1996. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(95\)00704-0](https://doi.org/10.1016/0030-4018(95)00704-0).
- [198] A. F. Molisch, B. P. Oehry, W. Schupita, and G. Magerl. Radiation trapping in a saturated atomic vapor in cylindrical geometries. *Optics communications*, 118(5-6):520–524, 1995. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(95\)00286-H](https://doi.org/10.1016/0030-4018(95)00286-H).
- [199] V. Sautenkov, S. Saakyan, and B. B. Zelener. Spectral dependence of nonlinear radiation trapping in high density atomic vapor. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 256, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2020.107349>.
- [200] J. Park, T. Jeong, and H. S. Moon. Temporal intensity correlation of bunched light from a warm atomic vapor with a ladder-type two-photon transition. *Scientific Reports*, 8(1), 2018. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-29340-7>.
- [201] A. Dussaux, T. P. de Silans, W. Guerin, O. Alibart, S. Tanzilli, F. Vakili, and R. Kaiser. Temporal intensity correlation of light scattered by a hot atomic vapor. *Physical Review A*, 93(4), 2016. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.043826>.
- [202] *Newport*, modelos 2151/2153. Disponível em: <https://www.newport.com/p/2151>. Acesso em: 17 jun. 2025.
- [203] P. A. Morettin and W. de O. Bussab. *Estatística Básica*. Editora Saraiva, 2023.
- [204] R. R. Meier and J.-S. Lee. A monte carlo study of frequency redistribution in an externally excited medium. *Astrophysical Journal*, 219(-), 1978. <https://doi.org/10.1086/155773>.
- [205] G. J. Parker, W. N. G. Hitchon, and J. E. Lawler. Radiation trapping simulations using the propagator function method: Complete and partial frequency redistribution. *Journal*

- of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 26(23), 1993. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/26/23/031>.
- [206] C. Song and R. Kawai. Monte carlo and variance reduction methods for structural reliability analysis: A comprehensive review. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 73, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.probengmech.2023.103479>.
- [207] K. Cheng, I. Papaioannou, and D. Straub. Enhanced sequential directional importance sampling for structural reliability analysis. *Structural Safety*, 260, 2025. <https://doi.org/10.1016/j.strusafe.2025.102574>.
- [208] X. Song, L. Zou, and M. Tang. An improved monte carlo reliability analysis method based on bp neural network. *Applied Sciences*, 15, 2025. <https://doi.org/10.3390/app15084438>.
- [209] Y. Jo and D. Lee. Current capabilities and future developments of monte carlo code mcs. *EPJ Nuclear Sciences & Technologies*, 11, 2025. <https://doi.org/10.1051/epjn/2025001>.
- [210] T. J. Sommerer. A monte carlo simulation of resonance radiation transport in the rare-gas–mercury positive column. *Journal of applied physics*, 74(3), 1993. <https://doi.org/10.1063/1.354831>.
- [211] M. Baeva and D. Reiter. Monte carlo simulation of radiation trapping in hg-ar fluorescent discharge lamps. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 23, 2003. <https://doi.org/10.1023/A:1022928320970>.
- [212] S.-T. Bao, D. Wu, P. Zhang, and L. Wang. Learning eigenstates of quantum many-body hamiltonians within the symmetric subspaces using neural network quantum states. *Physical Review B*, 111(16), 2025. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.L161116>.
- [213] T. Chen, E. Guo, W. Zhang, P. Zhang, and Y. Deng. Tensor network monte carlo simulations for the two-dimensional random-bond ising model. *Physical Review B*, 111(9), 2025. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.094201>.

- [214] F. Acebes, M. Pereda, D. Poza, J. Pajares, and J. M. Galán. Stochastic earned value analysis using monte carlo simulation and statistical learning techniques. *International Journal of Project Management*, 33(7), 2015. <https://doi.org/10.1016/j.ijproman.2015.06.012>.
- [215] K. Simsek. Practical applications of monte carlo simulation in financial modeling. *Practical Applications*, 49, 2024. <https://doi.org/10.3905/pa.2024.pa607>.
- [216] M. Pavlik and G. Michalski. Monte carlo simulations for resolving verifiability paradoxes in forecast risk management and corporate treasury applications. *International Journal of Financial Studies*, 13, 2025. <https://doi.org/10.3390/ijfs13020049>.
- [217] A. Firmino, J. R. Frisvad, and H. W. Jensen. Denoising-aware adaptive sampling for monte carlo ray tracing. In *ACM SIGGRAPH 2023 Conference Proceedings*, pages 1–11, 2023. <https://doi.org/10.1145/3588432.3591537>.
- [218] Y. Manabe, T. Yatagawa, S. Morishima, and H. Kubo. Monte carlo path tracing and statistical event detection for event camera simulation. In *2024 IEEE International Conference on Computational Photography (ICCP)*. IEEE, 2024. <https://doi.org/10.1109/ICCP61108.2024.10644728>.
- [219] K. Rajaraman and M. J. Kushner. A monte carlo simulation of radiation trapping in electrodeless gas discharge lamps. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 37(13), 2004. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/37/13/009>.
- [220] de A. J. C. Carvalho and T. P. de Silans. Backward fluorescence of optically thick cs vapor: Experiment and monte-carlo simulations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 260, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2020.107469>.
- [221] *Manual: Random sampling (numpy.random)*. Disponível em: <https://numpy.org/doc/stable/reference/random/generator.html>. Acesso em: 25 jun. 2025.
- [222] D. J. Dougherty, R. C. Gutierrez, S. Dubovitsky, and S. Forouhar. Semiconductor laser linewidth measurements for space interferometry applications. In *Testing, Packa-*

- ging, Reliability, and Applications of Semiconductor Lasers IV, volume 3626. SPIE, 1999. <https://doi.org/10.1117/12.345421>.
- [223] F. Lu, X. Hou, X. Wang, M. Guo, R. Chang, J. He, and J. Wang. Analyzing and measuring the diode lasers linewidth affected by the driving currents white noise. *Journal of the Optical Society of America B*, 39(9), 2022. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.460608>.
- [224] L. D. Turner, K. P. Weber, C. J. Hawthorn, and R. E. Scholten. Frequency noise characterisation of narrow linewidth diode lasers. *Optics communications*, 201(4-6), 2002. [https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(01\)01689-3](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(01)01689-3).
- [225] G. M. Bonner, C. Hunter, B. E. Jones, M. S. Warden, J. W. Thomas, L. J. McKnight, A. A. Lagatsky, D. J. M. Stothard, J. M. Jones, Y. Singh, et al. Comparative study of techniques for measurement of linewidth and frequency noise of single-frequency lasers. In *Advanced Solid State Lasers*. Optica Publishing Group, 2018. <https://doi.org/10.1364/ASSL.2018.ATh2A.13>.
- [226] M. Kourogi and M. Ohtsu. Novel optical frequency discriminator for fm noise reduction of semiconductor lasers. *Optics communications*, 81(3-4), 1991. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(91\)90639-U](https://doi.org/10.1016/0030-4018(91)90639-U).
- [227] J. B. Johnson, M. J. Johnson, and K. Lyon. Limitations and guidelines for measuring the spectral width of a single pulse of light with a fabry–perot interferometer. *Applied Optics*, 50(3), 2011. <https://doi.org/10.1364/AO.50.000347>.