



UNIVERSIDADE FEDERAL DA
PARAÍBA

Centro de Ciências Exatas e da Natureza

Coordenação de Pós-Graduação em Física

TESE DE DOUTORADO

Átomos próximos à superfície:

interação de van der Waals.

E

Diodo laser acoplado à transição atômica:

realimentação incoerente

Pedro Chaves de Souza Segundo

João Pessoa - Paraíba

2005

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física

Pedro Chaves de Souza Segundo

Átomos próximos à superfície: interação de van der Waals.

E

Diodo laser acoplado à transição atômica: realimentação incoerente

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientadora: Martine Chevrollier
Co-orientador: Daniel Bloch

João Pessoa - PB

2005

S729a de Souza Segundo, Pedro Chaves.

Átomos próximos à superfície: interação de van der Waals. E diodo laser acoplado à transição atômica: realimentação incoerente / Pedro Chaves de Souza Segundo . - - João Pessoa : [s.n], 2005.

280f. : il

Orientadora: Martine Chevrollier

Co-orientador: Daniel Bloch.

Tese (Doutorado) – UFPB /CCEN.

1.Física. 2.Interação átomo-superfície. 3.van der Waals. 4. Estabilização de diodo laser. 5. Biestabilidade em frequência.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

Agradecimento

Agradeço ao pessoal técnico do laboratório: Manoel Brasileiro (eletrônica) e Eduardo Soares (mecânica).

Aos professores do Laboratório de Física e Lasers/UFPB, pelo seu apoio e orientação: Oriá, Martine e Orlando.

Aos meus colegas, em especial Heron Freitas e Adrianderson da Rocha, pelas discussões científicas e dos trabalhos realizados em conjunto no laboratório.

À minha noiva, Klarissa Jerônimo, pelo seu incentivo.

Ao pessoal do Laboratoire de Physique des Lasers, por sua acolhida, em especial ao pessoal do grupo OCR, entre eles Daniel Bloch e Michele Fichet. Aos colegas da França, Isma Hamdi e Gabriel Dutier. A Alexandre Yarovitsky (Sasha) por sua ajuda e habilidade experimental.

À CAPES, por conceder bolsa de doutorado no Brasil e, principalmente, de doutorado sanduíche que me permitiu participar do grupo OCR na França.

Resumo

Interações dos átomos com superfícies modificam os graus de liberdade internos e externos desses átomos quando próximos a elas. A interação dominante de longo alcance (até a ordem do comprimento de onda das transições atômicas) é a interação de van der Waals, geralmente atrativa. Nesta tese é abordado o coeficiente C_3 , característico dessa interação e dependente da superfície e temperatura, determinado através do uso de uma técnica espectroscópica (Reflexão Seletiva). Trata-se também da transferência de excitação de longo alcance (efeito Förster) do átomo para a superfície. A curtas distâncias (dimensões atômicas), a interação torna-se repulsiva, devido à sobreposição dos orbitais eletrônicos do átomo incidente e dos constituintes da superfície. A soma das contribuições de curto e de longo alcance resulta em um poço de potencial com níveis discretos de energia que são simulados em uma transferência ótica para esses estados ligados.

As fontes de radiação utilizadas nas experiências da primeira parte desta tese são lasers de diodo ressonantes, cujas características espectrais precisam ser modificadas no laboratório para eles se tornarem ferramentas adequadas para a realização de tais experiências de espectroscopia de alta resolução. A Parte II da tese trata de diodos lasers, iniciando com a descrição de técnicas de estabilização e chegando a uma nova técnica desenvolvida no laboratório durante este trabalho de doutorado, onde a frequência do laser é controlada através de um retorno ótico com polarização ortogonal no diodo acoplado à transição atômica. Outros efeitos

relacionados a essa técnica de estabilização, como o fenômeno de bi-estabilidade, são descritos e interpretados no último capítulo desta tese.

palavras-chave: interação átomo-superfície, van der Waals, estabilização de diodo laser, biestabilidade em frequência

Abstract

Interactions with surfaces modify internal and external liberty degrees of atoms next to these surfaces. The dominant long range interaction (which extends itself to about an atomic transition wavelength is the van der Waals interaction, usually attractive. Firstly, this thesis treats C_3 coefficient, which is characteristic of this interaction and depends on the type of surface and temperature. Other theme is determination of this coefficient using a spectroscopic technique (Selective Reflection) in the atomic cesium system ($6S_{1/2} - 8P_{3/2}$ transition) on a dielectric surface. This interaction allows the long range excitation transfer (Förster effect) from atom to the dispersive dielectric surface. Considering small distances (atomic dimensions), interaction becomes repulsive because of electronic orbital overlap between the atom and surface components. The sum of these two kinds of interaction (far and close range) results in a potential well, with discrete energy levels. Next, are presented results of simulations on optic transfer from free atoms to atom-surface bounded states.

The radiation sources used on the experiments to evidence atom-surface effects described in the first part of this thesis are resonant diode lasers, with spectral characteristics that must be modified on the laboratory to become useful tools to perform high resolution experiments. The Part II treats diode lasers, beginning from stabilization techniques description and going to a new technique developed on the laboratory during doctoral work, where the laser frequency is controlled by an

coupled optical orthogonal feedback with atomic transition to diode. Other effects related to this stabilization technique, as the bi-stability phenomena, are described and interpreted on the last chapter.

keywords: atom-surface interaction, van der Waals, diode laser stabilization, frequency bi-stability

Sumário

Resumo	v
Abstract	vii
I van der Waals	1
1 A interação de van der Waals: uma introdução	3
1.1 Visão termodinâmica	4
1.2 Visão dipolo elétrico	5
1.3 Algumas possíveis aplicações	7
2 Teoria da interação de longo alcance entre átomos e superfícies	11
2.1 Introdução	12
2.2 Superfície como um espelho perfeito	14
2.2.1 Considerações gerais	14
2.2.2 Deslocamento dos níveis	19
2.2.3 Mudança do tempo de vida	24
2.3 Superfície dielétrica ideal	26
2.3.1 Considerações gerais	26
2.3.2 Meio dielétrico birrefringente	28

SUMÁRIO

2.4	Superfície dielétrica dispersiva à temperatura nula	29
2.4.1	Estado fundamental	30
2.4.2	Estado excitado	33
2.5	Superfície dielétrica dispersiva à temperatura não-nula	35
2.5.1	Aparecimento do termo de absorção	37
2.5.2	A soma discreta no espectro da frequência	40
2.5.3	Exemplo de variação de C_3 com a temperatura	42
2.6	Conclusão	44
3	Detectando a interação van der Waals:	
	Espectroscopia de Reflexão Seletiva	49
3.1	Técnicas de detecção da interação átomo-superfície	50
3.2	Reflexão Seletiva	55
3.3	Sinal da Reflexão Seletiva	57
3.4	Sistema de dois níveis	60
3.4.1	Sinal da RSFM	64
3.5	Conclusão	67
4	Experimento de Reflexão Seletiva	73
4.1	Introdução	74
4.2	O laser	75
4.2.1	Linearidade do Diodo Laser	76
4.3	Sistema atômico	80
4.3.1	Absorção saturada de referência	82
4.3.2	Efeitos de Pressão	83
4.4	Sistema de detecção	91
4.4.1	Geometria	91
4.4.2	Controle via computador	92

SUMÁRIO

4.4.3	Sinal da aquisição dos dados	93
4.5	Medidas	95
4.6	Conclusão	99
5	Análise dos resultados da reflexão seletiva	103
5.1	Introdução	104
5.2	Curvas teóricas	107
5.3	Ajuste de curvas	110
5.3.1	Diferenciando as curvas	112
5.4	Análise dos resultados por curva experimental	114
5.5	Análise dos resultados finais	123
5.6	Algumas correções	129
5.6.1	Distorção em frequência	129
5.6.2	Correção Doppler	131
5.7	Conclusão	133
6	Efeito Förster: Transferência de população via van der Waals	137
6.1	Introdução	138
6.2	Considerações para o cálculo	140
6.3	População dos níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$	142
6.3.1	Átomos chegando à superfície	144
6.3.2	Átomos partindo da superfície	148
6.4	Sinal da R.S.	151
6.5	Conclusão	154
7	Estados Ligados Átomo-Superfície	157
7.1	Introdução	158
7.2	Estados Ligados	161
7.2.1	Representação de variável discreta	162

SUMÁRIO

7.2.2	Cálculo dos estados ligados	166
7.2.3	Estados ligados rasos	170
7.3	Interação de estados ligados com a radiação	173
7.3.1	Modificação de energia	176
7.4	Resultados	176
7.5	Conclusão	180
 II Realimentação Ótica Incoerente		185
 8 Controle de frequência do Diodo Laser		187
8.1	Introdução	188
8.2	Utilização do diodo laser	189
8.3	Característica do diodo laser	191
8.4	Estabilização Eletrônica	193
8.4.1	Controle de temperatura	195
8.4.2	Controle de corrente	195
8.5	Realimentação Eletrônica	197
8.6	Realimentação Ótica	197
8.7	Realimentação Incoerente	199
8.8	Conclusão	202
 9 Bi-estabilidade com Realimentação Ótica Incoerente		205
9.1	Introdução	206
9.2	Realimentando o diodo laser	207
9.3	Equacionando a realimentação ótica incoerente	208
9.3.1	Variação de corrente	211
9.3.2	Variação de potência de realimentação	213
9.4	Simulação algébrica	216

SUMÁRIO

9.5	Resultado experimental	218
9.6	Conclusão	221
III	Apêndices	225
A	Modulação FM	227
B	Estimativa teórica de C_3	229
B.1	C_3 para o nível $8P_{3/2}$ do césio	231
B.2	Coeficiente de reflexão dielétrico	233
C	χ^2 para o ajuste de curvas	241
C.1	Ajuste de 3 parâmetros	241
C.2	Verificando o ajuste	243
D	Lista de Símbolos	249

SUMÁRIO

Lista de Figuras

2.1	Modelização do sistema constituído de um dipolo elétrico próximo de uma superfície condutora ideal, segundo a teoria de imagens elétricas.	20
2.2	Comparação entre os termos de absorção e emissão em função da temperatura, linhas sólidas. As retas tracejadas são as assíntotas . . .	38
2.3	Função de Lorentz, ligada à polarizabilidade, observado nos pontos considerados no somatório em p . A área formada pelos retângulos representam o valor do somatório.	41
2.4	Dependência com a temperatura da interação de van der Waals do cézio com a superfície de BaF_2	43
2.5	Dependência com a temperatura da interação de van der Waals do cézio com a superfície de CaF_2	43
3.1	Esquema da reflexão seletiva.	55
3.2	Esquema da reflexão seletiva.	58
3.3	Sistema de dois níveis, com a indicação das formas de transferência de população.	61
3.4	Espectros teóricos de RSFM para pequenos valores de A	66
3.5	Espectros teóricos de RSFM mostrando as modificações de forma do sinal para grandes diferenças nos valores de A	66

LISTA DE FIGURAS

4.1	Esquema simplificado da reflexão seletiva.	74
4.2	Montagem para a análise da linearidade da frequência do laser e da intensidade.	76
4.3	Detecção direta dos detectores	77
4.4	Picos do FP com a varredura em tensão.	78
4.5	Variação da frequência na varredura em tensão. Os pontos representam os picos do FP e a reta a inclinação da primeira região. . . .	78
4.6	Absorção linear com normalização em intensidade.	80
4.7	Estrutura hiperfina dos níveis $6S_{1/2}$ e $8P_{3/2}$ do césio, com a separação em frequência entre os níveis indicada.	81
4.8	Estrutura hiperfina dos níveis $6S_{1/2}$ e $8P_{3/2}$ do césio, com a separação em frequência entre os níveis indicado.	81
4.9	Curva da pressão em função da temperatura para o césio.	84
4.10	Esquema do aquecimento da célula de césio. Os termômetros se encontram fora da célula e próximos aos pontos do reservatório de césio e a janela dielétrica.	85
4.11	Absorção saturada $F=4$	86
4.12	Absorção saturada $F=4$	87
4.13	Absorção saturada $F=4$	87
4.14	Componentes dos picos de absorção saturada.	88
4.15	Deslocamento da linha atômica em relação à linha atômica de referência em função da pressão.	90
4.16	Alargamento da linha atômica em função da pressão	90
4.17	Esquema dos feixes refletidos pela janela, em uma experiência de reflexão seletiva.	91
4.18	Esquema da conexão eletrônica.	93
4.19	Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada. .	96

LISTA DE FIGURAS

4.20	Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.	96
4.21	Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.	97
4.22	Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.	97
4.23	Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.	98
4.24	Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.	98
5.1	Sinal RS e da referência AS, da transição Cs $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$.	105
5.2	Curvas de reflexão seletiva FM para pequenos valores do parâmetro A	109
5.3	Curvas de reflexão seletiva FM para grandes valores do parâmetro A	109
5.4	Erro em função de A.	116
5.5	Dependência da amplitude C_{1S} em função de A.	116
5.6	Dependência do erro (χ^2) em função de A.	117
5.7	Dependência da largura γ em função de A.	117
5.8	Dependência da interação ($A\Gamma$) em função de A.	118
5.9	Dependência do erro χ em função de A considerando diferentes dessintonias.	119
5.10	Comparação de diferentes A ajustados.	120
5.11	Dependência do erro (χ^2) em função de A considerando diferentes dessintonias.	121
5.12	Dependência da amplitude C_{1S} em função de A considerando dife- rentes dessintonias.	121
5.13	Dependência da largura γ em função de A considerando diferentes dessintonias.	122
5.14	Dependência da interação $A\gamma$ em função de A considerando diferen- tes dessintonias.	122
5.15	Resultado da dessintonia δ obtido em função da pressão para F=3.	124
5.16	Resultado da dessintonia δ obtido em função da pressão para F=4.	124
5.17	Largura γ obtido em função da pressão F=3.	125

LISTA DE FIGURAS

5.18	Largura γ obtido em função da pressão para $F=4$	125
5.19	Dependência da amplitude S pela pressão para $F=3$	127
5.20	Dependência da amplitude S pela pressão para $F=4$	128
5.21	Valor de $A\gamma$ para diferentes pressões.	128
5.22	Exemplo da diferença de ajuste de curvas com e sem o efeito Doppler.	132
6.1	Níveis do Césio utilizados no experimento.	139
6.2	Exemplo de distribuição espacial de população dos níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$ para átomos que se aproximam da superfície, $v=-50$ m/s . . .	145
6.3	Distribuições de população do nível $6D_{3/2}$ para átomos aproximando da superfície, velocidades negativas	146
6.4	Distribuições de população do nível $7P_{1/2}$ para aproximando da superfície, velocidades negativas	146
6.5	Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ para átomos se aproximando da superfície, velocidade negativa, para diversos valores de acoplamento B	147
6.6	Distribuição de população do nível $7P_{1/2}$ para átomos se aproximando da superfície, velocidade negativa, para diversos valores de acoplamento B	147
6.7	Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$ para átomos se afastando da superfície, velocidade positiva	148
6.8	Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ para átomos se afastando da superfície, velocidades positivas	149
6.9	Distribuição de população do nível $7P_{1/2}$ para átomos se afastando da superfície, velocidades positivas	150
6.10	Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ para diversos valores de B para átomos se afastando, $v = +5$ m/s	150

LISTA DE FIGURAS

6.11	Distribuição de população do nível $7P_{1/2}$ para diversos valores de B para átomos se afastando, $v = +5$ m/s	151
6.12	Contribuição das velocidades para o espectro de RS para diversas dessintonias	153
6.13	Espectro de Reflexão Seletiva para diversos valores de C	154
7.1	Potencial da interação átomo-superfície. A linha contínua, o potencial de curto alcance; a linha traço-ponto, o repulsivo de van der Waals; e a tracejada, o potencial resultante.	159
7.2	Comparação dos potenciais de Morse e van der Waals para o nível fundamental do átomo de cézio.	168
7.3	Exemplo de um auto-estado de van der Waals, para $n=3$	168
7.4	Comparação entre as auto-energias do van der Waals e Morse	169
7.5	Auto-funções correspondentes à autoenergias de alguns níveis do potencial de van der Waals.	170
7.6	Exemplo de estados ligados rasos na faixa de energia δE de -40 MHz a -2 MHz. O potencial $V(z)$ varia δE em δz próxima a superfície e Δz na região de longo alcance.	171
7.7	Dependência dos autovalores na faixa de -25MHz até -1MHz em função dos parâmetros do potencial repulsivo: a) para $A = 4 \times 10^{13} \text{ Hz}$ e $\alpha = 2 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ ($\times$), $1 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ ($\circ$) e $4 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ (+); b) para $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ e $A = 4 \times 10^{15} \text{ Hz}$ ($\times$), $4 \times 10^{17} \text{ Hz}$ ($\circ$) e $4 \times 10^{19} \text{ Hz}$ (+).	173

LISTA DE FIGURAS

7.8	Os potenciais de superfície Cs-dielétrico e suas funções de onda, correspondendo aos estados do césio $6S_{1/2}$ e $6P_{3/2}$ para o átomo livre. Os níveis vibracionais são obtidos para $A = 4 \times 10^{13}$ Hz e $\alpha = 2 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$. As setas representam o laser de frequência ν acoplando os estados $ \psi_{\text{livre}}\rangle$ e $ \phi_j^e\rangle e\rangle$ e o laser de frequência $\nu + \delta\nu$ acoplando os estados $ \phi_j^e\rangle e\rangle$ e $ \phi_i^f\rangle f\rangle$, resultando em uma configuração de transição Raman Λ	177
7.9	A evolução temporal da população para cada um dos 3 tipos de estados envolvidos na transição Raman: o estado livre do fundamental $ \psi_{\text{livre}}\rangle$ (linha tracejada), a soma dos estados ligados do fundamental $ \psi_i^f\rangle f\rangle$ (linha contínua) e a soma dos estados ligados do excitado $ \psi_j^e\rangle e\rangle$ (linha ponto-tracejada).	178
7.10	Eficiência do processo de carga como uma função do parâmetro de saturação s . O máximo da taxa de transferência 20% é obtido para $\Omega = 4\Gamma$	179
8.1	Espectro de operação de alguns tipos de diodo laser.	190
8.2	Ilustração do perfil de ganho e modos de vibração longitudinais de um diodo laser.	194
8.3	Ilustração do sinal de transmissão de uma absorção linear com o discriminador de frequência.	200
8.4	Ilustração do sentido da frequência quando o laser for perturbado.	200
8.5	Esquema do experimento de realimentação incoerente.	201
8.6	Análise da flutuação em frequência com o Fabry-Perot. a) laser livre. b) laser com realimentação incoerente acoplada à transição atômica.	202
9.1	Esquema do experimento de realimentação incoerente.	209

LISTA DE FIGURAS

9.2	Dependência linear do frequência com a potência de realimentação medida. Os pontos são experimentais e a reta tracejada é um ajuste linear.	216
9.3	Gráfico teórico da frequência realimentação incoerente, para dois níveis de acoplamento $D = 0$ e 2 GHz.	217
9.4	Gráfico teórico da absorção em uma realimentação incoerente, para dois níveis de acoplamento $D = 0$ e 2 GHz. O caminho 1 para corrente diminuindo e o caminho 2 para corrente aumentando. . . .	218
9.5	Gráfico teórico da absorção em uma realimentação incoerente, para dois níveis de acoplamento $D = 0$ e 2 GHz. (a) e (c) são os picos do Fabry-Perot, e (b) e (d) é a absorção linear. Os dois primeiros são sem realimentação, e os debaixo são com realimentação.	219
9.6	Gráfico do sinal de transmissão do Fabry-Perot aplicando diferente tensões no PZT. Em cima, há a rampa aplicada a corrente do diodo laser, e em baixo a curva de absorção.	220
9.7	Resultado da deconvolução da frequência de emissão do laser pela corrente. Os pontos são experimentais, e a linha apenas conecta os pontos.	221
B.1	Níveis atômicos do césio. As setas representam as transições dipolares a partir do nível $8P_{3/2}$	231
B.2	Níveis atômicos do césio mais próximos ao nível $8P_{3/2}$	234
B.3	Coeficiente de reflexão dielétrico $r(\omega > 0)$	234
B.4	Coeficiente de reflexão dielétrico $r(\omega < 0)$	235
B.5	Coeficiente de reflexão dielétrico marcado os pontos. As linhas verticais são as transições dipolares e a altura representa a contribuição para C_3	236

LISTA DE FIGURAS

B.6	Parte imaginária de $\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+1}$, ligado à modificação do tempo de vida. As linhas verticais são as transições dipolares e a altura representa a contribuição para C_3	236
C.1	Gráfico da função erro em função de γ	244
C.2	Gráfico de comparação das técnicas rápida com “exata”.	245

Lista de Tabelas

B.1	Contribuição de cada nível para o valor de C_3 . Em negrito, estão as principais contribuições. O sinal na coluna λ informa o tipo de transição a qual está relacionada.	232
-----	--	-----

LISTA DE TABELAS

Parte I

Interação de longo alcance entre átomos e superfícies

Capítulo 1

A interação de van der Waals: uma introdução

Um objeto interage com uma superfície próxima antes mesmo de ter contato. Essa interação podem resultar em forças perceptíveis até em escala macroscópica. Essas interações são de origem eletromagnética dos constituintes dos materiais. Alguns exemplos macroscópicos dessa interação são o pernilongo pousado na água sem se molhar e a lagartixa que sobe em qualquer superfície lisa [1]. Isso está ligado aos constituintes das matérias, átomos e moléculas.

Os átomos e as moléculas interagem eletromagneticamente com outros átomos e moléculas em sistemas de baixa energia (não nuclear) de diversas formas, como por exemplo: formando moléculas, líquidos e sólidos. Essas interações podem ser intramoleculares, intermoleculares ou interatômicas. As intramoleculares são as de maior intensidade e são responsáveis pela formação das moléculas, ligando os átomos. As interações intermoleculares (ou entre moléculas) e interatômicas são de menor intensidade e são responsáveis pela coesão para a formação de líquido e sólidos e pelos efeitos descritos acima. Essas interações têm o nome do primeiro a estudá-las na termodinâmica, van der Waals.

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

Um sistema mais simples para o estudo dessas interações dipolares é o sistema átomo-superfície. Uma simplificação ocorre quando considera-se a superfície fixa, ao invés de dois sistemas que podem se movimentar; em primeira aproximação a simetria é cilíndrica; e principalmente, a superfície é invariante por translação na direção tangente. Desta forma precisa-se considerar apenas o eixo normal à superfície, ou seja, apenas a distância à superfície é o parâmetro espacial relevante.

Além do mais, a superfície, formada de átomos e moléculas, será tratada apenas pelos valores médios de todo o conjunto e não por cada constituinte independentemente. Esse tipo de simplificação é, por exemplo, o mesmo utilizado para explicar o coeficiente dielétrico de um material considerando seus constituintes [2].

Pode-se considerar dois aspectos da interação de van der Waals: um modificando a equação de estado do gás e outro, o nível eletrônico. O primeiro é explicado na Visão termodinâmica, Seção 1.1. O segundo é considerando um átomo como um dipolo elétrico (Seção 1.2).

1.1 Visão termodinâmica

Efeitos na termodinâmica de meios gasosos foram observados por causa desta interação entre as moléculas, conforme pode ser observado na modificação da equação de estado dos gases. Essa modificação foi proposta por van der Waals em 1881 com a introdução de dois termos de correção na equação de estado para o gás ideal [3]. A equação de estado de um gás, para uma pressão P , uma temperatura T , contendo n átomos e um volume V , passou a ter então uma correção com termos em P e V :

$$PV = nRT \implies \left(P + \frac{an^2}{V^2} \right) (V - nb) = nRT. \quad (\text{Equação de estado})$$

1.2. VISÃO DIPOLO ELÉTRICO

Considera-se que cada átomo interage com outros átomos de forma atrativa à longa distância e repulsiva à curta distância. A interação repulsiva é quem determina o volume efetivo dos átomos. Dessa forma, o volume disponível para um átomo é reduzido por um fator b para cada um dos outros átomos, reduzindo assim o volume V para $V - nb$.

Por outro lado, a força atrativa tem um efeito líquido nulo para cada átomo no meio do vapor por causa da simetria dos outros átomos em torno desse átomo. Para os átomos da fronteira do vapor, a ausência de átomos (do mesmo tipo) na superfície provoca uma força líquida para dentro do meio, isto é, para longe da superfície do recipiente. Esta força representa uma redução da pressão medida. Desta forma a pressão real deve ser acrescida de um fator que depende do volume V e do número de átomos n

$$P_{\text{real}} = P_{\text{medido}} + a \frac{n^2}{V^2}. \quad (1.1)$$

Mesmo considerando uma correção no termo de interação, a análise da interação átomo-superfície via efeitos termodinâmicos tem algumas dificuldades, como a forma geométrica que foi desconsiderada no modelo por causa das escalas tomadas da célula grandes comparadas com os átomos que formam o vapor. Além disso, outra dificuldade é que esse tipo de análise considera a superfície totalmente inerte aos átomos de tal forma que seja considerada como um simples recipiente passivo, uma região sem matéria que possa interagir. Isso é visto nas inúmeras tabelas contendo valores de a como dependentes exclusivamente do gás.

1.2 Visão dipolo elétrico

As interações entre átomos e moléculas são de origem eletromagnéticas, assim, podem-se considerar dois tipos de sistemas segundo a carga total: os neutros ou os carregados. Normalmente, as análises são restritas àqueles sistemas cuja

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

a carga total seja nula, que é o caso mais frequentemente encontrado na natureza. Apesar de não ter carga líquida, existem distribuições de cargas formando multipolos elétricos, observados principalmente nas moléculas polares. Em uma primeira aproximação, pode-se considerar apenas o primeiro termo dipolar: chamada de interação dipolo-dipolo [4]. Esse dipolo pode ser permanente ou induzido.

Um dipolo permanente pode induzir uma redistribuição de cargas em um sistema eletricamente neutro e induzir um dipolo. A essa interação dá-se o nome de interação dipolo-dipolo induzido.

Outra forma de interação dipolar, que foi descrita por Fritz London [4], é a interação entre moléculas apolares. Na década de 1930, London [5, 6] explicou a existência da força no sistema porque, apesar do átomo neutro não possuir um dipolo real, há dipolo virtual pelas flutuações instantâneas das distribuições eletrônicas induzido pela vizinhança. A explicação para a existência desse tipo de interação só é possível completamente com a utilização da mecânica quântica e tem sua origem nas flutuações dos modos do vácuo e nas auto-interações. A descrição da interação entre um átomo e uma superfície metálica é dada por Lennard-Jonnes [7], com a obtenção da variação do potencial em $1/z^3$, onde z é a distância entre o átomo e a superfície. De forma semelhante à interação entre dois átomos, a interação de um sistema atômico neutro com uma superfície resulta da interação do dipolo virtual do átomo com o dipolo imagem na superfície.

Um tratamento mais moderno para os efeitos da interação com a superfície é dado pela eletrodinâmica quântica de cavidades [8], e para superfícies dielétricas por Wylie e Sipe [9, 10] e com experimentos relacionados [11–13]. No Capítulo 2, será visto que a presença de uma superfície tem influência nos átomos, modificando os seus níveis de energia e os tempos de vida de seus estados eletrônicos.

Nesta primeira parte da tese, será considerado um sistema simples onde o objeto próximo à superfície é um átomo. Os átomos serão considerados neutros e

1.3. ALGUMAS POSSÍVEIS APLICAÇÕES

sem dipolo permanente, restando apenas as flutuações do campo eletromagnético que induzem dipolos instantâneos, semelhante à descrição de London. Esses dipolos instantâneos induzem na superfície dipolos imagens e esse sistema pode ser entendido como interação do tipo dipolo-dipolo (induzido) entre o átomo e sua imagem elétrica. O nome para essa interação é London-van der Waals ou simplesmente van der Waals.

No Capítulo 2, é estudada essa interação de van der Waals considerando que o efeito será equivalente a uma perturbação nos níveis eletrônicos. No Capítulo 3, detalha-se a teoria de uma técnica espectroscópica utilizada para a observação da modificação dos níveis. Essa técnica é descrita no Capítulo 4, para um vapor de átomos de césio sondados próximos à transição ($6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$). Os resultados desse experimento são analisados no Capítulo 5.

No Capítulo 6, a mesma técnica espectroscópica descrita nos Capítulos 3 e 4 é simulada em um sistema cuja interação de van der Waals é repulsiva e leva a transferência de átomos entre dois níveis atômicos.

Da mesma forma que na descrição da formação de moléculas, em especial as de longo alcance, no Capítulo 7, a interação átomo-superfície é tratada como um potencial que, quanticamente, tem níveis de energia discretos. Descreve-se naquele capítulo uma forma de transferir átomos livres para estados ligados de superfície [14]. Esses estados ligados são equivalentes a uma molécula formada pelo átomo e sua imagem.

1.3 Algumas possíveis aplicações

Um sistema que envolve a interação entre um objeto e uma superfície pode ter esse tipo de interação dipolar, ou de van der Waals. Da mesma forma como verificado para a lagartixa [1], a interação tem aplicações para a fabricação de colas

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

e de óleos para reduzir atrito.

Um problema tecnológico para as empresas petrolíferas, como para a Transporto da Petrobrás, é o transporte de gás e petróleo. Os oleodutos e gasodutos transportam material por centenas de quilômetros e têm capacidade de fluxo limitada. Uma das limitações decorre da fricção (atrito) que podem aquecer, turbulências que surgem com a velocidade e do limite de pressão dos tubos e do material transportado. Em muitos casos, os dutos estão na capacidade máxima, porém há demanda por mais material e, portanto, podem ser aplicados estudos da interação-superfície, ligada ao atrito e possivelmente à pressão que o fluxo de material exerce sobre a parede.

Em um sistema em que os átomos chegam à superfície e que possam ser tratados como interagindo apenas com a superfície, ou ao menos uma parte da interação poder ser tratada como interagindo dessa forma, deve-se considerar a interação de van der Waals. Exemplos desse tipo de problemas ocorrem no crescimento de cristais, em litografia, nos processos de oxidação, entre outros.

Referências Bibliográficas

- [1] K. Autumn, Y. A. Liang, S. T. Hsieh, W. Zesch, W. P. Chan, T. W. Kenny, R. Fearing e R. J. Full, *Adhesive force of a single gecko foot-hair*, Nature, **405**, 681 (2000).
- [2] J. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1965).
- [3] *Johannes Diderik van der Waals - Biography*, <http://nobelprize.org/physics/laureates/1910/waals-bio.html>.
- [4] *Forças Intermoleculares* (2004), http://quark.qmc.ufsc.br/qmcweb/artigos/forcas_intermoleculares.html (Acessado em 2005).
- [5] F. London, *Theory and systematics of molecular forces*, Zeitschrift für Physik, **63**, 245 (1930), normalmente citado em conjunto com [6] para base da flutuação de dipolo induzindo seus vizinhos.
- [6] F. London, Trans. Faraday. Soc., **33N**, 8 (1937), normalmente citado em conjunto com [5].
- [7] J. E. Lennard-Jones, *Processes of adsorption and diffusion on solid surfaces*, Trans. Faraday Soc., **28**, 333 (1932), geralmente citado na explicação da interação entre átomo e superfície metálica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [8] E. A. Hinds e V. Sandoghdar, *Cavity QED level shifts of simple atoms*, Physical Review A, **43**, 398 (1991).
- [9] J. Wylie e J. Sipe, *Quantum electrodynamics near an interface*, Phys. Rev. A, **30**, 1185 (1984).
- [10] J. Wylie e J. Sipe, *Quantum electrodynamics near an interface. II*, Phys. Rev. A, **32**, 2030 (1985).
- [11] H. Failache, S. Saltiel, M. Fichet, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant van der Waals Repulsion between Excited Cs Atoms and Sapphire Surface*, Phys. Rev. Lett., **83**, 5467 (1999).
- [12] R. Grisenti, W. Schollkopf e J. Toennies, *Determination of Atom-Surface van der Waals Potentials from Transmission-Grating Diffraction Intensities*, Phys. Rev. Lett., **83**, 1755 (1999).
- [13] H. Failache, S. Saltiel, A. Fischer, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant Quenching of Gas-Phase Cs Atoms Induced by Surface Polaritons*, Phys. Rev. Lett., **88**, 243603 (2002).
- [14] E. Lima, M. Chevrollier, O. D. Lorenzo, P. Segundo e M. Oriá, *Long-Range atom-surface bound states*, Physical Review A, **62**, 013410 (2000).

Capítulo 2

Teoria da interação de longo alcance entre átomos e superfícies

Sumário

2.1	Introdução	12
2.2	Superfície como um espelho perfeito	14
2.2.1	Considerações gerais	14
2.2.2	Deslocamento dos níveis	19
2.2.3	Mudança do tempo de vida	24
2.3	Superfície dielétrica ideal	26
2.3.1	Considerações gerais	26
2.3.2	Meio dielétrico birrefringente	28
2.4	Superfície dielétrica dispersiva à temperatura nula	29
2.4.1	Estado fundamental	30
2.4.2	Estado excitado	33
2.5	Superfície dielétrica dispersiva à temperatura não-nula	35
2.5.1	Aparecimento do termo de absorção	37
2.5.2	A soma discreta no espectro da frequência	40
2.5.3	Exemplo de variação de C_3 com a temperatura	42
2.6	Conclusão	44

2.1 Introdução

O estudo das interações átomo-superfície é um ramo da física vasto por se relacionar com várias áreas dessa ciência, como a física de superfícies, a física atômica, a física molecular..., além de lidar com alguns resultados intrínsecos da mecânica quântica, como flutuações dos modos do vácuo, transições virtuais e reais.

A descrição completa da interação entre um átomo e uma superfície para um sistema real pode ser uma tarefa muito difícil. As principais dificuldades estão relacionadas à descrição de todos os aspectos físicos envolvidos, tanto da superfície quanto do átomo. Deseja-se obter um modelo que melhor descreva o sistema e que seja capaz de explicar e prever resultados de um experimento.

Nesta tese e particularmente neste capítulo introdutório aos estudos dessas interações, considera-se que as interações eletromagnéticas com um átomo sejam exclusivamente dipolares. Reduz-se com isso a descrição do átomo a um modelo de um dipolo atômico com todos os níveis eletrônicos do átomo. Nesse modelo, os números quânticos são levados em conta pela observância das regras de seleção e nos cálculos das probabilidades de transição. Considerar-se-á também que o átomo se encontra a distâncias muito maiores que o tamanho dos átomos constituintes da superfície, o que leva a chamar essa interação de *interação de longo alcance*.

O modelo para descrever a superfície deve-se conhecer as características físicas que modificam a interação, que são: a geometria da superfície, a sua resposta a campos eletromagnéticos e o seu estado físico (sólido ou líquido).

Na descrição da forma geométrica da superfície, observam-se duas características de uma superfície: planicidade e rugosidade. A distinção entre essas características é dada pela distância em que se observa a superfície, comparada com o tamanho da estrutura dos seus constituintes (átomo, molécula) da superfície ou do comprimento de onda das interações que se observa. Considera-se, por simplicidade e por ser uma boa aproximação, que a superfície seja perfeitamente plana e

2.1. INTRODUÇÃO

lisa.

Define-se uma superfície **plana** quando, em uma observação distante, pode-se aproximar a superfície por uma superfície plana ideal, isto é, pode-se considerar que ela não é curva e que não há efeitos de lente. Uma escala natural para medir a planicidade de uma superfície é o comprimento de onda da radiação interagindo com o sistema. Essa medida é relacionada à técnica de medi-la, através de padrões de interferência, dado fornecido pelo fabricante da superfície, quando for o caso. Por outro lado, define-se uma superfície **lisa** quando a dispersão média dos constituintes da superfície com relação a um plano é muito menor que o tamanho dos seus constituintes. Isso é possível de ser obtida, por exemplo, a clivagem em um plano de uma rede cristalina.

A respeito da composição da superfície, considera-se que esta seja um meio contínuo e sem defeitos ou singularidades. Entre os aspectos físicos, podem-se citar algumas características: líquido, sólido, vidro, cristal, condutor, semi-condutor, isolante, dielétrico. Entretanto, no caso em que a distância entre o átomo e a superfície é muito maior que as distâncias entre os constituintes da superfície, pode-se considerar que o efeito será dado não por apenas um constituinte mas por muitos constituintes. Fazendo-se médias estatísticas sobre esses constituintes encontram-se efeitos globais. Para os efeitos eletromagnéticos essas médias desempenham um papel fundamental na determinação da polarizabilidade da superfície.

Os efeitos da interação átomo-superfície são descritos na eletrodinâmica quântica de cavidades, já que é possível considerar o sistema átomo-superfície como um sistema de um átomo em uma meia cavidade ou, de maneira equivalente, próximo a um dos lados de uma cavidade de tamanho infinito. O resultado disso é que, dentro de uma cavidade, o átomo tem seus níveis eletrônicos modificados, tanto em energia como no tempo de vida. Heinzen et al. observaram em 1987 [1] a variação do tempo de vida de átomos dentro de uma cavidade confocal. Observou-se, mais

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

recentemente, no experimento de Kreuter *et al* [2], por exemplo, a dependência do tempo de vida de um estado excitado de um íon de Ca^+ em função da posição do átomo dentro de uma cavidade de alta *finesse*.

Neste capítulo, estuda-se alguns aspectos da superfície que modificam a interação de longo alcance de um sistema átomo-superfície. Os aspectos serão mostrados de forma evolutiva, em termos de conceitos e cálculos. Começa-se tratando o exemplo mais simples da interação átomo-superfície, que é a interação do átomo com uma superfície condutora ideal. Esse cálculo é generalizado na seção 2.3 para um sistema um pouco mais complexo, constituído de uma superfície dielétrica não-dispersiva. Na seção 2.4, mostra-se o caso da superfície dielétrica dispersiva como um caso ainda idealizado, a temperatura nula. E por fim, na seção 2.5, os cálculos são feitos para o caso mais geral de uma superfície dielétrica dispersiva à temperatura não nula.

2.2 Superfície como um espelho perfeito

2.2.1 Considerações gerais

Tanto os átomos como as superfícies são compostos de cargas positivas e negativas (prótons e elétrons). A interação eletromagnética entre esses dois sistemas de cargas, quando separados por distâncias grandes, pode ser descrita pela interação de Coulomb entre os diferentes momentos elétricos do desenvolvimento multipolar dessas distribuições de cargas: monopolo, dipolo, quadripolo... Esses momentos elétricos sofrem forças entre eles que diminuem com a distância. Assim, na interação entre sistemas de cargas a uma distância muito maior do que as dimensões características destes sistemas, as forças existente entre eles variam como uma potência do inverso da distância, descrito com termos de expoente superior a 2. Estas forças são habitualmente referidas como forças de longo alcance, em oposição

2.2. SUPERFÍCIE COMO UM ESPELHO PERFEITO

àquelas de curto alcance, existentes entre os sistemas de cargas próximos, onde as forças dependem bastante das distâncias entre os elementos constituintes de cada sistema.

As forças de longo alcance existem mesmo entre sistemas globalmente neutros. De fato, todo sistema de cargas é submetido às flutuações que polarizam instantaneamente o sistema, gerando os momentos de cargas flutuantes (dipolares, quadripolares...). A energia da interação entre dois sistemas neutros e sem momento de dipolo elétrico permanente é determinada, portanto, pela média da energia instantânea da interação entre seus momentos flutuantes, a qual é não-nula desde que estes momentos flutuantes não sejam completamente correlacionados.

As flutuações nos sistemas de cargas são de origem exclusivamente quânticas e obedecem a estatística de Bose-Einstein, resultando em distribuições de população dependente da energia $E(= \hbar\omega)$ e da temperatura T , como uma função de $\exp(-\frac{k_B T}{\hbar\omega})$, onde k_B é a constante de Boltzmann e onde ω é a frequência. Para o caso envolvendo átomos, essa dependência é importante quando se considera a diferença de energia dos níveis atômicos. Normalmente é considerado que a temperatura $T \ll \frac{\hbar\omega}{k_B}$ para as transições atômicas possíveis, ficando como hipótese $T \rightarrow 0$ ou temperatura nula. De maneira mas geral, entretanto, pode existir ao menos uma transição que não satisfaça essa condição. A hipótese de temperatura nula é a mais usual e será considerada nesta tese exceto quando especificado como na seção 2.5, onde será tratado o caso em que a temperatura é finita.

Como as partículas carregadas estão sempre acopladas ao campo eletromagnético, mesmo um átomo isolado se torna perturbado pelas flutuações quânticas dos modos eletromagnéticos do vácuo. Este acoplamento tem como conseqüências, no espaço livre, os fenômenos de emissão espontânea e de deslocamento de frequência (Lamb shift). Ao colocar-se um átomo em uma região do espaço onde os modos eletromagnéticos do vácuo estão fortemente modificados, como, por exemplo, em

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

uma cavidade, podem-se ver as propriedades radiativas do átomo substancialmente modificadas. A importância desses efeitos é estudada em uma área de pesquisa da física: a Eletrodinâmica Quântica em Cavidade.

Mais especificamente, para o problema tratado aqui, de um átomo próximo a uma parede, esse átomo está “acoplado” aos modos eletromagnéticos do vácuo que são modificados pela presença de uma superfície material que introduzirá uma modificação do tempo de vida (veja sub-seção 2.2.3) e um deslocamento dos níveis atômicos (subseção 2.2.2). Uma outra forma de descrever a interação átomo-cavidade consiste em atribuí-la a uma reação instantânea com o campo flutuante gerado pelo próprio átomo (auto-reação). Nesta segunda descrição, a origem física das flutuações encontra-se no dipolo atômico flutuante do próprio átomo e não é necessário considerar as flutuações quânticas do vácuo. Desta forma, para um átomo próximo de uma superfície, deve-se introduzir também as flutuações referentes ao campo eletromagnético flutuante gerado pelo átomo, as quais são refletidas pela superfície e às quais o átomo está acoplado [3].

A auto-reação pode ser identificada com um processo clássico a partir do momento em que se pode deixar de considerar os modos quânticos do vácuo. De fato, ela pode ser bem descrita classicamente substituindo o átomo por um dipolo clássico flutuante. A dualidade entre estas duas visões, flutuação do vácuo e auto-reação, “duas faces de uma mesma moeda”, foi estudada em [3], onde foram identificadas suas respectivas contribuições. O papel das flutuações do vácuo ou da auto-reação na descrição do deslocamento de um nível atômico por causa da interação do átomo com uma superfície têm a mesma importância e o efeito varia dependendo do regime desta interação ser instantâneo ou retardado, como será discutido a seguir.

2.2. SUPERFÍCIE COMO UM ESPELHO PERFEITO

REGIME DE INTERAÇÃO NÃO-RETARDADO

Diz-se que um regime de interação é não-retardado quando o átomo está a uma distância z da superfície tal que se pode desconsiderar o tempo de propagação de ida-e-volta da luz entre o átomo e a superfície, considerando o tempo característico τ das flutuações do dipolo atômico. Os tempos característicos das flutuações, τ_i , são determinados pelas diversas frequências de Bohr ω_i ($\tau_i = 2\pi/\omega_i$), associadas às transições entre o nível atômico considerado e os outros níveis. Para cada uma destas transições, a condição a ser verificada em um regime sem atraso é $2z/c \ll 2\pi/\omega_i$, o que implica em $z \ll \lambda_i$, onde λ_i é o comprimento de onda associado à frequência ω_i . Assim, está-se diante de um regime de interação não-retardado quando o átomo se encontra a uma distância da parede para a qual a condição $z \ll \lambda_i$ é verificada para todas as transições que tenham uma contribuição significativa para o dipolo atômico instantâneo.

Em um regime não-retardado, a interação é assim instantânea e os cálculos da Eletrodinâmica Quântica neste regime [3] mostram que a interação pode ser exclusivamente descrita pelo processo “clássico” da auto-reação. Desta maneira, neste regime, pode-se descrever a interação de um átomo com a superfície como a interação entre um dipolo clássico flutuante (negligenciando os momentos elétricos superiores do átomo) e a superfície. Neste caso, o potencial de interação é chamado de van der Waals (vdW) e o deslocamento de um nível atômico (fundamental ou excitado) varia como:

$$\delta_{f,e}^{\text{inst}} = \delta_{\text{vdW}} \propto \frac{1}{z^3}.$$

Esta dependência com z é determinada pela energia média da interação dipolo-dipolo, correspondente à interação entre o momento dipolar atômico flutuante e sua imagem elétrica instantânea na superfície (ver sub-seção 2.2.2).

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

REGIME DE INTERAÇÃO RETARDADO

A interação no regime retardado só pode ser explicada completamente se as contribuições da auto-reação e das flutuações do vácuo forem igualmente levadas em conta [3], i.e., suas respectivas contribuições na interação são estritamente idênticas.

No regime retardado, ao contrário do que ocorre com a interação de vdW, que varia em $1/z^3$ para todos os níveis, o deslocamento do nível atômico é diferente dependendo dele ser o estado fundamental ou um estado excitado [4]. O deslocamento do nível fundamental tem uma dependência com a distância z da parede: $\delta_f^{\text{ret}} \propto \frac{f(z)}{z^3}$ (potencial de Casimir & Polder [5] [4]), onde $f(z)$ é uma função monótona que varia de $f(0) = 1$ até $f(+\infty) = Cte/z$ e que leva em consideração a diminuição da energia devido aos efeitos do atraso. Assim, para $z \rightarrow \infty$, $\delta_f^{\text{ret}} \propto \frac{1}{z^4}$.

Partindo dos cálculos da referência [4] para um átomo de dois níveis perto de uma superfície condutora perfeita, o deslocamento do nível excitado no regime retardado é dado por:

$$\delta_e^r = -\frac{3\hbar}{4} \left[\frac{2\Gamma_{\perp} \sin(2kz)}{(2kz)^2} - \frac{\Gamma_{\parallel} \cos(2kz)}{2kz} \right]$$

e o deslocamento do nível fundamental é dado por:

$$\delta_f^r = -\frac{3\hbar}{\pi(kz)^4} [\Gamma_{\perp} + \Gamma_{\parallel}]$$

onde $\Gamma_{\perp}$ e $\Gamma_{\parallel}$ são as taxas de emissão espontânea do nível excitado para um momento dipolar perpendicular e paralelo à superfície, respectivamente, e $k = 2\pi/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda da transição entre os dois níveis. Observa-se que o alcance do efeito da interação no deslocamento no nível excitado pode ser maior que o alcance no nível fundamental, devido ao fator $\frac{1}{z}$ no nível excitado comparado ao fator $\frac{1}{z^4}$ no nível fundamental. Porém o efeito de maior distinção entre os dois estados é o termo oscilante amortizado no estado excitado. Perto da superfície, o

2.2. SUPERFÍCIE COMO UM ESPELHO PERFEITO

átomo interage com as flutuações do campo eletromagnético gerado pelo momento dipolar atômico flutuante que são refletidas pela superfície (auto-reação). Uma defasagem é introduzida na “emissão” do “dipolo atômico” flutuante, devido ao tempo de propagação de ida-e-volta da radiação do átomo até superfície. Assim, interferências neste mecanismo de auto polarização do átomo aparecem, resultando em um comportamento quase oscilatório no deslocamento do nível atômico excitado. Desta forma, este mesmo comportamento quase oscilatório pode ser previsto também para as taxas de emissão espontânea de um nível atômico. Isto é estudado em mais detalhes na seção 2.2.3.

Nesta tese, será tratado o caso do regime de interação instantâneo e serão desprezados os efeitos do atraso na propagação do campo eletromagnético. Nos capítulos 4 e 5, a técnica espectroscópica descrita e utilizada para estudar as interações átomo-superfície é a reflexão seletiva, que sonda átomos a distâncias z tais que $z \leq \frac{\lambda_i}{2\pi}$ para todas as transições de comprimento de onda λ_i , que contribuem para o dipolo atômico, justificando a aproximação de interação instantânea. No capítulo 7, os átomos adsorvidos no poço de potencial da superfície encontram-se a distâncias desta superfície significativamente inferiores às distâncias para as quais os efeitos de atraso devem ser levados em consideração.

2.2.2 Deslocamento dos níveis

DETERMINAÇÃO DO HAMILTONIANO DE van der Waals.

A energia de interação entre cargas e uma superfície perfeitamente condutora, ou seja, uma superfície equipotencial, pode ser calculada através do método das imagens elétricas. Nesse método, uma carga está localizada a uma distância $z_c > 0$ de uma superfície condutora, que compreende todo o plano $z = 0$ com o condutor ficando em $z \leq 0$. A polarização induzida no meio condutor pela carga gera,

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

na posição da carga, um campo elétrico equivalente ao que seria criado por uma carga (dita “imagem”) localizada em $z = -z_c$.

O meio condutor pode então ser substituído pelo sistema de cargas imagens. O sinal das cargas imagens é oposto ao das cargas reais. Na Figura 2.1, um

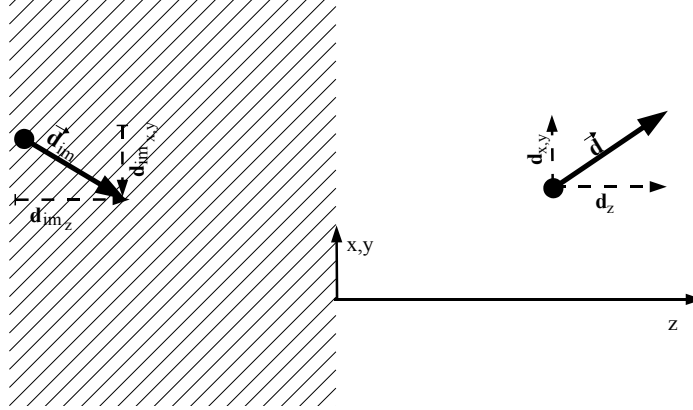


Figura 2.1: Modelização do sistema constituído de um dipolo elétrico próximo de uma superfície condutora ideal, segundo a teoria de imagens elétricas.

dipolo, que é composto de duas cargas iguais de sinais opostos separadas por uma distância d , a uma distância z da superfície, induz o equivalente a um dipolo dentro da superfície na posição $-z$ ($z \gg d$).

Para calcular a energia de interação de vdW entre um átomo e uma superfície condutora perfeita, considera-se o sistema clássico análogo constituído pelo desenvolvimento multipolar do sistema de cargas flutuantes que constituem o átomo e sua imagem elétrica. Como se considera um átomo neutro (portanto, com carga total nula), o primeiro termo não-nulo na expressão da energia de interação eletrostática corresponde à energia do momento dipolar instantâneo [6] do átomo no campo do dipolo imagem¹:

$$E_D = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}_{im} - 3\mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_z \mathbf{d}_{im} \cdot \mathbf{e}_z}{(2z)^3} \quad (2.1)$$

¹Sistema de unidades gaussiano

2.2. SUPERFÍCIE COMO UM ESPELHO PERFEITO

onde $\mathbf{d}$ é o momento dipolar elétrico instantâneo do átomo, $\mathbf{d}_{im}$ é o da sua imagem, $\mathbf{e}_z$ é um vetor unitário perpendicular à superfície e $2z$ é a distância entre o átomo e sua imagem elétrica. Devido à distância do átomo até a superfície ser muito maior do que as dimensões atômicas, pode-se desconsiderar os termos quadrupolares e os termos correspondendo aos momentos elétricos superiores no desenvolvimento multipolar do átomo. A energia da interação eletrostática instantânea se reduz então àquela da interação dipolo-dipolo, E_D .

Para calcular (2.1), deve-se encontrar a expressão para o dipolo $\mathbf{d}_{im}$. Como a superfície é perfeitamente condutora, constituindo então um espelho ideal, encontra-se para $\mathbf{d}_{im}$ (Figura 2.1):

$$\begin{aligned}\mathbf{d}_{im} &= (\mathbf{d}_{im} \cdot \mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z + (\mathbf{d}_{im} \cdot \hat{r})\hat{r} \\ &= d_{im,z}\mathbf{e}_z + d_{im,r}\hat{r} \\ &= (d_z)\mathbf{e}_z - (d_r)\hat{r},\end{aligned}\tag{2.2}$$

onde $\hat{r}$ é um vetor unitário de coordenadas polares no plano paralelo à superfície e $\mathbf{d}_z$ e $\mathbf{d}_r$ são as componentes de $\mathbf{d}$ segundo $(\mathbf{e}_z, \hat{r})$. Então, a partir de (2.2), as componentes flutuantes $\mathbf{d}_{im} \cdot \hat{z}$ e $\mathbf{d} \cdot \hat{z}$ são perfeitamente correlatas, ao mesmo tempo em que $\mathbf{d}_{im} \cdot \hat{r}$ e $\mathbf{d} \cdot \hat{r}$ são perfeitamente anti-correlatas. Dessa forma, avaliando (2.1), tem-se:

$$E = \frac{-\mathbf{d}_r^2 - 2\mathbf{d}_z^2}{16z^3} = -\frac{\mathbf{d}^2 + \mathbf{d}_z^2}{16z^3}.\tag{2.3}$$

Seguindo o princípio de correspondência, o Hamiltoniano da interação átomo-superfície ou Hamiltoniano de vdW deve ter a forma:

$$H_{vdW} = -\frac{\mathbf{D}^2 + \mathbf{D}_z^2}{16z^3},\tag{2.4}$$

onde $\mathbf{D}$ é o operador de momento dipolar elétrico instantâneo do átomo e $\mathbf{D}_z$, sua componente na direção z .

Desta forma, o deslocamento do nível atômico considerado ($|\alpha\rangle$) tem a

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

expressão:

$$E_{vdW} = \left\langle \alpha \left| -\frac{\mathbf{D}^2 + \mathbf{D}_z^2}{16z^3} \right| \alpha \right\rangle = \frac{-\langle \alpha | \mathbf{D}^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \mathbf{D}_z^2 | \alpha \rangle}{16z^3}. \quad (2.5)$$

Nota-se que o valor médio $\langle \alpha | \mathbf{D} | \alpha \rangle$ do operador flutuante $\mathbf{D}$ é sempre nulo em todos os estados atômicos, mas que o valor médio $\langle \alpha | \mathbf{D}^2 | \alpha \rangle$, correspondente à dispersão dos valores do dipolo atômico, não é nulo. Como se tem sempre que $\langle \alpha | \mathbf{D}^2 | \alpha \rangle \geq 0$ e $\langle \alpha | \mathbf{D}_z^2 | \alpha \rangle \geq 0$, a partir de (2.5), o átomo é necessariamente atraído pela sua imagem na parede. Na seção 2.4, a presença de uma superfície dielétrica dispersiva modifica a intensidade da interação podendo até modificar o sinal [7], o que torna a interação de van der Waals uma interação repulsiva.

PROPRIEDADES DA INTERAÇÃO DE VAN DER WAALS.

A interação de vdW entre um átomo e uma superfície varia em função da distância z à parede, como $1/z^3$.

A presença de uma superfície plana impõe para o sistema físico uma simetria cilíndrica que se traduz no Hamiltoniano H_{vdW} pela dependência de $\mathbf{D}^2 + \mathbf{D}_z^2$. Se, numa primeira aproximação, supõe-se um sistema simétrico para o átomo (ou seja, $\mathbf{D}_x = \mathbf{D}_y = \mathbf{D}_z$, onde $\mathbf{D}_x$, $\mathbf{D}_y$, $\mathbf{D}_z$ são as componentes de $\mathbf{D}$ em coordenadas cartesianas), o Hamiltoniano (2.4) toma a forma:

$$H_{vdW} \approx -\frac{\mathbf{D}^2}{12z^3}. \quad (2.6)$$

O deslocamento de um nível $|\alpha\rangle$ qualquer (nível fundamental ou excitado) a partir de (2.6) exprime-se:

$$\delta E_\alpha = -\frac{1}{12z^3} \langle \alpha | \mathbf{D}^2 | \alpha \rangle. \quad (2.7)$$

Introduzindo a identidade na parte do dipolo quadrado, $\mathbf{D}^2 = \mathbf{D}\mathbf{D} = \mathbf{D}/\mathbf{D}$,

2.2. SUPERFÍCIE COMO UM ESPELHO PERFEITO

e utilizando a relação de fechamento $I = \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta|$, a equação (2.7) se torna:

$$\delta E_{\alpha} = -\frac{1}{12z^3} \sum_{\beta} |\langle\alpha|\mathbf{D}|\beta\rangle|^2. \quad (2.8)$$

Observa-se que para calcular o deslocamento do nível $|\alpha\rangle$ é preciso então conhecer o seu acoplamento com todos os outros níveis do átomo. De fato, o deslocamento é dado pela contribuição positiva de todas as transições dipolares possíveis partindo do nível $|\alpha\rangle$. O termo $|\langle\alpha|\mathbf{D}|\beta\rangle|^2$ depende do comprimento de onda (λ^3) e da taxa de emissão espontânea $\Gamma_{\alpha\rightarrow\beta}$ da transição $|\alpha\rangle\rightarrow|\beta\rangle$ para $E_{\alpha} > E_{\beta}$ (ou $\Gamma_{\beta\rightarrow\alpha}$ de $|\beta\rangle\rightarrow|\alpha\rangle$ para $E_{\beta} > E_{\alpha}$).

Esse valor é calculado no Apêndice B para o nível $8P_{3/2}$ do césio a partir dos valores de λ^3 e $\Gamma_{e\rightarrow f}$. Devido à dependência em λ^3 , os acoplamentos do tipo infravermelho e principalmente os do tipo infravermelho distante são dominantes, por outro lado os acoplamentos do tipo ultravioleta têm taxas de emissão maiores. É verificado, entretanto, que em alguns casos são as transições infravermelho distantes que dominam [8, 9].

Anisotropia do Hamiltoniano de vdW As componentes cartesianas (x, y, z) do dipolo na equação (2.6) foram consideradas idênticas ($D_x^2 = D_y^2 = D_z^2$). Mas no caso mais geral, as componentes não são iguais, como será estudado na sub-seção 2.3.2 com um meio dielétrico birrefringente. Além do mais, como já foi mencionado, o Hamiltoniano de vdW (2.4) que é $\propto (\mathbf{D}^2 + \mathbf{D}_z^2)$ depende explicitamente da componente do dipolo atômico flutuante normal à superfície ($\mathbf{D}_z$). Essa diferença de contribuição em uma das componentes representa uma anisotropia espacial, em que as diferentes direções do espaço não são mais equivalentes para as propriedades atômicas.

Para o átomo, essa anisotropia faz com que a interação seja diferente para cada nível atômico. A principal diferença se dá na orientação do dipolo atômico

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

flutuante, associado aos diferentes níveis atômicos Zeeman $|F, M_F\rangle$.

Uma segunda diferença qualitativa a levar em consideração está relacionada às transições dipolares proibidas $|F\rangle \rightarrow |F' = F \pm 2\rangle$, mas que são permitidas pela parte quadrupolar do H_{vdW} . Essa parte quadrupolar torna-se relevante quando a separação entre os níveis $|F' = F\rangle$ e $|F' = F \pm 2\rangle$ é pequena. É então possível observar estas “transições proibidas” perto da superfície, na posição onde o deslocamento de vdW faz igualar a frequência da transição $|F\rangle \rightarrow |F' = F \pm 2\rangle$ com a da transição $|F\rangle \rightarrow |F' = F, F + 1\rangle$ no espaço livre. A dificuldade de realizar estas observações é proveniente do fato que estas “transições proibidas” são prováveis apenas muito perto da superfície onde existe um alargamento inhomogêneo devido ao potencial vdW. Boustimi *et al.* [10] em 2001 conseguiram observar esse acoplamento via deflexão de um feixe de átomos meta-estáveis passando muito próximo de uma ponta dielétrica.

As experiências específicas realizadas sobre o nível atômico ($6P_{3/2}$) do Cs [11] não conseguiram pôr em evidência os efeitos da anisotropia do Hamiltoniano de vdW. Isto se explica pelo fato que, quantitativamente, a diferença entre o potencial de vdW anisotrópico e o da aproximação isotrópica é 5% nestas experiências, enquanto que a sensibilidade na medição do potencial era da ordem de 20%. No capítulo 4, descreve-se uma técnica em que foi possível medir a interação no nível ($6P_{3/2}$) do Cs com um erro da ordem de 10%. Supondo que a diferença entre o potencial anisotrópico e o potencial isotrópico seja a mesma, ainda não seria possível observá-la.

2.2.3 Mudança do tempo de vida

O tempo de vida de um nível atômico é determinado pela probabilidade do átomo emitir um fóton de forma irreversível. Essa emissão não deve acontecer para um estado único ou para um conjunto discreto de estados, caso em que ocorre

2.2. SUPERFÍCIE COMO UM ESPELHO PERFEITO

uma troca oscilante da excitação entre o estado emissor e esses estados discretos. A emissão acontece para um contínuo de estados, o que implica num processo de caráter irreversível e que determina, portanto, a desexcitação do nível atômico considerado. No caso de um átomo isolado no vácuo, o tempo de vida finito dos níveis excitados é devido ao acoplamento com o contínuo dos modos eletromagnéticos do vácuo. Assim, uma mudança na estrutura deste contínuo, como, por exemplo, uma modificação da densidade dos modos ou mesmo a supressão de certos modos, tem, em geral, como consequência uma modificação do tempo de vida dos níveis atômicos. Experiências notáveis da Eletrodinâmica Quântica em Cavidade tiveram êxito ao inibir a emissão espontânea de um nível atômico utilizando cavidades óticas que não têm modos onde o átomo possa decair [12]. A proximidade de uma superfície, que pode ser considerada como uma semi-cavidade ou uma cavidade aberta, também pode modificar a taxa de emissão espontânea de átomos.

Tratamento clássico do problema.

O estudo da influência da mudança dos modos do vácuo sobre a taxa de emissão espontânea pode ser realizado com a ajuda da Eletrodinâmica Quântica ou Clássica.² De fato, mesmo se a troca de energia de um elétron do átomo com os modos eletromagnéticos do vácuo é um processo que é tratado integralmente de forma consistente apenas por uma descrição quântica, resultados análogos para a taxa de troca de energia são obtidos para um dipolo clássico oscilante próximo a uma superfície [3]. De fato, demonstrou-se [13] que, para a taxa de emissão espontânea de um nível atômico, as flutuações “clássicas” têm um papel tão importante quanto as flutuações quânticas (auto-reação). Assim o tratamento clássico prediz uma taxa de emissão espontânea duas vezes menor que a prevista pela eletrodinâmica quântica.

²Nessa discussão considera-se razoável que as modificações do tempo de vida dos níveis atômicos, pela deslocamento dos níveis devido a interação de vdW, sejam desprezíveis.

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

tica. Concluindo, um fator 2 deve ser incluído para levar em conta as flutuações quânticas no tratamento clássico.

A potência L emitida pelo dipolo é diretamente ligada à taxa de emissão espontânea Γ através da expressão:

$$L = \hbar\omega\Gamma. \quad (2.9)$$

Assim, pode-se determinar a influência de uma superfície na taxa de emissão espontânea calculando classicamente a potência emitida por um dipolo oscilante próximo a uma superfície.

Prefere-se freqüentemente realizar uma análise clássica do problema, principalmente porque as imagens físicas tornam mais fácil a compreensão.

De fato, os cálculos apresentados nos próximos capítulos são feitos considerando que o tempo de vida do átomo não é modificado com a posição. Essa aproximação é justificada pelo fato de que as superfícies estudadas, sendo dielétricas e portanto parcialmente refletoras, modificam pouco as condições de contorno para os modos do vácuo.

2.3 Superfície dielétrica ideal

2.3.1 Considerações gerais

Pode-se considerar um dielétrico ideal aquele que tem um coeficiente dielétrico constante com a frequência. A substituição do meio condutor ideal por um dielétrico ideal introduz no nosso modelo de cálculo baseado na teoria das imagens elétricas uma mudança para o momento dipolar da imagem $\mathbf{d}_{im}$. De fato, seguindo a teoria clássica da imagem eletrostática, aplicada aqui a um meio de constante dielétrica ϵ , o dipolo $\mathbf{d}_{im}$ da equação (2.2) e da Figura 2.1 deve ser simplesmente

2.3. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA IDEAL

substituído, da teoria das imagens elétricas por:

$$\mathbf{d}_{im}(\epsilon) = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} (\mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_z - \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_r) \quad (2.10)$$

e assim a expressão para H_{vdW} torna-se:

$$H_{vdW} = -\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \frac{\mathbf{D}^2 + \mathbf{D}_z^2}{16z^3}. \quad (2.11)$$

De forma semelhante, a expressão (2.5) para o deslocamento de um nível $|\alpha\rangle$ torna-se:

$$\delta E_\alpha = -\frac{1}{16z^3} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \sum_{\beta} \left(|\langle \alpha | \mathbf{D}_x | \beta \rangle|^2 + |\langle \alpha | \mathbf{D}_y | \beta \rangle|^2 + 2 |\langle \alpha | \mathbf{D}_z | \beta \rangle|^2 \right) \quad (2.12)$$

e ao se desconsiderar a anisotropia do potencial vdW, isto é, considerando $\mathbf{D}_x = \mathbf{D}_y = \mathbf{D}_z$:

$$\delta E_\alpha = -\frac{1}{12z^3} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \sum_{\beta} \left(|\langle \alpha | \mathbf{D} | \beta \rangle|^2 \right). \quad (2.13)$$

Como visto anteriormente, o deslocamento $|\alpha\rangle$ é então determinado por um somatório sobre todos os níveis $|\beta\rangle$ que são ligados à $|\alpha\rangle$ por uma transição dipolar elétrica.

A fórmula (2.11) é obtida a partir de uma aproximação eletrostática e inclui a hipótese de um meio dielétrico não-dispersivo, ou seja, de uma constante dielétrica ϵ independente da frequência. De fato, para um dielétrico real, a constante dielétrica ϵ depende sempre da frequência devido à dispersão e às ressonâncias do meio. Mas se todas as transições dipolares que têm uma contribuição importante para o cálculo de $\sum_{\beta} \langle \alpha | \mathbf{D} | \beta \rangle$ são concentradas em uma região espectral onde ϵ não apresenta ressonâncias, se pode aplicar a expressão (2.11) dando a ϵ seu valor típico no domínio de frequência considerado. O tamanho dessa faixa de frequências para considerar ϵ constante depende inversamente do tempo das flutuações do dipolo atômico, ligado aos tempos característicos do sistema, como frequência de

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

Rabi e tempo de decaimento. O problema mais complexo de um dielétrico dispersivo sobre uma faixa de frequências coincidindo com as frequências das flutuações do dipolo atômico é tratado na seção 2.4.

2.3.2 Meio dielétrico birrefringente

A anisotropia introduzida no sistema físico por um meio dielétrico birrefringente quebra em geral a simetria cilíndrica que este sistema possui, e torna mais difícil o tratamento do problema. Contudo, para um meio uniaxial tendo seu eixo ótico perpendicular à superfície, a simetria cilíndrica é preservada e o problema aceita um tratamento com a teoria de imagens elétricas. De fato, um cálculo relativamente simples de eletrostática mostra que se pode definir a imagem elétrica de um dipolo $\mathbf{d}$, a uma distância z da superfície de um dado meio birrefringente por uma expressão análoga à (2.10):

$$\mathbf{d}_{im} = \frac{\epsilon_{eq} - 1}{\epsilon_{eq} + 1} (\mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_z - \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_r) \quad (2.14)$$

onde ϵ_{eq} é uma permissividade equivalente que define o coeficiente da imagem dielétrica e que é calculada a partir das permissividades ordinária ϵ_o e extraordinária ϵ_e de um meio de acordo com a expressão $\epsilon_{eq} = \sqrt{(\epsilon_e \epsilon_o)}$, onde o dipolo imagem se situa na posição $-z$, simétrico do dipolo real com relação à superfície (análogo à Figura 2.1).

Assim, o hamiltoniano de vdW para a interação de um átomo com um dielétrico birrefringente que apresenta seu eixo ótico perpendicular à superfície é dado pela expressão (2.11), onde o coeficiente da imagem dielétrica $\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}$ deve ser substituído por $\frac{\epsilon_{eq}-1}{\epsilon_{eq}+1}$.

O caso de um meio birrefringente onde o eixo ótico apresenta uma orientação qualquer é mais difícil de tratar. Para a situação habitual onde $|\epsilon_e - \epsilon_o| \ll 1$ e enquanto o dielétrico é não-dispersivo (no sentido geral desenvolvido acima), a

2.4. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NULA

birrefringência não representa uma modificação quantitativamente importante para o potencial de vdW.

No artigo de Gorza *et al.* [14] é mostrado que o efeito de birrefringência é importante quando ressonâncias do sólido ocorrem próximo às frequências atômicas. Isto é, a superfície tem que, além de birrefringente, ser dispersiva. Nos sistemas estudados nesta tese o efeito de birrefringência é nulo, já que na superfície não há birrefringência em torno de nenhuma das possíveis frequências de transição, partindo ou chegando ao nível estudado.

2.4 Superfície dielétrica dispersiva à temperatura nula

Para se explicar a interação de van der Waals utilizando um modelo mais elaborado do que o que vem sendo utilizado nas seções anteriores, deve-se considerar que a polarizabilidade ϵ da superfície não é mais uma constante, mas depende da frequência, isto é, $\epsilon = \epsilon(\omega)$: a superfície será tratada como uma *superfície dielétrica dispersiva*. Existem inúmeros trabalhos em que se estuda a resposta dielétrica de superfícies em função da frequência, por exemplo, as referências [15–17] determinam explicitamente a polarizabilidade ϵ para algumas superfícies dielétricas e a referência [18] fornece, para vários materiais, fórmulas para o índice de refração em função da frequência. A respeito da interação de van der Waals entre um átomo e uma superfície dielétrica dispersiva, encontram-se alguns trabalhos, como por exemplo, as referências [19–21], que restringem os efeitos à temperatura nula ($T = 0$ K). Um trabalho recente de Failache *et al* [7] demonstra experimentalmente uma interação de van der Waals repulsiva por causa dessas propriedades dispersivas da superfície de safira.

Nessa seção, o problema será tratado de forma semelhante aos artigos de

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

Fichet *et al* [19] e Wylie e Sipe [20,21]. A interação varia dependendo do estado em que se encontra o átomo. Mostrar-se-á na sub-seção seguinte o caso para o estado fundamental, e na sub-seção 2.4.2 as expressões para o caso do estado excitado.

2.4.1 Estado fundamental

A resposta geral de um átomo no estado fundamental interagindo com uma superfície foi estudada nos anos 60 [22–24]. Segue-se uma apresentação dessa interação.

Um campo oscilante devido à presença de um dipolo $\mathbf{d}(\omega)$ na posição $\mathbf{r}_0$, equivalente ao átomo próximo à superfície, induz uma polarização na superfície que resulta no campo $\mathbf{E}$ na posição $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}) = \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; \omega) \cdot \mathbf{d}(\omega), \quad (2.15)$$

onde $\overset{\leftrightarrow}{G}$ é o tensor polarizabilidade devido ao dipolo na posição $\mathbf{r}_0$. Esse tensor calculado no mesmo ponto $\mathbf{r}_0$ em que se encontra o dipolo tem a forma [21]:

$$G_{xx}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega) = G_{yy}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega) \quad (2.16)$$

$$= \frac{1}{(8z)^3} \frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 1} \quad (2.17)$$

$$G_{zz}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega) = 2G_{xx}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega) \quad (2.18)$$

$$G_{ij} = 0, i \neq j, \quad (2.19)$$

onde ϵ é a constante dielétrica da superfície.

Da mesma forma, um sistema de cargas elétricas, equivalente a um átomo no nível atômico a , é polarizado na presença de um campo elétrico oscilante, formando um dipolo $\mathbf{D}$:

$$\mathbf{D}(\omega) = \overset{\leftrightarrow}{\alpha}^a(\omega) \cdot \mathbf{E}(\omega), \quad (2.20)$$

onde $\overset{\leftrightarrow}{\alpha}^a$ é o tensor polarizabilidade do átomo no nível atômico a . No sistema atômico, e simplificando para o caso linear e isotrópico, *i.e.* $\alpha_{ij}^a = \alpha^a$, o tensor pode ser

2.4. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NULA

descrito como um funcional e o produto tensorial da equação (2.20) é simplificado por um simples produto:

$$\mathbf{D}(\omega) = \alpha^a(\omega) \mathbf{E}(\omega). \quad (2.21)$$

A polarizabilidade para um nível a tem a expressão bem conhecida [20]:

$$\alpha^a(t) = \frac{i}{\hbar} \langle a | [\mu(t), \mu(0)] | a \rangle \Theta(t), \quad (2.22)$$

onde $\Theta(t)$ é a função degrau, que limita o efeito de polarização aos efeitos futuros. Pode-se reescrever esta equação no espaço das frequências [19] já introduzindo a relação de fechamento $I = \sum_n |n\rangle\langle n|$:

$$\alpha^a(\omega) = \frac{2}{\hbar} \sum_n |\mu^{an}|^2 \frac{\omega_{an}}{\omega_{an}^2 - \omega^2}, \quad (2.23)$$

onde $\omega_{an} = (E_n - E_a)/\hbar$ é a frequência da transição $a \rightarrow n$ e $\mu^{an} = \langle a | \mu | n \rangle$ é o momento de dipolo dessa transição.

No regime não-retardado, o efeito final no deslocamento do nível fundamental g devido à interação do átomo com a superfície dispersiva é dado por uma espécie de “convolução” da resposta do átomo e da resposta da superfície [20] que resulta na integral sobre o eixo de frequência imaginária:

$$\delta E_g = -\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty d\xi G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; i\xi) \alpha_{ij}^g(i\xi), \quad (2.24)$$

onde os índices i, j representam as componentes das coordenadas cartesianas e a soma sobre esses índices está implícita.

Reorganizando a equação e substituindo as equações (2.16) e (2.23) para a obtenção de uma forma semelhante à equação (2.13):

$$\delta E_g = -\frac{1}{12z^3} \sum_n |\mu^{gn}|^2 r(\omega_{gn}), \quad (2.25)$$

onde na equação foi introduzido o coeficiente de “reflexão dielétrica” dependente da frequência:

$$r(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon(iu) - 1}{\varepsilon(iu) + 1} \right) \frac{\omega}{\omega^2 + u^2} du. \quad (2.26)$$

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

Para o caso de coeficiente constante, $\epsilon(\omega) = \epsilon_s$, a equação (2.25) se reduz à equação (2.13) e no caso de um espelho perfeito, $r(\omega) = 1$.

O coeficiente ϵ em função de uma frequência imaginária, sem sentido físico, é obtido no artigo de Fichet *et al* [19] a partir de um modelo usual utilizado para a obtenção do coeficiente dielétrico baseado na descrição das ressonâncias do material:

$$\epsilon(iu) = 1 + C + \sum_n \frac{f_n \omega_n^2}{\omega_n^2 + u^2 + \gamma_n u}, \quad (2.27)$$

onde C é uma constante, ω_n , f_n e γ_n são a frequência, a força de oscilador e a largura da n -ésima ressonância, respectivamente, que são constantes dos materiais. Os valores desses coeficientes são dados em vários trabalhos para diversos materiais, por exemplo, nas referências [15–17].

O coeficiente de reflexão $r(\omega)$ é limitado, $0 < r(\omega) < 1$ e monotamente decrescente em função da frequência. Os limites superior e inferior dependem do material e são dados por

$$\begin{cases} r(\omega = 0) = \frac{\epsilon(0)-1}{\epsilon(0)+1} & \text{limite superior} \\ r(\omega \rightarrow \infty) \rightarrow 0 & \text{limite inferior} \end{cases}. \quad (2.28)$$

Os limites são relacionados aos valores que ϵ pode ter. Um campo oscilante em altas frequências faz com que a constante dielétrica ϵ tenda a unidade porque a superfície não consegue gerar nenhuma polarização. O resultado é a anulação do coeficiente de reflexão. Para o limite superior tem-se o caso estático $\epsilon(0) = \epsilon_{\text{estático}}$, cujo valor é superior a 1.

Na próxima sub-seção, a forma do coeficiente r é modificada de acordo com o estado do átomo, com a introdução de um termo ligado a emissões virtuais. Essa modificação resulta na modificação dos limites para o coeficiente de reflexão.

2.4. SUPERFÍCIE DIELETRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NULA

2.4.2 Estado excitado

Na seção anterior, o átomo se encontrava no estado fundamental, sendo restrito a apenas um tipo de transição. Isso aparece no somatório da equação (2.25), onde todas as transições $g \rightarrow n$ são do tipo absorção virtual.

Para o átomo excitado, os dois tipos de transição virtual (absorção e emissão) são envolvidos. Isso implica em alguma modificação nas deduções da equação (2.25). Essa diferença aparece a partir da equação (2.14) da referência [21]:

$$\delta E_a = -\frac{1}{\pi} P \left[\sum_n \mu_i^{an} \mu_j^{na} \int_0^\infty d\omega \frac{\text{Im} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega)}{\omega + \omega_{na}} \right], \quad (2.29)$$

onde i e j são as componentes cartesianas e a soma está implícita. P significa a parte principal e possui a seguinte propriedade:

$$P \left[\frac{1}{x} \right] = \frac{1}{x + i\eta} + i\pi\delta(x), \quad (2.30)$$

onde $\eta \rightarrow 0^+$. No caso da seção anterior em que o átomo se encontrava no estado fundamental, $\omega_{na} > 0$ e por consequência $\omega_{na} + \omega > 0$. A equação (2.29) fica então com apenas um termo e pode ser escrita na forma da equação (2.24) da seção anterior.

Para o caso excitado, entretanto, existe pelo menos um estado n tal que $E_n < E_a$, i. e. $\omega_{na} < 0$, levando à divergência da integral, devendo-se, então, utilizar da fórmula (2.30) na equação (2.29):

$$\delta E_a = -\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty d\xi G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; i\xi) \alpha_{ij}^a(i\xi) + \sum_n \mu_i^{an} \mu_j^{na} \text{Re} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega_{na}) \Theta(\omega_{an}), \quad (2.31)$$

onde Θ é a função de Heaviside (ou função degrau) e faz com que o termo só esteja presente nas transições do tipo emissão, isto é $E_n > E_a$.

Uma interpretação para esses dois termos da equação é dada por Wylie e Sipe na referência [21], na qual o 1º termo é associado a forças induzidas pelas

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

flutuações quânticas, enquanto que o 2º termo é associado com processos de emissão virtual e tem como análogo quântico um dipolo clássico oscilante interagindo com uma superfície. Uma comparação do átomo com uma antena clássica (dipolo clássico oscilante) é feita no artigo de Hinds e Sandoghdar [4].

Para obter uma forma semelhante à equação (2.25) explicitam-se e agrupam-se os termos de dipolo:

$$\delta E_a = -\frac{1}{12z^3} \sum_n |\mu^{an}|^2 r(\omega_{an}), \quad (2.32)$$

onde $r(\omega)$ apresenta duas formas, de acordo com o sinal de ω :

$$r = \begin{cases} r_f(\omega) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\epsilon(iu)-1}{\epsilon(iu)+1} \frac{\omega}{\omega^2+u^2} du & \text{para } \omega > 0 \text{ (absorção)} \\ r_e(\omega) &= -r_f(-\omega) + 2\text{Re} \frac{\epsilon(|\omega|)-1}{\epsilon(|\omega|)+1} & \text{para } \omega < 0 \text{ (emissão)} \end{cases}, \quad (2.33)$$

onde os índices f e e servem para distinguir se a transição é do tipo absorção ou emissão, respectivamente.

Para o átomo no estado fundamental tem-se que $r \leq 1$ e que o limite superior, $r = 1$, ocorre quando a superfície é metálica (espelho perfeito). Por outro lado, para o átomo no estado excitado, o valor de r pode ser “qualquer”, não tendo limite, podendo até ser negativo.

Podem ser encontrados, no artigo de Fichet *et al* [19] e no apêndice B, exemplos numéricos da interação ressonante do átomo de césio com uma superfície de safira. Os valores de $r(\omega)$ variam de -11 até 20 , para as transições do tipo emissão. No artigo de Failache *et al* [7], é descrito um experimento de reflexão seletiva em uma superfície de safira, ressonante com uma transição dos átomos de césio, em que se demonstra experimentalmente o termo r negativo, tornando a interação de van der Waals, normalmente atrativa, em uma interação repulsiva.

2.5 Superfície dielétrica dispersiva a temperatura não-nula

Nesta seção, serão estudados os efeitos da temperatura do sistema na interação átomo-superfície [25]. Entre os efeitos térmicos tem-se: as propriedades do dielétrico, a população de fótons e a do nível atômico. Para a primeira, será considerado que o coeficiente ϵ é constante ou varia suavemente com a temperatura. Continuam sendo válidas as considerações sobre a forma geométrica. Os efeitos térmicos ficarão restritos às distribuições das populações.

Na condição de equilíbrio térmico, a distribuição de população de um sistema nos estados com energia E é dada pela mecânica estatística, de acordo com a natureza fermiônica ou bosônica, das partículas, e se exprimem como função de $\exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$. É esse tipo de termo que aparecerá nas equações de deslocamento de energia.

A modificação da distribuição no sistema atômico devido à temperatura pode ser desprezada quando a diferença de energia entre o nível fundamental e qualquer um dos níveis excitado for muito maior que $k_B T$. Isso ocorre em muitos sistemas atômicos, por exemplo, no césio, onde a diferença de energia entre o nível fundamental e o nível primeiro excitado ($6S_{1/2} \rightarrow 6P_{1/2}$) é de ≈ 1.40 eV, que tem o equivalente em temperatura $T \approx 16.800$ K, dado pela relação de energia da transição com a energia da temperatura: $E_{6S_{1/2} \rightarrow 6P_{1/2}} = \hbar\omega = k_B T$.

Outros níveis mais excitados podem ser acessíveis via algum sistema de bombeio. Nesse caso, deve-se verificar se há transições atômicas com energias próximas a $k_B T$ para se levar em conta um possível efeito de redistribuição térmica. No caso em que $k_B T$ é da ordem da separação dos níveis, por exemplo, na transição $8P_{3/2} \rightarrow 7D_{5/2}$ ou $8P_{3/2} \rightarrow 7D_{3/2}$ do césio, é preciso se comparar os tempos de transição envolvidos, ou seja, comparar o tempo de transição devido à radiação

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

térmica com os tempos de bombeio e decaimento. Em alguns experimentos, como o de reflexão seletiva [7] utilizado para a medição do coeficiente de van der Waals, pode-se desconsiderar as redistribuições térmicas quando comparado com os tempos das coerências óticas e da sondagem.

Para a superfície em temperaturas diferentes de zero, pode-se considerar os modos de vibração com respostas quase contínuas em energia [26]. Dessa forma, é possível haver modos de vibração excitados para temperaturas $T > 0$ K. A contribuição da temperatura aparece de forma explícita nos trabalhos de Wylie e Sipe [20,21], onde o equilíbrio térmico da radiação e das excitações de superfície já está incluído no tratamento. Mas para o estudo de alguns efeitos da interação de van der Waals, é utilizada a temperatura tendendo a zero, justificada principalmente pela consideração que o sistema atômico possui energias muito maiores do que a energia térmica $k_B T$. Partindo da equação com termo explícito em temperatura [21]:

$$\delta E_a = -\frac{1}{\pi} P \left[\sum_n \mu_i^{an} \mu_j^{na} \int_0^\infty d\omega \frac{\text{Im} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega)}{(1 - e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}})(\omega + \omega_{na})} \right], \quad (2.34)$$

obtem-se após alguma álgebra, semelhante à da seção anterior:

$$\begin{aligned} \delta E_a = & -\sum_n \mu_i^{an} \mu_j^{na} \text{Re} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega_{na}) \left(\frac{1}{1 - e^{\frac{\hbar\omega_{na}}{k_B T}}} \right) \\ & - k_B T \sum_{k=0}^{\infty} ' G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; i\varepsilon_k) \alpha_{ij}^a(i\varepsilon_k), \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde no somatório no segundo termo, contendo uma linha, é colocado o fator $1/2$ para $k = 0$ e $\varepsilon_k = \frac{2k\pi k_B T}{\hbar}$ é a k -ésima frequência de Matsubara associada à temperatura T .

O efeito da temperatura pode ser observado comparando-se a equação (2.35) com a expressão para uma temperatura nula nas equações (2.32) e (2.33). Em primeiro lugar, deve-se observar se as equações são equivalentes no limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$).

2.5. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NÃO-NULA

Comparando-se o segundo termo da soma da equação (2.35) no limite $T \rightarrow 0$:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left[k_B T \sum_{k=0}^{\infty} ' G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; i\varepsilon_k) \alpha_{ij}^a(i\varepsilon_k) \right] = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} d\xi G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; i\xi) \alpha_{ij}^a(i\xi), \quad (2.36)$$

tem-se a expressão equivalente do caso da temperatura nula.

Já o termo entre parênteses da primeira equação do lado direito possui um limite característico dependendo do sinal da frequência ω_{na} , representado por

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{1}{1 - e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \right) = \begin{cases} 0 & \omega > 0 \\ 1 & \omega < 0 \end{cases} \quad (2.37)$$

$$= \Theta(\omega) \text{ se } \omega \neq 0. \quad (2.38)$$

No limite de baixas temperaturas, resta apenas o termo associado à emissão, $\omega_{na} < 0$, o que em conjunto com o resultado da equação (2.36) torna as equações (2.35) e (2.32) equivalentes.

Finalmente, para $T > 0$ as principais diferenças qualitativas dessa nova abordagem ocorrem claramente nos dois termos da direita da equação (2.35) que diferem das equações (2.32) e (2.33). No primeiro termo, aparece um fator em $\omega_{na} > 0$, ligado à absorção, já que a soma é feita sobre todas as transições. No segundo termo, uma soma discreta substitui a soma contínua no espectro de frequência. Nas próximas sub-seções, será discutido o impacto de cada termo independentemente.

2.5.1 Aparecimento do termo de absorção

Pode-se expandir o primeiro somatório sobre todas as transições da equação (2.35) em dois somatórios segundo o tipo de transição ao qual está relacionado, absorção ($\omega_{na} > 0$) ou emissão ($\omega_{na} < 0$), que serão denominados, por simplicidade, respectivamente, como $n > a$ ou $n < a$. O valor do fator entre parênteses, que depende da temperatura, tem o sinal dependente do tipo de transição. Organizando-se

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

para que o valor entre parênteses e, por consequência, o valor dentro do somatório sejam positivos:

$$\begin{aligned}
 -\sum_n \mu_i^{an} \mu_j^{na} \operatorname{Re} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega_{na}) \left(\frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar \omega_{na}}{k_B T}}} \right) = \\
 -\sum_{n>a} \mu_i^{an} \mu_j^{na} \operatorname{Re} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega_{na}) \left(\frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar \omega_{na}}{k_B T}}} \right) \cdot \\
 + \sum_{n<a} \mu_i^{an} \mu_j^{na} \operatorname{Re} G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \omega_{na}) \left(\frac{e^{-\frac{\hbar \omega_{na}}{k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar \omega_{na}}{k_B T}}} \right) \quad (2.39)
 \end{aligned}$$

No limite de baixa temperatura ($T \rightarrow 0$), o primeiro termo da expansão, ligado às emissões virtuais, torna-se semelhante ao somatório da equação (2.31). O segundo termo refere-se à absorção atômica virtual, e esse termo não existe na descrição de temperatura nula.

Os termos entre parênteses têm um comportamento simétrico em torno de $1/2$, mostrado na Figura 2.2. À baixa temperatura, o termo dominante é o ligado à

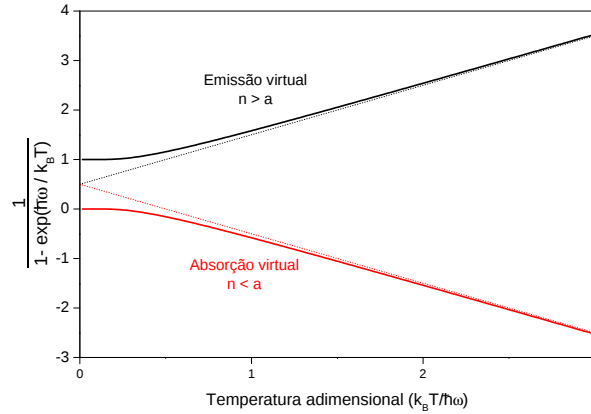


Figura 2.2: Comparação entre os termos de absorção e emissão em função da temperatura, linhas sólidas. As retas tracejadas são as assíntotas

emissão, enquanto que para altas temperaturas, os dois termos têm o mesmo comportamento, com sinais diferentes. Isso é explicado fazendo a expansão do termo

2.5. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NÃO-NULA

entre parênteses para altas temperaturas, $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1$:

$$\left(\frac{1}{1 - e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \right) \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}. \quad (2.40)$$

O gráfico dessa equação é a assíntota apresentada no gráfico da Figura 2.2. Vale salientar que a curva depende da transição, por causa do sinal e do valor de ω . Desta forma, duas temperaturas distintas têm diferentes contribuições para cada termo do somatório. As maiores mudanças ocorrem nos termos cujas transições possuam menores frequências.

Portanto, duas temperaturas diferentes podem levar a resultados com valores bem distintos, principalmente no caso em que as menores frequências de transição, em valor absoluto, sejam relacionadas a um mesmo tipo de transição, absorção ou emissão virtual, ou que ao menos as transições que têm maior contribuição sejam do mesmo tipo. Se essas menores frequências ou termos estiverem ligados à absorção virtual, então é possível até resultar em uma mudança de sinal na interação de van der Waals, transformando uma interação que normalmente é atrativa em repulsiva.

Uma interação de van der Waals repulsiva já foi detectada no experimento de Failache *et al* [7], devido a uma condição de interação ressonante entre uma superfície de safira e átomos de césio. Entretanto, nesse experimento se pôde considerar a temperatura $T \rightarrow 0$, pois todas as transições tinham grandes energias em relação às temperaturas em que se realizou o experimento. Desta forma, não se esperam variações importantes com a temperatura.

Um experimento a ser realizado para se observar os efeitos de temperatura deve conter átomos com transições com baixas energias $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1$. Uma proposta para tal experimento é utilizar técnicas de reflexão seletiva para átomos de césio [8, 27], semelhante ao utilizado por Failache, desta vez observando-se outros níveis atômicos, como o $8P_{3/2}$ com transição do tipo absorção virtual com os níveis

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

$7D_{5/2}$ e $7D_{3/2}$, que tem comprimentos de onda $\lambda = 36$ e $39 \mu\text{m}$, ou equivalente em temperatura $T = 400$ e 370 K. Essas temperaturas são facilmente atingíveis em experimentos de reflexão seletiva.

2.5.2 A soma discreta no espectro da frequência

Na equação (2.35), o segundo termo do lado direito é um somatório que, como foi visto na equação 2.36, no limite de temperatura nula ($T \rightarrow 0$), torna-se uma integral. A diferença entre uma forma integral e um somatório é bem conhecida de métodos numéricos de integração. Métodos numéricos utilizam a soma discreta para calcular a integral de uma função em um dado intervalo. A soma discreta é a soma feita sobre um determinado número de pontos do intervalo.

A diferença do resultado obtido com o somatório e o valor real da integral, conhecido como o erro do método de integração, depende da forma da função e do número de pontos em que a soma é feita [28–30]. Se o número de pontos for suficientemente grande e a função for suave na região de integração, então dada a técnica e a função, quanto maior o número de pontos, mais próximos serão os resultados. Isso ocorre por causa da maior proximidade entre dois pontos consecutivos, isto é, um aumento de densidade de pontos, que deve implicar em menor diferença entre o valor da função nesses pontos.

Diferentemente do somatório do termo primeiro da equação (2.35), o termo dentro do segundo somatório modifica a forma como o somatório pode ser tratado. Então, explicitando esse termo em função da frequência ξ_p :

$$-k_B T \sum_{k=0}^{\infty} {}' G_{ij}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; i\varepsilon_k) \alpha_{ij}^a(i\varepsilon_k) = -\frac{1}{12z^3} \frac{4k_B T}{\hbar} \sum_n \sum_p {}' |\mu^{an}|^2 \frac{\varepsilon(i\xi_p) - 1}{\varepsilon(i\xi_p) + 1} \frac{\omega_{na}}{\omega_{na}^2 + \xi_p^2}, \quad (2.41)$$

obtem-se um duplo somatório: um somatório sobre todas as transições e um somatório sobre todas as frequências ξ_p . Observando uma transição $n \rightarrow a$ os termos em

2.5. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NÃO-NULA

$k_B T$ e ξ_p podem ser agrupados e no limite de baixa temperatura resultam na forma integral da equação 2.33.

O somatório da equação (2.41) não é um simples problema numérico de integração, pois a densidade de pontos é determinada pela temperatura, que é um parâmetro físico e tem valor definido. Entretanto, para todo termo da soma em que se podem considerar baixas temperaturas ($|\hbar\omega_{na}| \gg k_B T$), o problema poderá ser tratado da forma integral ou da forma de somatório sem prejuízo ao resultado. A maior diferença ocorre nos termos onde a densidade de pontos é baixa, isto é, normalmente quando a temperatura é alta.

Quando considerando baixa temperatura, observando a equação (2.41), deve-se levar em conta os dois termos explícitos em ξ_p , o termo em ε e o termo em ω_{na} . A condição usual para se considerar baixa temperatura é $|\hbar\omega_{na}| \gg k_B T$, para todo n . Essa consideração é válida quando analisa-se apenas o termo ligado à polarizabilidade α em ω_{na} , que em função de ξ tem a forma lorentziana, $L(\xi) = \frac{1}{1+\xi^2}$. Na Figura 2.3, observa-se os pontos considerados para o somatório. Pode-se repre-

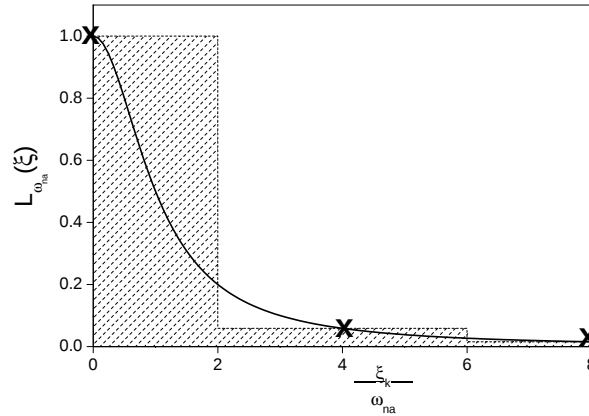


Figura 2.3: Função de Lorentz, ligada à polarizabilidade, observado nos pontos considerados no somatório em p . A área formada pelos retângulos representam o valor do somatório.

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

sentar o peso de cada termo da soma como um retângulo de largura $\xi_{p+1} - \xi_p = \frac{k_B T}{h}$. Esse largura já aparece expressa na equação (2.41). Para considerar o fator $1/2$ para $p = 0$, utiliza-se cada retângulo centralizado no ponto ξ_p e considera-se apenas a parte positiva, desta forma o ponto p terá apenas a metade da largura. Nessa representação, vê-se claramente a diferença do somatório e da integral.

Entretanto, o termo ligado ao dielétrico, com termo em ϵ , pode ter grande variações no intervalo $\xi_{p+1} - \xi_p$. Se essa variação ocorrer na ordem de ω_{na} , resultará em uma diferença importante para diferentes temperaturas. Essa limitação da região de atuação é devida ao produto com o termo na forma lorentziana.

Outro ponto a ser entendido observando, a partir da Figura 2.3, é que para altas temperaturas só o primeiro termo será não nulo. Como consequência o resultado será o valor dado pelo primeiro retângulo, cujo valor depende linearmente e positivamente de $k_B T$. Dessa forma, é necessário o cálculo inteiro para cada caso da interação para que se conheça a dependência da interação de van der Waals com a temperatura.

2.5.3 Exemplo de variação de C_3 com a temperatura

Uma variação importante do termo em ϵ ocorrerá quando houver ressonância da superfície com alguma transição do átomo. Adicionando a parte lorentziana, essa ressonância deve ocorrer em grandes comprimentos de onda, compatíveis com a temperatura. Tem-se como exemplo a superfície composta por CaF_2 ou BaF_2 tem ressonâncias em $38,9$ e $36,0 \mu\text{m}$, respectivamente, muito próximo da transição atômica do césio e com equivalente em temperatura de 370 e 400 K. Essas mudanças podem ser vista nas Figuras 2.4 e 2.5 [31]. Vê-se que há uma forte dependência com a temperatura a partir de 100 K. Entre 300 K e 500 K há uma grande modificação, um fator maior que dois.

Do ponto de vista do coeficiente entre essas superfícies, a diferença básica

2.5. SUPERFÍCIE DIELÉTRICA DISPERSIVA À TEMPERATURA NÃO-NULA

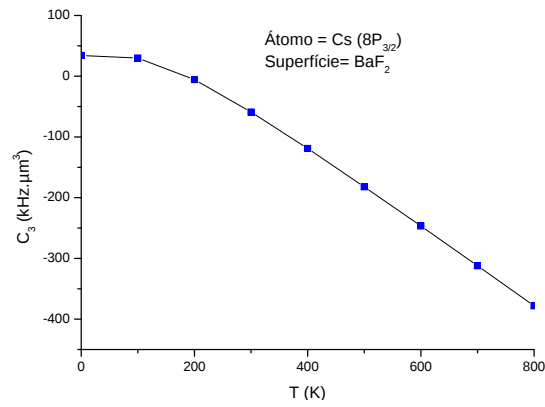


Figura 2.4: Dependência com a temperatura da interação de van der Waals do césio com a superfície de BaF_2

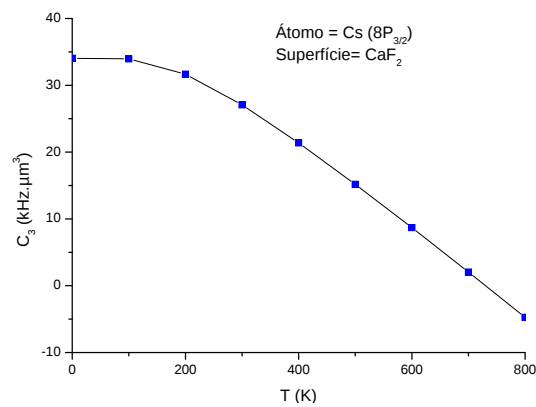


Figura 2.5: Dependência com a temperatura da interação de van der Waals do césio com a superfície de CaF_2

CAPÍTULO 2. TEORIA DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

está na modificação de sinal do BaF_2 , representando uma modificação de uma interação de van der Waals atrativa ($C_3 > 0$) para uma interação repulsiva ($C_3 < 0$). Entretanto, a observação da variação de C_3 no caso de interação atrativa é mais fácil que a observação da interação repulsiva, ao menos para o experimento de reflexão seletiva em que a amplitude do sinal é muito menor para o caso de C_3 negativo que o positivo, conforme Failache [32]. Em termos práticos, deve-se escolher observar a interação com o CaF_2 pois é mais fácil observar a variação de C_3 onde a interação é sempre atrativa.

2.6 Conclusão

Neste capítulo, estudou-se a interação de longo alcance entre átomos e superfícies restrita ao regime não retardado. Nessa restrição a interação é descrita como sendo a interação entre dois dipolos e tem o nome de interação de van der Waals. Essa interação depende do espectro atômico, com a contribuição de todos os níveis e do coeficiente de reflexão elétrica da superfície.

Foi mostrado que a superfície não é um elemento passivo na interação. Por causa dos modos de vibração o coeficiente dielétrico poder ser ressonante com alguma transição atômica, a interação de van der Waals podendo assim ter o seu valor modificado completamente. A interação de van der Waals repulsiva já foi observada experimentalmente [7].

Mostrou-se também que a temperatura pode ser um fator determinante dessa interação, através da distribuição térmica de população dos modos de vibração e a contagem de forma discreta dos modos do vácuo. Essa distribuição de população tem o efeito mais importante na inclusão da transição virtual do tipo absorção. Por outro lado a discretização pode tornar termos de superfície ressonantes para uma determinada temperatura.

Referências Bibliográficas

- [1] D. Heinzen, J. Childs, J. Thomas e M. Field, *Enhanced and inhibited visible spontaneous emission by atoms in a confocal resonator*, Phys. Rev. Lett., **58**, 1320 (1987).
- [2] A. Kreuter, C. Becher, G. Lancaster, A. Mundt, C. Russo, H. Häffner, C. Roos, J. Eschner, F. Schmidt-Kaler e R. Blatt, *Spontaneous Emission Lifetime of a Single Trapped Ca^+ Ion in a High Finesse Cavity*, Phys. Rev. Lett., **92**, 203002 (2004).
- [3] D. Meschede, W. Jhe e E. Hinds, *Radiative properties of atoms near a conducting plane: An old problem in a new light*, Phys. Rev. A, **41**, 1587 (1990).
- [4] E. A. Hinds e V. Sandoghdar, *Cavity QED level shifts of simple atoms*, Physical Review A, **43**, 398 (1991).
- [5] H. Casimir e D. Polder, *The influence of retardation on London-van der Waals forces*, Phys. Rev., **73**, 360 (1948).
- [6] J. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1965).
- [7] H. Failache, S. Saltiel, M. Fichet, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant van der Waals Repulsion between Excited Cs Atoms and Sapphire Surface*, Phys. Rev. Lett., **83**, 5467 (1999).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [8] M. Chevrollier, *Spectroscopie de réflexion sélective à une interface diélectrique/vapeur de césium. Observation de l'attraction van der Waals de surface.*, Tese de Doutorado, Université Paris XIII (1992).
- [9] H. Failache, S. Saltiel, A. Fischer, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant Quenching of Gas-Phase Cs Atoms Induced by Surface Polaritons*, Phys. Rev. Lett., **88**, 243603 (2002).
- [10] M. Boustimi, B. Viaris de Lesegno, J. Baudon, J. Robert e M. Ducloy, *Atom symmetry break and metastable level coupling in rare gas atom surface van der Waals interaction*, Phys. Rev. Lett., **86**, 2766 (2001).
- [11] N. Papageorgiou, *Spectroscopie de réflexion à très haute résolution sur la vapeur de Cesium : déplacement collisionnelle, structure Zeeman et effets de saturation sur la raie D₂*, Tese de Doutorado, Laboratoire de Physique des Lasers, Université Paris XIII (1994).
- [12] W. Jhe, A. Anderson, E. Hinds, D. Meschede, L. Moi e S. Haroche, *Suppression of spontaneous decay at optical frequencies: test of vacuum-field anisotropy in confined space*, Phys. Rev. Lett., **58**, 666 (1987).
- [13] J. Dalibard, J. Dupont-Roc e C. Cohen-Tannoudji, *Vacuum fluctuations and radiation reaction: identification of their respective contribution*, J. Physique, **43**, 1617 (1982).
- [14] M.-P. Gorza, S. Saltiel, H. Failache e M. Ducloy, *Quantum theory of van der Waals interactions between excited atoms and birefringent dielectrics*, Eur. Phys. J. D, **15**, 113 (2001).
- [15] W. Kaiser, W. Spitzer, R. Kaiser e L. Howarth, *Infrared properties of CaF₂, SrF₂, and BaF₂*, Phys. Rev., **127**, 1950 (1962).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [16] A. Barker-Jr, *Transverse and longitudinal optic mode study in MgF_2 and ZnF_2* , Phys. Rev., **136**, A1290 (1964).
- [17] G. Gledhill, P. Nikolic, A. Hamilton, S. Stojilkovic, V. Blagojevic, P. Mihajlovic e S. Djuric, *FIR Optical properties of single crystal $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG)*, Phys. Stat. Sol. (b), **163**, K123 (1991).
- [18] M. Bass, E. W. V. Stryland, D. R. Williams e W. L. Wolfe, *Handbook of Optics*, volume II - Devices, Measurements, and Properties (McGraw-Hill, Inc., 1994).
- [19] M. Fichet, F. Schuller, D. Bloch e M. Ducloy, *van der Waals interactions between excited-state atoms and dispersive dielectric surfaces*, Phys. Rev. A, **51**, 1553 (1995).
- [20] J. Wylie e J. Sipe, *Quantum electrodynamics near an interface*, Phys. Rev. A, **30**, 1185 (1984).
- [21] J. Wylie e J. Sipe, *Quantum electrodynamics near an interface. II*, Phys. Rev. A, **32**, 2030 (1985).
- [22] C. Mavroyannis, *The interaction of neutral molecules with dielectric surfaces*, Mol. Phys., **6**, 593 (1963).
- [23] A. D. MacLachlan, *Retarded dispersion forces between molecules*, Proc. Roy. Soc. A, **271**, 387 (1963).
- [24] A. D. MacLachlan, *Retarded dispersion forces in dielectrics at finite temperature*, Proc. Roy. Soc. A, **274**, 80 (1963).
- [25] M.-P. Gorza, *Shift d'un niveau atomique excité en présence d'un champ et d'une surface en équilibre thermique à temperature non nulle*. (2002), discussão interna.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [26] C. Kittel, *Introdução à Física do estado sólido* (Guanabara Dois S.A., Rio de Janeiro - RJ, 1978), 5^a ed.
- [27] M. Chevrollier, M. Fichet, M. Oriá, G. Rahmat, D. Bloch e M. Ducloy, *High resolution selective reflection spectroscopy as a probe of long-range surface interaction: measurement of the surface van der Waals attraction exerted on excited atoms*, J. Phys II France, **2**, 631 (1992).
- [28] P. L. Devries, *A first course in computational physics* (Wiley, 1994), livro de técnicas numéricas para problemas físicos. É interessante utilizar em conjunto com o Numerical Recipes [29].
- [29] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1987), nesse livro podemos encontrar mais alguns métodos numéricos.
- [30] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1987), nesse livro podemos encontrar exemplos de uso dos métodos numéricos do livro [29].
- [31] I. Hamdi, Tese de Doutorado, Paris XIII (2005).
- [32] H. Failache, *Etude spectroscopique des resonances dans l'interaction de van der Waals entre un atome et une surface dielectrique*, Tese de Doutorado, Université Paris XIII (1999).

Capítulo 3

Detectando a interação van der

Waals:

Espectroscopia de Reflexão Seletiva

Sumário

3.1	Técnicas de detecção da interação átomo-superfície	50
3.2	Reflexão Seletiva	55
3.3	Sinal da Reflexão Seletiva	57
3.4	Sistema de dois níveis	60
3.4.1	Sinal da RSFM	64
3.5	Conclusão	67

3.1 Técnicas de detecção da interação átomo-superfície

Considerando-se as mudanças no tempo de vida e na energia dos níveis atômicos (ver Capítulo 2) provocadas pela interação átomo-superfície, técnicas espectroscópicas são a priori suscetíveis de evidenciar essas modificações. Porém, anterior às técnicas espectroscópicas, a termodinâmica já considerava que a presença da superfície modificava algumas propriedades do gás.

Por volta de 1873, van der Waals propôs uma correção (explicada no Capítulo 1), com a introdução de dois termos na equação de estado para o gás ideal. A equação de estado do gás passou a ter então uma correção nos termos em P e V :

$$PV = nRT \implies \left(P + \frac{an^2}{V^2} \right) (V - nb) = nRT, \quad (\text{Equação de estado})$$

onde a está ligado à existência de uma superfície.

Nesse modelo, não foi incluída a importância da superfície, como o tipo de material que a constitui nem a sua forma geométrica. Além disso, para as análises de sistemas termodinâmicos, é necessário um número muito grande de átomos para se aplicar a mecânica estatística. Outro ponto negativo é que para a observação dos efeitos na pressão P , utilizada na equação de estado, a densidade de átomos deve ser grande. Essas densidades elevadas podem mascarar a interação de van der Waals pelas interações átomo-átomo, dificultando as análises. Por isso, devem-se utilizar outros métodos de investigação para as medidas dessa interação, como as que serão estudadas neste capítulo.

Duas técnicas espectroscópicas para observar efeitos da interação átomo-superfície surgem no começo dos anos 90. Uma utiliza-se da espectroscopia de reflexão seletiva [1] e a outra, realizada por Sandoghdar *et al.* [2], utiliza um feixe de átomos entre duas placas metálicas para detectar a quantidade de átomos que atravessam, em função da separação entre as placas. A primeira técnica será o foco deste capítulo e dos seguintes. A segunda técnica tem como resultado a demons-

3.1. TÉCNICAS DE DETECÇÃO DA INTERAÇÃO ÁTOMO-SUPERFÍCIE

tração da forma da variação espacial do potencial de interação de van der Waals, $1/z^3$.

As soluções da equação de Schrödinger para potencial independente do tempo relacionam-se com probabilidades de partículas serem refletidas ou transmitidas ou estarem apenas em uma região do espaço, isto é, ligadas ao potencial. Essas probabilidades dependem da energia dessas partículas e do potencial. Assim, para se medir a interação de van der Waals como um potencial estático, basta se conhecer a relação dessas probabilidades para várias energias dos átomos. Uma maneira é jogar um feixe atômico em uma grade de difração e observar modificações no padrão de difração. Isto ocorre porque a interação de van der Waals cria uma grade efetiva diferente da grade normal, pois há modificação na seção de choque devido ao potencial. Esse efeito foi observado tanto em transmissão [3] como em reflexão [4]. Outra técnica consiste em estudar os níveis dos estados ligados do poço de potencial de van der Waals, fazendo a espectroscopia desses níveis [5]. Esta última técnica é ainda teórica ¹, mas dá indicações da possibilidade de detecção e será apresentado no Capítulo 7.

Por causa de seu alcance limitado (da ordem do comprimento de onda λ), a observação da interação de van der Waals por espectroscopia deve ser limitada a uma região de espessura $\approx \lambda$ próxima da superfície. As técnicas espectroscópicas de vapor atômico em uma célula feitas em transmissão detectam as características dos átomos em todo o volume. Isso mascara os efeitos de superfície, não sendo possível distinguir átomos próximos à superfície dos demais átomos. Um exemplo é a espectroscopia de absorção linear (ou saturada), onde o sinal obtido depende do volume da célula, que é muito maior do que o volume da região onde a atuação da interação de van der Waals é importante.

A análise da fluorescência dos átomos é uma técnica espectroscópica que

¹Montagem experimental sendo realizada no Laboratório de Física Atômica e Lasers da UFPB

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

mede a radiação emitida pelo vapor atômico quando excitado. É possível utilizar essa técnica para observar efeitos de interações de superfície no caso em que essas interações modificam as propriedades radiativas do vapor, como é o caso das colisões dos átomos com as paredes da célula, que destroem o bombeio ótico realizado pela radiação de excitação do vapor. Assim, a comparação da fluorescência em células de vidro de mesma forma, mas com as superfícies internas diferentes, sendo uma sem revestimento e a outra revestida com um silano foi realizado por Freitas et al. [6]. Nesta experiência, a superfície modifica a fluorescência com a despolarização do spin do átomo que chega à superfície fazendo com que volte ao volume do vapor mais ou menos polarizado. Essa despolarização depende do tempo de adsorção que, por sua vez, depende da energia de adsorção e, conseqüentemente, da interação átomo-superfície. Uma conseqüência dessa diferença de polarização entre duas superfícies diferentes é a diferença do número de átomos capazes de reabsorver a radiação, modificando a fluorescência. Essa despolarização pode ser medida através de medidas de absorção ou de fluorescência [6], que permitem assim uma determinação indireta de parâmetros da interação átomo-superfície. Fatores complicantes como a composição da superfície e a dependência com a temperatura dificultam a análise da interação. Porém, para a medida de van der Waals essa técnica não é adequada porque a adsorção ocorre muito próxima da superfície (dimensões atômicas) onde a simples aproximação dipolar não é mais válida. De uma maneira geral, o curto alcance não é a distância onde os efeitos da atração de van der Waals predominam.

Na espectroscopia de absorção ou de transmissão, seja ela linear ou saturada, o sinal obtido representa uma média sobre o volume atravessado pelo laser. Supondo que a seção do feixe seja aproximadamente constante, o sinal será proporcional ao comprimento L da célula, que em geral tem dimensões macroscópicas ($\gg \lambda$). Nesta média, os eventuais efeitos de superfície são completamente despre-

3.1. TÉCNICAS DE DETECÇÃO DA INTERAÇÃO ÁTOMO-SUPERFÍCIE

zíveis, devido ao número de átomos interagindo com as superfícies ($\propto \lambda$) ser muito menor que o número de átomos que não interagem ($\propto L - 2\lambda \approx L \gg \lambda$).

A interação entre uma superfície e um átomo modifica as propriedades espectrais deste, mais especificamente seu tempo de vida e suas auto-energias. Essas modificações são significativas somente para átomos muito próximos ($\approx \lambda$) da superfície e uma técnica espectroscópica de volume, como explicado acima, não permitirá detectá-las, exceto quando o comprimento normal l do volume for menor ou da ordem do comprimento de onda ($l \leq \lambda$), como é o caso das células ultra-finas [7, 8].

As células finas têm duas propriedades básicas interessantes para a espectroscopia: seleção direta de espaço (confinamento) e seleção de velocidade. A primeira propriedade torna-se importante quando todos os átomos estão sob forte influência de vdW, resultando, por exemplo, em um forte deslocamento de energia ou em efeitos de uma cavidade quântica. Esses efeitos são importantes quando a célula for muito estreita ($l \ll \lambda$).

Outra característica dessas células finas, que ocorre mesmo para células mais espessas, é a seleção de velocidade ligada ao tempo de interação com a radiação antes da colisão com as paredes [9], isto é, o tempo de vôle livre $t_v = l/v$, onde v é a velocidade normal e a principal contribuição ao sinal é em torno de $v \approx 0$. Em células maiores, por outro lado, há átomos mais velozes que interagem com a radiação com tempos de vôle próximos ou maiores que o tempo de vida da transição e por causa do efeito Doppler da distribuição de velocidades de Maxwell desses átomos, o perfil de absorção será do tipo Voigt largo mascarando essa seleção de velocidades.

A construção dessas células é uma tarefa difícil, pois deve ser, além de estreita e de comprimento macroscópico, resistente a diferentes temperaturas e a forças mecânicas. Esse tipo de experimento é realizado no Laboratoire de Physique

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

des Lasers (Paris XIII, França).

É necessário então lançar mão de técnicas capazes de sondar uma profundidade da ordem de λ próximo da superfície, como é o caso de técnicas de reflexão, como a espectroscopia com ondas evanescentes ou a espectroscopia de Reflexão Seletiva (RS).

As ondas evanescentes, por terem seu alcance intrinsecamente limitado (decaimento exponencial da amplitude do campo elétrico a partir da superfície, de alcance $\approx \lambda$), permitem, com um vetor de onda paralelo à superfície, sondar átomos a distâncias $z \lesssim \lambda$. O sinal dessa técnica pode ser perturbado por dois motivos:

1. **via força dipolar** criada pelo gradiente de potencial normal à superfície [10, 11] levando à modificação de velocidade, fato já verificado experimentalmente, ver por exemplo os artigos [12–17]. Esta força depende explicitamente da dessintonia, dificultando a análise espectral.
2. **via efeito Doppler** da distribuição de velocidade paralela à superfície. Este efeito pode mascarar uma análise espectroscópica para altas velocidades u , por exemplo quando $ku \geq \Gamma$, onde k é o vetor de onda e Γ é a largura da transição.

Para o primeiro item, pode-se, em algumas condições, considerar que os efeitos mecânicos são desprezíveis, principalmente quando compara-se os efeitos durante os períodos óticos ou atômicos. Para o segundo item, pode-se fazer da mesma forma que para a absorção em uma célula: utilizar dois feixes contra-propagantes para saturar o vapor. Essa espectroscopia de reflexão saturada [18–20] utiliza dois feixes contra-propagantes no dielétrico na configuração de reflexão interna total para, entre outros, cancelar o efeito Doppler.

O princípio básico da técnica de reflexão seletiva foi realizado por Wood em 1909 [21]. Ele consiste em monitorar a mudança do coeficiente de reflexão de

3.2. REFLEXÃO SELETIVA

uma interface vapor-dielétrico em torno da frequência ressonante do vapor, como representado na Figura 3.1.

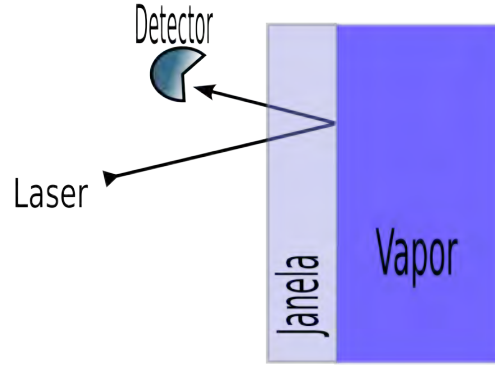


Figura 3.1: Esquema da reflexão seletiva.

Neste capítulo, analisa-se a teoria da reflexão seletiva para a obtenção das curvas espectroscópicas para o caso da interação de van der Waals. Inicialmente, descreve-se a técnica e o que deve ser observado. Na seção 3.3, mostra-se a dependência do sinal da reflexão seletiva por causa do vapor. Na seção 3.4, considera-se um sistema de dois níveis e obtém-se as curvas espectrais para várias forças de interação que são utilizadas no capítulo 5.

3.2 Reflexão Seletiva

A idéia da Reflexão Seletiva é observar um feixe refletido em uma interface dielétrico-vapor, do lado do dielétrico, estando a frequência deste feixe próxima à da ressonância do vapor. O coeficiente de reflexão deve variar com a frequência por causa da variação do índice de refração do vapor, e para a incidência normal, é dado pela relação:

$$R(\omega) = \left| \frac{n - n_v(\omega)}{n + n_v(\omega)} \right|^2, \quad (3.1)$$

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

onde n é o índice de refração do dielétrico e $n_v(\omega)$ é o índice do vapor na frequência ω .

Pode ser mostrado que o campo eletromagnético refletido na interface é mais sensível ao que ocorre próximo à interface, sendo independente do comprimento macroscópico da célula. Isto ocorre quando o "alcance" do potencial de interação átomo-superfície é curto, como por exemplo a interação de van der Waals.

Em resumo, a Reflexão Seletiva, que será considerada nesta tese, sonda o meio gasoso próximo da superfície ($z \leq \lambda$) com um vetor de onda cuja componente z , perpendicular à superfície. Dessa forma, ela permite realizar uma seleção dos átomos segundo sua velocidade v_z através do deslocamento Doppler $\vec{k} \cdot \vec{v}$. A seleção existe por causa da superfície que limita o tempo de interação dos átomos com a radiação na região $z \lesssim \lambda$, tanto para os átomos que chegam quanto para os que saem da superfície. Assim, a classe de velocidade selecionada (ou destacada) é $v_z = 0$, o que corresponde a átomos deslocando-se quase paralelamente à superfície e, portanto, interagindo muito tempo com o campo. Particularmente, se a incidência do campo eletromagnético for normal à interface $k_{x,y} = 0$, então não haverá efeito Doppler da distribuição de velocidade paralela à superfície. Apesar de ser a classe mais evidenciada não exclui as outras classes de velocidade. Essa seleção ocorre efetivamente com a técnica de reflexão seletiva saturada a incidência quase normal [22].

Na Seção 3.3, será detalhado o cálculo do sinal da espectroscopia de reflexão seletiva de um vapor próximo à superfície utilizando as equações de Maxwell e a polarizabilidade dos átomos [23]. As equações de Maxwell para a propagação das ondas eletromagnéticas e a polarizabilidade modificando as propriedades dielétricas do vapor. A polarizabilidade é definida pela coerência ótica dos átomos, que evolui conforme as equações de Bloch.

3.3. SINAL DA REFLEXÃO SELETIVA

Na Seção 3.4, os átomos são considerados como um sistema de dois níveis, que permite algumas aproximações através das quais, com auxílio de uma transformação de variáveis, a forma do espectro é dado por uma variável adimensional A . Pode-se então construir uma família de curvas espectrais para vários valores de A independentes da intensidade de interação. A determinação do coeficiente C_3 ficará dependente do valor de A que fornece a melhor curva, dentre a família de curvas, que se aproxima do espectro experimental, descrito no Capítulo 4. No Capítulo 5, é detalhado a forma de se obter o valor de A e, por conseguinte, o valor de C_3 .

3.3 Sinal da Reflexão Seletiva

O sinal da reflexão seletiva será a intensidade da radiação eletromagnética que é refletida da interface dielétrico-vapor. Essa radiação refletida depende do índice de refração do meio e do dielétrico. O índice do meio, por sua vez, depende da polarizabilidade do meio. Nesta seção, será estudado o sinal de reflexão seletiva, considerando-se que o vapor atômico é simplesmente um meio polarizável.

Na Figura 3.2, o campo E_i incide na interface e os campos E_r e E_t são os campos refletido e transmitido, respectivamente. Considerando a incidência normal e escrevendo esses campos na forma de ondas propagantes:

$$\vec{E}_i(z, t) = \hat{\epsilon} E_i e^{i(\omega t - nkz)} \quad (3.2)$$

$$\vec{E}_r(z, t) = \hat{\epsilon} E_r e^{i(\omega t + nkz)} \quad (3.3)$$

$$\vec{E}_t(z, t) = \hat{\epsilon} E_t e^{i(\omega t - n(\omega)kz)}, \quad (3.4)$$

onde E_i e E_r são constantes, pois não dependem da posição e $E_t = E(z)$ é uma função da posição. Essas considerações sobre os campos E_i e E_r são possíveis quando se considera um dielétrico que não tem absorção, é linear e homogêneo. Por outro lado, considera-se que o vapor, quando ressonante, não seja homogêneo

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

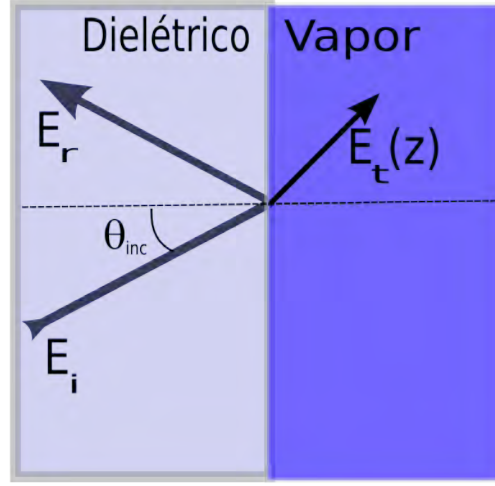


Figura 3.2: Esquema da reflexão seletiva.

e ainda possa haver absorção. Essa inhomogeneidade ocorrerá também devido à interação de van der Waals.

Esses campos são relacionados pelas condições de contorno das equações de Maxwell na interface, isto é, $z = 0$. Pode-se escrever então:

$$\begin{cases} E_i + E_r = E_t(z=0) \\ ikn_1(E_i - E_r) = ikn_2(\omega)E_t(z=0) - \left(\frac{\partial E_t}{\partial z}\right)_{z=0}, \end{cases} \quad (3.5)$$

onde $n_1 = n$ é o índice do dielétrico e $n_2(\omega)$ é o índice do vapor. Considerando que o vapor é diluído então $n_2(\omega) \approx 1$, o que resulta no termo do campo refletido E_r :

$$E_r = E_i \left(\frac{n-1}{n+1} \right) - \frac{1}{ik(n+1)} \left(\frac{\partial E_t}{\partial z} \right)_{z=0}. \quad (3.6)$$

O primeiro termo é independente do vapor e apenas o segundo termo depende explicitamente do que ocorre no vapor. Escrevendo de forma resumida:

$$E_r = E_r^{NR} + \delta E_r, \quad (3.7)$$

onde E_r^{NR} é a parte não ressonante ou independente do vapor e δE_r é a contribuição ressonante do vapor ao campo refletido.

3.3. SINAL DA REFLEXÃO SELETIVA

Pela equação de Maxwell, a solução para a δE_r é feita considerando-se o meio polarizável:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}, \quad (3.8)$$

onde a polarização $P(z, t)$ no meio pode ser escrito de forma semelhante às equações 3.2. Finalmente [24]:

$$\delta E_r = \frac{ik}{\epsilon_0(n+1)} \int_0^{+\infty} dz P(z) e^{i2kz}. \quad (3.9)$$

Para observar essa contribuição da parte ressonante pode-se relacionar a intensidade do sinal refletido com a intensidade da radiação incidente, pela refletividade R :

$$R = \left| \frac{E_r}{E_i} \right|^2. \quad (3.10)$$

Em uma aproximação de pequena perturbação pela presença do vapor, isto é, $\delta E_r \ll E_r^{NR}$, pode-se descrever o fator R composta de duas partes: $R = R^{NR} + \Delta R$, onde $R^{NR} = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2$ é o coeficiente de reflexão de Fresnel na interface dielétrico/vácuo e

$$\Delta R = 2 \frac{E_r^{NR}}{|E_i|^2} \Re \left(\frac{ik}{\epsilon_0(n+1)} \int_0^{+\infty} dz P(z) e^{i2kz} \right) \quad (3.11)$$

é a parte não ressonante mais importante no sinal, onde $\Re$ significa a parte real. O sinal de reflexão seletiva que interessa, S_{RS} , é essa variação ΔR , $S_{RS} = |E_i|^2 \Delta R$.

Deve-se agora calcular a polarização, P , do vapor atômico. A polarização P de um meio é dada por:

$$P = N \langle \mu \rangle, \quad (3.12)$$

onde N é o número de dipolos e $\langle \mu \rangle$ é o momento dipolar médio dos átomos. O número de dipolos em um vapor monoatômico é igual ao número de átomos. O valor médio do dipolo pode ser descrito com o auxílio da matriz densidade: a resolução das equações de Bloch óticas para o sistema permite determinar os elementos de matriz da matriz densidade, inclusive seus elementos não diagonais aos quais

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

$\langle \mu \rangle$ é proporcional. Assim, a polarização pode ser descrita explicitamente e depende da velocidade dos átomos $P(z, v_z)$, ligada ao tempo de interação e ao efeito Doppler.

O valor da polarização em determinado ponto z é dado pela contribuição dos átomos nesse ponto, descrito como a “soma” das contribuições de todos os átomos na posição z com todas as velocidade v_z :

$$P(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} W(v_z) P(z, v_z) dv_z, \quad (3.13)$$

onde $W(v_z)$ é a distribuição de velocidade dos N átomos. Uma forma dessa distribuição é a usual distribuição térmica de Maxwell-Boltzmann para um vapor térmico em equilíbrio.

Na Seção 3.4, o vapor atômico considerado para o cálculo da polarização será formado por átomos de apenas dois níveis eletrônicos. Esse sistema já está descrito em alguns trabalhos [23, 25] e teses [18, 24], entretanto será descrito para mostrar os passos necessários para o cálculo. Esses passos também podem ser utilizados em um sistema mais complexo como no Capítulo 6.

3.4 Sistema de dois níveis

Em mecânica quântica, a medida de uma grandeza A , ou valor esperado, é dada pela média do observável $\hat{A}$:

$$A = \langle \hat{A} \rangle. \quad (3.14)$$

Utilizando-se a matriz densidade $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, onde $|\psi\rangle$ é a função de onda do sistema, a medida pode ser dada pelo traço $A = \text{Tr}(\rho A)$. Neste capítulo, o observável é a polarização P , ou a polarizabilidade μ , da seguinte forma:

$$P = N \langle \hat{\mu} \rangle = N \text{Tr}(\hat{\mu} \rho) = N \mu (\rho_{ef} + \rho_{fe}), \quad (3.15)$$

3.4. SISTEMA DE DOIS NÍVEIS

para um sistema de dois níveis (índices e e f), onde μ é o momento dipolar elétrico.

A evolução do sistema pode ser descrita pela equação de movimento da matriz densidade:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H(t), \rho(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_{\text{relaxação}}, \quad (3.16)$$

onde H é o hamiltoniano do sistema e o termo de relaxação corresponde às variações do número de átomos no sistema. Esse termo pode ser ligado a sistemas de 3 ou mais níveis em que a espectroscopia observa apenas 2 e inclui-se os outros níveis como mecanismos de acréscimo ou perda de átomos no sistema de dois níveis. Nesta Seção, será considerado um sistema de dois níveis fechado, conforme a Figura 3.3, onde o termo de relaxação corresponde à emissão espontânea do nível

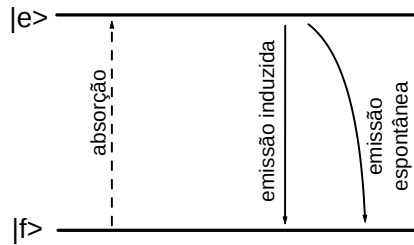


Figura 3.3: Sistema de dois níveis, com a indicação das formas de transferência de população.

excitado para o fundamental. O nível excitado terá o índice e e o fundamental, f .

As equações de Bloch óticas, ver por exemplo o Capítulo V da referência [12], são modificadas na aproximação de ondas girantes para a observação de efeitos com frequências muito menores do que a frequência do laser. Os elementos da

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

matriz densidade são:

$$\frac{d}{dt}\sigma_{ee} = -\frac{d}{dt}\sigma_{ff} = i\frac{\Omega}{2}(\sigma_{fe} - \sigma_{ef}) - \gamma\sigma_{ee} \quad (3.17)$$

$$\frac{d}{dt}\sigma_{ef} = -\left(\frac{\gamma}{2} - i(\omega - \omega_0 - kv_z)\right)\sigma_{ef} + i\frac{\Omega}{2}(\sigma_{ff} - \sigma_{ee}), \quad (3.18)$$

onde Ω é a frequência de Rabi, ligada à intensidade do feixe, ω_0 é a frequência da transição atômica, γ é a largura da transição, que inclui a emissão espontânea e a colisional, o termo kv_z é devido ao efeito Doppler.

Os átomos com velocidade v adicionam um efeito equivalente a um transiente devido ao deslocamento $\Delta z = v\Delta t$. Considerando que a velocidade permanece constante, isto é, sem potencial (ao menos desprezível) nem a colisão átomo-átomo, que modifique a velocidade, pode-se simplificar a diferencial total no tempo que pode ser escrita, via transformação hidrodinâmica, como:

$$\frac{d}{dt}\sigma = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\sigma \quad (3.19)$$

$$= v_z\frac{\partial}{\partial z}\sigma. \quad (3.20)$$

Considerando que as medidas são feitas sempre sob tempos longos se comparado com os tempos típicos da evolução atômica (Γ^{-1} , Δ^{-1}), isto é, quando o regime estacionário é atingido então $\frac{\partial}{\partial t}\rho = 0$. Sendo a reflexão seletiva utilizada como uma técnica de análise, a intensidade do feixe deve ser muito baixa para não modificar consideravelmente a população do sistema. Considerando o sistema inicialmente no estado fundamental e que não haja modificação da população (aproximação de campo nulo), isto é, $\sigma_{ee} = 0$ e $\sigma_{ff} = 1$, obtém-se

$$v_z\frac{\partial}{\partial z}\sigma_{ef} = -\left[\frac{\gamma}{2} - i(\omega - \omega_0 - kv_z)\right]\sigma_{ef} + i\frac{\Omega}{2}. \quad (3.21)$$

A solução geral dessa equação é

$$\sigma_{ef}(z, v_z) = \sigma(z_0, v_z)e^{\frac{L(z)}{v_z}} + i\frac{\Omega}{2v_z}\int_{z_0}^z e^{\frac{L(z')-L(z)}{v_z}} dz', \quad (3.22)$$

3.4. SISTEMA DE DOIS NÍVEIS

onde

$$L(z) = \int \left[\frac{\gamma(z')}{2} - i(\omega - \omega_0(z') - kv_z) \right] dz' \quad (3.23)$$

$$= L_0(z) + ikv_z z. \quad (3.24)$$

e z_0 é arbitrário e permite o ajuste às condições de contorno impostas.

As condições de contorno dependem do “histórico” do átomo e da sua velocidade, isto é, de se o átomo se aproxima ($v_z < 0$) ou se o átomo se afasta da superfície ($v_z > 0$).

Para os átomos que se aproximam da superfície, pode-se considerar z_0 no infinito ($+\infty$), onde a coerência ótica é nula, $\sigma_{ef}(\infty, v_z) = 0$, porque o campo excitador se anula devido às absorções e difusões durante a propagação no meio. Assim, a solução é

$$\sigma_{ef}(z, v_z < 0) = i \frac{\Omega}{2v_z} \int_{+\infty}^z e^{\frac{L(z')-L(z)}{v_z}} dz'. \quad (3.25)$$

Por outro lado, para os átomos que partem da superfície, supõe-se que a interação evolui a partir da superfície, onde a coerência ótica é nula ($\sigma_{ef}(0, v_z) = 0$).

A solução fica:

$$\sigma_{ef}(z, v_z > 0) = i \frac{\Omega}{2v_z} \int_0^z e^{\frac{L(z')-L(z)}{v_z}} dz'. \quad (3.26)$$

O sinal de reflexão seletiva (equações 3.11, 3.15, 3.25 e 3.26), é composta então de duas partes:

$$S_{RS(+)} = \eta \Re \int_0^\infty \frac{W(v_z)}{v_z} dv_z \int_0^\infty dz \int_0^z e^{ik(z'+z)} e^{\frac{L_0(z')-L_0(z)}{v_z}} dz' \quad (3.27)$$

$$S_{RS(-)} = \eta \Re \int_{-\infty}^0 \frac{W(v_z)}{v_z} dv_z \int_0^\infty dz \int_\infty^z e^{ik(z'+z)} e^{\frac{L_0(z')-L_0(z)}{v_z}} dz'. \quad (3.28)$$

onde $\eta = -\frac{4\pi\mu k N \Omega E_r}{n+1}$.

Fazendo-se na equação 3.28 uma transformação $z \rightarrow z'$ e $v_z \rightarrow -v'_z$, chega-se à mesma expressão que 3.27, se $W(v_z) = W(-v_z)$, isto é, se a distribuição de velocidade é simétrica. Resumindo, a expressão que descreve o sinal de reflexão

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

seletiva é:

$$S_{RS} = 2\eta \Re \int_0^\infty \frac{W(v_z)}{v_z} dv_z \int_0^\infty dz \int_\infty^z e^{ik(z'+z)} e^{\frac{L_0(z')-L_0(z)}{v_z}} dz'. \quad (3.29)$$

Essa forma de sinal depende da distribuição de velocidade, levando a espectros de largura Doppler se a distribuição de velocidades for de Maxwell. Pode ser mostrado [18] que a forma de linha desse sinal de reflexão seletiva é a convolução de uma dispersão e da distribuição de velocidade $W(v_z)$, descontínua em $v_z = 0$. No caso da largura, γ , da dispersão ser muito menor que a largura da distribuição de velocidades (Doppler), o sinal apresenta uma contribuição de largura sub-Doppler simétrica em torno de $v_z = 0$. Essas assinaturas nos dão informações sobre a interação com a superfície e devem ser de alguma forma isoladas para permitir a análise desses efeitos de superfície.

A diferença entre as curvas normalmente é muito pequena e um método para discriminar duas curvas com formas diferentes é derivá-las, realçando as variações rápidas, o que pode ser feito com o auxílio de uma detecção síncrona do tipo FM (modulação em frequência) descrito no apêndice A.

3.4.1 Sinal da RSFM

A derivação do sinal de R.S. pode simplificar a equação 3.29, considerando-se que a largura Doppler é muito maior que a largura de linha e que a dessintonia ($ku \gg \gamma, |\omega - \omega_0|$). Tem-se

$$S_{RSFM} \propto \frac{\partial}{\partial \omega} S_{RS} = -\eta W(0) \Im \left(\int dz \int_0^\infty \frac{(z' - z) e^{ik(z' - z)}}{L_0(z') - L_0(z)} dz' \right), \quad (3.30)$$

onde $\Im$ significa a parte imaginária e $W(0)$ representa os átomos com velocidades próximas a zero, que contribuem ao sinal.

No caso específico da interação de van der Waals com uma superfície die-

3.4. SISTEMA DE DOIS NÍVEIS

létrica, considerou-se que:

$$\begin{cases} \gamma(z) = \text{constante} = \gamma \\ \omega(z) = \omega_{ef} - \frac{\Theta}{z_3} \end{cases}, \quad (3.31)$$

onde $\Theta = C_{3e} - C_{3f}$ é a diferença entre a interação entre do nível fundamental e a do excitado, e

$$L_0(z) = \frac{\gamma}{2}z - i \left((\omega - \omega_0)z - \frac{\Theta}{2z^2} \right). \quad (3.32)$$

Para cada valor de C_3 e para cada largura de linha, deve-se calcular essa dupla integral para a obtenção da forma de linha do sinal detectado. Porém, uma transformação pode ser feita [25] com a introdução de uma nova constante $A = \frac{C_3 k^3}{\gamma/2}$ adimensional. Pode-se então escrever o sinal como

$$S_{RSFM} = -\frac{2\eta W(0)}{k^2 \gamma} \Im \int_0^{+\infty} d\xi \int_0^{+\infty} \frac{(\xi' - \xi) e^{i(\xi' - \xi)}}{(1 - i\delta)(\xi' - \xi) + i\frac{A}{2} \left(\frac{1}{\xi'^2} - \frac{1}{\xi^2} \right)} d\xi' \quad (3.33)$$

onde $kz = \xi$, $kz' = \xi'$ e $\delta = \frac{\omega - \omega_0}{\gamma/2}$ são novas transformações para simplificar a equação. Dessa forma, podem-se calcular curvas para diferentes conjuntos de parâmetros C_3 e γ variando-se apenas o parâmetro A . Desta maneira, é possível criar uma biblioteca das possíveis formas espectrais.

Na Figura 3.4, têm-se as curvas para valores pequenos de A , onde se percebe que pequenas variações em A assemelham-se a deslocamentos na curva. Na Figura 3.5, para valores maiores de A , as grandes variações podem assemelhar à inversão da forma de linha e ao aumento de “oscilações” (em relação a $A = 0$).

Aparentemente, essas curvas têm formas que são aparentemente independentes, necessitando da realização de cálculos numéricos para resolver cada curva espectral. A sensibilidade das curvas à interação de van der Waals permite determinar C_3 com precisão.

São essas as curvas utilizadas nos ajustes, feitos no Capítulo 5, das curvas do experimento descrito no Capítulo 4. Para sistemas mais complexos, como por

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

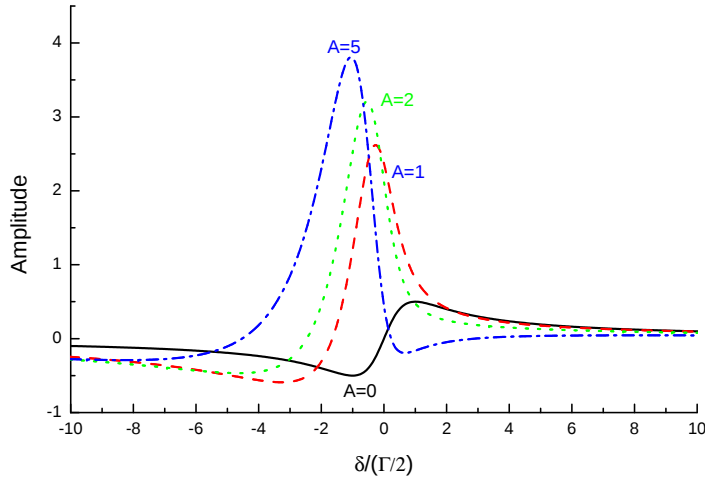


Figura 3.4: Espectros teóricos de RSFM para pequenos valores de A .

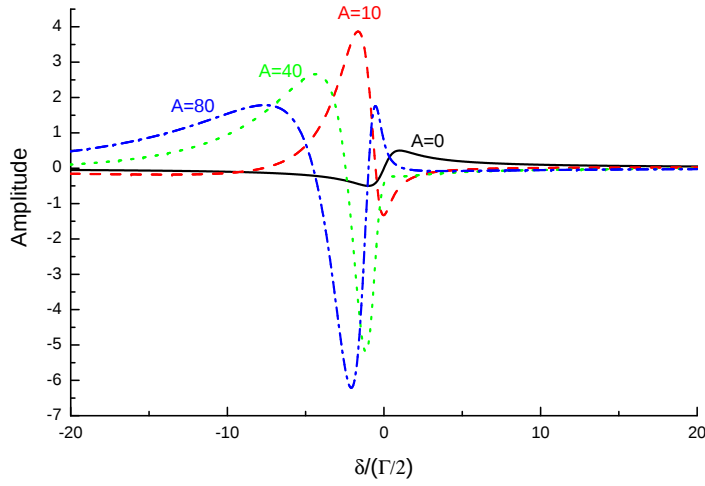


Figura 3.5: Espectros teóricos de RSFM mostrando as modificações de forma do sinal para grandes diferenças nos valores de A .

3.5. CONCLUSÃO

exemplo o descrito no Capítulo 6 para calcular o espectro do experimento de Failache et al. [26], há a necessidade de se calcular todo o espectro para o sistema a cada mudança de um único parâmetro, o que torna a análise mais complexa.

3.5 Conclusão

A técnica de Reflexão Seletiva não permite medida direta da interação com a superfície. Entretanto, é uma técnica espectroscópica sensível ao que ocorre próximo à superfície e tem curvas espectrais distintas para cada coeficiente de interação.

Para sistemas de dois níveis, a obtenção de curvas teóricas para comparar com resultados de experimentos usando a modulação FM é bastante simples e pode ser realizado através de um único parâmetro adimensional A . A técnica de Reflexão Seletiva mostrou ser uma técnica teoricamente muito eficiente para a detecção dos efeitos da interação de van der Waals. Para a extração dos dados de um experimento de reflexão seletiva deve-se comparar a curva experimental à curva teórica. A precisão da técnica é limitada basicamente pela capacidade de “escolha” da curva (e seus parâmetros) que mais se assemelham a curva experimental.

CAPÍTULO 3. DETECTANDO A INTERAÇÃO VDW

Referências Bibliográficas

- [1] M. Oriá, M. Chevrollier, D. Bloch, M. Fichet e M. Ducloy, *Spectral observation of surface-induced van der Waals attraction on atomic vapor*, Europhys. Lett., **14**, 527 (1994).
- [2] V. Sandoghdar, C. I. Sukenik, E. A. Hinds e S. Haroche, *Direct Measurement of the van der Waals Interaction between an Atom and Its Images in a Micron-Sized Cavity*, Physical Review Letters, **68**, 3432 (1992), primeira medida direta da interação van der Waals como função da separação átomo-superfície.
- [3] R. Grisenti, W. Schollkopf e J. Toennies, *Determination of Atom-Surface van der Waals Potentials from Transmission-Grating Diffraction Intensities*, Phys. Rev. Lett., **83**, 1755 (1999).
- [4] M. C. Vargas e W. L. Mochán, *Atom-surface band structure and bound-state resonances: A theoretical study*, Surface Science, **409**, 130 (1998).
- [5] E. Lima, M. Chevrollier, O. D. Lorenzo, P. Segundo e M. Oriá, *Long-Range atom-surface bound states*, Physical Review A, **62**, 013410 (2000).
- [6] H. Freitas, A. Rocha, M. Chevrollier e M. Oriá, *Radiation trapping and spin relaxation of cesium atoms at cell walls*, Appl. Phys. B -Lasers, **76**, 661 (2003).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [7] G. Dutier, *Cavité nanométrique de vapeur de Césium: spectroscopie à haute résolution et interaction de surface de type van der Waals*, Tese de Doutorado, Université Paris 13 (2003).
- [8] G. Dutier, S. Saltiel, D. Bloch e M. Ducloy, *Revisiting optical spectroscopy in a thin vapor cell: mixing of reflection and transmission as a Fabry-Perot microcavity effect*, J. Opt. Soc. Am. B, **20**, 172 (2003), observação de efeitos de microcavidades, considerando os efeitos de Fabry-Perot e espectroscópicos.
- [9] S. Briaudeau, D. Bloch e M. Ducloy, *Sub-Doppler spectroscopy in a thin film of resonant vapor*, Physical Review A, **59**, 3723 (1999).
- [10] R. J. Cook, *Atomic motion in resonant radiation: An application of Ehrenfest's theorem*, Physical Review A, **20** (1979), artigo teórico que utiliza a matriz densidade para obter as forças dipolar e espontânea.
- [11] R. J. Cook e R. K. Hill, *An electromagnetic mirror for neutral atoms*, Optics Communications, **43** (1982), força repulsiva da onda evanescente, uma aplicação da força dipolar.
- [12] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc e G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes* (InterEditions/Editions du CNRS, Paris, 1988).
- [13] D. Meschede, W. Jhe e E. Hinds, *Radiative properties of atoms near a conducting plane: An old problem in a new light*, Phys. Rev. A, **41**, 1587 (1990).
- [14] M. A. Kasevich, D. S. Weiss e S. Chu, *Normal-incidence reflection of atoms from an optical evanescent wave*, Optics Letters, **15** (1990).
- [15] Y. B. Ovchinnikov, I. Manek e R. Grimm, *Surface Trap for Cs atoms based on Evanescent-Wave Cooling*, Phys. Rev. Lett, **79** (1997).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [16] G. J. Liston, S. M. Tan e D. F. Walls, *Quantum dynamics of bouncing atoms in a stable gravitational cavity*, Applied Physics B, **60** (1995).
- [17] H. Nha e W. Jhe, *Sisyphus cooling on the surface of a hollow-mirror atom trap*, Physical Review A, **56** (1997).
- [18] M. Chevrollier, *Spectroscopie de réflexion sélective à une interface diélectrique/vapeur de césium. Observation de l'attraction van der Waals de surface.*, Tese de Doutorado, Université Paris XIII (1992).
- [19] H. de Freitas, *Estudos de processos da Interação de átomos de césio com superfícies dielétricas utilizando lasers de diodo.*, Tese de Doutorado, Universidade Federal da Paraíba (2002).
- [20] P. Simoneau, S. L. Boiteux, C. de Araujo, D. Bloch, J. Leite e M. Ducloy, *Doppler-free Evanescent Wave Spectroscopy*, Optics Communications, **59**, 103 (1986).
- [21] R. Wood, *The selective reflection of monochromatic light by Mercury vapor.*, Phil. Mag., **18**, 187 (1909), surge o termo reflexão seletiva.
- [22] S. L. Boiteux, P. Simoneau, D. Bloch e M. Ducloy, *Doppler-free spectroscopy at a glass-vapour interface by saturated selective reflection at near normal incidence*, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. Lett., **20**, 149 (1987).
- [23] M. Chevrollier, M. Fichet, M. Oriá, G. Rahmat, D. Bloch e M. Ducloy, *High resolution selective reflection spectroscopy as a probe of long-range surface interaction: measurement of the surface van der Waals attraction exerted on excited atoms*, J. Phys II France, **2**, 631 (1992).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [24] H. Failache, *Etude spectroscopique des resonances dans l'interaction de van der Waals entre un atome et une surface dielectrique*, Tese de Doutorado, Université Paris XIII (1999).
- [25] M. Ducloy e M. Fichet, *General theory of frequency modulated selective reflection. Influence of atom surface interactions*, Journal de Physique II France I, **1**, 1429 (1991), teoria geral da reflexão seletiva modulada, influenciando na curva espectral por causa da mudanças nas interações com os átomos próximos à superfície.
- [26] H. Failache, S. Saltiel, A. Fischer, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant Quenching of Gas-Phase Cs Atoms Induced by Surface Polaritons*, Phys. Rev. Lett., **88**, 243603 (2002).

Capítulo 4

Experimento de Reflexão Seletiva

Sumário

4.1	Introdução	74
4.2	O laser	75
4.2.1	Linearidade do Diodo Laser	76
4.3	Sistema atômico	80
4.3.1	Absorção saturada de referência	82
4.3.2	Efeitos de Pressão	83
4.4	Sistema de detecção	91
4.4.1	Geometria	91
4.4.2	Controle via computador	92
4.4.3	Sinal da aquisição dos dados	93
4.5	Medidas	95
4.6	Conclusão	99

4.1 Introdução

No Capítulo 3, viu-se a teoria para a extração de parâmetros como o coeficiente C_3 de van der Waals utilizando a técnica da reflexão seletiva [1, 2] (RS). A escolha dessa técnica espectroscópica foi detalhada no Capítulo 3 e uma das vantagens é demandar um pequeno aparato: uma fonte de radiação, um vapor atômico, uma superfície dielétrica e um sistema de detecção. O princípio é fazer incidir o laser quase-normal à superfície interna da célula contendo vapor atômico e detectar o feixe refletido nessa interface dielétrico-vapor, como mostrado na Figura 4.1.

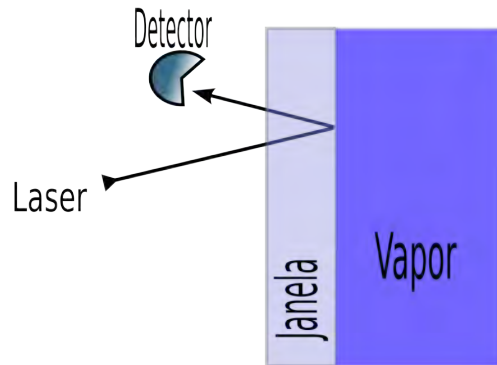


Figura 4.1: *Esquema simplificado da reflexão seletiva.*

Neste capítulo, descreve-se cada parte do aparato utilizado no experimento de Reflexão Seletiva. A fonte de radiação é um diodo laser que será descrito na Seção 4.2, mostrando a sintonizabilidade e linearidade do laser. Para o vapor atômico foi escolhido átomos de césius por causa das ressonâncias com algumas superfícies, explicado no Capítulo 3. Será mostrada na Seção 4.3, além dos níveis atômicos do césius, a referência atômica com a técnica de absorção saturada, detalhes sobre a célula com vapor de césius e da dependência das propriedades do vapor com a pressão. Na seção 4.4, o sistema de detecção é detalhado em algumas partes: o sistema de aquisição, o controle via computador, o sistema de modulação e a detecção síncrona.

4.2. O LASER

Ao final deste capítulo, seção 4.5, há os espectros de reflexão seletiva obtidos neste experimento para algumas temperaturas. Esses espectros serão tratados por uma técnica de ajuste de curvas descrito no Capítulo 5.

4.2 O laser

O laser utilizado para realizar essas experiências de reflexão seletiva, na transição $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$ é um laser de diodo emitindo em torno de $\lambda = 387$ nm, comprimento de onda dessa transição, e com a potência de saída utilizada sempre menor que 1 mW. O laser é realimentado com uma grade de difração na configuração de Littman, para facilitar a sintonia e diminuir a largura do espectro de emissão do laser. Nessa configuração estão presentes duas cavidades: a do diodo laser e a formada entre a grade e o diodo. Essas duas cavidades definem a frequência de emissão do diodo laser. A cavidade do diodo laser é modificada pela variação de temperatura e corrente do diodo laser e a cavidade externa, pela variação da posição da grade via aplicação de tensão em um PZT na base da mesma. A temperatura do laser é mantida constante por um controle PID da diferença do sinal do detector de temperatura (NTC) na base do diodo e o sinal de referência (resistência). Para uma varredura da frequência do laser pode-se utilizar dos dois métodos: varredura de corrente e de tensão do PZT. Pequenas varreduras (alguns MHz), como por exemplo para a modulação em frequência, são feitas apenas com a modificação de corrente. Para maiores varreduras, deve-se utilizar da combinação da variação de corrente e da tensão do PZT. Foi possível varrer continuamente mais de 10 GHz.

Neste experimento, o sistema laser apresenta uma série de variáveis difíceis de controlar com a precisão necessária, resultando que o sistema não é muito reprodutível. Isto implica que a frequência do laser não pode ser determinada somente a partir dos parâmetros de corrente, temperatura e tensão no PZT. Por isso,

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

o laser deve ser analisado simultaneamente com as aquisições realizadas. Na subseção 4.2.1, é tratado a detecção da intensidade, do modo e da frequência relativa e absoluta. Para a referência de frequência absoluta, utilizou-se a frequência das linhas atômicas observadas com uma experiência de absorção saturada, descrita na seção 4.3, a partir de uma fração do feixe laser. Essa fração do laser para análise é conseguida com um divisor de feixe, que pode ser uma simples lâmina de vidro.

4.2.1 Linearidade do Diodo Laser

Pensando na curva espectral a ser obtida e analisada, há a necessidade de garantir a linearidade na frequência e na estabilidade na intensidade durante a varredura. Nesse sentido, tem que se considerar todas as causas que possam modificar a forma da curva obtida. Nessa sub-seção, será analisado a variação da intensidade e da frequência durante a varredura. Fez-se uma montagem conforme à figura 4.2 em que há a possibilidade de verificar o sinal de transmissão de um discriminador de frequência (Fabry-Perot (FP)) e de observar uma absorção linear.

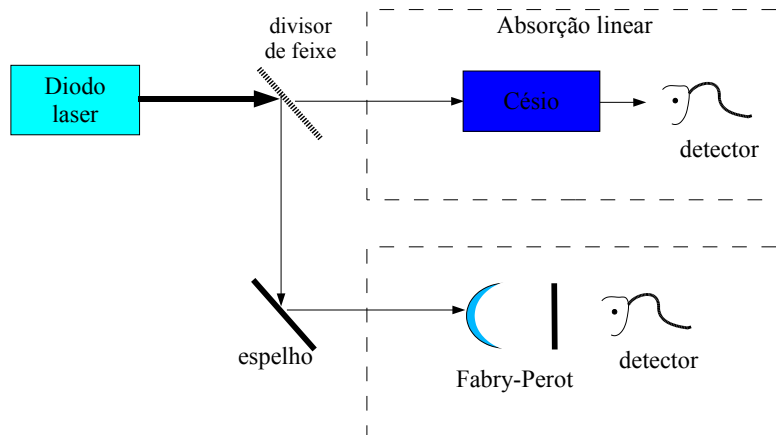


Figura 4.2: Montagem para a análise da linearidade da frequência do laser e da intensidade.

A varredura do laser, na configuração Littrow, é feita pelo lock-in SR530

4.2. O LASER

que fornece uma tensão que modifica ao mesmo tempo a corrente do laser e a posição da grade. Entretanto, isso não modifica apenas a frequência do laser mas também a sua potência de emissão e conseqüentemente os sinais detectados. Na Figura 4.3, mostra-se esses sinais, utilizados para a calibração da frequência do laser em função da tensão da rampa.

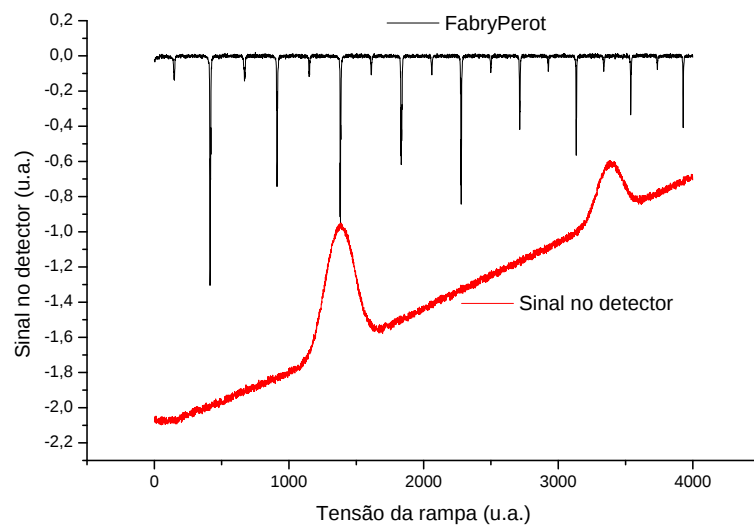


Figura 4.3: *Deteção direta dos detectores*

Pode-se assim estabelecer uma relação entre a frequência do laser e a tensão da rampa. Para analisar melhor a relação, deve-se utilizar um sistema permitindo uma resolução melhor que a absorção linear, que tem separação dos picos em 9 GHz. No caso utilizou-se o um Fabry-Perot (FP) côncavo-plano que admite três configurações geométricas: ida-e-volta simples, em forma de V e em forma de W. A menor separação entre dois picos consecutivos é de 1 GHz porém os comprimentos dos caminhos óticos diferem de um fator 2 ou 4 para os diferentes modos possíveis, resultando no espectro de transmissão do FP com 3 tipos de picos com alturas diferentes, como pode ser visto na Figura 4.4.

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

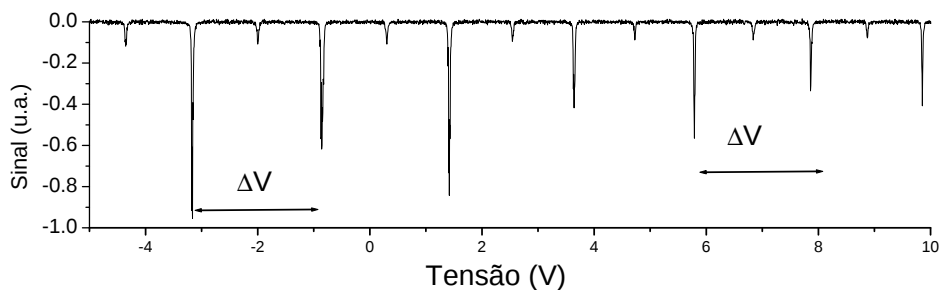


Figura 4.4: Picos do FP com a varredura em tensão.

Observando-se com mais detalhes essa a relação frequência/tensão percebe-se que não é constante. Na Figura 4.5, os pontos representam a frequência de acordo

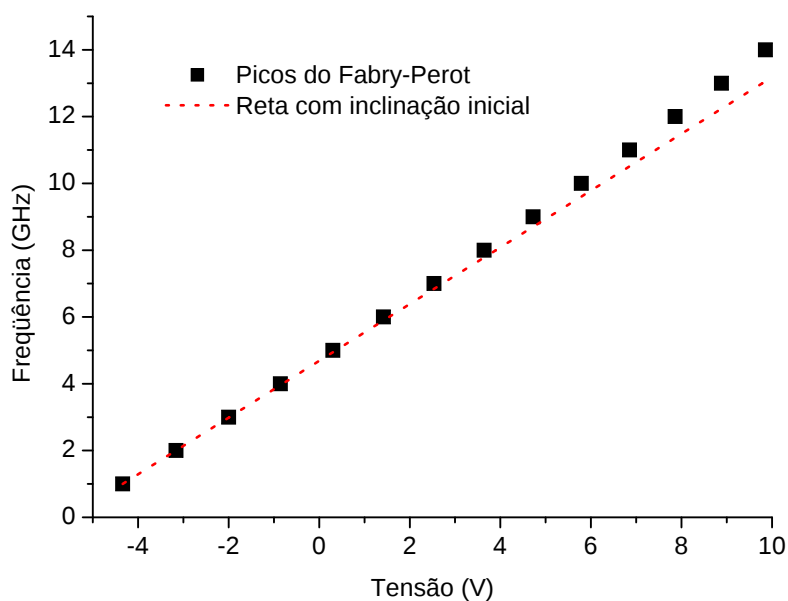


Figura 4.5: Variação da frequência na varredura em tensão. Os pontos representam os picos do FP e a reta a inclinação da primeira região.

com a tensão aplicada para a varredura considerando que cada um dos picos do FP que tenha uma separação conhecida de 1 GHz. A reta tem a inclinação da primeira região e é utilizada para mostrar a diferença das relações.

4.2. O LASER

Para a varredura pode-se considerar dois regimes: grande e pequena varredura. A grande da ordem de 10GHz, um pouco maior que a separação de 9 GHz dos níveis fundamentais, e a pequena de 1 GHz, da ordem da largura Doppler. Para a grande varredura, vê-se a não-linearidade, de 20% no máximo, da relação de 0,85 GHz/V para 1,05 GHz/V, e a calibração pode ser feita com a separação dos picos do FP.

Para pequena varredura, entretanto, pode-se considerar a varredura linear em frequência, considerando que se observa apenas uma pequena região desse espectro (≈ 1 GHz de um extremo a outro). A diferença entre duas regiões consecutivas é da ordem de 0,5 %, por exemplo, de 0,855 $\rightarrow$ 0,86 GHz/V ou 1,0 $\rightarrow$ 1,03 GHz/V. Porém, como as condições do laser não são sempre as mesmas, faz-se necessária uma calibração a cada aquisição efetuada para se determinar de forma absoluta a frequência e a escala. Além do mais, nesse caso com a medida sendo feita em uma pequena varredura, da ordem da separação de apenas dois picos do FP, utiliza-se a calibração feita a partir da referência de uma absorção saturada, em que os picos têm separação bem conhecida, dada pelas transições atômicas.

Um outro efeito observado na figura 4.3 é a variação da amplitude no espectro de transmissão. Fora da região de ressonância, observa-se uma declividade linear do sinal. Isso é devido à variação da intensidade do laser durante a varredura. Da mesma forma que desprezou-se a não-linearidade da frequência, despreza-se aqui essa variação de intensidade, que é menor que 1% por GHz.

A observação do sinal da absorção linear, que direto, é dado pela diferença do sinal com e sem absorção dividido pelo sinal sem absorção. Por causa dessa variação de intensidade deve ser considerada e feita uma normalização. Essa normalização pode ser feita de duas formas: a detecção direta da intensidade do laser ou aproximando por uma reta o sinal de da absorção durante uma varredura. No primeiro tipo, parte do feixe do laser vai para um detector de referência, em que

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

pode ser detectado a variação de intensidade. No segundo tipo, mede-se o sinal de uma varredura que começa e termine fora da ressonância, ou seja, mais largo que a ressonância. Sendo a variação linear da potência do laser, a medida da absorção é dado pela diferença do sinal com uma reta que melhor se aproxima da base do próprio sinal. Para se ter o percentual absorvido divide-se esse resultado pelo sinal de intensidade do laser dividindo-se pelo do laser. Essa normalização em amplitude da Figura 4.3 é mostrado na Figura 4.6. Observa-se que o sinal é mais ruidoso do

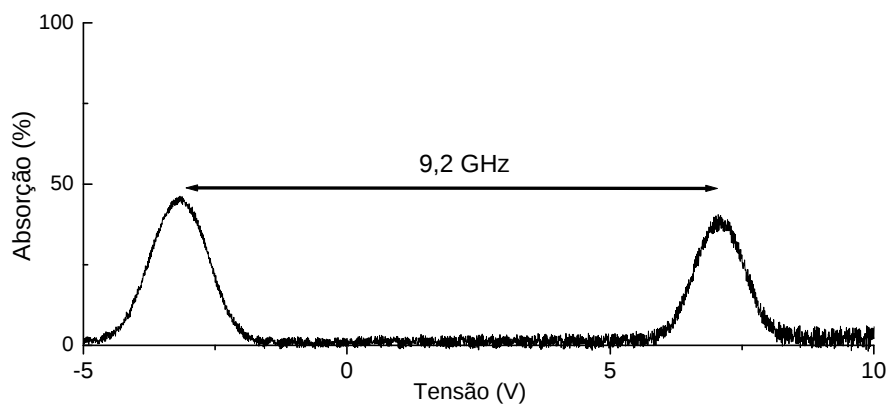


Figura 4.6: Absorção linear com normalização em intensidade.

lado direito que o esquerdo, porque o ruído manteve a mesma amplitude enquanto que o sinal diminuía e na divisão isso equivale a amplificar o ruído.

4.3 Sistema atômico

O átomo observado neste experimento foi o césio na transição atômica $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$, descrito na figura 4.7. Note-se que os níveis hiperfinos do nível $8P_{3/2}$ são muito mais próximos que os do nível $6S_{1/2}$. Particularmente, a separação entre os sub-níveis hiperfinos do estado fundamental é muito maior do que a largura Doppler da transição, que é da ordem de algumas centenas de MHz, enquanto que os sub-níveis hiperfinos do nível excitado são separados por energias muito menores

4.3. SISTEMA ATÔMICO

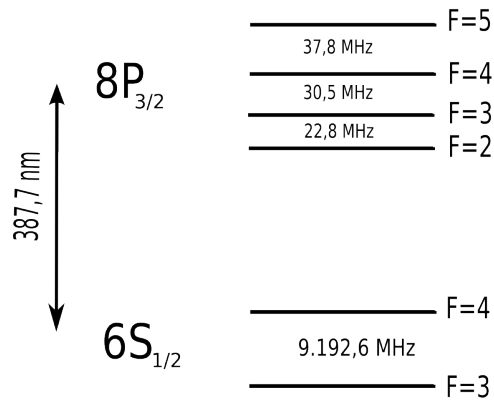


Figura 4.7: Estrutura hiperfina dos níveis $6S_{1/2}$ e $8P_{3/2}$ do césio, com a separação em frequência entre os níveis indicada.

que essa largura Doppler. Por causa dessa diferença de separação, considera-se dois grupos de transição a partir do nível fundamental $6S_{1/2}$, a saber, $F = 3$ e $F = 4$. Isso é facilmente compreendido observando o sinal da absorção linear, que é o sinal de transmissão de um laser através da célula com o vapor ressonante. Esse sinal é mostrado na figura 4.8. Todos os sub-níveis hiperfinos estão sobrepostos pelo

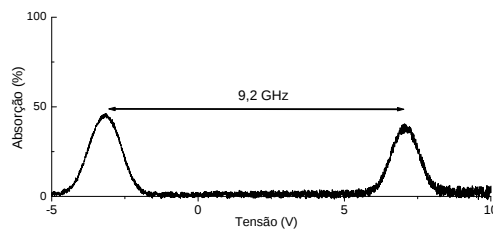


Figura 4.8: Estrutura hiperfina dos níveis $6S_{1/2}$ e $8P_{3/2}$ do césio, com a separação em frequência entre os níveis indicado.

efeito Doppler do próprio vapor de césio. Esses sub-níveis hiperfinos podem ser resolvidos por meio da técnica de absorção saturada.

4.3.1 Absorção saturada de referência

A experiência de absorção saturada consiste em fazer passar dois feixes contra-propagantes em uma célula com vapor atômico ressonante, e o objetivo é observar linhas livres do efeito Doppler devido à distribuição térmica de velocidade desse vapor. Um feixe satura a transição e o outro feixe (o sonda) é utilizado para sondar o vapor saturado. Quando os dois feixes têm a mesma frequência, o sinal obtido (transmissão do feixe sonda) é um espectro largo (Doppler) com buracos¹ correspondendo às transições hiperfinas, cujas separações são inferiores à largura Doppler.

Esse sinal pode ser utilizado como referência absoluta, desde que os átomos possam ser considerados livres. A análise da dependência do sinal de absorção saturada com a temperatura do reservatório de césio da célula, que modifica a densidade e aumenta a interação entre os átomos, é feita no Capítulo 5.

Para aumentar o sinal, uma vez que a potência é limitada, utilizou-se um sistema de telescópio de tal forma que dentro da célula a intensidade seja máxima, isto é, a saturação maior. Essa focalização tem que ocorrer nos dois feixes (sonda e bombeio) para que possa ser detectada toda a região de saturação. Outra forma de ampliar o sinal é aumentando a densidade, o que pode ser obtido através do aumento de temperatura, porém isso também introduz efeitos de deslocamentos e alargamento das linhas atômicas, ver seção 4.3.2.

Para melhorar o sinal e observar as linhas sobre largo fundo Doppler foi feito uma modulação do sinal. Essa modulação tem que ter frequência diferente de um dos múltiplos da frequência da rede elétrica e estar na faixa aceitável do detector. Há duas formas básicas de modulação: em amplitude (AM) e em frequência (FM).

¹Não há figura da absorção saturada direta, pois não são observados os buracos devido a fraca saturação

4.3. SISTEMA ATÔMICO

Referência com modulação AM

Modula-se o feixe de bombeio e faz-se a detecção síncrona do feixe sonda, detectando somente a frequência de modulação, *i.e.* somente a modulação do feixe sonda induzida pelo feixe saturante. O resultado é que a absorção linear do feixe sonda não aparece no espectro demodulado, onde podem ser observadas as linhas de absorção, com a largura homogênea das transições hiperfinas.

Referência com modulação FM

A partir da modulação da frequência do laser, utilizado no experimento de reflexão seletiva (RSFM), pode-se observar a derivada do espectro de absorção saturada. Como a largura homogênea das transições é muito menor que a largura Doppler, isso implica que os estreitos picos da absorção saturada (transições e *crossover*) são mais evidenciadas do que o largo pico Doppler. O cálculo do sinal para esse tipo de modulação é mostrado no Apêndice A. A vantagem principal de se utilizar essa modulação é a utilização da modulação FM necessária ao experimento de reflexão seletiva.

4.3.2 Efeitos de Pressão

A realização e a interpretação de um experimento de espectroscopia em um sistema atômico requerem que se levem em conta efeitos associados à interação átomo-átomo. Os efeitos espectroscópicos observados foram o deslocamento e o alargamento da linha atômica. Esses efeitos podem ser considerados lineares com a pressão em uma aproximação de primeira ordem.

O vapor de césio normalmente utilizado em para experimentos de espectroscopia atômica em células resulta da evaporação de uma pequena porção de césio. Nas condições estudadas de baixa pressão, menor que 1 mTorr, pode-se considerar

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

o vapor de césio como um gás quase ideal, isto é, para o qual a equação termodinâmica $PV = nRT$ é válida. Porém, nas células tem-se uma parte de césio não evaporado, ou seja, que continua no estado líquido ou sólido. Assim, o número de átomos n é também função da temperatura de tal forma que a pressão de vapor equilibre a pressão de superfície do césio não evaporado.

Para os átomos de césio, a pressão é uma função da temperatura, sendo dada empiricamente por [3]:

$$\begin{aligned}\log_{10} P &= 8.22127 - \frac{4006}{T} - 0.00060194T - 0.19623 \log_{10}(T) \quad (\text{fase líquida}) \\ \log_{10} P &= -219.482 + \frac{1088.676}{T} - 0.08336185T + 94.88752 \log_{10} T \quad (\text{fase sólida})\end{aligned}\quad (4.1)$$

onde a pressão P é dada em mTorr e a temperatura T , em Kelvin, sendo que a mudança de fase ocorre em $28,44^\circ\text{C}$. Observamos na figura 4.9 que a pressão pode

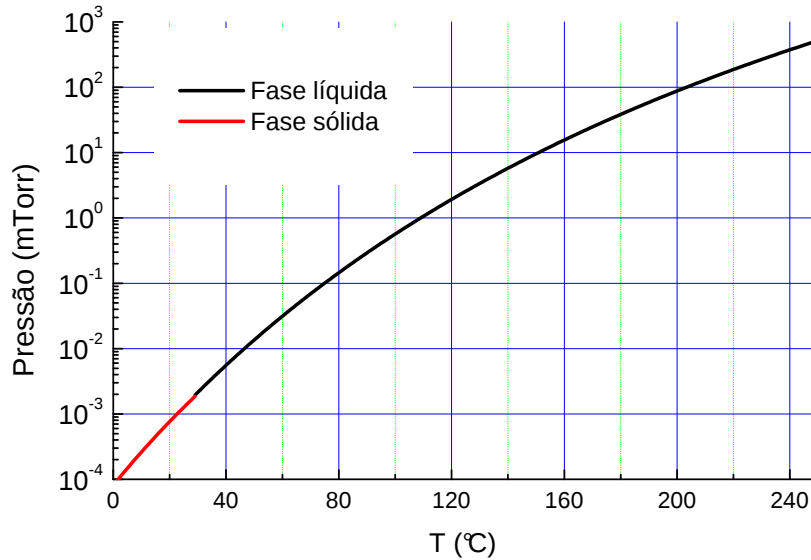


Figura 4.9: Curva da pressão em função da temperatura para o césio.

mudar em até uma ordem de grandeza para uma variação na temperatura do césio

4.3. SISTEMA ATÔMICO

de apenas 20°C . Desta forma, um pequeno erro na medida da temperatura do césio pode significar uma grande diferença na medida de pressão. Por exemplo um erro de 5°C em torno da temperatura 20°C leva a uma imprecisão de um fator 1,7 na pressão e o mesmo erro a temperatura 200°C equivale a 20 % de imprecisão . Mas ao fazer medidas em condições parecidas, espera-se que a proporção entre o valor medido e o valor real seja mantida.

Nos experimentos realizados, a célula era aquecida por fios Thermocoax, conforme a figura 4.10. Para evitar a condensação de césio no corpo da célula e

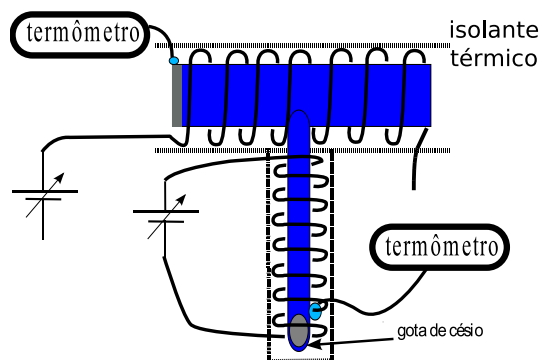


Figura 4.10: *Esquema do aquecimento da célula de césio. Os termômetros se encontram fora da célula e próximos aos pontos do reservatório de césio e a janela dielétrica.*

mais particularmente nas janelas, manteve-se sempre uma diferença de temperatura entre o corpo da célula e o reservatório, de tal forma que o reservatório de césio condensado estivesse sempre em uma temperatura um pouco mais baixa do que a temperatura das janelas para espectroscopia. Tanto no aquecimento quanto no resfriamento, devem-se evitar variações bruscas de temperatura, para evitar a condensação na janela e não fragilizar a célula.

Para o experimento descrito, foram realizadas medições em diferentes condições de pressão, deduzidas da medida da temperatura. Entre essas medições, respeita-se um intervalo de alguns minutos para garantir o equilíbrio da nova tem-

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

peratura (estabilização dos medidores) e para evitar a dinâmica do fluxo de césio. Considerou-se que a pressão do vapor de césio é dada pela temperatura do reservatório, apesar do gradiente entre este e as janelas.

Para este sistema (transição $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$ do césio), observou-se um deslocamento dado por $\delta = \omega - \omega_0$, onde ω é a frequência da transição dos átomos quentes e ω_0 é a frequência atômica de referência. Observou-se também um alargamento da linha atômica γ dependente da pressão. Nas Figuras 4.11, 4.12 e 4.13,

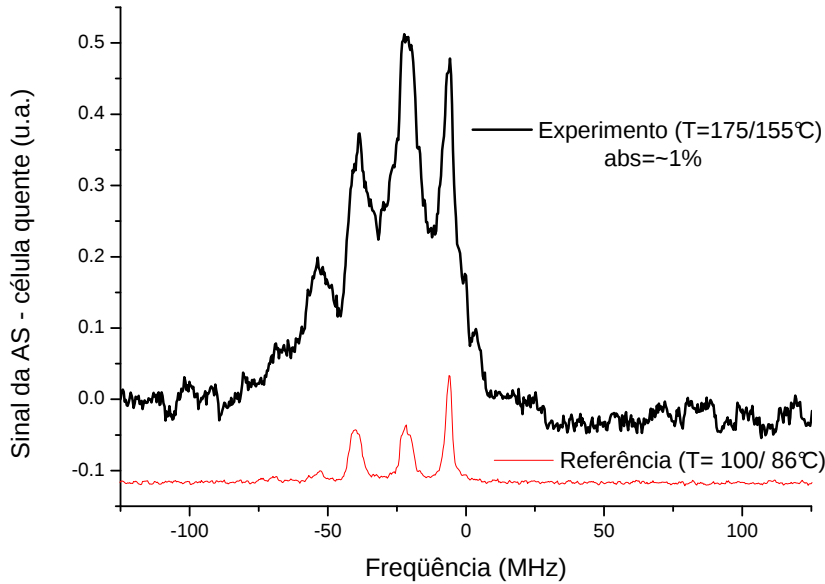


Figura 4.11: Absorção saturada $F=4$.

tem-se os espectros de absorção saturada para 3 temperaturas para os dois grupos de transição: partindo dos níveis hiperfinos do fundamental $F=3$ e do fundamental $F=4$. Para baixas temperaturas, os picos são mais fáceis de serem resolvidos, enquanto que, para altas temperaturas, a largura de linha atinge valores comparáveis com a separação dos picos. Entretanto, ainda é possível extrair dados espectroscópicos dessas curvas.

Foi estudada a dependência com a pressão comparando-se dois espectros

4.3. SISTEMA ATÔMICO

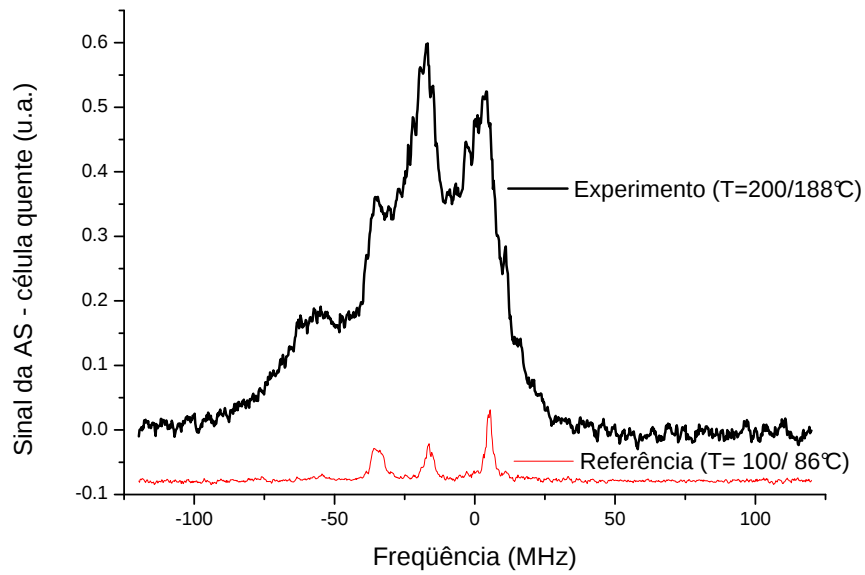


Figura 4.12: Absorção saturada $F=4$.

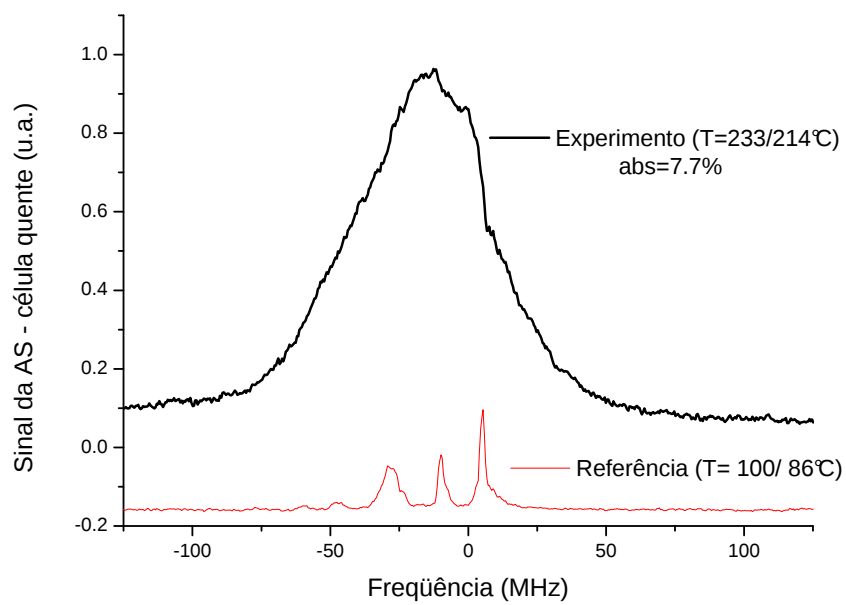


Figura 4.13: Absorção saturada $F=4$.

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

de absorção saturada gravados simultaneamente:

- um (de referência) realizado em uma temperatura próxima à temperatura ambiente (“célula fria”), regime no qual a pressão é muito baixa e os átomos podem ser considerados como isolados;
- e outro espectro realizado a temperatura mais alta (“célula quente”).

Os espectros de absorção saturada modulada em amplitude continham 6 picos: 3 transições + 3 *crossover*. Na Figura 4.14, há um exemplo dos sinais de

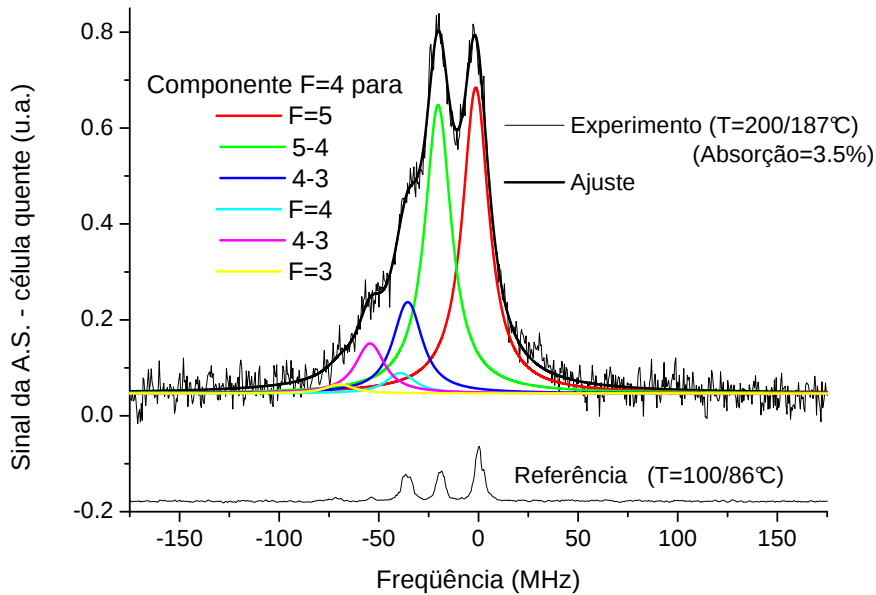


Figura 4.14: Componentes dos picos de absorção saturada.

absorção saturada adquiridos. Vê-se que os picos não são todos bem resolvidos, principalmente o pico das transições $F=4$ para $F'=4$ que mistura-se com o $F=4$ com “crossover” $3 \leftrightarrow 5$. A amplitude desses dois picos poderiam até ser trocadas não mudando o resultado.

Podem ser extraídos alguns valores desses espectros. O número de parâmetros para ajustar é, além do “off-set”, 3 para cada pico: posição, amplitude, largura.

4.3. SISTEMA ATÔMICO

É necessário ajustar 16 parâmetros, entretanto é possível utilizar agrupamentos de parâmetros devido as possíveis relações físicas. Foram realizados 3 tipos de ajuste de curva considerando:

1. tudo variável;
2. separação entre os picos constante mas com as amplitudes variáveis.
3. separação entre os picos constante com a proporção de amplitude fixa;

No primeiro caso, não considerou alguma relação entre os picos. Devido ao grande número de graus de liberdade o resultado seria difícil de analisar, pois há uma sobreposição das curvas.

No segundo e terceiro casos, manteve-se a mesma separação entre os picos que a referência. Essa consideração está ligada a pequena separação entre os picos que chegam inclusive a se sobreporem, o que pode levar a se deslocarem agrupados, com o mesmo deslocamento.

No terceiro caso, considerou-se além das relações entre as posições que a proporção entre as amplitudes era mantida em relação ao primeiro experimento, ou a referência. Essa consideração está ligada ao fato que os fatores de transição não mudem, isto seria considerar um efeito linear na absorção saturada.

O conjunto dos diferentes ajustes mostraram resultados muito próximos dando maior confiabilidade ao resultado. O sistema, que se mostrou invariante a esses agrupamentos, pode ser entendido que essas considerações são válidas ou são compensadas de alguma forma.

Os pontos das curvas 4.15 e 4.16 resultam de ajustes das 6 lorentzianas, nesses 3 casos. Os resultados mostram que a dependência é aproximadamente linear em função da pressão tanto para a dessintonia como para o alargamento. O alargamento com a pressão pode ser compreendido pensando-se na diminuição do tempo de vida da transição pelo aumento de colisões átomo-átomo. Já para

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

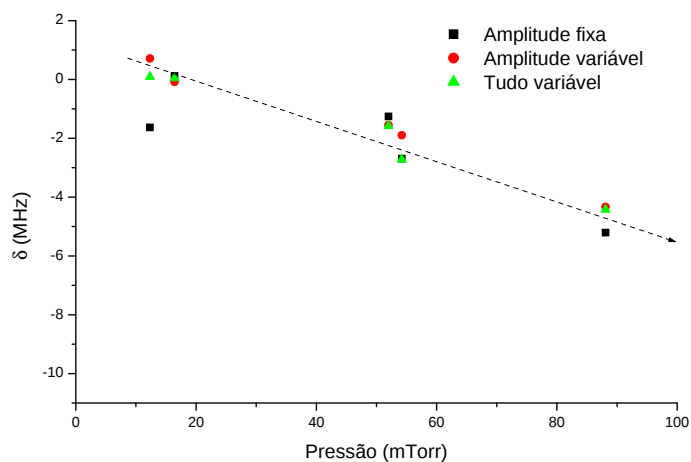


Figura 4.15: *Deslocamento da linha atômica em relação à linha atômica de referência em função da pressão.*

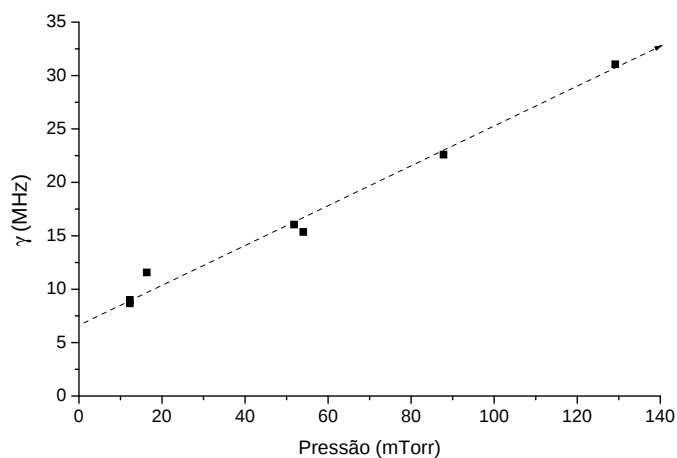


Figura 4.16: *Alargamento da linha atômica em função da pressão*

o deslocamento, pode-se pensar na interação átomo-átomo gerando um potencial do tipo van der Waals, levando-se a uma modificação nos níveis de energia. Pelo aumento da densidade, os átomos ficam em média mais próximos um dos outros, modificando a diferença de energia entre os níveis. No nosso experimento, estuda-

4.4. SISTEMA DE DETECÇÃO

se a transição $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$ e verifica-se que essa modificação ocorre no sentido de diminuir a energia da transição com a densidade.

4.4 Sistema de detecção

Uma vez definido o sistema de referência, passa-se para o experimento principal, a detecção do sinal de Reflexão Seletiva. A parte de detecção é composta da parte geométrica do feixe laser (alinhamento), descrito na sub-seção 4.4.1, dos detectores, do sistema de detecção síncrona e do sistema de aquisição, na sub-seção 4.4.2.

4.4.1 Geometria

Deve-se ter em mente que o sinal é obtido na reflexão da superfície interna da célula em contato com o vapor. A reflexão na interface ar/janela da célula (primeira interface “reflexo 1” na Figura 4.17), próxima à interface a ser analisada não

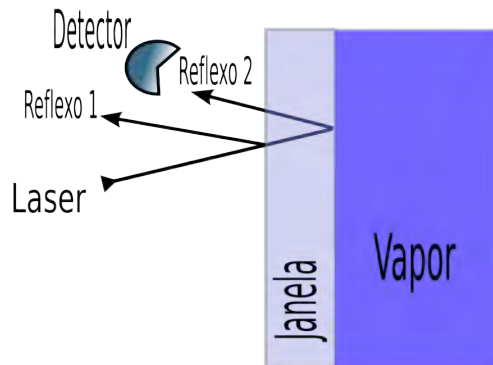


Figura 4.17: Esquema dos feixes refletidos pela janela, em uma experiência de reflexão seletiva.

contem informação do vapor atômico e deve ser descartada. Há duas formas de separar os feixes 1 e 2:

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

1. Incidindo o laser com um ângulo diferente da normal. Os feixes saem paralelos e, devido ao tamanho limitado dos feixes, podem ser separados com um diafragma, por exemplo.
2. Janela com faces não paralelas. Neste caso, há uma diferença nos ângulos dos dois feixes refletidos. Pode-se facilmente escolher entre os feixes. Entretanto, esse tipo de janela é mais difícil de encontrar, por ser para uma aplicação específica, e de trabalhar por ser mais difícil de determinar a direção normal à superfície interna.

Foi utilizado, neste experimento, uma célula com faces paralelas e um ângulo de incidência muito próximo da normal, resultando em uma separação entre os feixes de alguns milímetros, proporcional à largura da janela. A medida do ângulo de incidência é feita a partir da separação entre o feixe de incidência e o feixe refletido, neste caso foi de 1 cm para 1 m da célula.

4.4.2 Controle via computador

Uma grande parte do experimento era controlado por computador, via lock-in RS530, que permitia, entre outras coisas, a conversão analógica-digital e vice-versa. Uma rampa para varrer a frequência do diodo laser era gerada pelo computador e transformada em tensão pelo lock-in, que era ligado ao sistema de controle do laser, corrente e tensão do piezo-elétrico da grade. A aquisição dos sinais era também realizada via lock-in, tanto o sinal sincronizado quanto outros sinais pela entrada do lock-in. O esquema desse controle é mostrado na Figura 4.18. Via lock-in, foram feitas as aquisições de todos os sinais do experimento: reflexão seletiva, absorção saturada, Fabry-Perot. Nestes casos, o lock-in é utilizado na sua função principal: detecção síncrona.

O gerador de função gera uma tensão senoidal que modula diretamente a

4.4. SISTEMA DE DETECÇÃO

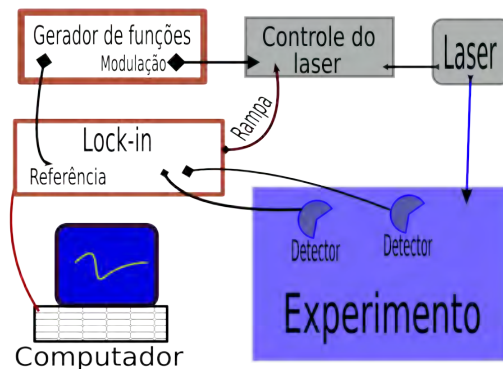


Figura 4.18: *Esquema da conexão eletrônica.*

corrente do laser, ou seja, a frequência de emissão do laser. A saída de referência do gerador de função é conectada ao lock-in e serve como sincronia para definir a frequência e a fase de referência. A fase da detecção é ajustada (máximo de sinal fora de ressonância) para levar em conta defasagens introduzidas pela montagem experimental (propagação da luz e tempo de resposta eletrônica essencialmente).

4.4.3 Sinal da aquisição dos dados

Nesta sub-seção, são discutidos alguns problemas que podem interferir no sinal durante a aquisição de dados do experimento. Qualquer sinal proveniente de uma aquisição eletrônica experimental tem algum ruído embutido [4]. Esse ruído pode ser o acúmulo de vários ruídos. Por exemplo, o ruído da eletrônica pode ser causado pelos ruídos intrínsecos à eletrônica, como as flutuações Thompson, e ruídos provenientes da indução da rede elétrica, resultando em múltiplos da frequência de oscilação da rede.

Existe também um ruído de “eletrônica digital”, devido ao sinal em modo analógico (em princípio contínuo) ser convertido em forma de sinal digital (portanto, discreto), podendo haver perda de informação. Para minimizar as perdas pela digitalização, deve-se otimizar a sensibilidade da aquisição para utilizar toda

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

a escala. Foi utilizada a entrada analógica do próprio lock-in (SR530) para fazer a digitalização do sinal. A limitação de sensibilidade desse lock-in é de 2,5 mV, numa escala que vai de -10 V até +10 V.

No diodo laser, ruídos eletrônicos dos controles de corrente e temperatura, bem como ruídos mecânicos na cavidade externa introduzem ruído na frequência do laser. O ruído em frequência traduz-se, em primeira ordem, em um alargamento da linha e será tratado com mais detalhes na seção 5.6.1. A variação de amplitude devido a esses ruídos foi negligenciada.

No caso de experimentos com laser e foto-detecores, ruídos mecânicos podem modificar o alinhamento do laser, alterando a intensidade do sinal detectado. Esses ruídos podem ter várias causas: mudança do coeficiente de reflexão na janela por causa da variação do ângulo; mudança da região de detecção no detector (considerado normalmente homogêneo na maioria dos detectores). Pode haver também, em experimentos com mais de um feixe, a modificação da região da sobreposição dos feixes. Esse efeito modifica a amplitude da absorção saturada, mas não a posição dos picos. No experimento de reflexão seletiva, tem-se apenas um feixe.

Os ruídos mecânicos podem ser reduzidos e até eliminados apenas com uma boa fixação dos componentes sobre uma mesa “rígida”, e com a colocação de lentes focalizando o feixe em cada detector. No caso de sistemas mais sensíveis, como o laser acoplado a uma grade ou uma cavidade Fabry-Perot, colocar uma blindagem às ondas sonoras, que pode ser uma simples caixa de papelão ou isopor, é suficiente em alguns casos.

O ruído é fortemente reduzido em uma detecção síncrona, onde se modula o sinal numa determinada frequência. Essa modulação pode ser em amplitude (AM) ou em frequência (FM). Observa-se o sinal apenas em torno da frequência de modulação. Essa frequência de modulação deve ser escolhida de maneira a não pertencer a uma faixa de ruído intenso do sistema.

4.5. MEDIDAS

De maneira geral, o laser apresenta uma instabilidade e um “jitter” em frequência. Esses fatores foram tratados, na sub-seção 5.6.1, como sendo equivalentes a um alargamento da linha atômica.

A amplitude do sinal de espectroscopia de reflexão seletiva depende linearmente do número de átomos. Para obter-se uma grande relação sinal-ruído, pode-se aumentar a densidade de átomos. Entretanto, como será apresentado na seção 4.3.2, a pressão afeta a transição atômica, modificando a largura e a frequência de transição da linha.

No experimento realizado, onde o laser está modulado em frequência, um aumento da amplitude de modulação também permite aumentar a amplitude do sinal. Entretanto, uma forte modulação FM pode distorcer a forma do sinal. Isto acontece quando não se levam em conta, na expansão da equação 3.30, termos de ordens superiores que agora não são mais desprezíveis. O tratamento para isso está descrito na seção 5.6, mais especificamente na sub-seção 5.6.1.

4.5 Medidas

Os espectros de reflexão seletiva foram realizados simultaneamente com os da absorção saturada, utilizada como referência de frequência. Em uma parte do experimento a absorção saturada foi feita com modulação em amplitude (AM) e outra parte com modulação em frequência (FM). São mostrados nas figuras seguintes alguns desses espectros para diversas temperaturas. As temperaturas indicadas em cada figura representam a temperatura do corpo da célula/temperatura do reservatório da célula (densidade atômica) para cada experimento (Reflexão seletiva ou absorção saturada).

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

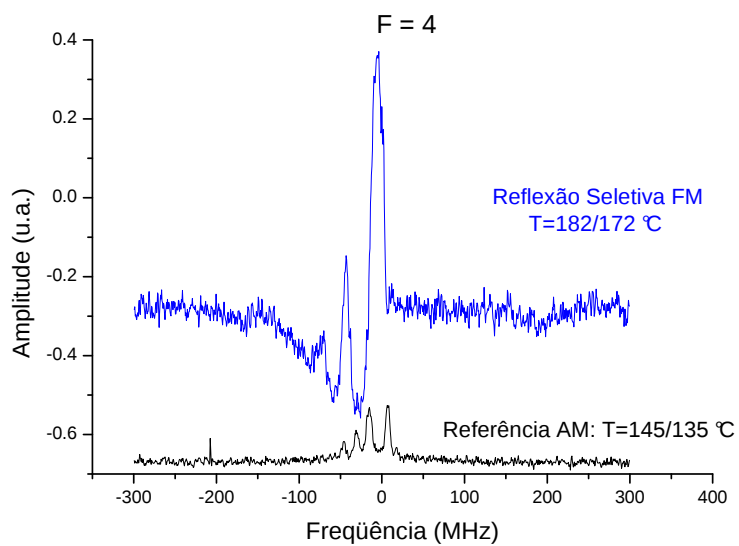


Figura 4.19: *Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.*

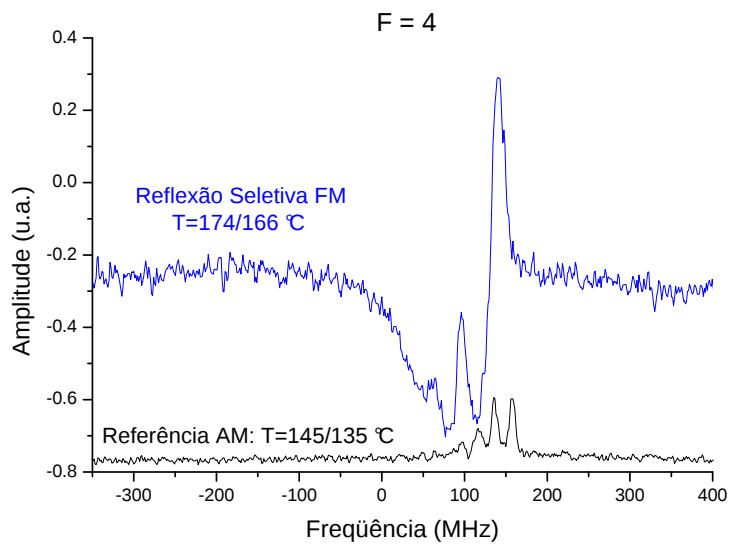


Figura 4.20: *Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.*

4.5. MEDIDAS

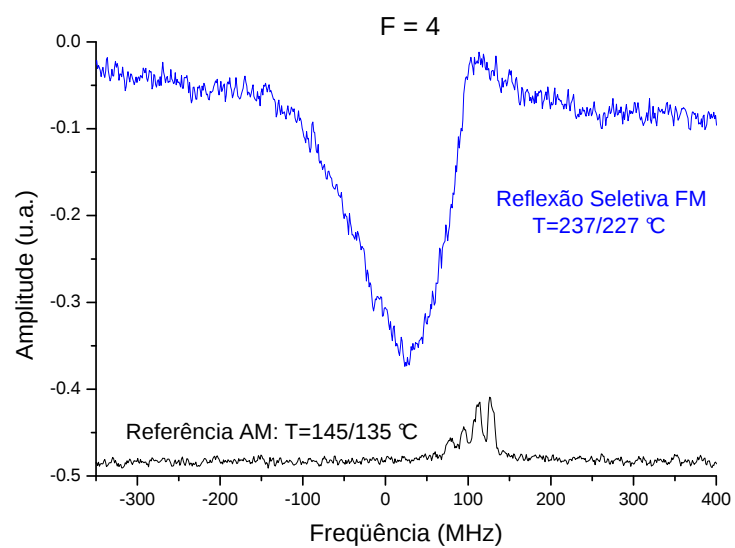


Figura 4.21: *Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.*

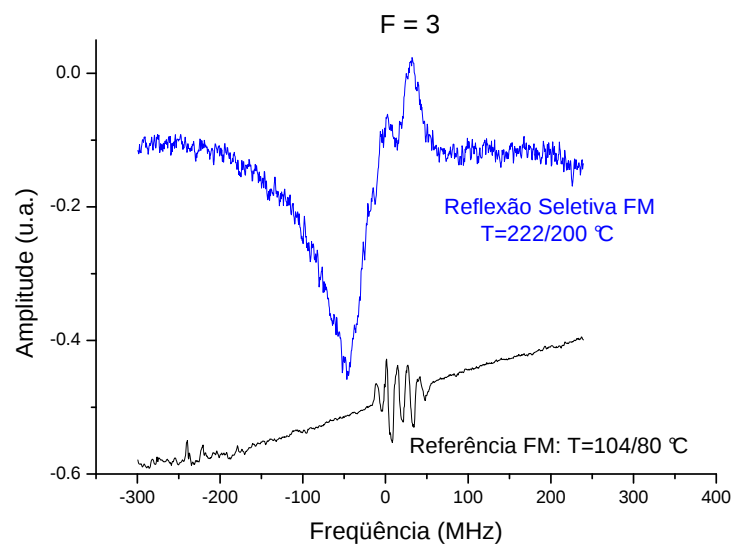


Figura 4.22: *Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.*

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

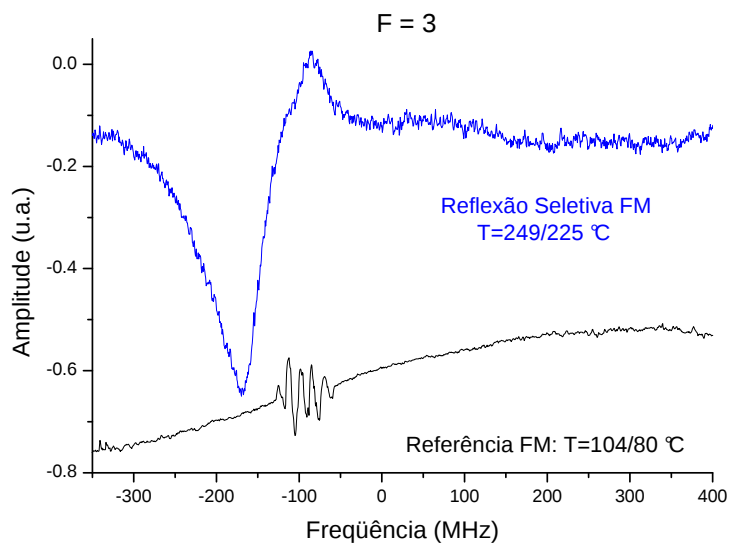


Figura 4.23: *Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.*

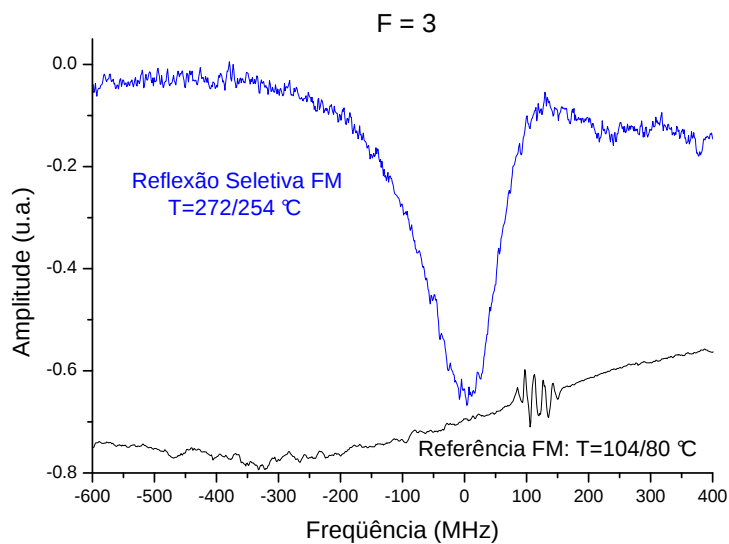


Figura 4.24: *Espectro de Reflexão Seletiva e sua referência de absorção saturada.*

4.6. CONCLUSÃO

4.6 Conclusão

Este capítulo apresentou uma técnica espectroscópica adaptada para o estudo de átomos próximos à superfície, a Espectroscopia de Reflexão Seletiva. Verificou-se que, com um aparato relativamente simples, é possível observar a interação de van der Waals entre átomos e superfície.

Observa-se também que as curvas espectrais mudam significativamente de forma com a temperatura. Isso está ligado à mudança do tempo de vida γ^{-1} que não apenas alarga o espectro mas principalmente modifica a forma espectral, quando consideramos que a forma da curva, mostrada no Capítulo 3, depende de γ através do parâmetro $A = \frac{C_3 k^3}{\gamma/2}$. No Capítulo 5, analisam-se esses espectros e extraem-se valores para o deslocamento, largura e coeficiente de interação desse experimento.

CAPÍTULO 4. EXPERIMENTO DE REFLEXÃO SELETIVA

Referências Bibliográficas

- [1] M. Chevrollier, *Spectroscopie de réflexion sélective à une interface diélectrique/vapeur de césium. Observation de l'attraction van der Waals de surface.*, Tese de Doutorado, Université Paris XIII (1992).
- [2] H. Failache, *Etude spectroscopique des resonances dans l'interaction de van der Waals entre un atome et une surface dielectrique*, Tese de Doutorado, Université Paris XIII (1999).
- [3] A. Nesmeyanov, *Vapor Pressure of Chemical Elements* (Elsevier, 1963).
- [4] *Manual do lock-in SR530*.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Capítulo 5

Análise dos resultados da reflexão seletiva

Sumário

5.1	Introdução	104
5.2	Curvas teóricas	107
5.3	Ajuste de curvas	110
5.3.1	Diferenciando as curvas	112
5.4	Análise dos resultados por curva experimental	114
5.5	Análise dos resultados finais	123
5.6	Algumas correções	129
5.6.1	Distorção em frequência	129
5.6.2	Correção Doppler	131
5.7	Conclusão	133

5.1 Introdução

Neste capítulo é abordado o tratamento dos dados da experiência de Reflexão Seletiva com Modulação de Frequência (RSFM) descrita nos capítulos 3 e 4, que tem como objetivo observar efeitos da interação átomo-superfície e obter o valor do coeficiente C_3 de van der Waals. Neste capítulo, são apresentadas as análises das curvas experimentais de uma RSFM da transição $6S_{1/2} \leftrightarrow 8P_{3/2}$ dos átomos de césio sobre uma superfície de YAG. As curvas espectrais desse tipo de experimento têm formas dependentes da interação com a superfície e do tempo de interação com o laser. As diferentes interações traduzem-se em deslocamentos, alargamentos e distorções nas formas de linha. É necessário então fazer a deconvolução desses vários efeitos para isolar aqueles devidos à interação com a superfície e obter informações quantitativas sobre elas. O coeficiente C_3 , por exemplo, é determinado a partir da comparação entre os espectros experimentais (ver capítulo 4) e curvas teóricas, obtidas a partir do modelo apresentado no capítulo 3. Essas curvas devem reproduzir as condições experimentais correspondendo a conjuntos de parâmetros independentes tais como a densidade atômica, a intensidade da interação átomo-superfície, a transição atômica envolvida, ...

Descreve-se, neste capítulo, um método que desenvolvemos especificamente para analisar os nossos espectros experimentais. Este método baseia-se na comparação dos espectros experimentais com curvas teóricas em coordenadas reduzidas, i.e. em função de parâmetros adimensionais combinando vários dos parâmetros explicitados acima. Este procedimento permite a constituição de uma biblioteca com um número reduzido de curvas.

Outra motivação para o desenvolvimento de um programa específico é a necessidade de modelar as 3 transições hiperfinas existentes no experimento, que se sobrepõem parcialmente, conforme é mostrado na Figura 5.1. A influência de cada uma dessas transições precisa ser considerada. A comparação entre os espectros

5.1. INTRODUÇÃO

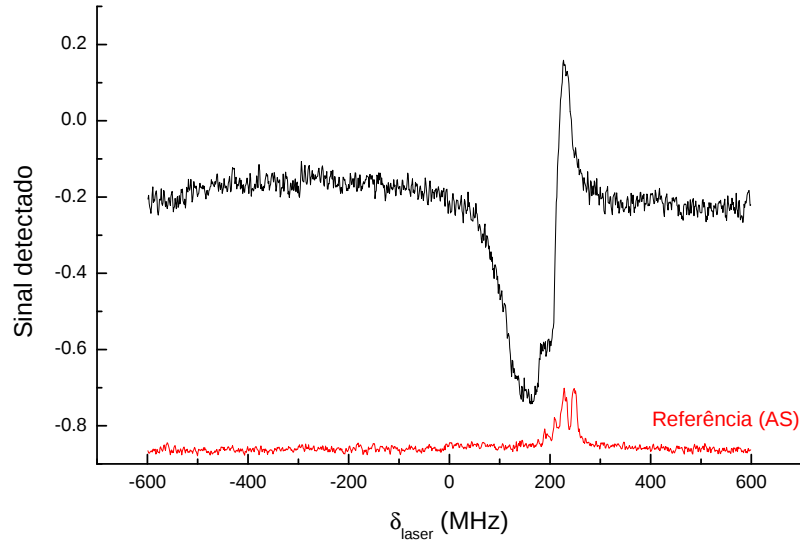


Figura 5.1: Sinal RS e da referência AS, da transição $\text{Cs } 6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$.

experimentais e teóricos deve ser feita para o conjunto dessas três transições. Os fatores que variam dependente da configuração do experimento de espectroscopia RSFM, por exemplo, com a pressão, são:

- A posição em frequência e a largura de linha das transições;
- A amplitude do sinal.

Isso leva a considerar que, para cada transição, poderia-se ter uma posição, uma largura, uma amplitude e um coeficiente C_3 . Como resultado, ter-se-ia um sistema de 12 parâmetros a serem ajustados, tornando a interpretação dos resultados muito complicada.

Em primeiro lugar, para a análise da posição e da largura de linha é necessário dispor de uma referência de frequência absoluta e outra relativa (ligada à escala da frequência). A referência utilizada para a calibração de frequência rela-

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

tiva e absoluta foi um espectro de Absorção Saturada modulada em Amplitude com ausência ou presença do feixe saturador (AS ou ASAM), realizado em volume, ou seja, a priori imune dos efeitos de superfície. O espectro de AS sempre foi realizado de maneira a evitar alargamentos e deslocamentos indesejados, usando, por exemplo, um vapor diluído (para evitar efeitos de pressão) e feixes não muito intensos, conforme Seção 4.3.

Em segundo lugar, a amplitude do sinal depende de uma série de fatores, como por exemplo, alinhamento, potência do laser (descrito na Seção 4.2), da amplitude de modulação, do detector, do número de átomos sondados.

Este capítulo apresenta o procedimento adotado para determinar o valor de C_3 , utilizando um número reduzido de parâmetros (apenas 5). Será mostrado que foi possível determinar com boa precisão o coeficiente C_3 de van der Waals, dando informações sobre a interação de superfície de “longo” alcance. Outras informações obtidas simultaneamente são sobre a dependência da dessintonia e da largura da linha dos átomos com a pressão, numa faixa superior de pressão do que a obtida na Seção 4.3.

Na Seção 5.2, descreve-se a geração de uma biblioteca de curvas teóricas ou invés de um contínuo de curvas, que seriam dependentes das características do sistema atômico em cada caso a ser estudado. Entre essas curvas procura-se as que melhores se ajustam a curva experimental, obtida no Capítulo 4.

Nas seções 5.3 a 5.5, serão descritos os passos do programa desenvolvido para a determinação do coeficiente C_3 . A seção 5.3, além de incluir a motivação para a redução de parâmetros, descreve o programa para o ajuste de uma dada curva experimental com um certo número de parâmetros fixos. Em seguida, na seção 5.4 a análise completa da curva experimental é feita. Por fim, na seção 5.5, o conjunto de curvas experimentais é analisado.

Foram consideradas, na seção 5.6, algumas correções de efeitos que pode-

5.2. CURVAS TEÓRICAS

riam alterar o resultado, como a amplitude de modulação FM e o efeito Doppler.

Na seção final, 5.7, discute-se os resultados obtidos neste capítulo e os limites da precisão obtida.

5.2 Curvas teóricas

Deve-se calcular *a priori* o espectro de reflexão para um dado valor do coeficiente C_3 da interação e para a largura γ da transição (ver capítulo 3). Para calcular uma única curva teórica $I_{\{C_3, \gamma\}}(\Delta)$, é necessário um tempo computacional de aproximadamente 4 dias por espectro, num processador AMD Athlon XP 1800+, para um espectro de 4000 pontos. Esse tipo de cálculo é necessário quando não é possível realizar aproximações que permitam evitar uma série de cálculos. Para o sistema estudado foram feitas algumas aproximações que reduzem o tempo de cálculo para 4 horas.

Neste experimento de RSFM, a curva teórica para uma interação de van der Waals C_3/z^3 na superfície e no limite Doppler ($ku \gg \gamma$) obtida por Duloy e Fichet [1] é:

$$I(\Delta) = -\frac{1}{L_0} \left[1 - \int_0^{+\infty} ds \frac{8ivF(q)e^{is}}{s^2 L_0} \right], \quad (5.1)$$

com

$$q = 2 \frac{1+i}{s^{3/2}} \sqrt{\frac{v}{L_0}},$$

$$F(q) = \frac{1}{2q} \left[\frac{1}{\sqrt{1-q}} \tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{1-q}} \right) - \frac{1}{\sqrt{1+q}} \tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{1+q}} \right) \right],$$

onde $L_0 = \gamma/2 - i\Delta$, $\Delta = \omega - \omega_0$ e $v = C_3 k^3$. Este último parâmetro representa o deslocamento da frequência devido à interação de van der Waals quando o átomo encontra-se à distância $z_0 = \lambda/2\pi$ da superfície. γ é a largura da linha e ω_0 a frequência angular no centro de linha. A largura de linha é dado pelo inverso do tempo de vida da transição, $\gamma = \tau^{-1}$, isto é, este parâmetro deve conter todos os efeitos, além

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

do decaimento natural γ_{natural} , efeitos colisionais $\gamma_{\text{colisão}}$ e os do laser (ver seções ?? e 5.6).

No sistema estudado, a medida da pressão é realizada de forma indireta via a medida da temperatura na célula, mais precisamente do reservatório de césio (ver seção 4.3.2). A medida da temperatura sofre de limitações experimentais resultando numa imprecisão no valor da pressão. A largura γ da transição varia de acordo com a pressão e com outros parâmetros experimentais (largura do laser, profundidade da modulação, etc.). Calcular uma curva para cada conjunto (γ , C_3) tornar-se-ia inviável. A solução encontrada para esse problema, resolvida também por Ducloy e Fichet no mesmo artigo [1], foi fazer uma mudança de variável com a inclusão de um novo parâmetro adimensional:

$$A = \frac{2\nu}{\gamma} = \frac{2C_3k^3}{\gamma} \quad (5.2)$$

Modificando-se também a escala de frequência para uma escala adimensional, $\frac{\Delta}{(\gamma/2)}$, tem-se uma simplificação dos cálculos. Conseguindo ter a dimensão de cálculos reduzida para um, resta calcular os espectros da reflexão apenas para valores dessa nova variável A .

O conjunto de espectros obtidos para diferentes valores de A constitui uma biblioteca de curvas teóricas que precisam ser calculadas apenas uma vez, já que não dependem da transição, nem da interação ou explicitamente da largura de linha γ . Foi assim constituída uma biblioteca de espectros teóricos para valores discretos de A , para $A = 0$ até $A = 80$, que foram utilizados no programa desenvolvido. Como será mostrado nas seções de ajuste, não houve necessidade de biblioteca maior. A vantagem dessa biblioteca é que ela é versátil, servindo para a análise de vários acoplamentos e várias larguras γ .

Nas Figuras 5.2 e 5.3, são representadas as curvas para diferentes intensidades da interação de van der Waals, expressas em termos do coeficiente A . Na Figura 5.2, pode-se notar, para pequenos valores de A , a mudança da forma da curva.

5.2. CURVAS TEÓRICAS

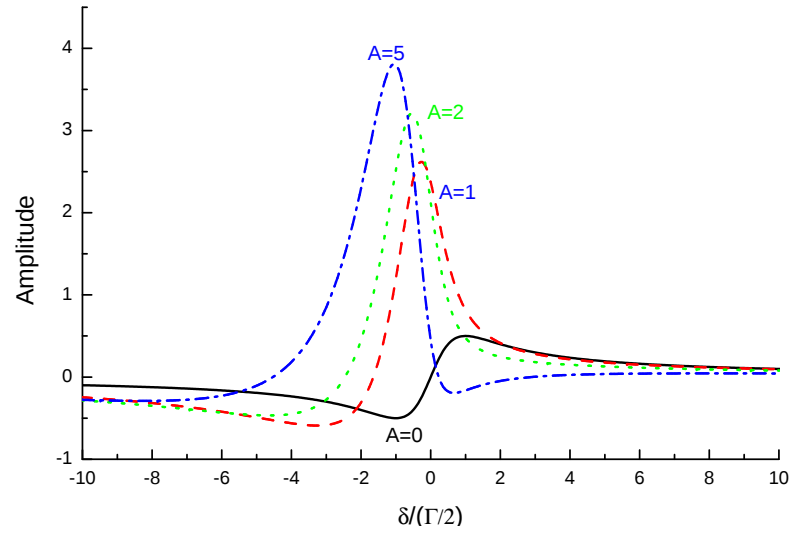


Figura 5.2: Curvas de reflexão seletiva FM para pequenos valores do parâmetro A

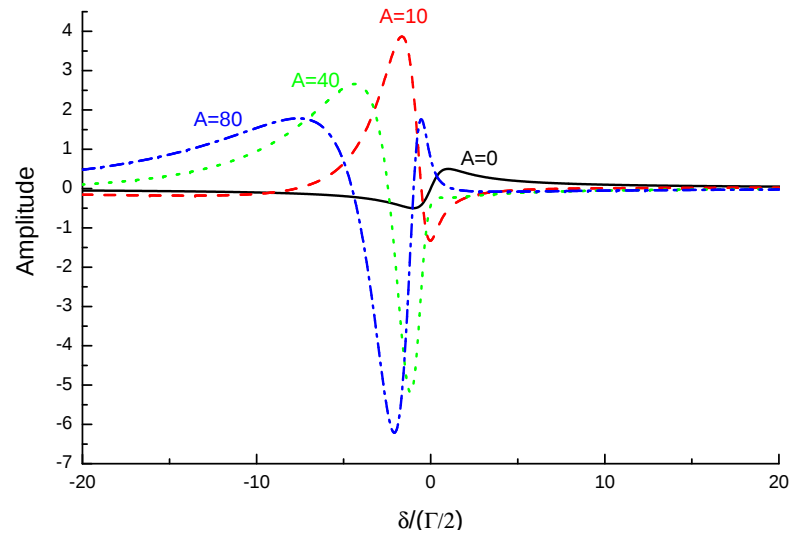


Figura 5.3: Curvas de reflexão seletiva FM para grandes valores do parâmetro A

Observa-se que, além de uma variação de amplitude, existe um efeito equivalente a um deslocamento em frequência e um alargamento. Na Figura 5.3, grandes valores do coeficiente A levam a deformações (em relação à curva para $A = 0$) cada vez mais pronunciadas. Pode-se notar, por exemplo, que as curvas $A = 10$ e $A = 80$ têm

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

formas semelhantes, porém invertidas. Esses resultados indicam que em um mesmo experimento (único C_3), variando-se γ o sinal muda de forma consideravelmente.

As diferenças entre as curvas teóricas ajudam a escolher qual melhor se ajusta à curva do experimento, pois deve-se ajustar à toda a curva considerando os parâmetros: amplitude, largura, deslocamentos... . Esses parâmetros dependem das condições do experimento, como a pressão, que, conforme visto na Seção 4.3, modifica a largura e deslocamentos. Será visto na seção 5.3 que esses parâmetros são levados em conta e obedecem a dependência com a temperatura de forma semelhante ao visto na sub-seção 4.3.2.

5.3 Ajuste de curvas

Nessa seção, será mostrada a redução no número de parâmetros necessários ao ajuste, passando dos 12 para apenas 5. Na sub-seção 5.3.1, será mostrada a escolha do melhor ajuste.

Neste experimento, conforme visto na Seção 4.3, a largura γ e o deslocamento δ dos níveis de energia dependem da pressão. A medida do valor de pressão, dada de forma indireta pela temperatura do reservatório, possui uma grande imprecisão, fazendo com que a largura e o deslocamento não possam ser determinados completamente por essa medida. Então, eles devem ser usados como parâmetros para o ajuste da curva teórica.

Neste sistema atômico, estuda-se a transição $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$ onde tem-se que considerar as 3 transições possíveis para cada um dos dois níveis do fundamental: $F = 3 \leftrightarrow F' = 2, 3, 4$ e $F = 4 \leftrightarrow F' = 3, 4, 5$.

Considera-se nos cálculos que o coeficiente de van der Waals, a largura de linha e o deslocamento por pressão sejam os mesmos para todas as transições hiperfinas partindo do mesmo nível hiperfino do fundamental pois as separações

5.3. AJUSTE DE CURVAS

entre essas transições são pequenas (≈ 20 MHz), comparáveis à largura de linha (≈ 10 MHz). Dessa forma, o número de parâmetros a serem ajustados reduz-se o número de 12, ou seja 4 parâmetros para cada um das 3 transições, para apenas 6: mesmo deslocamento, largura e coeficiente C_3 para todas transições.

A determinação da amplitude do sinal é difícil, pois depende de um conjunto relativamente grande de parâmetros como por exemplo: intensidade do laser, amplitude de modulação FM, densidade de átomos, dipolo atômico e amplificação e sensibilidade do sistema de detecção. Ao invés de tentar controlar todos esses parâmetros, coloca-se a amplitude como um parâmetro a ser ajustado. Mostra-se, após o ajuste de curvas, que a amplitude é proporcional à densidade, conforme será visto na seção 5.5.

Como o experimento de reflexão seletiva é linear, pode-se considerar que o sinal pode ser descrito pela soma direta dos sinais referentes a cada transição hiperfina.

Dever-se-ia considerar que cada transição possui uma amplitude própria, porém pode-se relacionar essas amplitudes utilizando o cálculo de matrizes de transição 6-j. Obtém-se então a curva teórica dada por:

$$Y_{teo}(\omega) \propto t_a Y_1(\omega) + t_b Y_2(\omega) + Y_3(\omega), \quad (5.3)$$

onde t_a e t_b são as relações de amplitude da primeira e da segunda transição, respectivamente, em relação à terceira transição; Y_i é o espectro correspondente à transição i . Será utilizada o parâmetro C_{1S} , que será ajustado, para essa proporção da amplitude geral. Assim, reduz-se o número de parâmetros de 6 para apenas 4.

Por outro lado, um parâmetro experimental relacionado ao sinal detectado surge e que tem origem diversa, mas aparenta uma forma simples é o “off-set”, um nível DC que está adicionado ao sinal. Este parâmetro é tratado apenas como uma constante C_4 a ser ajustado. Dessa forma o número de parâmetros é 5.

5.3.1 Diferenciando as curvas

O primeiro passo para o ajuste é converter os pontos teóricos para a mesma escala dos pontos experimentais, lembrando que a escala experimental é dada em frequência e a teórica é adimensional, dada em frequência sobre $\gamma/2$. Essa transformação da coordenada dos pontos teóricos para a coordenada dos pontos experimentais leva à seguinte transformação:

$$Y(I) = Y(II(I)) \quad (5.4)$$

com I na coordenada experimental e II nas coordenadas teóricas, com a seguinte relação:

$$II(I) = \frac{I - X_0}{C_2} + t_0 \quad (5.5)$$

onde X_0 é a posição da transição na coordenada experimental; t_0 é o zero da coordenada teórica; e C_2 é a compressão de escala dada por:

$$C_2 = \left(\frac{\gamma}{2}\right) \left(\frac{E_{exp}}{E_{teo}}\right) \quad (5.6)$$

em que E_{exp} e E_{teo} são a escala experimental e teórica, respectivamente, dadas pela diferença entre dois pontos consecutivos no eixo das coordenadas. E_{exp} é dado, como já dito, em unidade de frequência, mais especificamente em MHz. Já a escala E_{teo} é uma escala sem unidades.

O cálculo de $II(I)$ não impõe que ele seja inteiro para qualquer valor de I . Mas os pontos teóricos são conhecidos apenas para valores inteiros de II . Para resolver este problema, considerou-se que existem pontos suficientes para aproximar o valor no ponto II por uma combinação linear dos pontos vizinhos inteiros. Pode-se definir agora esta função utilizando apenas os primeiros vizinhos, sendo II_m e II_M números inteiros consecutivos em que se satisfaz $II_m < II(I) < II_M$.

Considerando a função no ponto $II_j(I)$ como sendo a média da função nos

5.3. AJUSTE DE CURVAS

pontos II_m e II_M com certa ponderação, a função neste ponto $II_j(I)$ é dada por:

$$f(II(I)) = p_m f(II_m) + p_M f(II_M), \quad (5.7)$$

e com as ponderações dadas por:

$$\begin{aligned} p_m &= II(I) - II_m \\ p_M &= II_M - II(I). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Uma vez definido o valor da função teórica nos pontos experimentais, é possível encontrar uma função que representa a diferença entre as curvas. Para este caso, foi considerada a função erro χ , definida como a soma sobre todos os pontos das diferenças ao quadrado entre as curvas teórica e experimental:

$$\chi = \sum_I \{Y_{exp}(I) - Y_{teo}(I)\}^2, \quad (5.9)$$

onde $Y_{exp}(I)$ e $Y_{teo}(I)$ são, respectivamente, os valores das curvas teórica e experimental no ponto I . Utilizou-se o erro dado apenas pelo valor da curva Y , pois considerou-se que a escala em frequência é bem conhecida. No caso desta experiência, a escala considerada é linear para os pontos experimentais.

Define-se que a diferença entre as curvas teóricas e experimentais é dada por essa função erro χ . Logo, para se ajustar a curva teórica à experimental deve-se minimizar essa diferença.

Reescrevendo a função erro χ em termos da nova função teórica criada:

$$\chi = \sum_I \{Y_{exp}(I) - C_{1S}[t_a * Y_1(I) + t_b * Y_2(I) + Y_3(I)] - C_4\}^2. \quad (5.10)$$

Onde a função χ é função de 5 parâmetros: A , δ , C_2 , C_{1S} e C_4 . A é ligado à interação de van der Waals, δ ao deslocamento da linha atômica devido a pressão, C_2 à largura γ , C_{1S} à amplitude e C_4 ao offset.

A solução para o ajuste de curva é encontrar os valores do conjunto de parâmetros que minimizem a diferença entre as curvas, isto é, minimizar χ . Entretanto,

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

tem-se uma quantidade ainda grande de parâmetros, 5 parâmetros, o que tornaria difícil a interpretação dos resultados. Para facilitar a interpretação dos resultados de um ajuste agrupou-se 3 parâmetros: compressão de escala C_2 , amplitude C_{1S} e off-set C_4 . Observar como esses parâmetros e o erro χ variam com o conjunto de parâmetros restantes, A e δ , é saber não apenas o valor dos 5 parâmetros, mas saber também qual a margem de erro que podemos associar a cada um dos parâmetros.

No apêndice C, mostra-se a técnica numérica para o ajuste de Γ , amplitude C_{1S} e off-set C_4 , para dado valor de A e δ . Para teste de convergência, compara-se essa técnica numérica com um sistema ainda mais restrito onde um dos parâmetros é fixo e onde ajusta-se apenas 2 parâmetros.

Na seção 5.4, analisam-se resultados considerando também o conjunto de parâmetros A e δ . Esses dois parâmetros são tratados em separado por dois motivos básicos:

- o parâmetro A não é contínuo, pois é baseado em uma biblioteca discreta;
- o parâmetro δ livre pode fazer com que o sistema passe de uma transição hiperfina para outra durante o percurso necessário para o ajuste.

No caso do deslocamento em frequência δ , apesar do erro esperado ser menor quando o sistema está sobre a devida transição, nada impede que haja um mínimo local em χ^2 quando posicionado sobre outra transição, ou o sistema numérico divirja e saia da região do espectro. A imposição de limites máximos e mínimos é um pouco precário pois o valor do deslocamento depende da temperatura, conforme verificado na seção 4.3.2.

5.4 Análise dos resultados por curva experimental

Nesta seção, completa-se a análise dos resultados considerando-se, além dos parâmetros tratados na seção anterior, os parâmetros restantes A e δ .

5.4. ANÁLISE DOS RESULTADOS POR CURVA EXPERIMENTAL

O parâmetro A , ligado às bibliotecas de curvas teóricas, possui valores discretos, enquanto que δ é contínuo, podendo ser atribuído qualquer valor real a ele. Dessa forma, é mais fácil analisar em primeiro lugar uma faixa de valores do parâmetro A do que uma faixa contínua de δ . Esse parâmetro contínuo δ poderia ser introduzido de forma discreta, entretanto não é fácil determinar o número de pontos necessários porque nem a faixa de valores é bem determinada, tendo apenas uma idéia do seu comportamento, conforme mostrado na seção 4.3.2.

A partir de um dado δ , compara-se o erro associado a cada A dentro da faixa aplicando-se o ajuste de curva da seção anterior. Para garantir a convergência do ajuste, o ponto inicial, isto é, os parâmetros iniciais a serem inseridos na rotina de ajuste, é dado pelo ponto de menor erro dado pela técnica “exata” variando-se o parâmetro γ . Essa técnica é muito rápida com resultado equivalente ao mostrado na Figura C.1. A vantagem desse passo é a não necessidade de introdução de parâmetro inicial, feita usualmente pela técnica de tentativa e erro.

Os resultados obtidos para a faixa de valores de A são mostrados na Figura 5.4. Observa-se nessa figura, que é semelhante à Figura C.2, uma região ou valores de A onde o erro é mínimo. Observa-se também que a figura é suave, como esperado já que as curvas variam suavemente conforme visto na Figura 5.2 indicando que não é necessário aumentar a quantidade de bibliotecas, indo até $A = 80$, nem criar bibliotecas com valores fracionários de A .

Os parâmetros físicos do resultado do ajuste formam “curvas” suaves em função de A . Nas Figuras 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8, têm respectivamente os gráficos dos parâmetros amplitude, off-set, largura de linha (γ) e o coeficiente de van der Waals, dados pelos parâmetros C_{1S} , C_4 , C_2 e $A\gamma/(2k^3)$.

Observa-se que a dependência desses parâmetros é de forma contínua e suave. A pouca dependência do valor de A pode ser vista na Figura 5.8, que mesmo em uma grande faixa de variação, $20 \leq A \leq 60$, a variação de $A\gamma$ foi menor que 20%.

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

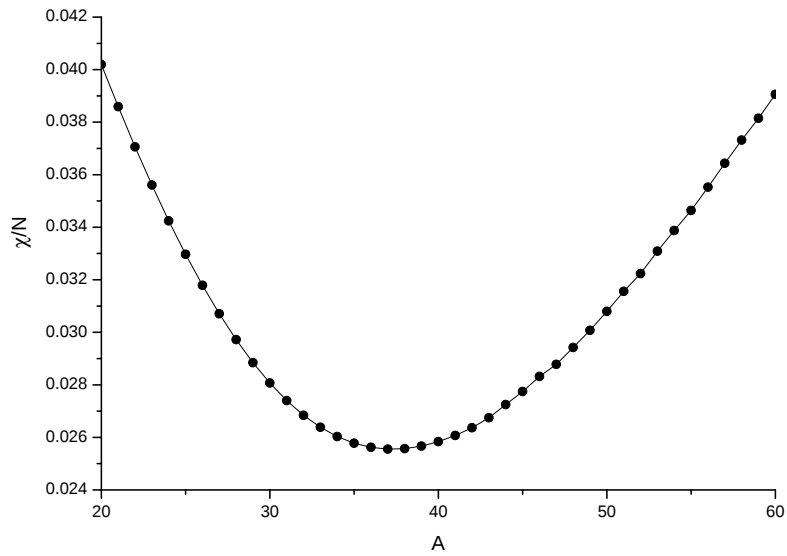


Figura 5.4: Erro em função de A .

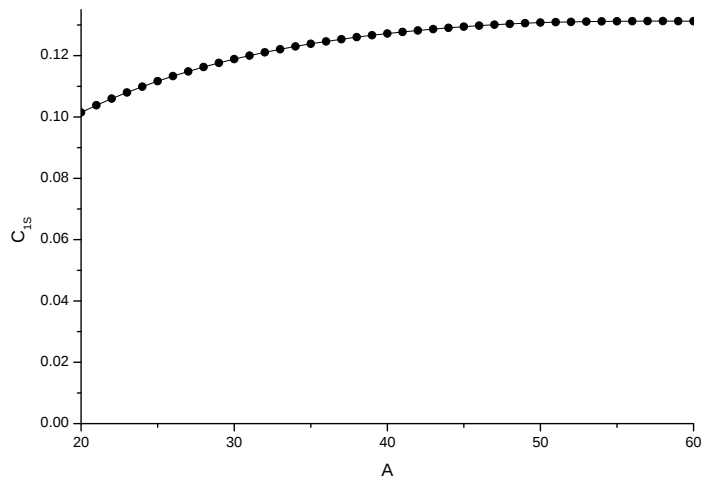


Figura 5.5: Dependência da amplitude C_{1S} em função de A .

Para os demais parâmetros, observa-se que uma pequena variação de A modifica pouco o resultado do ajuste. Então, pode-se utilizar como parâmetros iniciais os resultados obtidos do cálculo para o primeiro valor de A . Na verdade, utilizou-se dos

5.4. ANÁLISE DOS RESULTADOS POR CURVA EXPERIMENTAL

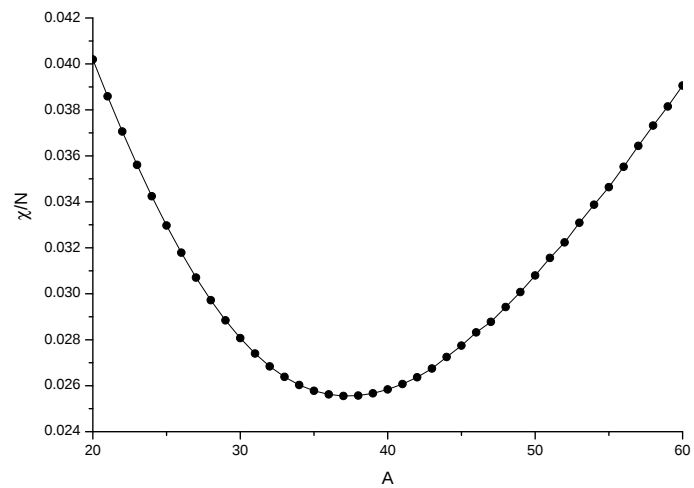


Figura 5.6: Dependência do erro (χ^2) em função de A .

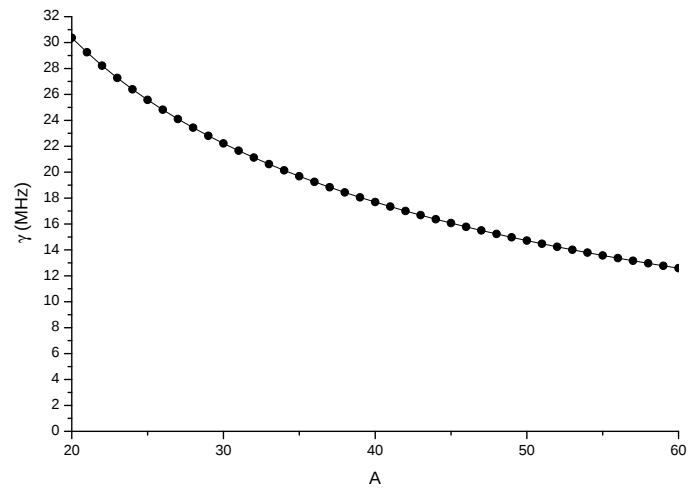


Figura 5.7: Dependência da largura γ em função de A .

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

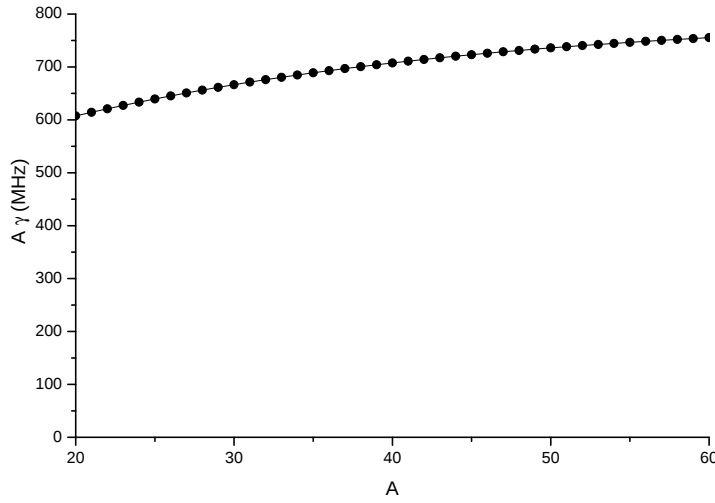


Figura 5.8: Dependência da interação ($A\gamma$) em função de A .

resultados do valor de A anterior. Isso aumentou consideravelmente a velocidade de cálculo, pois muitas vezes foram necessárias apenas duas interações para atingir o mínimo ao invés de umas 6 utilizadas anteriormente.

A dependência de γ com A , na Figura 5.7, é monótona decrescente com A , isso pode ser entendido com o auxílio de $A\gamma$ que é uma constante $= 2C_3k^3$ e que tem no resultado do ajuste valor quase constante, um fator 0,8 entre o primeiro e o último. Esse produto $A\gamma$ constante implica em $\gamma \propto 1/A$, verificado no gráfico de γ da Figura 5.7.

O gráfico do erro, Figura 5.6, tem a forma de uma parabólica, com o mínimo diferente de zero, verificado em todas as análises. Entretanto, esse mínimo possui explicação física, além da simples diferença entre os espectros da teoria e do experimento. O mínimo dos erros, considerando todos os parâmetros, é ligado ao ruído no experimento na frequência observada, no caso em torno da frequência de modulação.

Após a compreensão dos resultados em função de A , analisou-se as curvas em A para diversos valores de δ . A dessintonia δ é associada ao efeito de pressão,

5.4. ANÁLISE DOS RESULTADOS POR CURVA EXPERIMENTAL

explicado na seção 4.3.2. Como existe uma imprecisão na medida da pressão assim como na medida de seu efeito a faixa analisada é determinada manualmente, mas partindo-se do valor ou da estimativa obtida na seção 4.3.2. Observando-se a função erro χ na Figura 5.9, verifica-se que o mínimo de erro se desloca para valores

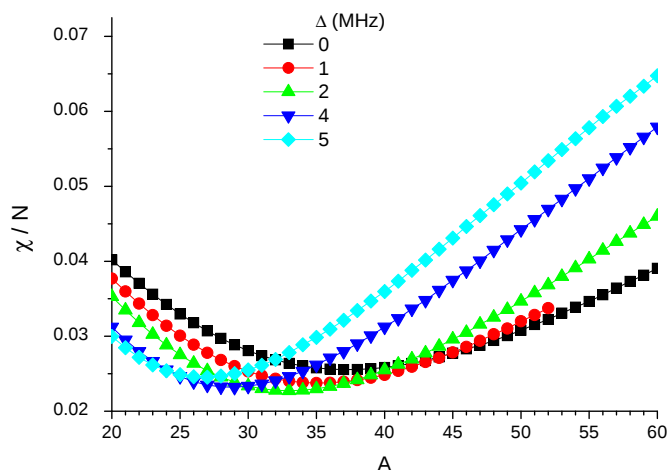


Figura 5.9: Dependência do erro χ em função de A considerando diferentes dessintonias.

menores de A com o aumento de δ . Outra observação é que o valor do erro não varia muito, isto quer dizer que o mínimo de cada δ em uma certa faixa possui resultado igualmente satisfatório.

Os valores obtidos dos parâmetros ainda são próximos, como para uma única sintonia. Porém, isso é válido para uma faixa de sintonia e dos parâmetros, que pode ser visto como um efeito no valor do erro (χ^2). Neste momento, para maior precisão nos valores dos parâmetros, pode-se escolher quais curvas são satisfatórias. Essa distinção só pode ser feita quando se compara as curvas com a melhor curva ajustada visualmente. Um exemplo desse tipo de escolha é mostrado na Figura 5.10. Observam-se nas curvas teóricas (a) e (c) que elas não se ajustaram à curva experimental tão bem quanto a curva (b) se ajustou. Dessa forma exclui-se da região válida, ou impõe-se limites, os valores dos parâmetros A e δ como sendo

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

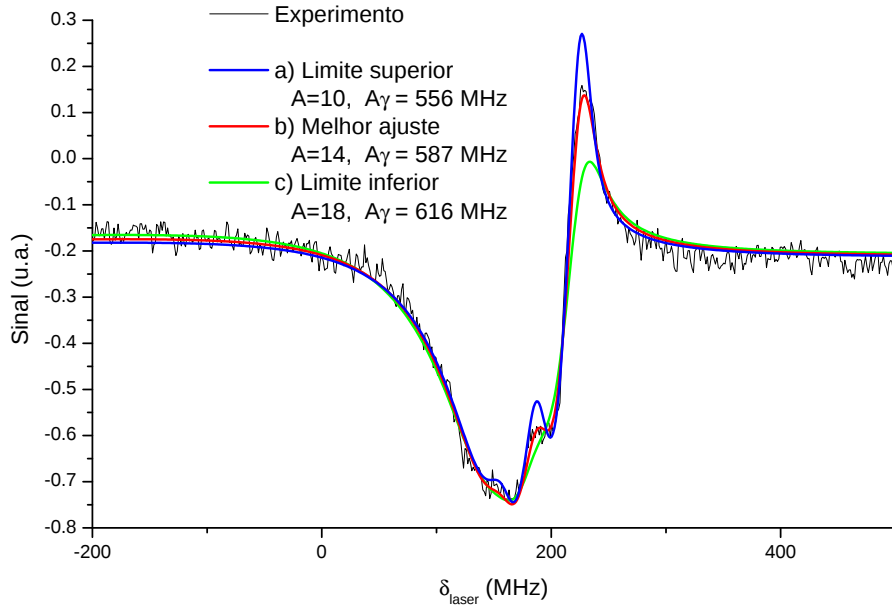


Figura 5.10: Comparação de diferentes A ajustados.

os parâmetros que geraram a curva (a) até os parâmetros que geraram a curva (c).

Após a escolha das curvas que satisfazem, marca-se essas curvas nos gráficos que formam “regiões de satisfação”. Não é preciso percorrer todos os pontos dessa região, basta determinar a região limite formada pelos parâmetros A e δ . Essa região pode determinar o erro de cada parâmetro pois é uma região grande o suficiente para ser considerada maior que os outros erros. Isso pode ser considerado verdade baseando-se na qualidade dos ajustes e nas relações entre todos os parâmetros obtidos, mostrado na seção 5.5.

O centro dessa região é mostrado nas figuras dos parâmetros em função de A , Figuras 5.11, 5.12, 5.13 e 5.14. A forma geométrica real dessa região não é trivial, mas um conjunto de elipses descrevem razoavelmente bem essa região.

Define-se o valor do parâmetro como sendo o valor mais central da região e o erro como sendo a meia largura dessa região. Esta técnica de análise deve

5.4. ANÁLISE DOS RESULTADOS POR CURVA EXPERIMENTAL

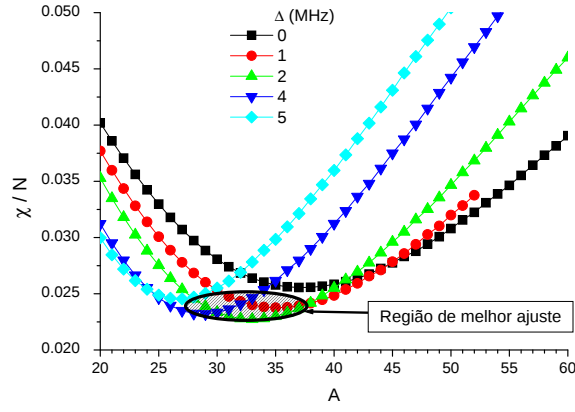


Figura 5.11: Dependência do erro (χ^2) em função de A considerando diferentes dessintonias.

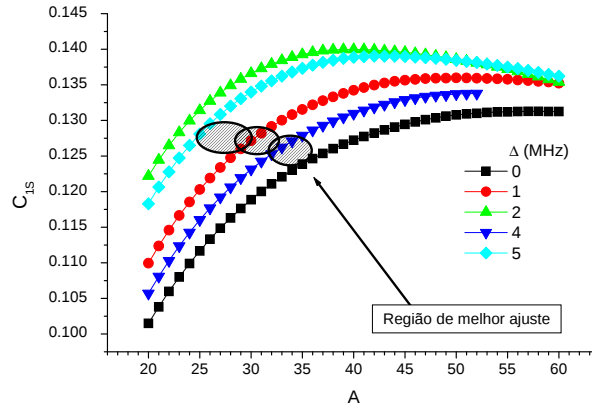


Figura 5.12: Dependência da amplitude C_{1S} em função de A considerando diferentes dessintonias.

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

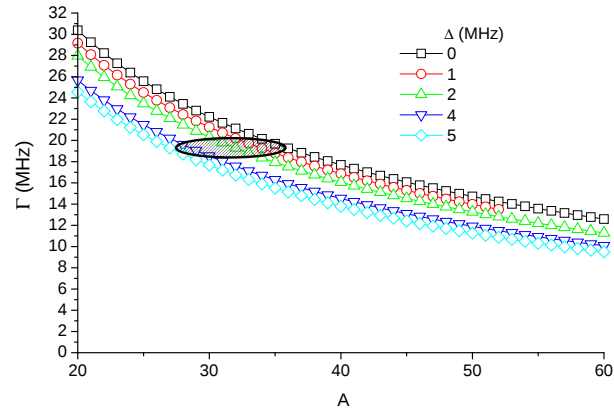


Figura 5.13: Dependência da largura γ em função de A considerando diferentes dessintonias.

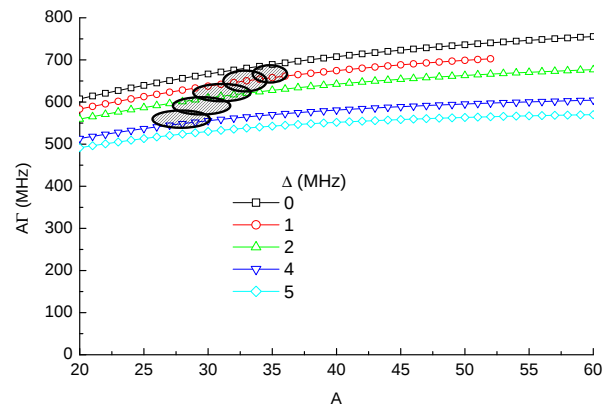


Figura 5.14: Dependência da interação $A\gamma$ em função de A considerando diferentes dessintonias.

5.5. ANÁLISE DOS RESULTADOS FINAIS

ser aplicada a cada curva experimental analisada. Na seção 5.5, analisam-se os resultados obtidos para todas as curvas experimentais.

5.5 Análise dos resultados finais

Na seção anterior definiu-se, a partir da técnica utilizada, como obter o valor e a barra de erro dos parâmetros analisados. Nesta seção, mostrar-se-ão os resultados obtidos para o experimento de reflexão seletiva com modulação em frequência de átomos de césio próximos à uma superfície de YAG, que não é ressonante com o césio na transição estudada.

Os espectros desse experimento foram analisados para as transições $6S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$ em diferentes condições de temperatura e, por consequência, diferentes pressões. Os dois grupos de níveis hiperfinos, $F = 3 \rightarrow F' = 2, 3, 4$ e $F = 4 \rightarrow F' = 3, 4, 5$, continuam separados porque esses dois grupos são separados energeticamente de 9.2 GHz o que dificulta uma única aquisição espectral com os dois grupos com alto grau de resolução. Outros motivos para a separação são dados na seção 5.3.

Os efeitos esperados pelo aumento de temperatura são: a pressão e a modificação na largura e no deslocamento de linha, visto na seção 4.3.2; a variação do coeficiente de van der Waals, conforme visto no capítulo 2. Para essa superfície, sem ressonância com o nível $8P_{3/2}$, o coeficiente deve ser constante.

Os efeitos ligados à pressão na espectroscopia de um vapor são: o deslocamento dos níveis de energia, a modificação do tempo de vida e assim na largura de linha da transição e uma variação da amplitude do sinal detectado que é ligada à variação da densidade atômica.

O deslocamento de níveis dado pelo ajuste é mostrado nas Figuras 5.15 e 5.16, e tem uma dependência aproximadamente linear com a pressão, semelhante

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

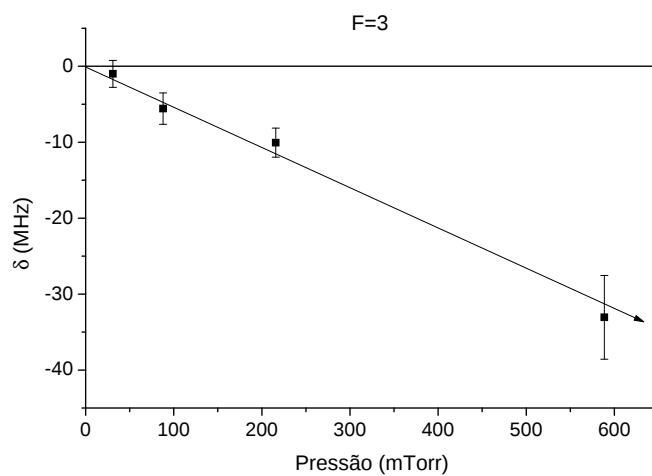


Figura 5.15: Resultado da dessintonia δ obtido em função da pressão para $F=3$.

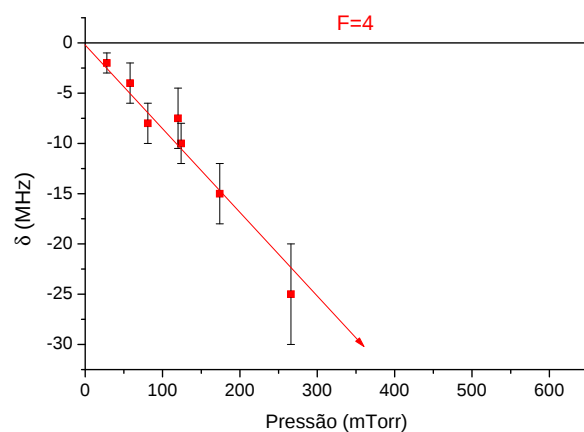


Figura 5.16: Resultado da dessintonia δ obtido em função da pressão para $F=4$.

à obtida na seção 4.3.2, para o aumento do deslocamento com a pressão.

Para a largura de linha, o resultado mostrado nas Figuras 5.17 e 5.18 também é semelhante ao obtido na seção 4.3.2.

As inclinações para a largura γ e deslocamento δ diferentes para os níveis

5.5. ANÁLISE DOS RESULTADOS FINAIS

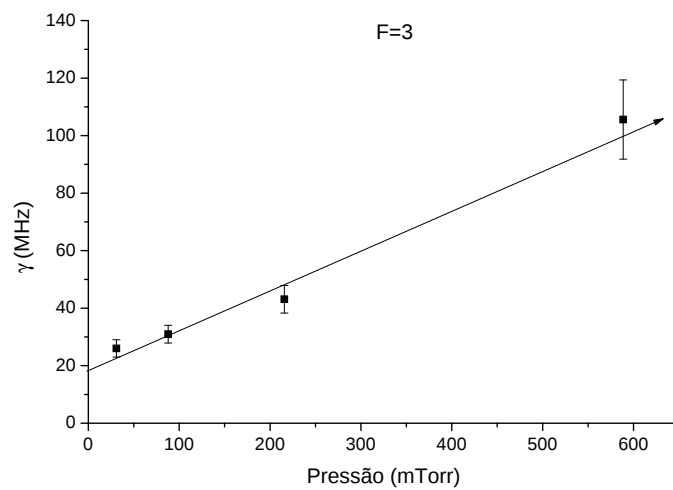


Figura 5.17: Largura γ obtido em função da pressão $F=3$.

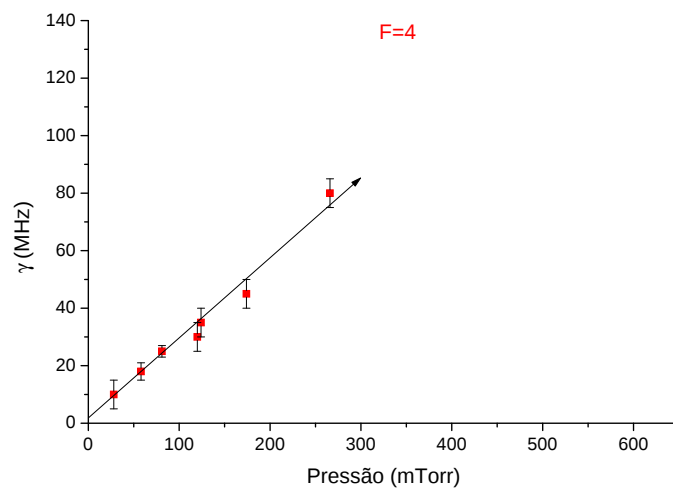


Figura 5.18: Largura γ obtido em função da pressão para $F=4$.

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

$F = 3$ e $F = 4$ podem ser atribuídas à diferença nas condições experimentais em que são realizados os dois conjuntos de experimentos. Essa diferença experimental está ligada às diferentes temperaturas aplicadas ou razões de temperatura entre a parte do reservatório e a janela. A pressão que foi considerada aqui é dada unicamente pela temperatura do reservatório de césio, isto é a temperatura mais próxima da gota de césio. Isso pode não ser verdade pois pode haver na célula diferentes densidades ao longo da janela por acúmulo de césio em alguma parte, principalmente na célula que foi utilizada ($20\mu\text{m}$ de espessura interna).

A imprecisão da pressão é o maior limitante desse experimento, entretanto a técnica de absorção linear aplicada simultaneamente pode corrigir essa imprecisão. Por outro lado, altas temperaturas e, por consequência, altas pressões implicam em grande absorção o que facilmente satura o sinal. Dessa forma, a absorção linear não se aplica a todos os casos.

É possível considerar, de fato, que a técnica de reflexão seletiva possa também dar mais uma informação sobre o sistema: a pressão ou a densidade de átomos “diretamente”, sobretudo a altas temperaturas. A comparação ou calibração com a absorção linear poderia ser feita, por exemplo, a baixas temperaturas.

O parâmetro C_{1s} , ligado à amplitude, que depende da densidade d . Em primeiro lugar, a relação da amplitude do sinal S e C_{1s} é dada por:

$$S = \frac{C_{1s}}{\gamma/2}. \quad (5.11)$$

Esse fator $\gamma/2$ surge na criação da biblioteca de curvas teóricas, com a transformação que se faz para o surgimento do parâmetro A . Em segundo lugar, a amplitude do sinal, S , é proporcional à amplitude de modulação e intensidade do laser e à densidade de átomos. O conjunto do experimento é realizado nas mesmas condições de intensidade e amplitude de modulação com a realização do experimento com a mesma corrente do laser e a mesma amplitude de modulação, além de, ser realizado em um mesmo dia garantindo o mesmo modo de operação.

5.5. ANÁLISE DOS RESULTADOS FINAIS

Por fim, a densidade d é ligada a pressão e temperatura pela relação termodinâmica:

$$PV = nRT \quad (5.12)$$

$$d = \frac{n}{V}, \quad (5.13)$$

onde se percebe a dependência linear da densidade com a pressão. Nas Figuras 5.19 e 5.20, observa-se o resultado experimental da dependência quase linear da

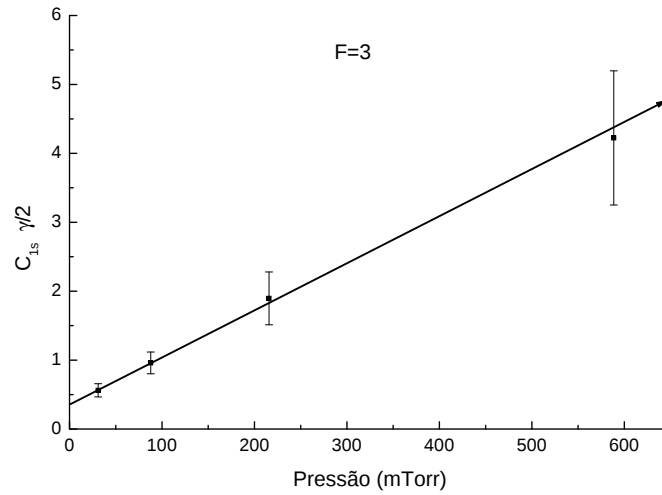


Figura 5.19: Dependência da amplitude S pela pressão para $F=3$.

amplitude S com a pressão.

O comportamento do conjunto de variáveis δ , γ e S dá maior confiabilidade nos resultados de C_3 . Vê-se que todos os parâmetros deram resultados compatíveis com o esperado na dependência com a temperatura/pressão.

Não é esperado que a variação do coeficiente C_3 com a temperatura seja grande porque nesse experimento a superfície é não-ressonante com o nível atômico observado. A variação aparecerá, se existir, apenas no termo da soma discreta, explicado na sub-seção 2.5.2. A figura 5.21 mostra que o resultado obtido no

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

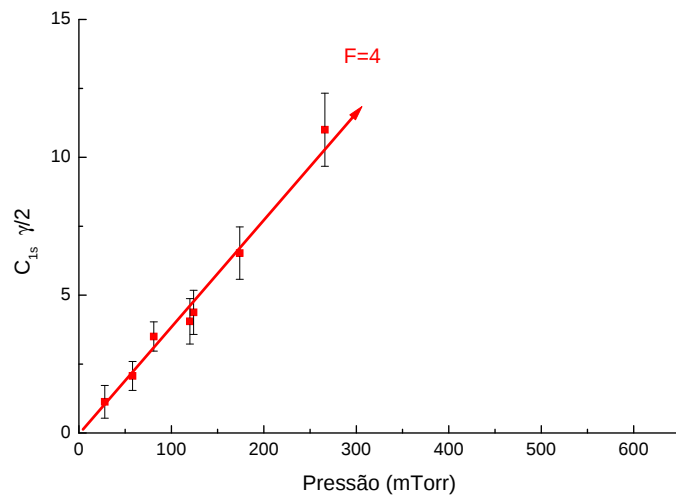


Figura 5.20: Dependência da amplitude S pela pressão para $F=4$.

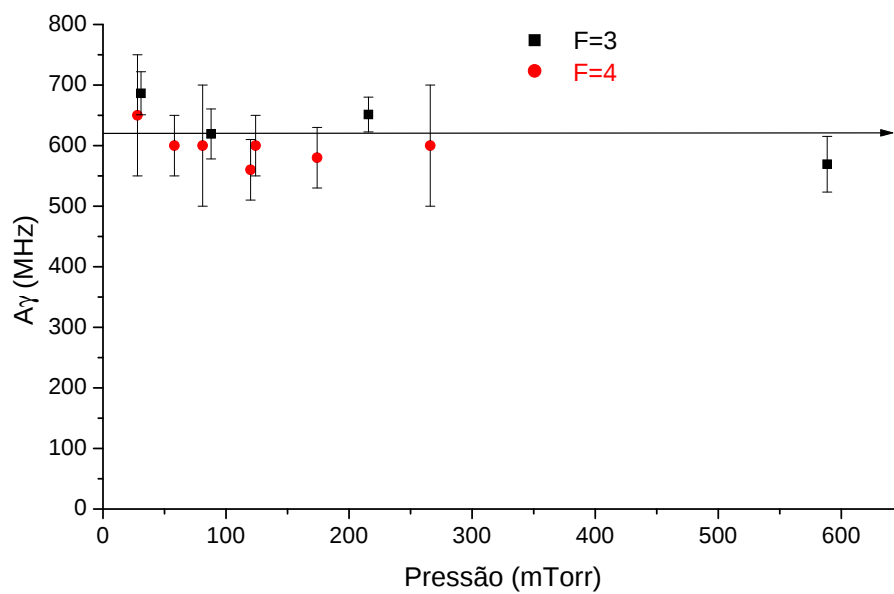


Figura 5.21: Valor de $A\gamma$ para diferentes pressões.

5.6. ALGUMAS CORREÇÕES

experimento, com auxílio da técnica descrita neste capítulo, é praticamente constante e o mesmo para os dois grupos. O resultado disso é a obtenção do valor de $C_3 = 70 \pm 10 \text{ kHz}/\mu\text{m}^3$.

Na próxima seção, será adicionado alguns fatores de correção aos ajustes para aumentar a confiança sobre os resultados obtidos.

5.6 Algumas correções

Nesta seção, serão abordadas algumas correções do modelo teórico. A primeira correção é a inclusão de distorções que ocorrem no espectro no eixo de frequência. Há basicamente dois aspectos a serem considerados na análise dos espectros do experimento: ruído em frequência e a própria modulação. É considerado em conjunto esses dois aspectos na sub-seção 5.6.1.

A segunda correção tratada é a respeito do tratamento sub-doppler feito nas equações do 4. A consideração utilizada é $ku \gg \gamma$ que não é sempre válida, como é verificado nos dados obtidos na seção anterior. O tratamento mais adequado é realizado na sub-seção 5.6.2.

5.6.1 Distorção em frequência

No experimento realizado, a varredura em frequência foi gerada variando-se a tensão de varredura V_R , que alterava em conjunto a tensão no piezo-elétrico e a corrente no diodo laser. Obteve-se um bom modo de operação do laser, que permitia variar a frequência de pelo menos 10 GHz em torno da ressonância. Entretanto, o gerador da rampa (lockin SR530) permitia de maneira contínua com boa resolução, mudando amplificação, em apenas 2 GHz. Detalhes das técnicas experimentais estão no capítulo 4.

Considerou-se que a variação de frequência era linear com respeito à ten-

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

são V_R na região estudada. Porém a dependência da frequência com a tensão da rampa não é a mesma entre as aquisições. Esse tipo de distorção em frequência é facilmente eliminado com a comparação com um sistema de escala fixa como a utilizada, nos experimentos de Absorção Saturada (AS), ver Seção 4.3.

Nesse experimento, o diodo laser tinha um “jitter” em frequência da ordem de alguns MHz (não medido). Esse “jitter” é representado como uma variação da frequência do laser em torno de uma dada frequência. O valor medido experimentalmente é dado pela média temporal do valor, representando a média do valor em torno da frequência medida. O efeito do “jitter” pode ser considerado na medição como um alargamento do sinal.

Considerou-se que a técnica da modulação em frequência resulta na derivada da função e que a amplitude do sinal dependia linearmente da amplitude de modulação, conforme visto no capítulo 3. Mostra-se também que essa aproximação é válida apenas quando consideramos pequenas oscilações. Para o caso mais completo considerando uma amplitude de modulação qualquer deve-se levar em conta que isso distorce a curva [1]. No experimento realizado, a profundidade da modulação não foi desprezível, pois desejou-se obter que a amplitude do sinal fosse maior que a amplitude do ruído. Aumentou-se a amplitude da modulação, o que leva à necessidade de considerar termos de ordens superiores da expansão utilizada.

Pode-se considerar que a amplitude de modulação já não é desprezível, mas que seja pequena o suficiente para que possa-se fazer uma aproximação de “segunda” ordem, em que o valor na frequência ν é dado por uma média dos valores em torno dessa frequência com certa ponderação.

Considerou-se uma correção para esses efeitos que podem distorcer o sinal. Considerou-se que o valor em um determinado ponto, devido ao agito do laser e à amplitude de modulação, era dado por:

$$f(\nu) = \sum_{j=-m}^m f(\nu - j\delta\nu)P(j), \quad (5.14)$$

5.6. ALGUMAS CORREÇÕES

onde m mostra o número de curvas sobre o qual se faz a média, e δv representa a perturbação. O valor da função ponderação $P(j)$ depende da perturbação a ser aproximada. Ao considerar-se apenas o agito, pode-se fazer $P(j)$ uma função, semelhante a uma gaussiana, com o máximo em $j = 0$ e com a largura do agito. Mas ao considerar a distorção devido à amplitude de modulação, então a função ponderação $P(j)$ se torna mais complicada, e para uma modulação realmente grande essa aproximação não é válida.

Os resultados obtidos com essa correção foram muito próximos dos valores obtidos sem ela e descritos na seção 5.5, pois a perturbação foi realmente pequena. O que realmente variou foi a medida da largura de linha da transição. Isso deve-se ao fato que a largura medida é a combinação de todas as larguras $\gamma = \gamma(\gamma_0, \gamma_{\text{laser}})$, onde γ_0 é a largura da transição atômica (natural + colisional) e γ_{laser} é a largura do laser, devido à largura do “jitter” mais a largura do próprio laser.

5.6.2 Correção Doppler

A forma do espectro teórico considerado na equação 5.1 é obtida considerando que a largura devida ao efeito Doppler da distribuição de velocidade é muito maior que a largura de linha da transição, isto é: $ku \ll \gamma$. Entretanto, obteve-se, pelo ajuste, até $\frac{ku}{\gamma} \approx 5$ para a condição de grande temperatura e alta pressão.

Uma correção a esse problema é considerar que a forma do sinal é dada pelo sinal devido à interação de van der Waals considerando válido $ku \ll \gamma$, acrescido do sinal devida ao efeito Doppler:

$$S = S_0 + S_{\text{Doppler}}. \quad (5.15)$$

Nessa primeira correção da curva teórica, aparece um fator de correção $f_d = ku/\gamma$. Para cada valor de f_d deve ser criada uma biblioteca de curva, essa nova biblioteca deve ser acrescida a biblioteca teórica antes de se começar o ajuste.

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Na Figura 5.22, mostra-se um exemplo onde o efeito Doppler começa a ter alguma

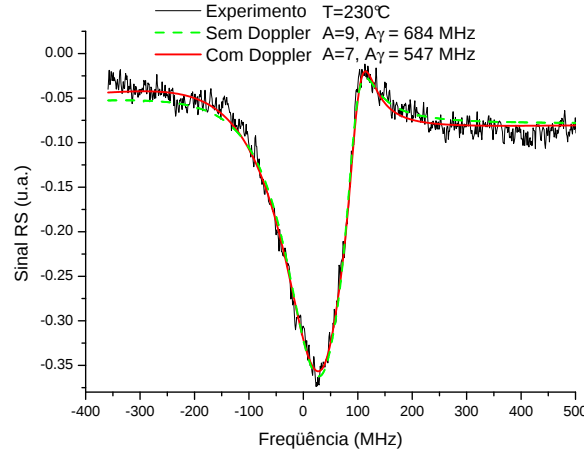


Figura 5.22: Exemplo da diferença de ajuste de curvas com e sem o efeito Doppler.

importância, pois $ku \approx \gamma$. Neste caso, tem-se o fator $f_d = \frac{ku}{\gamma} \approx 5$.

Pode-se observar, até nesse caso, que a correção modifica em apenas 20% o resultado dessa aquisição. Isso ocorre, pois além do fator $f_d > 1$, esse efeito está ligado ao que ocorre longe do centro da linha, isto é, nas asas do espectro onde o sinal é pequeno.

Os resultados obtidos para os demais espectros apenas com a correção Doppler ou com a correção Doppler acrescido da correção da frequência, mostraram-se muito semelhantes aos resultados sem correção alguma. Isso é consequência de alguns fatores como a barra de erro, ainda grande o suficiente para englobar tais correções, o fator Doppler f_d continuar ser grande e a perturbação da modulação e do agito do laser ser da ordem de γ natural, isto é γ a baixa temperatura.

5.7. CONCLUSÃO

5.7 Conclusão

Nesse capítulo, mostrou-se uma técnica bem adaptada à análise dos resultados da espectroscopia de reflexão seletiva. Foi possível determinar o coeficiente C_3 de interação de van der Waals com poucas considerações sobre o sistema e obteve-se o valor desse coeficiente com boa precisão $C_3 = (70 \pm 10)\text{kHz}/\mu\text{m}^3$. Apesar dessa precisão, o resultado fica quase duas vezes maior que o valor calculado teoricamente no Apêndice B, quando se considera que o sistema físico átomo-superfície é independente da temperatura da superfície. Essa diferença pode ter duas explicações básicas: o modelo teórico de soma dos níveis incompleto ou a aproximação de temperatura nula.

O modelo de soma não considera a soma sobre todos os níveis discretos, mas sobre uma quantidade limitada deles, e nem menciona a soma sobre os níveis contínuos. Já o cálculo de C_3 deverá ser feito considerando a temperatura da superfície no momento em que realizou-se o experimento. Isso está sendo atualmente desenvolvido no Laboratoire de Physique de Lasers - Paris XIII.

Mostrou-se também que com essa técnica é possível obter dados sobre os átomos como deslocamento (δ) e largura (γ) de linha em condições onde a temperatura e a pressão são muito altas e a espectroscopia de absorção linear não é favorável devido à saturação.

CAPÍTULO 5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Referências Bibliográficas

- [1] M. Ducloy e M. Fichet, *General theory of frequency modulated selective reflection. Influence of atom surface interactions*, Journal de Physique II France I, **1**, 1429 (1991), teoria geral da reflexão seletiva modulada, influenciando na curva espectral por causa da mudanças nas interações com os átomos próximos à superfície.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Capítulo 6

Efeito Förster: Transferência de população via van der Waals

Sumário

6.1	Introdução	138
6.2	Considerações para o cálculo	140
6.3	População dos níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$	142
6.3.1	Átomos chegando à superfície	144
6.3.2	Átomos partindo da superfície	148
6.4	Sinal da R.S.	151
6.5	Conclusão	154

6.1 Introdução

Os efeitos da interação átomo-superfície de van der Waals foram descritos no capítulo 2 em termos de mudanças nos níveis de energia e no tempo de vida da transição. No capítulo 3, considera-se apenas a mudança nos níveis de energia. Neste capítulo, será mostrado um sistema em que mudanças no tempo de vida são importantes e, principalmente, o aparecimento de um “novo” efeito: Förster átomo-superfície. Na transferência de excitação de Förster [1] (transferência de excitação dipolo-dipolo), conforme a definição da IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), duas entidades moleculares (átomos ou moléculas) distantes, sendo uma doadora e outra receptora, podem mudar de estado. Esse processo tem uma taxa de transferência que é proporcional à $1/r^6$, onde r é a distância entre os átomos.

Entre a superfície e o átomo, a troca de energia e a mudança nos níveis e no tempo de vida obedecem à lei $1/z^3$, por serem consequência da mesma interação de van der Waals. A troca de energia e o tempo de vida da transição estão intimamente ligados. De fato, parte da taxa de relaxação é a troca de energia do átomo com a superfície.

Para observação desse efeito, uma superfície com ressonância próxima a uma das transições do átomo pode favorecer esse efeito. Neste capítulo, o sistema é o experimento de Reflexão Seletiva (RS) já realizado por Failache et al [2] em que se observa claramente a transferência de população, ou mudança de estado do átomo, devido à interação de van der Waals átomo-superfície. O sistema atômico é o césio, cujos níveis atômicos utilizados diretamente são esquematizados na Figura 6.1. A escala de energia é tal que o zero é o estado fundamental e os mais excitados tem maior energia, conforme o artigo [3].

A medida do sistema foi feita sondando a população do nível $7P_{1/2}$ cuja população depende da transferência Förster (dada pela interação de van der Waals)

6.1. INTRODUÇÃO

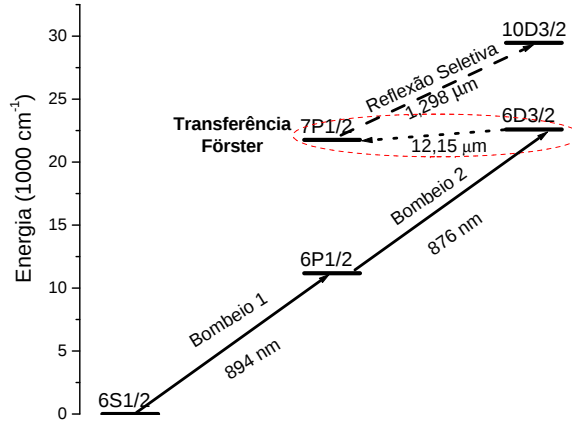


Figura 6.1: Níveis do Césio utilizados no experimento.

e da população do nível $6D_{3/2}$. A transferência de população $6D_{3/2} \rightarrow 7P_{1/2}$ é amplificada com excitação da superfície de safira, a qual tem uma ressonância próxima a $12 \mu\text{m}$, que é próxima à transição $6D_{3/2} \rightarrow 7P_{1/2}$ do césio ($12,15 \mu\text{m}$). Na Figura B.6 do anexo B, é representado o efeito da ressonância do termo ligado à taxa de emissão em torno de $12 \mu\text{m}$.

Inicialmente, considera-se que os átomos encontram-se no estado fundamental $6S_{1/2}$, pois além de ser o de menor energia, dificilmente perderá átomos via radiação térmica, cuja primeira transição para o $6P_{1/2}$ é da ordem de 16100 K , nem deverá perder por colisão entre átomos no mesmo estado fundamental.

Em seguida, bombeia-se do nível fundamental $6S_{1/2}$ até $6D_{3/2}$ via dois passos ($6S_{1/2} \rightarrow 6P_{1/2}$ e $6P_{1/2} \rightarrow 6D_{3/2}$). Considera-se que esse bombeio tenha uma taxa que dependa da posição, por efeito van der Waals, e da velocidade, pelo tempo de interação.

E finalmente, pelo Efeito Förster os átomos mudam de estado de $6D_{3/2}$ para o $7P_{3/2}$, transferindo sua excitação para a superfície. Mas, para se observar a população do nível $7P_{3/2}$, realizou-se uma reflexão seletiva entre os níveis $10D_{5/2}$ e $7P_{3/2}$. O sinal dessa reflexão seletiva depende da população do nível $7P_{3/2}$, que

CAPÍTULO 6. EFEITO FÖRSTER

depende do Efeito Förster.

Um outro ponto notável desse experimento foi o tipo de transição para transferência de população, sendo utilizada a $6D_{3/2} \rightarrow 7P_{3/2}$ em que o estado inicial $6D$ é mais energético que o $7P$, ver Figura 6.1. Isto é, o processo é do tipo emissão do átomo e absorção pela superfície. O processo contrário é possível se a superfície puder ser excitada, conforme visto na Seção 2.5. Isso pode ser obtido excitando os fônons com a temperatura, porém essa transição necessitaria de temperatura da ordem de 800 Kelvins, que é muito superior à dos experimentos RS realizados à temperatura menor que 500 K.

Neste capítulo, realiza-se o cálculo numérico do sinal de reflexão seletiva desse experimento para possível verificação e medição dos fatores de transferência. Isto é necessário, pois não há valores experimentais para todas as transições envolvidas dos acoplamentos com uma superfície e o sistema possui certos detalhes que podem complicar a análise direta do sinal. Na próxima seção, descrevem-se algumas das dificuldades dos cálculos.

6.2 Considerações para o cálculo

No capítulo 3, foi visto que o sinal de reflexão seletiva dependia diretamente do número de átomos N , ou do número de átomos polarizáveis pela radiação. Considerou-se que esse número era constante e a polarizabilidade média dos átomos dependia da velocidade e das interações do átomo com a superfície e com o campo. Nesta seção, o número de átomos polarizáveis depende do mecanismo de bombeio, que depende da posição e velocidade. Essa dupla dependência (número de átomos e polarizabilidade média) com a posição e a velocidade é parte da necessidade da elaboração de programa de simulação.

O sistema total, com todos os mecanismos de transferências da Figura 6.1

6.2. CONSIDERAÇÕES PARA O CÁLCULO

ativos, obedece equações de taxa que devem levar em conta as interações com a superfície, os lasers de bombeio e os níveis intermediários. Isso resultaria em uma série de pelo menos 6 equações diferenciais acopladas, uma para cada nível. Deve-se acrescentar também as equações dos termos de coerência, o que adicionaria, ao menos, mais 8 equações.

O problema, entretanto, pode ser dividido em três etapas ou mecanismos independentes: bombeio laser, mecanismo de transferência Förster e espectroscopia de reflexão seletiva. O bombeio é considerado um mecanismo que leva os átomos do nível $6S_{1/2}$ para o $6D_{3/2}$. O mecanismo Förster os leva do nível $6D_{3/2}$ para o nível $7P_{1/2}$. A espectroscopia é feita dos níveis $7P_{1/2}$ para $10D_{3/2}$.

Pode-se dividir o problema se forem atendidas algumas condições sobre as etapas. Para o bombeio, considera-se que seja muito forte, capaz de saturar as transições, sendo os lasers de bombeio que determinam as populações dos níveis $6S_{1/2}$, $6P_{1/2}$ e $6D_{3/2}$. Na prática, deve-se tratar o problema como um meio onde esse bombeio depende de z e v_z , bombeando o sistema à taxa $\lambda_{ext}(z, v_z)$. Porém pode ser utilizado, para simplificar o mecanismo de bombeio inicial, um efeito total de bombeio a uma taxa constante $\lambda_{ext}(z, v_z) = \lambda_{ext}$.

Para a etapa de espectroscopia, considera-se que a presença do laser de RS seja uma pequena perturbação, não modificando significativamente a população dos níveis $7P_{1/2}$ nem $10D_{3/2}$. Essa hipótese é indispensável para toda a reflexão seletiva considerada aqui.

Para o mecanismo de transferência Förster, que é o mecanismo intermediário que faz a transferência entre os níveis $6S_{1/2}$ e $7P_{1/2}$, considera-se que o mecanismo seja proporcional a $1/z^3$, devido a interação de van der Waals.

Mesmo dividido em grupos, o problema ainda continua difícil, pois deve manter a ligação entre os grupos. Uma simplificação para a resolução da população é observar apenas os níveis que ligam esses grupos. Os níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$ têm

uma perda de população via emissão espontânea para os níveis inferiores. Para o nível $6D_{3/2}$, existe uma fração transferida para o nível $7P_{1/2}$, que pode ser dividida em uma parte constante, “fraca”, e uma parte proporcional a $1/z^3$, para o modo polariton.

A primeira parte do problema é calcular a população dos níveis intermediários, realizado na Seção 6.3. A segunda parte é o cálculo da reflexão seletiva considerando a distribuição dessa população e o deslocamento dos níveis devido a interação van der Waals, feito na Seção 6.4.

6.3 População dos níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$

O tratamento para a população dos níveis pode ser feito através de equações de taxa que acoplam os diversos níveis atômicos. Cada nível tem um mecanismo próprio de perda e de ganho de população.

O nível $6D_{3/2}$ tem um mecanismo de ganho dado pelo bombeio realizado a partir do nível $6S_{1/2}$ passando pelo $6P_{3/2}$. Esse mecanismo tem uma taxa dada por $\lambda_{\text{ext}}(z, \nu)$. O nível $6D_{3/2}$ tem perda para os demais níveis, via emissão espontânea, que depende do número de átomos que esse nível possui. Dessa forma, escreve-se a evolução da população desse nível em termo das taxas de ganho e perda:

$$\frac{d}{dt}N_{6D}(z, \nu) = \lambda_{\text{ext}}(z, \nu) - \gamma_{6D}(z)N_{6D}(z, \nu), \quad (6.1)$$

onde $\lambda_{\text{ext}}(z, \nu)$ é a taxa de bombeio ou ganho do nível $6D_{3/2}$ e γ_{6D} é a taxa de perda por emissão do nível.

A taxa de bombeio $\lambda_{\text{ext}}(z, \nu)$ depende da posição devido à interação de van der Waals que muda a energia dos níveis do átomo. Como os lasers têm frequência fixa, há uma alteração de sintonia em função da posição. Como a transferência de população depende da sintonia, então a transferência depende da posição. Porém, é considerada que a taxa de bombeio seja constante $\lambda_{\text{ext}}(z, \nu) = \lambda_{\text{ext}}$ por simplificação

6.3. POPULAÇÃO DOS NÍVEIS $6D_{3/2}$ E $7P_{1/2}$

do problema. Isso pode ser válido se a intensidade do feixe for suficientemente alta, fazendo com que até os átomos na posição em que estariam fora da ressonância façam a transição.

A taxa de bombeio tem um limite superior quando longe da superfície, pois a taxa de perda e de ganho devem se igualar para atingir o equilíbrio, ficando:

$$\lambda_{\text{ext}} = \gamma_{6D}(z \rightarrow \infty)N_{6D}(z \rightarrow \infty). \quad (6.2)$$

Em um sistema de dois níveis o valor para a população seria $1/2$ da população, mas no nosso problema foi “normalizado”, pois se considera que o sistema no infinito tenha valor unitário, $N_{6D}(z \rightarrow \infty) = 1$.

A taxa de perda do nível $6D_{3/2}$ deve-se às perdas por decaimento espontâneo do átomo livre, considerada constante, acrescida da taxa B/z^3 para o nível $7P_{1/2}$, devido à emissão para o modo polariton, resultando em:

$$\gamma_{6D}(z) = \gamma_{6D} + B/z^3. \quad (6.3)$$

Dentre os níveis para os quais há a emissão espontânea do nível $6D_{3/2}$ está o nível $7P_{1/2}$, podendo escrever γ_{6D} como sendo

$$\gamma_{6D} = \Gamma_{6D \rightarrow 7P} + \Gamma_{6D \rightarrow \text{outros}}, \quad (6.4)$$

onde $\Gamma_{6D \rightarrow 7P}$ é a taxa de emissão espontânea para o nível $7P_{1/2}$ e $\Gamma_{6D \rightarrow \text{outros}}$ é a taxa para os demais níveis inferiores. A taxa de emissão para o nível $7P$ é muito menor que para os outros níveis, com pouca precisão, mas com o fator de aproximadamente $1/200$. Isso obriga a se fazer testes com diferentes valores para esse termo.

Para o nível $7P_{1/2}$, a equação de taxa da população é descrita pelo ganho via transferência do nível $6D$, devido ao mecanismo Förster acrescido da emissão espontânea para o nível $7P_{1/2}$, isto é, $\Gamma_{6D \rightarrow 7P} + B/z^3$. As perdas desse nível são descritas simplesmente pela taxa de emissão espontânea γ_{7P} . O resultado é a equação

de taxa para o nível $7P_{1/2}$.

$$\frac{d}{dt}N_{7P}(z, v) = (\Gamma_{6D \rightarrow 7P} + B/z^3)N_{6D}(z, v) - \gamma_{7P}N_{7P}(z, v). \quad (6.5)$$

Essas populações dependem da velocidade através da transformação hidrodinâmica $\frac{d}{dt} \rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial z}\right)$. E, semelhante ao Capítulo 3, podem ser descritas na forma integral:

$$N_{6D}(z, v) = \left(\frac{\gamma_{6D}N_{\infty}}{v_z}\right) e^{\frac{-z}{v_z}\left(\gamma_{6D} - \frac{B}{2z^3}\right)} \int_{\infty}^z dz_2 e^{\frac{-z_2}{v_z}\left(\gamma_{6D} - \frac{B}{2z_2^3}\right)} \quad (6.6)$$

$$N_{7P}(z, v) = \left(\frac{\gamma_{6D}N_{\infty}}{v_z^2}\right) e^{\frac{\gamma_{7P}z}{|v_z|}} \int_z^{+\infty} dz_2 \left[\left(\frac{B}{z_2^3}\right) e^{-\frac{\gamma_{7P}z_2}{|v_z|}} e^{\frac{z_2}{|v_z|}\left(\gamma_{6D} - \frac{B}{2z_2^3}\right)} \int_{+\infty}^{z_2} dz_3 e^{\frac{-z_3}{|v_z|}\left(\gamma_{6D} - \frac{B}{2z_3^3}\right)} \right]. \quad (6.7)$$

Pode-se notar que a expressão para as populações não são triviais. Um método numérico utilizado para calculá-las foi a integração de equação diferencial ODEint [4], baseado no método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Conforme descrito no que segue, há dois tipos de evolução a serem considerados, a dos átomos que chegam à superfície e a dos que partem da superfície.

6.3.1 Átomos chegando à superfície

Para os átomos se aproximando superfície, $v < 0$, vê-se na Figura 6.2 um exemplo, da população de um pacote de átomos partindo da posição $z=50 \mu\text{m}$ e no estado fundamental com velocidade de 50 m/s indo para a superfície. Observa-se o bombeio para o nível $6D_{3/2}$ e que a população do nível $6D_{3/2}$ atinge o máximo 1, significando que todos os átomos possíveis por bombeio estão nesse nível. O regime “estacionário” para o bombeio ocorre muito longe da superfície.

Próximo à superfície, há perdas da população $6D_{3/2}$ para o nível $7P_{1/2}$. Nessa transferência, há transientes que, entre outros, dependem de tempos de voo

6.3. POPULAÇÃO DOS NÍVEIS $6D_{3/2}$ E $7P_{1/2}$

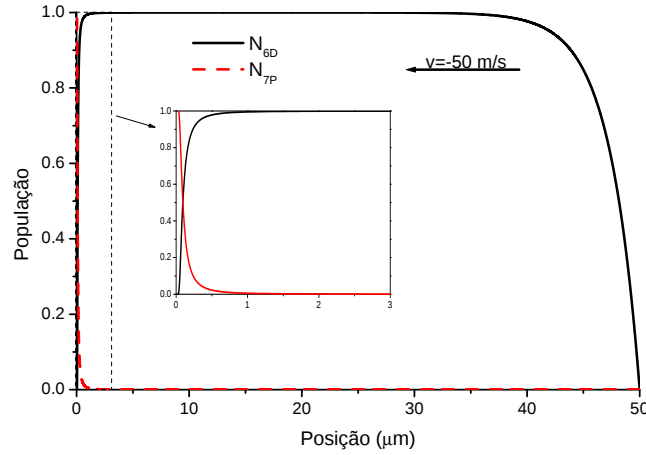


Figura 6.2: Exemplo de distribuição espacial de população dos níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$ para átomos que se aproximam da superfície, $v = -50$ m/s

do tipo z/v_z das equações 6.6 e 6.7. A dependência com a velocidade pode ser vista nas Figuras 6.3 e 6.4, onde se observa que quanto menor a velocidade, mais átomos podem ser transferidos para o nível 7P. Além do mais, a distribuição espacial não difere apenas de um fator, mas a forma também varia com a velocidade. A forma também muda dependendo do coeficiente de transferência B, conforme visto nas Figuras 6.5 e 6.6. Observa-se que na Figura 6.6 a população em 7P ultrapassa o valor unitário. A explicação desse efeito está na diferença de distribuição de população longe de e próxima à superfície. Longe da superfície basicamente só participam os níveis 6S, 6P e 6D, resultando em uma determinada população em 6D. Já próximo à superfície inclui-se o processo de transferência para o nível 7P (o efeito Förster) redistribuindo as populações entre os 4 níveis. De forma simples, pode-se entender essa redistribuição:

- Como os níveis 6D e 7P são fortemente acoplados em emissão, “todos” os átomos do 6D são transferidos para 7P, o que faria $N_{7P} \rightarrow 1$.
- Ao mesmo tempo, o nível 6D continua sendo bombeado e esses novos átomos

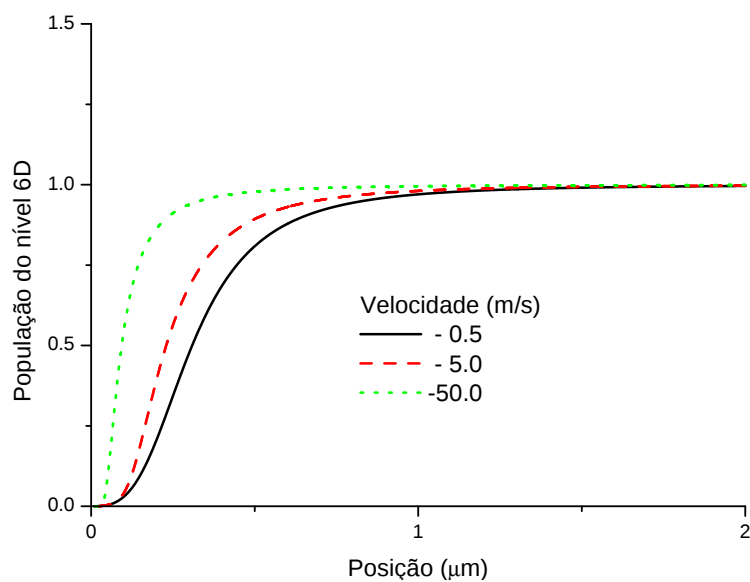


Figura 6.3: Distribuições de população do nível $6D_{3/2}$ para átomos aproximando da superfície, velocidades negativas

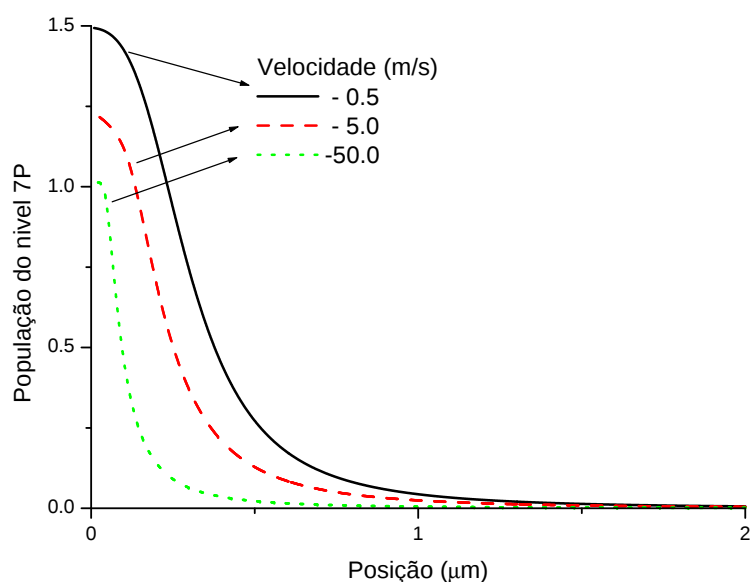


Figura 6.4: Distribuições de população do nível $7P_{1/2}$ para aproximando da superfície, velocidades negativas

6.3. POPULAÇÃO DOS NÍVEIS $6D_{3/2}$ E $7P_{1/2}$

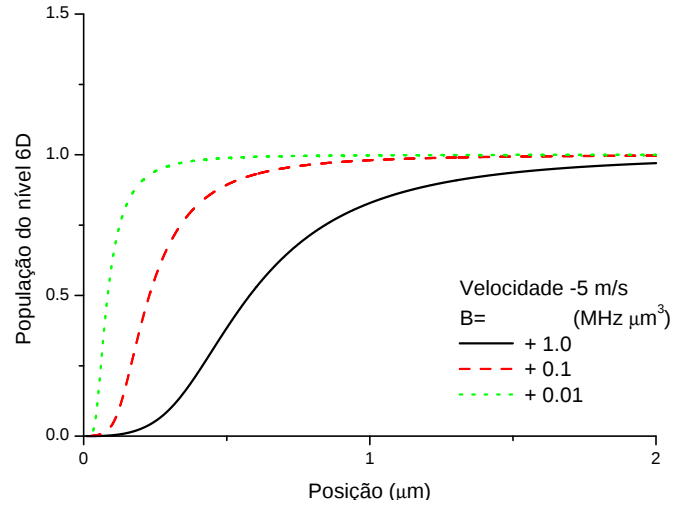


Figura 6.5: Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ para átomos se aproximando da superfície, velocidade negativa, para diversos valores de acoplamento B

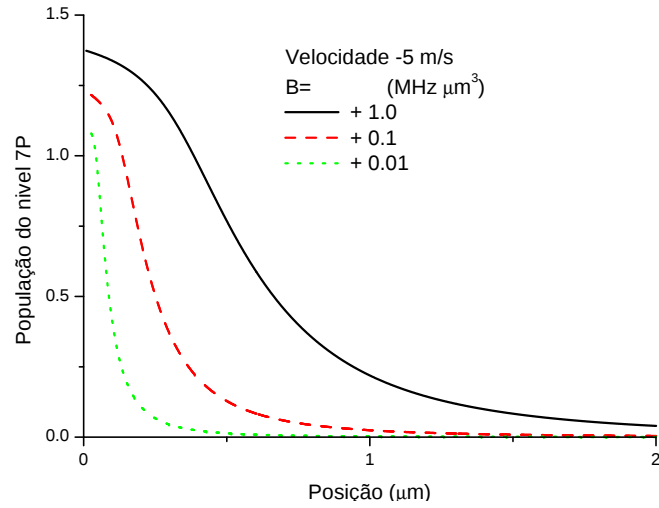


Figura 6.6: Distribuição de população do nível $7P_{1/2}$ para átomos se aproximando da superfície, velocidade negativa, para diversos valores de acoplamento B

são transferidos para o 7P.

Dessa forma a população do nível 7P, N_{7P} , pode ser maior que a população do nível 6D longe da superfície, isto é, pode-se encontrar $N_{7P} \geq 1$.

6.3.2 Átomos partindo da superfície

Para os átomos saindo da superfície, $v > 0$, como mostrado na Figura 6.7, há um máximo da população N_{7P} fora do ponto $z = 0$. Nas equações 6.6 e 6.7,

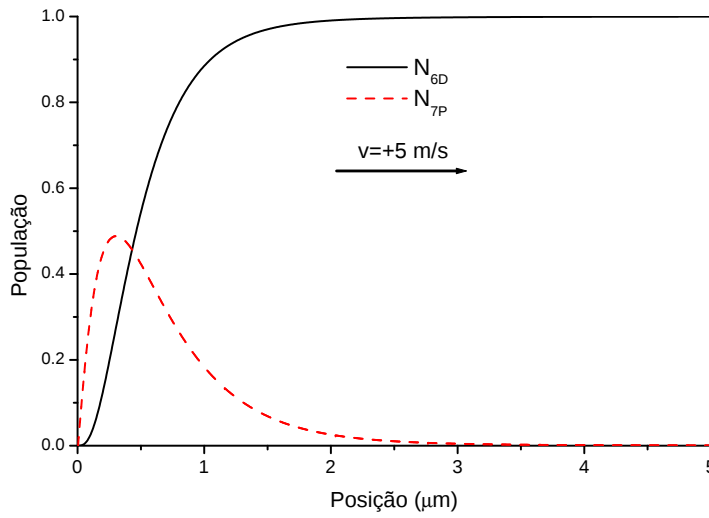


Figura 6.7: Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$ para átomos se afastando da superfície, velocidade positiva

da mesma forma que para velocidade negativa, aparece uma dependência explícita com a velocidade, ligada ao tempo necessário para chegar ao ponto z , nos termos z/v_z .

Esse máximo ocorre porque primeiramente em $z = 0$ os átomos partem do nível fundamental $6S_{1/2}$ e são bombeados inicialmente para 6D, o que demanda um tempo t , ou seja, um deslocamento $d = tv$ para a velocidade v do átomo. Fora da região de transferência Förster $6D \rightarrow 7P$ (onde $B/z^3 \ll \Gamma_{6D \rightarrow 7P}$), a população do

6.3. POPULAÇÃO DOS NÍVEIS $6D_{3/2}$ E $7P_{1/2}$

nível $7P$ dependerá apenas do ganho via nível $6D$, pelo fator $\Gamma_{6D \rightarrow 7P}$, e da perda do nível $7P$. Como a taxa da emissão espontânea do nível $6D_{3/2}$ para $7P_{1/2}$ é pequena comparada à taxa de emissão do nível $7P_{1/2}$, então há perda líquida de átomos na região distante da superfície, resultando em uma diminuição. Longe da superfície, onde o átomo é livre, praticamente não há população em $7P$.

Nas Figuras 6.8 e 6.9, observa-se que o máximo de população transferida

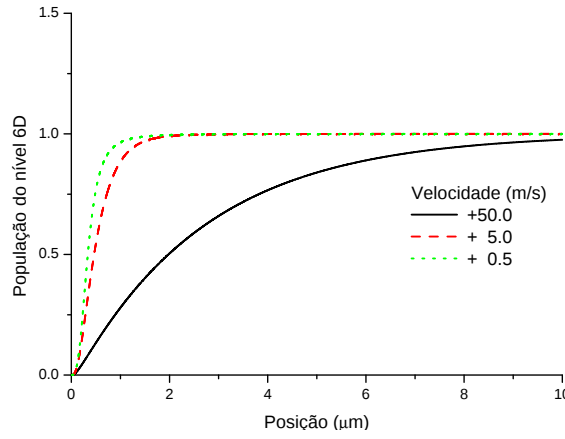


Figura 6.8: Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ para átomos se afastando da superfície, velocidades positivas

para $7P_{1/2}$ diminui com o aumento de velocidade e o ponto de máxima transferência é mais distante da superfície com o aumento da velocidade.

Nas Figuras 6.10 e 6.11, observa-se maior transferência para valores maiores de B e também um maior alargamento da região que conterá os átomos. Essa região maior é explicada pela competição entre as perdas (emissão espontânea) do nível $7P$ e o bombeio. Para um coeficiente B maior essa competição é favorável em uma região maior ($B/z^3 > \gamma_{7P}$).

CAPÍTULO 6. EFEITO FÖRSTER

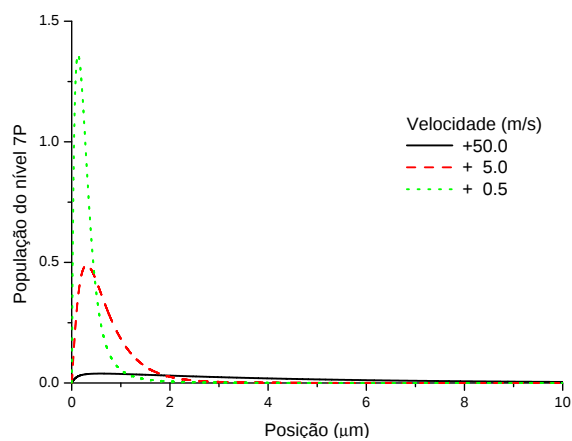


Figura 6.9: Distribuição de população do nível $7P_{1/2}$ para átomos se afastando da superfície, velocidades positivas

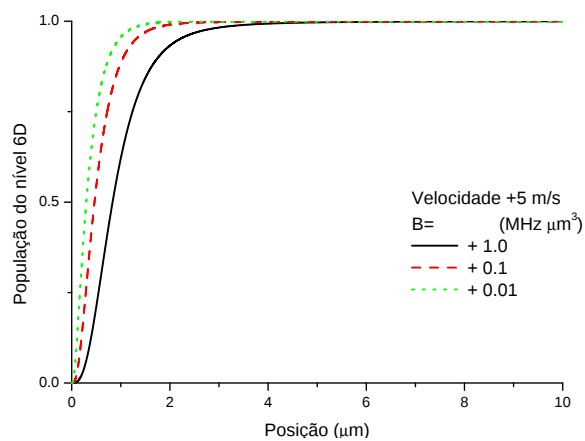


Figura 6.10: Distribuição de população do nível $6D_{3/2}$ para diversos valores de B para átomos se afastando, $v = +5$ m/s

6.4. SINAL DA R.S.

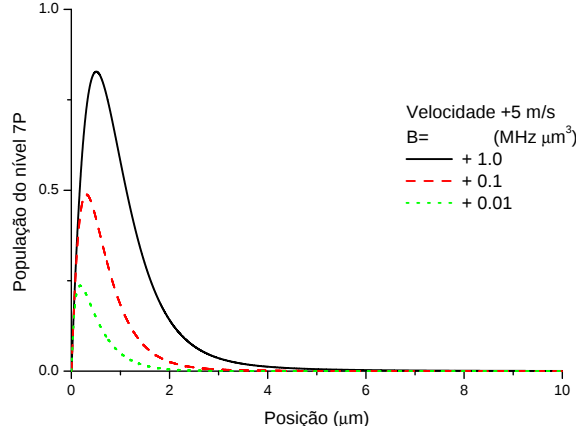


Figura 6.11: Distribuição de população do nível $7P_{1/2}$ para diversos valores de B para átomos se afastando, $v = +5$ m/s

6.4 Sinal da R.S.

Uma vez o nível $7P_{1/2}$ populado pela transferência Förster do nível $6D_{3/2}$, utiliza-se a RSFM, já descrita no Capítulo 3, que é sensível aos átomos próximos da superfície, onde se encontram os átomos no nível $7P_{1/2}$. A reflexão seletiva será feita do nível $7P_{1/2}$ para o $10D_{3/2}$, que é um nível mais energético e que obedece a regra de transição dipolar. Como visto naquele capítulo, o sinal da reflexão seletiva é dado pela parte não ressonante da intensidade refletida $S_{RS} = \Delta R$, cuja expressão 3.11 é reescrita:

$$S_{RS} = 2E_R^{NR} \Re \left(\frac{ik}{\epsilon_0(n+1)} \int_0^{+\infty} dz P(z) e^{i2kz} \right). \quad (6.8)$$

Da mesma forma, para a polarização

$$P(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} W(v_z) P(z, v_z) dz \quad (6.9)$$

$$P(z, v_z) = N\mu(\rho_{ef} + \rho_{fe}), \quad (6.10)$$

onde se considera que as populações estão definidas nos elementos da diagonal principal da matriz densidade ρ . Considerando que a população dos níveis não é modi-

CAPÍTULO 6. EFEITO FÖRSTER

ficada pela espectroscopia RS, pode-se escrever $N_{p_{ff}} = N_{7P}$. Então a solução para ρ_{ef} , da equação 3.25, é modificada com a inserção de $N_{7P}(z, v_z)$:

$$N\sigma_{ef}(z, v_z > 0) = i \frac{\Omega}{2v_z} \int_0^z e^{\frac{L(z') - L(z)}{v_z}} N_{7P} dz'. \quad (6.11)$$

É nesse ponto que deve-se adicionar o efeito de deslocamento de energia por causa da interação de van der Waals dos níveis $7P_{1/2}$ e $10D_{3/2}$. O fator da diferença de energia $C = C_{3_{10D}} - C_{3_{7P}}$ é acrescido em $L(z)$, da mesma forma que foi feito na seção anterior, na equação 3.23.

O sinal de R.S. torna-se o cálculo de 5 integrais consecutivas: uma em velocidade e 4 em posição. Esse cálculo pode ser extremamente complicado e demorado se calculado na forma de integrais simples. Por exemplo, se forem utilizados apenas 100 pontos por integral, que não garantem boa precisão, encontra-se o resultado em $100^5 = 10^{10}$ pontos calculados. Todos esses pontos são para uma única condição de frequência do laser. Ao se utilizar para calcular um espectro, com um número de pontos semelhantes, 100, chega-se ao número de 10^{12} pontos. O tempo mínimo necessário para calcular um espectro seria em um computador de 1 GHz, considerando que o cálculo de cada ponto utilize pelo menos 100 ciclos de clock, por conter funções mais elaboradas como exponenciais, chega-se ao tempo mínimo de 27 horas para a solução sem muita resolução nem precisão. Aumentando a precisão, chega-se ao tempo estimado de meses. Isso torna o cálculo impraticável.

A forma encontrada para resolver esse problema foi a utilização do método de integração de equações diferenciais ordinárias acopladas, baseada no método de Runge-Kutta. O tempo necessário tornou-se uma semana por espectro, em um computador Pentium 1GHz. Para diminuir o tempo gasto, dividiu-se o trabalho entre vários computadores, utilizando-se do tipo cliente-servidor invertido, onde vários servidores podem realizar os cálculos e um único cliente recebe os resultados dos cálculos e distribui as tarefas pelos servidores.

A contribuição de cada classe de velocidade pode ser vista na Figura 6.12,

6.4. SINAL DA R.S.

em que se observa uma forma dispersiva para os átomos em torno de $v_z = 0$. E em

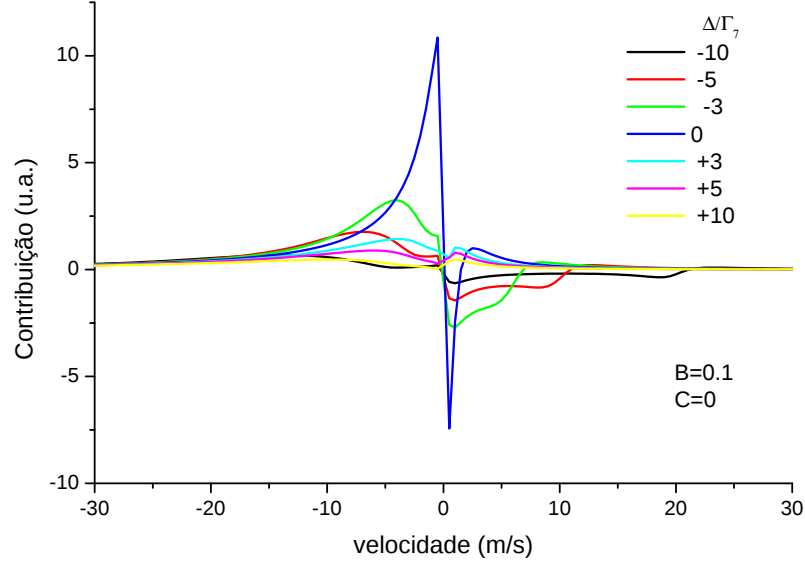


Figura 6.12: Contribuição das velocidades para o espectro de RS para diversas dessintonias

torno da velocidade em que o efeito Doppler compensa a dessintonia, $kv_z = \omega - \omega_0$, há uma pequena perturbação.

O resultado final, integrando-se o resultado mostrado na Figura 6.12 com o peso da distribuição de velocidade de Maxwell-Boltzman, é mostrado nos espectros da Figura 6.13, onde considera-se a variação do parâmetro C (diferença de C_3 de van der Waals dos níveis $6D_{3/2}$ e $7P_{1/2}$) em $z=1 \mu\text{m}$ e $B = 0.1\gamma_{6 \rightarrow 7}$, que equivale a 100kHz à mesma distância. Para simplificação das análises, foram considerados dois parâmetros $bb = B/\Gamma_{6 \rightarrow 7}$ sem unidades e $cc = c$ em unidades de $\text{kHz} \mu\text{m}^3$.

O ajuste de curvas baseado nesses resultados é mais difícil que o da seção anterior, que é descrito no Capítulo 5, por possuir um grau de liberdade a mais e principalmente por se utilizar do espectro Doppler, reduzindo a diferença entre os espectros.

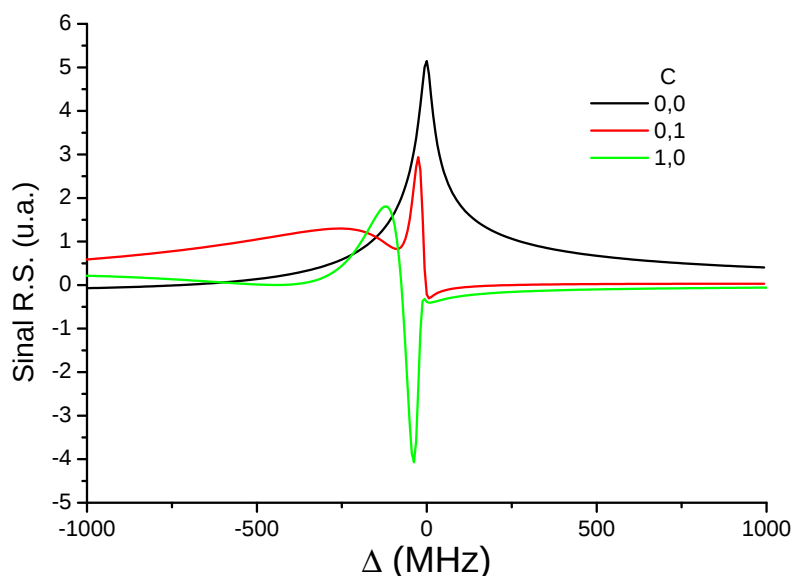


Figura 6.13: *Espectro de Reflexão Seletiva para diversos valores de C .*

6.5 Conclusão

Neste capítulo, estudou-se o mecanismo de transferência Förster para o caso átomo-superfície. Mostrou-se que a distribuição das populações dependem da posição e da velocidade dos átomos, assim como do vigor da interação com a superfície. Mostrou-se que a transferência de população para os átomos que partem da superfície é diferente da dos que chegam. Foram obtidas curvas espectrais para várias condições, que podem ser comparadas com os resultados experimentais.

Entretanto, dificuldades numéricas e teórico-experimentais (falta de dados para as constantes) limitam a obtenção de melhores resultados do experimento, mas permitem uma orientação sobre os experimentos que podem ser realizados.

Para o futuro, deve-se considerar o mecanismo de bombeio completo, considerando o deslocamento van der Waals que tem como consequência a dependência espacial do bombeio.

Referências Bibliográficas

- [1] T. Förster, Z. Naturf., **2b**, 174 (1947), ann. Phys. (Leipzig) [6] 2, 55 (1948).
- [2] H. Failache, S. Saltiel, A. Fischer, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant Quenching of Gas-Phase Cs Atoms Induced by Surface Polaritons*, Phys. Rev. Lett., **88**, 243603 (2002).
- [3] K.-H. Weber e C. J. Sansonetti, *Accurate energies of nS , nP , nD , nF and nG levels of neutral cesium*, Phys. Rev. A, **35**, 4650 (1987), contem os níveis de energia para muitos níveis do césio, n até 26.
- [4] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1987), nesse livro podemos encontrar mais alguns métodos numéricos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Capítulo 7

Estados Ligados Átomo-Superfície

Sumário

7.1	Introdução	158
7.2	Estados Ligados	161
7.2.1	Representação de variável discreta	162
7.2.2	Cálculo dos estados ligados	166
7.2.3	Estados ligados rasos	170
7.3	Interação de estados ligados com a radiação	173
7.3.1	Modificação de energia	176
7.4	Resultados	176
7.5	Conclusão	180

7.1 Introdução

A interação átomo-superfície pode ser classificada como sendo de curto ou de longo alcance. A região de curto alcance é aquela onde o constituinte da superfície (átomo, moléculas, cluster...) é observável de forma (quase-)individual. Já da região de longo alcance, observa-se o efeito coletivo dos constituintes. Nesse sentido, para considerar distante basta estar algumas vezes o tamanho dos constituintes. No Capítulo 2, foi considerado o caso de átomos cuja distâncias da superfície era igual ou inferior ao comprimento de onda associado à transição ($\lesssim \lambda$) mas grande o suficiente para considerar os efeitos coletivos dos constituintes da superfície.

As interações de longo alcance têm efeitos conhecidos [1–3] que são: o deslocamento dos níveis de energia, com a dependência espacial em $1/z^3$, para o regime não retardado, e as modificações dos tempos de vida [4, 5].

Esse tipo de interação pode ser atrativa [2] ou repulsiva [6] dependendo se as ressonâncias da superfície coincidem com as transições atômicas e dependendo da temperatura da superfície [7, 8] (ver Capítulo 2). Será considerado nesse capítulo a interação de van der Waals puramente atrativa, com $T = 0$.

Neste capítulo, estuda-se o caso em que os átomos se aproximam suficiente podendo interagir com os constituintes da superfície. Uma maneira de descrever essa interação próxima é aproximá-la por uma barreira de potencial finita ou infinita. No modelo da barreira finita é permitida a penetração de átomos na superfície. Já no modelo da barreira infinita, todos os átomos são refletidos pela superfície. Esse modelo de barreira é simplista, pois não leva em conta nenhum dos aspectos da interação física da superfície próxima, no máximo pode-se considerar a interação dentro da superfície dado pelo coeficiente de penetração.

Um modelo mais sofisticado, quando um átomo está muito próximo à superfície, leva em conta que o átomo torna-se sensível aos constituintes do sólido, e até sensível aos elétrons dos átomos da superfície. Como os elétrons dos átomos e

7.1. INTRODUÇÃO

do sólido estão mais próximos, pode-se pensar na existência de uma força repulsiva relacionada às interações dos elétrons dos átomos da superfície com os elétrons do átomo estudado. Uma das interações existentes está ligada ao princípio de exclusão de Pauli [9], que não permite elétrons (férmions) no mesmo estado, formando uma região não permitida. A consequência dessa interação excludente é um efeito repulsivo de curtíssimo alcance. Essa interação pode ser descrita de várias formas, porém será utilizada a forma do tipo $Ae^{-\alpha z}$, onde A é relacionada à amplitude da interação e α ao seu alcance.

Considera-se que o efeito total da superfície sobre o átomo é descrito por um potencial total, visto na Figura 7.1, dado pelo potencial repulsivo de curtíssimo

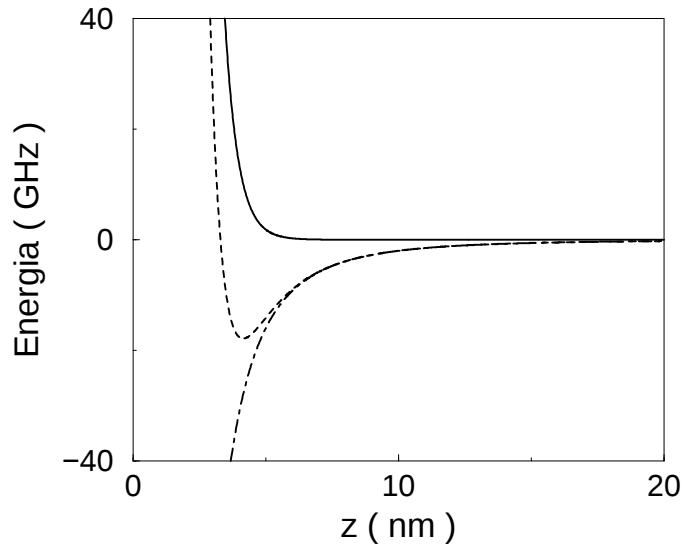


Figura 7.1: *Potencial da interação átomo-superfície. A linha contínua, o potencial de curto alcance; a linha traço-ponto, o repulsivo de van der Waals; e a tracejada, o potencial resultante.*

alcance acrescido do potencial atrativo de van der Waals de longo alcance:

$$V(z) = Ae^{-\alpha z} - \frac{C_3}{z^3}. \quad (7.1)$$

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

Essa interação pode ser interpretada como uma força ou um potencial, já que, neste caso, a força é conservativa. Em certas condições, a presença de força repulsiva e atrativa, sobre uma partícula, pode criar um poço de potencial. O poço representa uma região em torno de um mínimo local. Classicamente, dizer que a partícula está presa no poço de potencial implica dizer que a partícula possui uma energia E igual ao potencial em pelo menos dois pontos $\{z_0, z_1\}$ e, entre esses pontos, a energia é maior do que a energia do potencial. Se fora dessa região de poço a energia E for menor que todo o potencial $V(z)$, então a partícula classicamente estaria ligada ao potencial, na região limitada entre z_0 e z_1 , os pontos de retorno clássico.

Já na visão quântica, não existe ponto de retorno definido dessa forma pois é permitido que a partícula com energia E penetre na região onde $V(z) > E$. Outra característica é que a partícula ficará ligada se a sua energia for uma das permitidas pela equação de Schrödinger (níveis discretos de energia). Sabe-se que, em um poço quântico, a energia é quantizada. Esses são os níveis dos estados ligados, pois, sem interação externa, o átomo ficaria preso (ligado) a uma região do espaço.

Neste capítulo são mostrados resultados de simulações nas quais o átomo-livre e no seu estado fundamental, com energia maior que o potencial de superfície, é aprisionado para um dos estados ligados do fundamental [10]. Esse aprisionamento não seria possível via uma única transição dipolar por se tratar de uma transição entre 2 estados do mesmo nível eletrônico. A técnica utilizada é de uma transição Ramam ou em Lambda (Λ), em que se utiliza no processo um passo intermediário, para um estado ligado no nível excitado, permitindo a utilização de interação dipolar monocromática, por exemplo um laser.

Para realizar o cálculo numérico das probabilidades para as transições Ramam, é preciso primeiramente conhecer as auto-funções e as auto-energias desse potencial. Na Seção 7.2, descreve-se o tratamento utilizado para o cálculo das auto-

7.2. ESTADOS LIGADOS

funções e auto-energias, apresentando-se as dificuldades do cálculo do potencial e comparando os resultados obtidos com modelos teóricos aproximados.

Em seguida, para ser feita a evolução do sistema átomo no potencial de van der Waals, interagindo com a radiação, constrói-se, na Seção 7.3, o modelo utilizado para a simulação da evolução do sistema átomo e potencial de van der Waals, em presença de um laser.

O resultado final da simulação é mostrado na Seção 7.4 como uma transferência de átomos para os estados ligados do fundamental.

7.2 Estados Ligados

A evolução de um sistema quântico é descrita pela equação de Schrödinger:

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle, \quad (7.2)$$

onde $|\psi\rangle$ dá o estado do sistema e H é o hamiltoniano do sistema. Para o caso de potencial independente do tempo, que é o utilizado neste Capítulo, utilizou-se a separação de variáveis $|\psi\rangle = \phi(t)|\Psi\rangle$ e obtem-se uma forma onde a derivada temporal pode ser substituída pela energia E :

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (7.3)$$

onde E é a energia do sistema. O hamiltoniano é:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V \quad (7.4)$$

onde V é o operador potencial e, considerando que será observado um caso unidimensional na direção z , $P = P_z = i\hbar \frac{d}{dz}$ é o operador momento, que leva a:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (7.5)$$

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

A solução dessa equação diferencial são auto-energias E_n permitidas e as funções de onda $|\Psi_n\rangle$. Contudo, a solução de equações diferenciais de segunda ordem nem sempre são triviais e muito freqüentemente nem têm forma analítica. De fato, há poucos potenciais solúveis analiticamente, entre eles: potencial degrau, oscilador harmônico, átomo de hidrogênio, potencial de Morse. Assim, freqüentemente utiliza-se de métodos numéricos para resolver essa equação e obter as auto-funções e os auto-valores.

Há alguns métodos numéricos capazes de resolver esse tipo de problema: representação de variável discreta (DVR), WKB, WKB livre de divergência [11], Numerov, etc. O método utilizado neste trabalho foi o da representação discreta do espaço, por conseguir obter suas auto-energias e auto-estados com a precisão necessária. A precisão pode ser verificada pelos testes realizados e descritos na sub-seção 7.2.1.

7.2.1 Representação de variável discreta

A representação do espaço discreto é a representação onde uma posição do espaço assume apenas valores discretos, isto é, $z_0, z_1, z_2, \dots$. Essa discretização pode ser feita segundo dois critérios relativos à uniformidade da distribuição: igualmente ou diferentemente espaçados. Estando os pontos suficientemente próximos, uma função nesse espaço tem as mesmas características do que no espaço contínuo. Assim, dizer que há pontos suficientes numa região depende da função que se deseja descrever.

Nesta sub-seção, será mostrado o tratamento necessário nessa representação para as funções e operadores. Primeiramente, será considerado o operador posição $\mathbf{z}$ e seus auto-estados, agora discretos, $|z_i\rangle$ com auto-valor z_i :

$$\mathbf{z}|z_i\rangle = z_i|z_i\rangle. \quad (7.6)$$

7.2. ESTADOS LIGADOS

Considerando a distribuição dos pontos uniforme e em apenas uma região do espaço, tem-se N pontos e dessa forma N auto-estados para o operador $\mathbf{z}$: $|z_1\rangle$, $|z_2\rangle$, $|z_3\rangle$, ... $|z_N\rangle$. Dessa forma, pode-se escrever os operadores relativos ao espaço e seus auto-estados na forma matricial, respectivamente, $N \times N$ e $N \times 1$. A forma do auto-vetor $|z_i\rangle$ pode ser descrita numa matriz coluna:

$$|z_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}_{N \times 1} \quad (7.7)$$

e a forma do operador $\mathbf{z}$ é uma matriz diagonal $N \times N$:

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} z_1 & & & 0 \\ & z_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & z_{N-1} \\ & & & & z_N \end{pmatrix}_{N \times N}. \quad (7.8)$$

Para as aplicações deste capítulo, será mostrado a descrição de uma função $f(z)$ e dos operadores derivada primeira e segunda que estão contidas na equação de Schrödinger, equação 7.5.

Descrição de funções no DVR

Há duas formas de descrever uma função nessa representação matricial: matriz quadrada $N \times N$ e matriz coluna $N \times 1$. A primeira forma é descrita a partir da função $f(z)$ como uma série de potenciais de z , utilizando-se uma série de Taylor:

$$f(z) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l (z)^l. \quad (7.9)$$

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

Substituindo-se o operador $\mathbf{z}$ na função f , tem-se um operador $\mathbf{F}$:

$$\mathbf{F} = f(\mathbf{z}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l(\mathbf{z})^l. \quad (7.10)$$

Para a obtenção do valor da função no ponto z_i , basta calcular o valor esperado de $f(\mathbf{z})$ em $|z_i\rangle$:

$$f(z_i) = \langle z_i | f(\mathbf{z}) | z_i \rangle. \quad (7.11)$$

Cada elemento de matriz $F_{i,j}$ do operador nessa base é dado por

$$F_{i,j} = \langle z_i | F | z_j \rangle \quad (7.12)$$

e, na forma matricial, os elementos do operador função ficam:

$$F_{i,j} = \langle z_i | f(\mathbf{z}) | z_j \rangle \quad (7.13)$$

$$= \langle z_i | \sum c_j(\mathbf{z})^j | z_j \rangle \quad (7.14)$$

$$= \langle z_i | \sum c_j(z_j)^j | z_j \rangle \quad (7.15)$$

$$= \left[\sum c_j(z_j)^j \right] \langle z_i | z_j \rangle \quad (7.16)$$

$$= f(z_j) \delta_{i,j}, \quad (7.17)$$

que é uma matriz diagonal. Isto é esperado, pois, f é uma soma de produtos de matrizes diagonais, $\mathbf{z} \times \mathbf{z} \dots \times \mathbf{z}$, que é diagonal.

Outra forma de descrever uma função nessa representação é a forma de uma matriz coluna:

$$|f\rangle = \begin{pmatrix} f(z_1) \\ f(z_2) \\ \vdots \\ f(z_N) \end{pmatrix}. \quad (7.18)$$

Assim, para se obter a função em um ponto a partir do vetor, deve-se calcular o produto interno de $|z\rangle$ e $|f\rangle$

$$f(z_i) = \langle z_i | f \rangle. \quad (7.19)$$

7.2. ESTADOS LIGADOS

Vale a pena lembrar que um vetor $|f\rangle$ é uma matriz coluna e que $\langle z_i|$ é uma matriz linha onde apenas o elemento $z_i = 1$ é não nulo.

Descrição da derivada 1^a

Para descrever a derivada, parte-se do conceito básico de derivada, que é a inclinação da reta tangente à função. A inclinação de uma reta que passa pelos pontos $P_1(z_1, y_1)$ e $P_2(z_2, y_2)$ é dada por:

$$m = \frac{y_2 - y_1}{z_2 - z_1}. \quad (7.20)$$

Que resulta em:

$$f'(z_i) = \frac{f(z_{i+1}) - f(z_i)}{z_{i+1} - z_i}. \quad (7.21)$$

Na forma de operador matricial cada elemento da matriz tem a forma:

$$\left(\frac{d}{dz}\right)_{i,j} = \frac{\delta_{i,j+1} - \delta_{i,j}}{z_{i+1} - z_i}. \quad (7.22)$$

Essa matriz é formado pela diagonal principal e primeira diagonal superior. Todos os outros elementos são nulos.

Descrição da derivada 2^a

Semelhante a derivada primeira, pode-se estender para a derivada segunda:

$$f''(z_i) = \frac{f'(z_{i+1}) - f'(z_i)}{z_{i+1} - z_i} \quad (7.23)$$

$$= \frac{f(z_{i+1}) - 2f(z_i) + f(z_{i-1}))}{(z_{i+1} - z_i)(z_i - z_{i-1})}. \quad (7.24)$$

Então, a representação matricial do operador derivada segunda nessa base

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

é dada por:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2}\right)_{i,j} = \langle z_i | \frac{d^2}{dz^2} | z_j \rangle \quad (7.25)$$

$$= \langle z_i | \left[\frac{|z_{j+1}\rangle - 2|z_j\rangle + |z_{j-1}\rangle}{(z_{j+1} - z_j)(z_j - z_{j-1})} \right] \rangle \quad (7.26)$$

$$= \frac{\delta_{i,j+1} - 2\delta_{i,j} + \delta_{i,j-1}}{(z_{j+1} - z_j)(z_j - z_{j-1})}. \quad (7.27)$$

Que é uma matriz tridiagonal.

Logo, o operador hamiltoniano, formado da soma de uma matriz tridiagonal e uma diagonal na base das coordenadas, é uma matriz tridiagonal que possui técnicas próprias de cálculo de auto-vetores e auto-valores.

7.2.2 Cálculo dos estados ligados

O hamiltoniano, descrito na forma matricial $N \times N$, admite até N auto-estados e auto-valores correspondentes.

Para resolver os auto-valores, utiliza-se algumas sub-rotinas existentes, por exemplo, da Numerical Recipes [12, 13]. Deve-se conhecer também as auto-funções, que também são resolvidas por sub-rotinas do Numerical Recipes, que resolvem todas as auto-funções possíveis, levando mais tempo que a sub-rotina DEVFSF do pacote MSIMSL da Microsoft, que resolve as auto-funções e auto-valores de uma matriz para uma dada faixa de auto-valores. O resultado obtido dessa sub-rotina são funções normalizadas.

Deve-se sempre observar as unidades utilizadas, pois os programas numéricos normalmente não manipulam unidades. Como no artigo *Long-range atom-surface bound states* [10], foram utilizadas as unidades em MHz para a energia e metros para o espaço. A conversão da unidade de energia em unidade de frequência (MHz) é feita utilizando-se a relação de energia e frequência: $E = h\nu$.

7.2. ESTADOS LIGADOS

A qualidade do programa foi testada comparando-se os resultados (auto-valores e auto-funções) obtidos numericamente com as soluções analíticas da equação de Schrödinger, para um potencial de Morse. Aplica-se então esse procedimento ao potencial de van der Waals, para o sistema átomo de césio com uma superfície dielétrica. Esse potencial tem a forma, descrita na seção 7.1:

$$V(z) = Ae^{-\alpha z} - \frac{C_3}{z^3}, \quad (7.28)$$

onde o primeiro termo, $Ae^{-\alpha z}$, representa a interação repulsiva a curto alcance e o segundo termo, $-\frac{C_3}{z^3}$, a atração de van der Waals de longo alcance. Os parâmetros A e α foram determinados a partir dos valores de C_3 e da profundidade do poço D , determinados experimentalmente para o nível fundamental $6S_{1/2}$: $C_3 = 2 \text{ kHz} \cdot \mu\text{m}^3$ [2] e $D \approx 0,5 \text{ eV}$ [14].

Os parâmetros da equação potencial 7.28 são então $C_3 = 8.3 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$, $A = 150 \text{ eV}$ e $\alpha = 2.1 \text{ \AA}^{-1}$, para o sistema $\text{Cs}(6S_{1/2})$ -vidro.

Foram calculadas também as auto-energias para o potencial de van der Waals com esses parâmetros, e comparadas com um resultado analítico do potencial de Morse:

$$V(z) = A_m (e^{-2\alpha_m z} - 2e^{-\alpha_m z}), \quad (7.29)$$

em que foram ajustadas as variáveis A_m e α_m para melhor ajuste na faixa observada (ver Figura 7.2). Como a forma dos poços de potencial são diferentes, principalmente a localização mais restrita do potencial de Morse, deve-se decidir qual é a curva Morse que melhor se aproxima da de van der Waals.

Para realizar o cálculo com o método DVR, deve-se escolher uma região no espaço e o número de pontos. A região de cálculo será a região a função de onda será diferente de zero, além dessa região é zero ou aproximadamente zero. Essa região deve incluir os pontos de retorno clássico mais a região de tunelamento, ou seja, será maior que largura do potencial naquela faixa de energia observada.

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

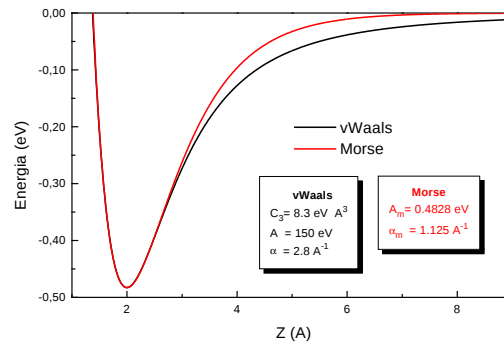


Figura 7.2: Comparação dos potenciais de Morse e van der Waals para o nível fundamental do átomo de césio.

Deve-se ter pontos suficientes para que a função encontrada seja suave, como é de se esperar, pois o potencial utilizado é limitado e derivável no espaço, e, ao mesmo tempo, um número pequeno de pontos (e da matriz) pela dificuldade computacional. Pode-se ver na Figura 7.3 que as auto-funções são suaves (existem muitos pontos

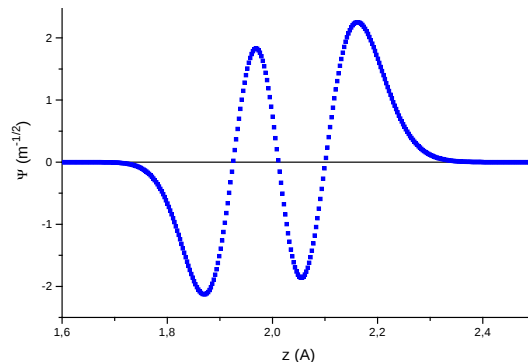


Figura 7.3: Exemplo de um auto-estado de van der Waals, para $n=3$

em cada ondulação).

Após a resolução das auto-energias dos potenciais, observa-se na Figura 7.4 que há uma boa concordância, para as auto-energias dos estados profundos, mostrando que o programa resolve muito bem os auto-valores. Para níveis superiores, a diferença aumenta, pois a diferença entre os potenciais torna-se significativa.

7.2. ESTADOS LIGADOS

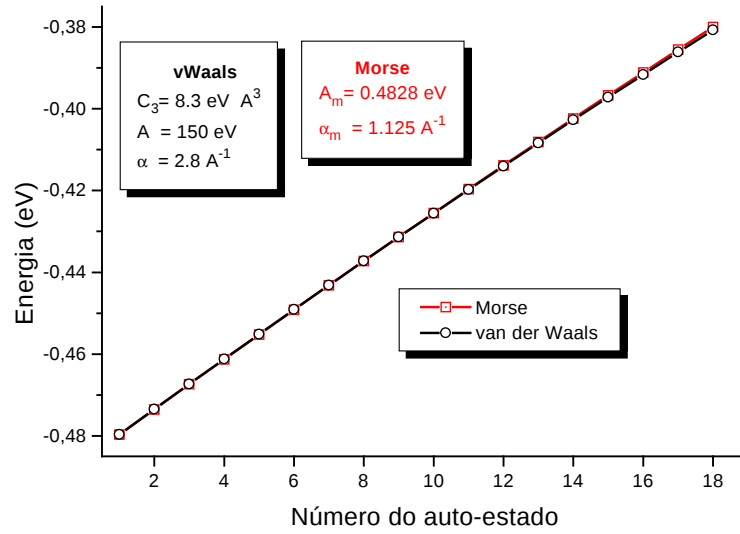


Figura 7.4: Comparação entre as auto-energias do van der Waals e Morse

De fato, espera-se que haja mais níveis no potencial “real” que no potencial de Morse, por causa do maior alcance do potencial de “real”.

O resultado final do cálculo das auto-funções para o potencial de van der Waals é mostrado na Figura 7.5, onde há as auto-funções sobre a auto-energia correspondentes.

Como o coeficiente C_3 de van der Waals depende do estado em que se encontra o átomo, deve-se calcular as auto-energias e as auto-funções para os dois níveis do átomo envolvidos no processo de foto-associação. Foi considerado o átomo de césio (Cs) e que os níveis $6S_{1/2}$ e $6P_{3/2}$ estão em ressonância com os lasers. Para simplificar, foi considerado o sistema atômico como sendo formado apenas por dois níveis, o fundamental ($6S_{1/2}$) e o excitado ($6P_{3/2}$).

Sabendo que a eficiência do mecanismo de transferência depende da sobreposição das funções de onda e considerando que inicialmente os átomos estão em um estado livre e que ocupam toda região $z > 0$, estudou-se as auto-funções que tinham maior alcance. As auto-energias próximas do estado livre têm as auto-

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

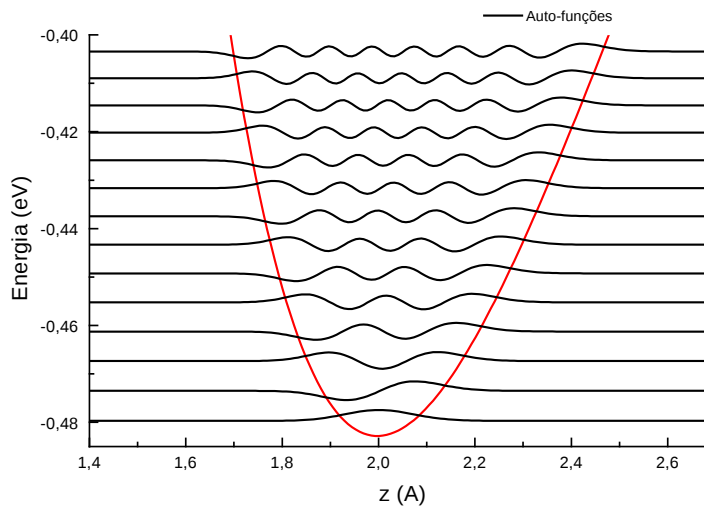


Figura 7.5: Auto-funções correspondentes à autoenergias de alguns níveis do potencial de van der Waals.

funções associadas com o maior alcance. Esses estados ligados são chamados de estados ligados rasos em relação aos auto-estados próximos ao mínimo do poço de potencial (estados ligados profundos). Na subseção 7.2.3, é mostrado os auto-estados considerados na simulação e a dependência com o potencial repulsivo.

7.2.3 Estados ligados rasos

Os estados ligados rasos, que foram escolhidos por ter a maior sobreposição com estado livre e, por isso, serem os mais indicados para a transferência de átomos para os estados ligados, têm problemas computacionais no método DVR. A dificuldade está no número de pontos que será muito grande para esses estados, pois a região para o cálculo, que é ordens de grandeza maior do que para os calculados estados profundos, e a grande diferença auto-energia e potencial representam um número grande de oscilações. Por causa disso, não foi possível calcular as auto-energias dos estados mais rasos, muito próximos a dissociação. Estudou-se, entretanto, para se manter a validade da técnica VDR e assim ter a suavidade das

7.2. ESTADOS LIGADOS

funções, outras intensidades para o potencial repulsivo, sem que modificasse significativamente as auto-energias nem as auto-funções, como será visto mais adiante.

Na Figura 7.6, é mostrado o resultado de um cálculo das auto-funções para

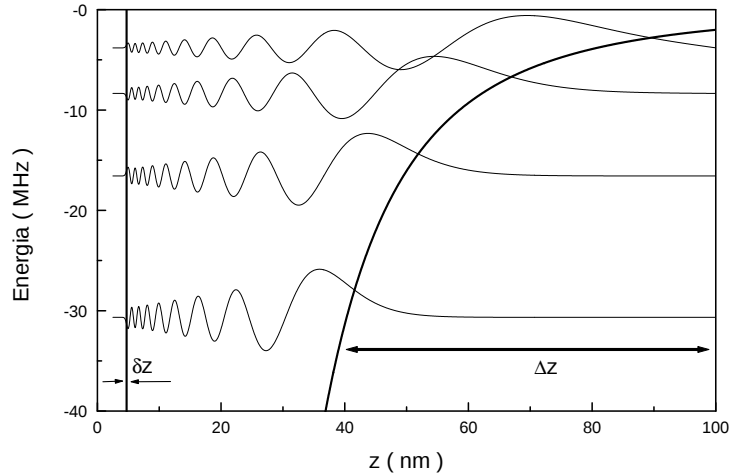


Figura 7.6: Exemplo de estados ligados rasos na faixa de energia δE de -40 MHz a -2 MHz. O potencial $V(z)$ varia δE em δz próxima a superfície e Δz na região de longo alcance.

os estados ligados rasos para uma faixa de energia -40 MHz até -2 MHz. Os resultados como a forma das auto-funções e os valores das auto-energias são explicados a seguir.

A diferença entre dois estados i e j relaciona-se com as diferenças entre $\sqrt{E_i - V(z)}$ e $\sqrt{E_j - V(z)}$, dessa forma, na região mais profunda do potencial, onde tem-se $|V(z)| \gg |E_{j,i}|$, essa diferença será pequena, com o resultado assemelhando-se a uma diferença de fase. Além do mais, a amplitude da função de onda é inversamente proporcional a $\sqrt{E - V(x)}$, isto implica em uma amplitude muito menor nessa região. Entretanto, entorno da região de retorno clássico, em que a energia é próxima do potencial, haverá grandes diferenças, podendo uma função de onda ser zero numa região em que a outra é máxima. No poço de potencial há duas regiões

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

com essas características: a região muito próxima a superfície e a região de longo alcance.

Próximas a superfície, as diferenças das funções de onda não são importantes porque para uma faixa de energia escolhida δE , em que estarão todos os auto-estados estudados, representa no potencial $V(z)$ uma pequena região do espaço δz , que é muito menor que a região de cálculo. Assim, mesmo havendo uma diferença local entre duas auto-funções, não é significativo em relação a toda função.

Por outro lado, para a região de longo alcance, as diferenças entre as funções de onda serão muito importantes e serão mais sensíveis à forma do potencial de longo alcance. Essa ligação com a forma do potencial está relacionada com a região em que o potencial é maior para uma auto-energia e menor para outra. Na primeira auto-energia, a função tende a zero exponencialmente e na segunda, a função ainda oscila. A região Δz para que o potencial $V(z)$ varie δE é mostrada na Figura 7.6. É essa região que tem maior diferença entre as funções.

Baseado nas características das funções de onda na região de mínimo como semelhança de forma e pequena amplitude para os estados rasos ligados, pode-se utilizar potencial menos profundo para representar o mesmo problema de carregamento de átomos ligados átomo-superfície. A profundidade deve manter ainda a relação $|V(z)| \gg |E_i|$ para qualquer nível i . A principal vantagem está no cálculo dos estados ligados, pois pode-se reduzir o número de pontos com a redução do número de oscilações.

Foram calculados as energias para os estados ligados na faixa de energia de -25 MHz a -1 MHz para diversos parâmetros do potencial repulsivo de curto alcance $Ae^{-\alpha z}$. Na figura 7.7, observa-se que os níveis praticamente não mudam de energia, mesmo para variações de ordem de grandeza dos parâmetros A e α .

Após o cálculo das auto-energias e auto-funções, é necessário calcular a população dos níveis ligados, considerando que inicialmente só existiam átomos

7.3. INTERAÇÃO DE ESTADOS LIGADOS COM A RADIAÇÃO

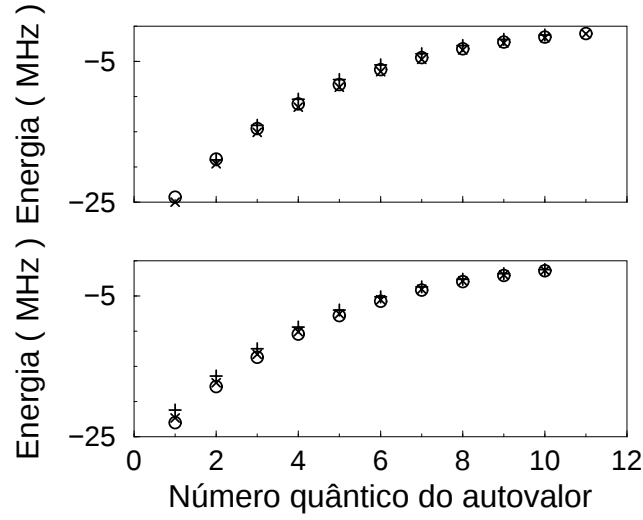


Figura 7.7: Dependência dos autovalores na faixa de -25MHz até -1MHz em função dos parâmetros do potencial repulsivo:

- a) para $A = 4 \times 10^{13} \text{ Hz}$ e $\alpha = 2 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ ($\times$), $1 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ ($\circ$) e $4 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ ($+$);
b) para $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ e $A = 4 \times 10^{15} \text{ Hz}$ ($\times$), $4 \times 10^{17} \text{ Hz}$ ($\circ$) e $4 \times 10^{19} \text{ Hz}$ ($+$).

livres. Esse processo de transferência é feito através de uma transição Λ entre o nível livre e o fundamental ligado, passando pelo excitado ligado.

7.3 Interação de estados ligados com a radiação

Em um feixe atômico com energia cinética E , o centro de massa pode ser descrito como uma função de onda $\psi_E(z) = \langle z | \psi_E \rangle$. Porém, num modelo simples de dois níveis, considera-se que a transição eletrônica não modifique o centro de massa, assim $|\psi_E\rangle$ não aparece nas equações. A evolução do sistema é descrita, então, pela equação de Bloch com 2x2 equações diferenciais acopladas que depende frequência de Rabi, dada pela interação entre campo e o dipolo atômico, a dessintonia δ_{livre} e do tempo de vida da transição.

A evolução dos átomos por causa da interação do átomo com a radiação

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

pode ser descrita em termos do operador de densidade:

$$\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (7.30)$$

da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho]. \quad (7.31)$$

O vetor de onda $|\Psi\rangle$ pode ser descrita como uma combinação linear dos elementos da base $\{|i\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = \sum_i C_i |i\rangle. \quad (7.32)$$

Em física atômica, esses vetores $\{|i\rangle\}$ são os níveis eletrônicos dos átomos, dado pelo hamiltoniano sem interação $H_0 = H_{at}$, onde H_{at} é o hamiltoniano do átomo livre.

Para o sistema com a superfície, o hamiltoniano H_0 , sem interação da radiação, é composto de duas partes:

$$H_0 = H_{at} + H_{vdW}, \quad (7.33)$$

onde H_{at} é o hamiltoniano do átomo livre H_{vdW} é o hamiltoniano da interação de superfície, dado na seção 7.2, em que a interação da superfície modifica apenas a dinâmica do centro de massa.

Se considerarmos que $H_{at} \gg H_{vdW}$, que os dois hamiltonianos são independentes e separáveis, que se tenha a seguinte propriedade:

$$H_{vdW} |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle \quad (7.34)$$

$$H_{at} |\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle, \quad (7.35)$$

onde $|\alpha\rangle$ pode ser o estado fundamental $|g\rangle$ ou excitado $|e\rangle$. Pode-se considerar, desta forma, a função que descreve o estado de átomo é a combinação das partes centro de massa e eletrônica:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i\alpha} C_i^\alpha |\phi_i^\alpha\rangle |\alpha\rangle, \quad (7.36)$$

7.3. INTERAÇÃO DE ESTADOS LIGADOS COM A RADIAÇÃO

onde a soma em i é sobre todos os níveis vibracionais do núcleo, dentro da faixa de energia E_i , para os estados eletrônicos α . Nessa nomenclatura, o estado inicial, que é o estado livre com a energia de alguns MHz é dado pelo vetor:

$$|\Psi_{livre}\rangle = |i = \text{livre}\rangle |\alpha = \text{fundamental}\rangle. \quad (7.37)$$

Não há necessidade de calcular o estado livre para o nível eletrônico excitado, por estar longe da sintonia dos lasers e, assim, não pode ser populado.

Dessa forma, o operador densidade tem os elementos de matriz:

$$\rho_{i\alpha j\beta} = \langle \phi_i^\alpha | \langle \alpha | \Psi \rangle \langle \Psi | \beta \rangle | \phi_j^\beta \rangle \quad (7.38)$$

$$= \sum_{k^{\gamma}, l^{\epsilon}} C_l^{\epsilon} C_k^{\gamma*} \langle \alpha | \gamma \rangle \langle \epsilon | \beta \rangle \langle i | k \rangle \langle l | j \rangle \quad (7.39)$$

onde, neste capítulo, os termos de índices diferentes para o centro de massa não são necessariamente 0, isto é:

$$\langle i | k \rangle \neq \delta_{ik}, \quad (7.40)$$

mas é calculado como sendo:

$$\langle i | k \rangle = \int \phi_i(z) * \phi_k(z) dz. \quad (7.41)$$

Mas continua valendo para os índices eletrônicos:

$$\langle \alpha | \gamma \rangle = \delta_{\alpha\gamma}. \quad (7.42)$$

A eficiência da transferência para o estado ligado depende da dessintonização e da intensidade dos dois lasers, assim como dos coeficientes de superposição das funções de onda para cada transição: $\left| \langle \alpha | \langle \phi_i^\alpha | \phi_j^\beta \rangle | \beta \rangle \right|^2$, onde $|\phi_i^\alpha\rangle$ ($|\phi_j^\beta\rangle$) representa a função de onda do nível ligado i (j) do estado eletrônico α (β) [15].

A interação com a radiação atua apenas nos estados eletrônicos α , porém, deve-se levar em conta a diferença de energia dos estados vibracionais. Por isso, a evolução do sistema foi adicionando o termo de energia na dessintonia da radiação (E_i) detalhado a seguir.

7.3.1 Modificação de energia

A energia de um estado $|\phi_i^\alpha\rangle|\alpha\rangle$ é:

$$\langle\phi_i|\langle\alpha|H|\phi_i\rangle|\alpha\rangle = \langle\phi_i|\langle\alpha|H_{vdW} + H_{at}|\phi_i\rangle|\alpha\rangle \quad (7.43)$$

$$= E_i + E_\alpha. \quad (7.44)$$

Dessa forma, cada estado tem uma energia $E_i + E_\alpha$. Uma transição atômica só pode ocorrer se a diferença de energia entre os níveis $|i, \alpha\rangle$ e $|j, \beta\rangle$ for igual à energia do fóton:

$$h\nu = (E_i - E_j) + (E_\alpha - E_\beta), \quad (7.45)$$

onde $(E_\alpha - E_\beta)$ é a diferença de energia eletrônica e $(E_i - E_j)$ é a da energia do centro de massa. Dessa forma a dessintonia será:

$$\delta = (E_\alpha - E_\beta - h\nu) + (E_i - E_j), \quad (7.46)$$

onde $\delta_{\text{livre}} = (E_\alpha - E_\beta - h\nu)$ é a dessintonização sem a existência da interação da superfície.

Na Figura 7.8, descreve-se o mecanismo de carga que leva os átomos que estavam inicialmente no estado livre $|\psi_{\text{livre}}\rangle$ para os estados ligados no fundamental $|\phi_i\rangle|g\rangle$, onde $|g\rangle$ representa o nível eletrônico no fundamental $6S_{1/2}$ e E_i está na faixa de energia das auto-funções calculadas. Os níveis intermediários de transferência são os excitados $|\phi_j\rangle|e\rangle$, onde $|e\rangle$ representa o nível eletrônico excitado $6P_{3/2}$ e E_j está na faixa de energia calculada. Assim, as frequências dos lasers são escolhidos de forma a acoplar o estado livre com um estado excitado e do estado excitado um estado ligado do fundamental.

7.4 Resultados

Considera-se que sistema tratado seja formado de alguns níveis e cada nível possua uma energia. Essa diferença de energia aparece explicitamente na evo-

7.4. RESULTADOS

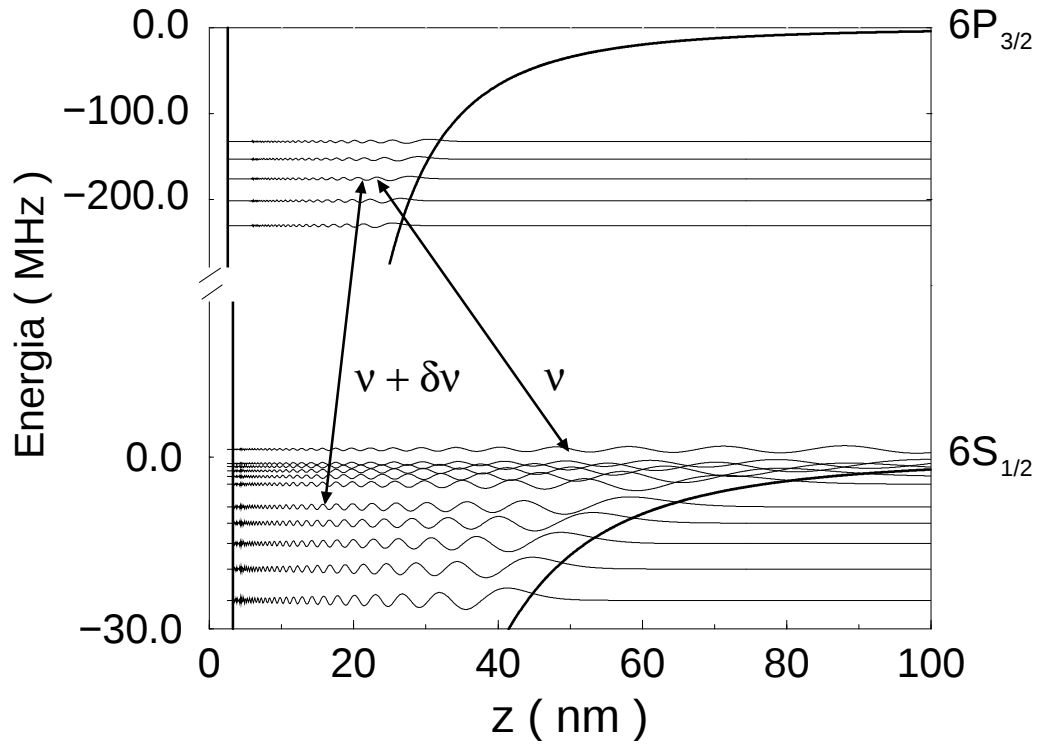


Figura 7.8: Os potenciais de superfície Cs-dielétrico e suas funções de onda, correspondendo aos estados do cézio $6S_{1/2}$ e $6P_{3/2}$ para o átomo livre. Os níveis vibracionais são obtidos para $A = 4 \times 10^{13} \text{ Hz}$ e $\alpha = 2 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$. As setas representam o laser de frequência ν acoplado os estados $|\psi_{\text{livre}}\rangle$ e $|\phi_j^e\rangle|e\rangle$ e o laser de frequência $\nu + \delta\nu$ acoplado os estados $|\phi_j^e\rangle|e\rangle$ e $|\phi_i^f\rangle|f\rangle$, resultando em uma configuração de transição Raman Λ .

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

lução na forma: $e^{i(E_i - E_f)t/\hbar}$ para cada nível i sobre todos os níveis f . Assim, a população de cada nível, que evolui com termos dessa diferença, terá componentes oscilatórias em várias frequências.

Para simplificar e observar melhor a efetividade da transferência, observou-se a soma das populações dos estados ligados do fundamental e a soma das populações dos estados ligados do excitado. O resultado é mostrado na figura 7.9.

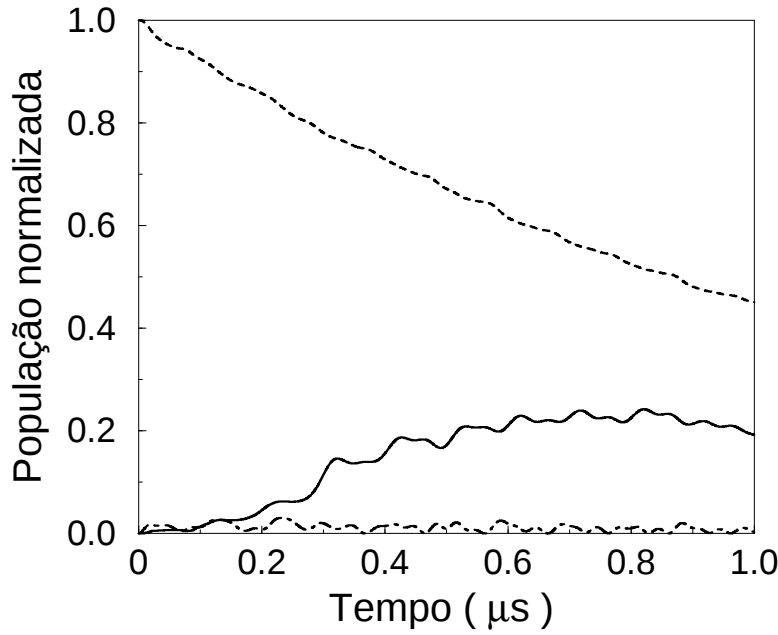


Figura 7.9: A evolução temporal da população para cada um dos 3 tipos de estados envolvidos na transição Raman: o estado livre do fundamental $|\psi_{\text{livre}}\rangle$ (linha tracejada), a soma dos estados ligados do fundamental $|\psi_i^f\rangle > |f\rangle$ (linha contínua) e a soma dos estados ligados do excitado $|\psi_j^e\rangle > |e\rangle$ (linha ponto-tracejada).

Observa-se na Figura 7.9, que o estado livre, inicialmente contendo todos os átomos, perde átomos para o estado excitado. O estado excitado, por sua vez, não consegue acumular esses átomos porque os transfere para o fundamental ou porque os perde por emissão espontânea. Essa emissão espontânea, considerado nesse modelo como uma perda, é a responsável pela diminuição de população total,

7.4. RESULTADOS

soma das populações, que inicialmente é igual a um e diminui com o tempo.

Por outro lado, os estados ligados do fundamental não apresentam perda por emissão espontânea, têm apenas o mesmo tipo de ganho e perda pelo acoplamento com o laser. O efeito líquido é a transferência de átomos do estado livre para os estados ligados do fundamental, deduzindo-se a perda pela emissão espontânea dos estados ligados do excitado.

Um parâmetro importante para a eficiência do processo de carga é a intensidade do laser, considerada a mesma para os dois lasers. Na Figura 7.10, observa-se

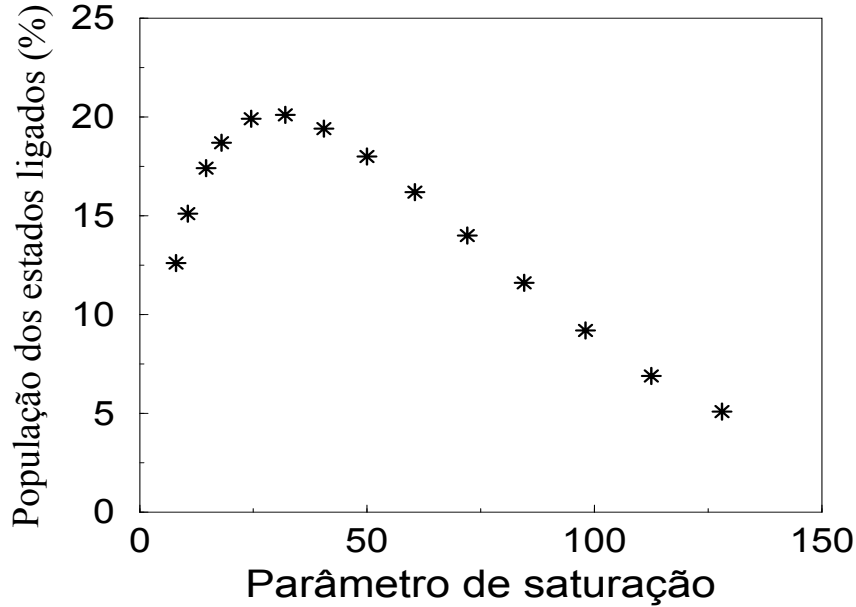


Figura 7.10: Eficiência do processo de carga como uma função do parâmetro de saturação s . O máximo da taxa de transferência 20% é obtido para $\Omega = 4\Gamma$.

que há um máximo para o parâmetro de saturação $s = 32$, isto é, $\Omega = 4\Gamma$. Para intensidades menores, haverá menos átomos pois não houve tempo suficiente para que fossem transferidos muitos átomos do estado livre para o ligado excitado. Para intensidade maiores, os níveis ligados do excitado ficam mais populados e, como a

CAPÍTULO 7. ESTADOS LIGADOS ÁTOMO-SUPERFÍCIE

perda se dá por emissão espontânea desse nível, o sistema perde mais átomos.

7.5 Conclusão

Neste Capítulo, foi apresentada uma técnica laser para obtenção de átomos de Cs ligados a um potencial de superfície. Essa técnica consiste em transferir átomos frios livres para níveis quânticos do potencial de superfície via interação com lasers. A descrição completa do processo necessita do cálculo das energias e das funções de onda dos átomos nos níveis ligados, assim como dos elementos de matriz da interação dipolar com a radiação laser.

Em uma primeira etapa, foram calculadas numericamente as auto-energias e as auto-funções para os níveis profundos e médios do potencial de superfície para átomos no seu estado eletrônico fundamental. Um teste do cálculo dessas funções, consistindo na comparação dos resultados obtidos numericamente com soluções analíticas, para um potencial de Morse, confirmou a sua precisão e valida os resultados numéricos obtidos para o potencial físico, de van der Waals.

Na segunda etapa, mostrou-se a possibilidade e eficiência de até 20% da transferência atômica dos átomos para os estados ligados pelo potencial de superfície.

O prosseguimento desse trabalho consiste em calcular as demais grandezas com parâmetros realísticos do sistema, tendo em vista uma observação experimental desses efeitos¹. Entre os cálculos futuros, estão: o sinal de Reflexão Seletiva para esse sistema, e considerar outros átomos e superfícies.

¹Montagem sendo feita no Laboratório de Física Atômica e Lasers da UFPB.

Referências Bibliográficas

- [1] V. Sandoghdar, C. I. Sukenik, E. A. Hinds e S. Haroche, *Direct Measurement of the van der Waals Interaction between an Atom and Its Images in a Micron-Sized Cavity*, Physical Review Letters, **68**, 3432 (1992), primeira medida direta da interação van der Waals como função da separação átomo-superfície.
- [2] M. Chevrollier, M. Fichet, M. Oriá, G. Rahmat, D. Bloch e M. Ducloy, *High resolution selective reflection spectroscopy as a probe of long-range surface interaction: measurement of the surface van der Waals attraction exerted on excited atoms*, J. Phys II France, **2**, 631 (1992).
- [3] R. Grisenti, W. Schollkopf e J. Toennies, *Determination of Atom-Surface van der Waals Potentials from Transmission-Grating Diffraction Intensities*, Phys. Rev. Lett., **83**, 1755 (1999).
- [4] H. Failache, S. Saltiel, M. Fichet, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant van der Waals Repulsion between Excited Cs Atoms and Sapphire Surface*, Phys. Rev. Lett., **83**, 5467 (1999).
- [5] W. Jhe, A. Anderson, E. Hinds, D. Meschede, L. Moi e S. Haroche, *Suppression of spontaneous decay at optical frequencies: test of vacuum-field anisotropy in confined space*, Phys. Rev. Lett., **58**, 666 (1987).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [6] H. Failache, S. Saltiel, A. Fischer, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant Quenching of Gas-Phase Cs Atoms Induced by Surface Polaritons*, Phys. Rev. Lett., **88**, 243603 (2002).
- [7] I. Hamdi, M.-P. Gorza, P. Segundo, G. Dutier, P. Valente, J. Leite, M. Fichet, D. Bloch e M. Ducloy, *Investigation of nonzero temperature effects in cavity quantum electrodynamics*, J. Phys. IV France, **119**, 187 (2004).
- [8] M.-P. Gorza, *Shift d'un niveau atomique excité en présence d'un champ et d'une surface en équilibre thermique à température non nulle*. (2002), discussão interna.
- [9] C. Kittel, *Introdução à Física do estado sólido* (Guanabara Dois S.A., Rio de Janeiro - RJ, 1978), 5^a ed.
- [10] E. Lima, M. Chevrolier, O. D. Lorenzo, P. Segundo e M. Oriá, *Long-Range atom-surface bound states*, Physical Review A, **62**, 013410 (2000).
- [11] T. Hyouguchi, S. Adachi e M. Ueda, *Divergence-Free WKB Method*, Physical Review Letters, **88** (2002), descreve um método analítico em que se modifica o método de WKB, de integração da equação de Schrödinger para obtenção da função de onda. A modificação permite calcular a função de onda no ponto de retorno clássico.
- [12] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1987), nesse livro podemos encontrar mais alguns métodos numéricos.
- [13] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1987), nesse livro podemos encontrar exemplos de uso dos métodos numéricos do livro [12].

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [14] M. Stephens, R. Rhodes e C. Wieman, *Study of wall coatings for vapor-cell laser traps*, J. Appl. Phys., **76** (1994).
- [15] P. S. Julienne, *Cold Binary Atomic Collisions in a Light Field*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., **101**, 487 (1996).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Parte II

Realimentação Ótica Incoerente

Capítulo 8

Controle de frequência do Diodo Laser

Sumário

8.1	Introdução	188
8.2	Utilização do diodo laser	189
8.3	Característica do diodo laser	191
8.4	Estabilização Eletrônica	193
8.4.1	Controle de temperatura	195
8.4.2	Controle de corrente	195
8.5	Realimentação Eletrônica	197
8.6	Realimentação Ótica	197
8.7	Realimentação Incoerente	199
8.8	Conclusão	202

8.1 Introdução

A utilização do laser é muito ampla, alcançando várias áreas do conhecimento. Podem ser encontrados lasers para uso médico, odontológico, tecnológico, entre outros. Em medicina, o uso do laser não é restrito ao efeito de aquecimento pela potência do laser em uma área restrita, como um simples bisturi de precisão, mas principalmente por poder interagir mais fortemente com materiais específicos, devido às substâncias contidas nele. Essas substâncias ressonantes podem ser naturais ou aplicadas a outros materiais para essa finalidade. A interação ressonante ocorre devido a outra importante característica do laser; o seu alto poder espectral, dado pela potência por unidade de frequência. Em espectroscopia atômica, esse poder espectral torna-se mais importante por permitir a análise mais precisa de um espectro. É possível obter um fator de precisão em frequência de fração de Hertz [1] na faixa de emissão do laser (centenas de THz).

Neste capítulo, serão mostradas inicialmente, na Seção 8.2, as motivações da utilização de um tipo especial de laser que, dentre os diversos tipos de laser disponíveis, tem se mostrado muito versátil: o diodo laser ou laser de diodo.

Lasers de diodo destacam-se entre as fontes de radiação EM coerente vários aspectos. Em aplicações tecnológicas, o diodo laser torna-se muito flexível pelo preço, pelo tamanho reduzido e solidez; e pela eficiência elétrica, com baixo consumo de energia. Entre as aplicações tecnológicas estão os leitores e gravadores óticos, como DVD e CD, e diversos dispositivos de medição. Em sistemas espectroscópicos ou de transmissão de informação, os diodos lasers são muito úteis pela possibilidade de modulação direta em amplitude através da modulação de sua corrente de injeção ou pela grande capacidade de varredura em frequência. Tais efeitos não podem ser obtidos com lasers a gás, por exemplo, que dependem de descargas elétricas para o bombeio, ou transferência de excitação por colisão interatômica. Todos esses meios de bombeio demandam tempos relativamente longos,

8.2. UTILIZAÇÃO DO DIODO LASER

o que impossibilita o rápido chaveamento direto desse tipo de lasers.

Na Seção 8.3, descreve-se o diodo laser e o seu funcionamento. Na seção 8.4, o sistema de controle de corrente e temperatura é descrito. Nas Seções 8.5 e 8.6, descrevem-se sistemas para o travamento do diodo laser em torno de uma frequência. Na Seção 8.5, é descrito o uso de um sinal de erro, gerado por um discriminador de frequência, para tentar corrigir a frequência. Na Seção 8.6, utilizam-se as propriedades do diodo laser, alto ganho e baixa seletividade, para modificar a frequência de emissão e tentar corrigi-la fazendo uso da realimentação do feixe do laser e um discriminador de frequência. Por fim, na Seção 8.7, a técnica de realimentação ótica incoerente é descrita para um novo sistema onde o discriminador de frequência é uma transição atômica [2].

8.2 Utilização do diodo laser

Uma vantagem dos diodos lasers é a variedade espectral disponível. Dependendo da forma que ele é construído (dopagem dos materiais constituintes), é possível obter-se emissão laser em quase todo espectro de frequência entre o infravermelho distante ($1,7\text{ }\mu\text{m}$) até o ultravioleta (200 nm). Como exemplo dessas possibilidades, apresenta-se na Figura 8.1, obtida de um vendedor de material para lasers, TOPTICA [3], o espectro e suas respectivas potências em que é possível se obter diodos lasers comercialmente. Esse grau de possibilidades de frequência permite uma facilidade, em termos de projetos, de montagens e análises com diodos lasers diferentes, principalmente quando se compara a mesma família de lasers, o que mantém próximas as características operacionais como a corrente e temperatura de operação, além do mesmo formato físico, dado pelo encapsulamento.

A utilização de diodo laser em espectroscopia é indicada quando existe um diodo que opera em torno da frequência que se deseja trabalhar. De acordo com

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

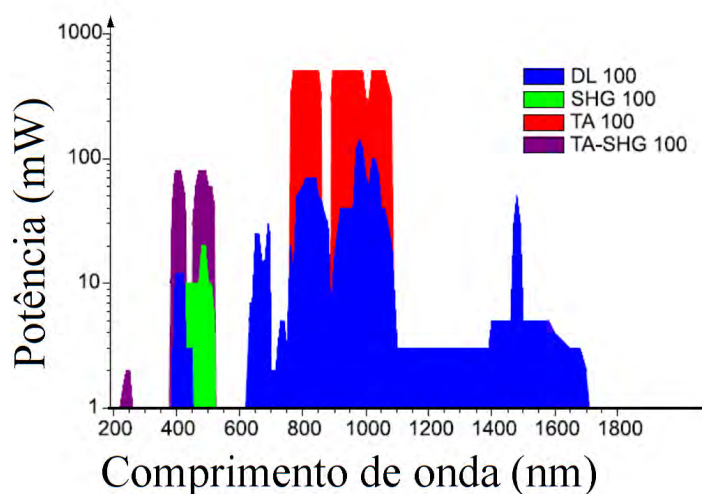


Figura 8.1: *Espectro de operação de alguns tipos de diodo laser.*

a Figura 8.1, é muito provável que se obtenha o laser de diodo desejado e com potências razoáveis. Exemplos de aplicações são as espectroscopias com vapor de diversos materiais, como o dióxido de carbono (CO_2), amônia (NH_3) e o índio (In). Os átomos alcalinos, que são de grande interesse em Física Atômica, podem ter seus primeiros níveis excitados por diodos lasers, particularmente as transições do cério ($6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$ e $6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$) e as do lítio ($5P_{1/2} \rightarrow 6S_{1/2}$).

A principal vantagem da utilização de diodos lasers para espectroscopia baseia-se na possibilidade de com um único laser pode-se varrer o equivalente até alguns nanômetros¹, o que equivale a variar até 1% da sua frequência de emissão. Essa é uma faixa bastante ampla se comparada, por exemplo, com lasers a gás que emitem radiação cuja frequência é muito próxima da frequência da transição atômica ou molecular desse gás. Por outro lado, essa facilidade de varredura na frequência dificulta a fixação em uma determinada frequência, por exemplo, em uma transição atômica. Mas há inúmeras técnicas utilizadas para a “fixação” e estabilização da frequência, entre elas as realimentações óticas e eletrônicas que

¹Não necessariamente em um único modo, ver Seção 8.3

8.3. CARACTERÍSTICA DO DIODO LASER

serão citadas neste capítulo.

Outras aplicações utilizam as propriedades dos diodos lasers como um meio de alto ganho e cavidade pouco seletiva. Isso permite utilizar diodos laser para a análise de sistemas complexos, quando na presença de meios não lineares, de não-linearidade, bistabilidade [4], caos [5]. Uma aplicação recente é a aplicação tecnológica avançada, como a criptografia com laser.

8.3 Característica do diodo laser

Os lasers, de forma geral, podem ser descritos como sistemas formados de: um meio de ganho, uma cavidade e um sistema de bombeio. O meio de ganho é responsável pela geração de fótons idênticos aos fótons que já se encontravam no meio. A cavidade serve, entre outras coisas, para realimentar o sistema com uma fração desses fótons gerados. O sistema de bombeio está ligado ao fornecimento de energia e inversão de população.

Em um laser, o número de fótons criados, N_c , pelo meio de ganho depende do número de fótons dentro do meio, N_f . Da mesma forma, o número de fótons perdidos pelo meio, N_p , que pode ser pela absorção no próprio meio, ou transmissão para fora da cavidade (radiação laser útil), ou outras formas dispersivas. Desta forma, a variação do número de fótons pode ser descrita em termos desses ganhos e perdas como:

$$\frac{dN_f}{dt} = GN_f - PN_f, \quad (8.1)$$

onde G e P são, respectivamente, as taxas de ganho e perda de fótons no meio. No equilíbrio, quando o ganho se torna igual à perda, isto é, o número de fótons é constante, $G = P$.

A cavidade serve para realimentar o laser com parte desses fótons gerados, resultando numa diminuição efetiva das perdas P . Porém, isso reduziria a radiação

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

laser útil, em uma primeira aproximação. Essa redução não ocorre de fato porque os fótons que retornam ao meio de ganho induzem a emissão de mais fótons. Assim, mais fótons chegam à superfície da cavidade e por consequência mais saem e mais fótons retornam. A cada retorno, mais fótons seriam gerados. O fator limitante do número de fótons gerados é o número limitado de recombinações, que pode ser dado pelo número de átomos excitados ou de elétrons em níveis superiores de energia que podem decair para um nível de mais baixa energia.

Em um diodo laser, o ganho G , dado pela razão entre o número de fótons gerados pelo número de fótons no meio, é muito grande e, em consequência, não há necessidade de cavidades com espelhos de reflectividade alta: é possível utilizar-se apenas da faces clivadas do próprio cristal semiconductor como cavidade. Dessa forma a cavidade do diodo laser (AsGaAl) utilizada é o próprio meio de ganho pode ser considerada como um Fabry-Perot com o índice $n \approx 3,5$ e um comprimento $L \approx 250 \mu\text{m}$.

A qualidade de emissão de um laser nessas condições (livre) em muitos casos não é ideal para a espectroscopia. Na análise com o cézio, transição $6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$, a largura espectral de emissão do laser livre é $\approx 30 \text{ MHz}$ que é maior que a largura de linha natural da transição ($\Gamma \approx 5,2 \text{ MHz}$).

Outro problema do laser livre está na frequência de emissão que é sensível ao tamanho da cavidade e ao índice de refração. Como são afetados pela temperatura e corrente [6], é necessário algum controle desses parâmetros. De fato, utiliza-se esses parâmetros para a seleção da frequência de emissão. Na seção 8.4, descreve-se o sistema básico desses controles.

Além disso, é possível melhorar largura de emissão em várias ordens de grandeza [7] dos diodos lasers e diminuir sua dependência com a temperatura e corrente, através de uma das formas de realimentação:

- eletrônica, que modifica a corrente inicial, e

8.4. ESTABILIZAÇÃO ELETRÔNICA

- ótica, que utiliza de parte do feixe emitido pelo laser e reinjeta no próprio laser.

A realimentação ótica e pode ser de dois tipos:

- coerente e
- incoerente.

Na realimentação coerente considera-se que a cavidade laser é estendida por uma cavidade externa, modificando a frequência de emissão. Esse tipo de realimentação é mais detalhada na seção 8.6. Na realimentação incoerente o efeito pode ser entendido como a modificação do meio de ganho. Na seção 8.7, utiliza-se da realimentação incoerente com um vapor atômico no caminho para travar o laser na transição atômica desse vapor.

8.4 Estabilização Eletrônica

A frequência de emissão de um laser pode ser descrita como sendo uma função do índice de refração do meio ativo e do tamanho da cavidade. Portanto, dada uma cavidade de tamanho L , que nos diodos lasers é o comprimento do meio de ganho, as frequências possíveis são aquelas que satisfazem:

$$m\lambda/2 = nL, \quad (8.2)$$

onde m é um número inteiro, λ é o comprimento de onda e n é o índice de refração. A condição acima resulta em um “pente” de picos de frequências de ressonância da cavidade, conforme ilustrado na Figura 8.2. O modo oscilante (modo laser) será determinado pela curva de ganho do semiconductor, isto é, a emissão ocorrerá no modo da cavidade mais próxima à região de maior ganho.

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

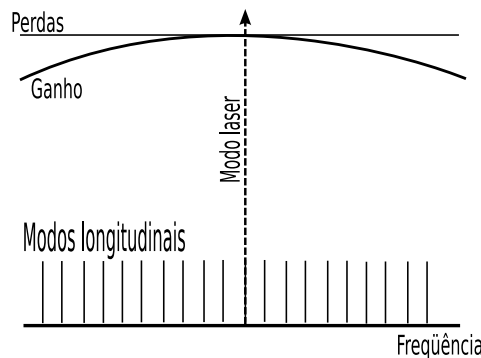


Figura 8.2: Ilustração do perfil de ganho e modos de vibração longitudinais de um diodo laser.

A convolução entre a curva de ganho e o espectro da cavidade resulta, normalmente, em algumas poucas frequências que serão emitidas pelo diodo laser. Será considerado, neste capítulo, que a emissão será do tipo monomodo, *i.e.*, um único modo contém mais de 95% da potência ótica.

Porém, freqüentemente, o modo que o laser se encontra não é o desejado, mas é um modo vizinho que se encontra na região semelhante da curva de ganho e perda do modo desejado. Considera-se que o laser só possa ir para o modo desejado com a mudança de corrente ou temperatura, pois tanto a curva de ganho quanto a curva dos modos longitudinais dependem da corrente e da temperatura. Por exemplo, uma variação de temperatura de 1 Kelvin, para um diodo baseado no AlGaAs, por exemplo, o comprimento da cavidade varia de +0,06 nm, enquanto que o máximo da curva de ganho se desloca de +0,25 nm/K [7]. Essa diferença de deslocamento resulta em “saltos de modos”. Há esse mesmo tipo de diferença na variação de corrente.

Nas próximas subseções, será visto como é possível controlar a temperatura e corrente para que o laser permaneça na frequência desejada.

8.4. ESTABILIZAÇÃO ELETRÔNICA

8.4.1 Controle de temperatura

Normalmente, os diodos lasers são fornecidos com alguns dados, entre eles, a frequência de emissão para certa corrente e temperatura. Como a frequência de emissão do diodo laser depende da temperatura da junção do semiconductor, a obtenção da frequência desejada pode ser alcançada com a temperatura, em primeira aproximação, usa-se a relação $+0,25 \text{ nm/K}$.

Essa temperatura deverá permanecer, durante todo o processo, estável da ordem de $10 \mu\text{K}$. Esta estabilização é obtida com um sistema eletrônico de controle de temperatura com uma sonda (termômetro) e uma realimentação (trocador de calor). A maneira usual para a detecção da temperatura é feita através de um resistor NTC (Negative Temperature Coefficient). A comparação dessa resistência com uma resistência padrão, gera um sinal de erro. Uma ponte de Wheastone permite que qualquer variação de temperatura signifique uma variação de tensão.

A partir do sinal de erro, pode-se utilizar sistemas de controle baseados em circuitos eletrônicos como o PID (proporcional- integrador - diferenciador) ou apenas P (proporcional). O PID é o sistema mais utilizado porque é mais completo e tem a capacidade de ser ajustado para evitar variações em três níveis de velocidade: rápido (Diferenciador), lento (Integrador), médio (Proporcional).

Como trocador de calor, utiliza-se o Peltier (ou TEC—Termo Eletric Cooler) com propriedades interessantes para o sistema de controle de temperatura, entre elas a capacidade de transferir calor em qualquer sentido, *i.e.*, poder esfriar ou esquentar, dependendo do sentido da corrente aplicada.

8.4.2 Controle de corrente

Além de depender da temperatura, o comprimento de onda de emissão do diodo laser depende também da corrente de injeção. Mudanças na corrente de inje-

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

ção afeta a temperatura na junção do diodo e muda a densidade de portadores que também muda o índice de refração, e estes por sua vez afetam o comprimento de onda. Para escalas de tempo maior que $1 \mu\text{s}$, a mudança de corrente pode ser simplesmente entendida como uma forma de mudança rápida de temperatura, porque a contribuição da densidade de portadores para a mudança do índice de refração é relativamente pequena. A corrente afeta a temperatura de junção por causa do efeito Joule, e resulta em uma curva para o comprimento de onda versus corrente muito semelhante a versus temperatura.

Somente para tempos mais curtos que $1 \mu\text{s}$ é que a subida da temperatura é suficientemente pequena que o efeito da densidade de portadores não seja dominado. Para diodos de AlGaAs [6], a variação na frequência do lasers pela corrente é $\approx -3 \text{ GHz/mA}$ para frequências menores que 1 MHz , caindo para $\approx -300 \text{ MHz/mA}$ para frequências até 3 GHz . Essa variação sobe novamente para $\approx -1 \text{ GHz/mA}$ próximo da frequência de oscilação (tipicamente $\approx 3 \text{ GHz}$), e cai fortemente para frequências superiores. Esses diferentes tipos de comportamento da resposta FM pode causar consideráveis complicações em modulações de alta velocidade e para sistemas de controle para diodos lasers.

O controle de corrente é bem mais simples que o controle de temperatura, pois somente é necessária uma fonte de corrente estabilizada. Essa fonte de corrente precisa, normalmente, ser variável e possibilitar o controle externo para a varredura.

Outros fatores externos podem alterar a qualidade do resultado do controle de corrente, entre eles ruídos da rede elétrica e ruídos eletromagnéticos. Isso resulta em uma flutuação na frequência de emissão.

Caso não seja possível com uma temperatura e uma corrente o modo laser desejável, procura-se outro par temperatura-corrente, próximos ao primeiro par temperatura-corrente.

8.5. REALIMENTAÇÃO ELETRÔNICA

8.5 Realimentação Eletrônica

Os circuitos eletrônicos de controle de temperatura e corrente podem ter seus componentes referenciais, por exemplo, resistências, com valores modificados com o tempo ou condição climática (umidade e temperatura). Esse efeito é mais importante quando se deseja fixar em uma frequência atômica que é extremamente estreita ($\approx$ MHz) comparada com a faixa de varredura possível (centenas de GHz) e até mesmo com a faixa devido à flutuações (dezenas de MHz ao longo do dia de um experimento).

Uma forma de fixar absolutamente a frequência do laser é utilizar de uma referência absoluta em frequência, como uma transição atômica. Uma técnica comum é a estabilização no declive [7] de um pico da absorção linear ou da absorção saturada. Nessa região, uma pequena variação na frequência pode ser transformado em um sinal de correção da corrente.

Esse sistema é limitado pois pode introduzir variações na frequência por haver variação do sinal de correção, mesmo sem variação na frequência. Isso pode ocorrer quando o sistema se desalinha, modifica a absorção do meio, ruído em intensidade, baixa velocidade de correção, entre outros.

Na seção 8.7, descreve-se uma técnica em que o laser pode ser fixado em uma frequência atômica com uma realimentação ótica incoerente, em que o sistema seria menos sensível aos problemas do controle eletrônico.

8.6 Realimentação Ótica

Uma grande parte da saída do diodo laser tem uma polarização bem definida, quase 100% em um dos eixos. Nesse caso, a realimentação ótica pode ser considerada como sendo formada de uma realimentação paralela e uma perpendicular em relação a esse eixo. Nesta tese, será considerado que haja apenas um tipo

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

de realimentação.

A realimentação paralela forma, dentro do laser, um padrão de interferência modificando os modos de oscilação, por isso chama-se realimentação coerente. Por possuir uma cavidade pouco seletiva e um forte ganho esse sistema modifica o modo de operação do laser. Essa realimentação pode ser independente ou dependente da frequência do laser. A independente é do tipo cavidade estendida, e a dependente é do tipo discriminador.

A cavidade simples estendida [8,9] modifica a cavidade laser, que era apenas o próprio laser, para uma cavidade maior composta de duas cavidades: a do laser e a estendida. Dependendo da configuração é possível ter laser operando independente da cavidade do diodo, permitindo grandes varreduras.

A cavidade do tipo discriminador tem a característica de reinjetar no diodo laser apenas determinadas frequências que serão amplificadas e todas as demais frequências serem excluídas. Como seletor de frequência pode-se utilizar, por exemplo, o Fabry-Perot confocal ou uma grade de difração. Com o Fabry-Perot, a cavidade estendida fica basicamente restrita à cavidade do Fabry-Perot. Para o sistema com grade a cavidade estendida é dada pela distância do diodo à grade. Para uma sintonização com a grade é necessário rotacionar (selecionando a frequência de reinjeção) ao mesmo tempo que se desloca, permitindo que a cavidade mantenha números inteiros de comprimento de onda.

Como a sensibilidade do diodo laser à realimentação ótica é grande, pode-se utilizar também para explorar regimes de funcionamento dinâmico de dois lasers [10]. Uma das possibilidades de injeção é a técnica de injeção que permite transferir características espectrais de um laser estreito e estabilizado para um laser de potência (aproximadamente até 500mW)².

Na seção 8.7, será tratado o caso da realimentação ortogonal ou incoerente.

²Isto ainda não foi feito em João Pessoa.

8.7. REALIMENTAÇÃO INCOERENTE

8.7 Realimentação Incoerente

A realimentação ortogonal não forma padrão de interferência dentro do laser, por isso foi tratada como Realimentação Ótica Incoerente. O efeito desse tipo de realimentação pode ser entendida em termos da variação do número de portadores. O aumento da potencia reinjetada P_R leva a uma recombinação dos portadores, isto é, a uma diminuição do número de portadores N . Essa diminuição diminui o ganho g do laser. Por estar inversamente relacionados, a diminuição do ganho implica em um aumento na parte imaginária do índice de refração, n' , que por sua vez aumenta a parte real do índice de refração, n'' , onde o índice de refração é $n = n' - in''$. Esse aumento do índice, dentro do mesmo modo, diminui a frequência de emissão ν . O esquema pode ser ilustrado:

$$\uparrow P_R \quad \downarrow N \quad \downarrow g \quad \uparrow n'' \quad \uparrow n' \quad \downarrow \nu$$

Utilizando-se de um discriminador de frequência, como a transição de uma absorção linear, a potência de realimentação torna-se dependente da frequência, conforme mostrado na Figura 8.3. Uma perturbação em torno de uma frequência F , próximo ao transmissão, pode gerar um aumento ou diminuição do sinal transmitido, observar a diferença de $F+$ e $F-$ da Figura 8.3.

Pode-se, então, colocar a frequência do laser na região onde uma variação de frequência modifique a potencia reinjetada de tal forma a forçar uma variação no sentido contrário, ou seja, uma correção. Nesse caso, é do lado de $F+$ que isso ocorre. O resultado é que de um lado, após uma perturbação na frequência, o sistema tende a voltar a condição de origem e do outro, afasta-se deste ponto. Isto é, de um lado $F+$ a região é estável e do outro $F-$ é instável. Na figura 8.3, as setas mostram em que sentido a frequência tenderá a seguir após uma perturbação. Essa região de instabilidade permite pensar em uma histerese ou bi-estabilidade, conforme será estudado no Capítulo 9.

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

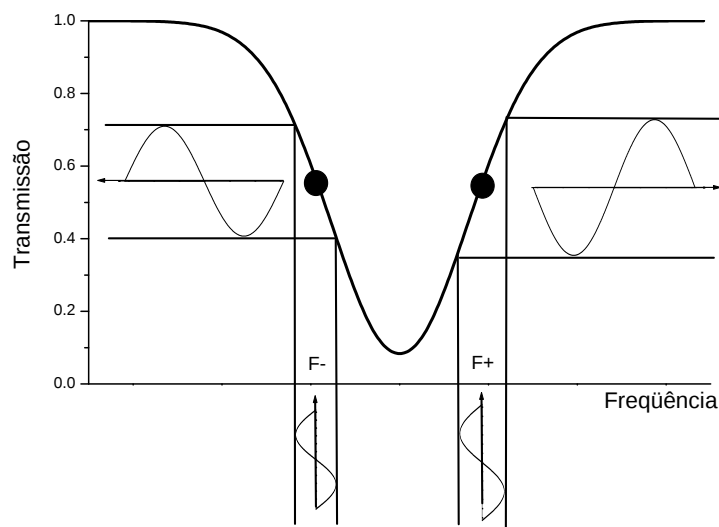


Figura 8.3: Ilustração do sinal de transmissão de uma absorção linear com o discriminador de frequência.

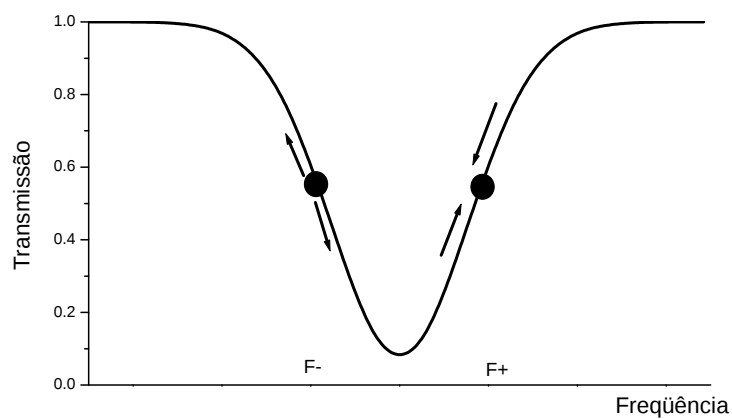


Figura 8.4: Ilustração do sentido da frequência quando o laser for perturbado.

Utilizando-se a esquema da Figura 8.5, onde o feixe sai do diodo laser DL com polarização paralela à folha, passa pelo polarizador G-F (Glan-Foucault).

8.7. REALIMENTAÇÃO INCOERENTE

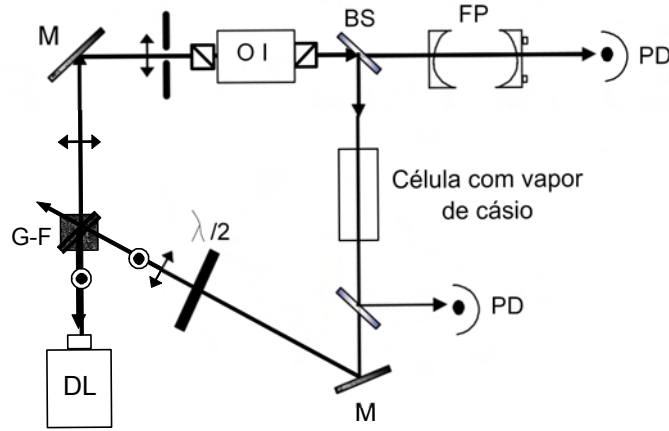


Figura 8.5: Esquema do experimento de realimentação incoerente.

Em seguida, o feixe é injetado no isolador ótico OI, utilizado para não permitir que fração alguma do feixe retorne, e segue para o divisor BS (Beam Splitter) do feixe. Parte do feixe é analisado com o auxílio de um discriminador de frequência, o Fabry-Perot FP. Outra fração do feixe passa pela célula contendo o vapor de césio, que tem o sinal analisado pelo foto-detector PD. Após o espelho M, a polarização é girada pela lâmina de atraso de fase $\lambda/2$. Apenas a componente do feixe que é perpendicular a folha realimenta o diodo laser ortogonalmente. O isolador ótico OI

O resultado é uma estabilização capaz de reduzir a flutuação em frequência de um fator ≈ 3 , conforme figura 8.6. O grau dessa estabilização depende do acoplamento da realimentação, isto é, quanto o laser reinjetado consegue modificar a frequência do laser em relação à frequência do laser livre. Por causa da não extinção da componente paralela pelo polarizador, no máximo de acoplamento, quando o laser está bem alinhado, a pequena fração do feixe polarizado paralelamente, que retorna a cavidade, forma uma mistura de realimentação coerente e incoerente não estável.

CAPÍTULO 8. CONTROLE DE FREQUÊNCIA DO DIODO LASER

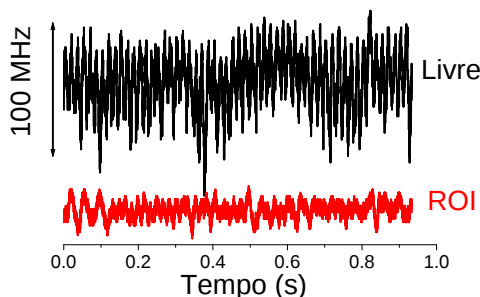


Figura 8.6: *Análise da flutuação em frequência com o Fabry-Perot. a) laser livre. b) laser com realimentação incoerente acoplada à transição atômica.*

8.8 Conclusão

O sistema de realimentação incoerente mostrou-se uma técnica simples capaz de travar o diodo laser próximo a uma transição atômica reduzindo a flutuação da frequência do laser. Trabalhos futuros podem ser relacionados à dependência com o tamanho, que aparentemente o limite seria apenas relacionado ao tempo máximo percorrido pelo feixe para que a realimentação haja como uma correção da possível flutuação. Por outro lado, na miniturização do tamanho do sistema, a limitação é, basicamente, o tamanho do isolador ótico e a obtenção de uma densidade considerável de átomos.

Uma outra possível configuração de realimentação incoerente é a utilização, como o discriminador de frequência, de uma grade de difração de alto poder de resolução. Para obter-se algum resultado, deve-se poder resolver espacialmente alguns MHz com essa grade. Isto é, o tamanho do caminho ótico é importante.

Referências Bibliográficas

- [1] T. Day, E. K. Gustafson e R. L. Byer, *Sub-Hertz relative frequency stabilization of two diode laser pumped Nd:YAG Lasers*, IEEE Journal of quantum electronics, **28**, 1106 (1992).
- [2] A. F. A. da Rocha, P. C. S. Segundo, M. Chevrollier e M. Oriá, *Diode laser coupled to an atomic line by incoherent optical negative feedback*, Appl. Phys. Lett., **84**, 179 (2004).
- [3] TOPTICA Photonics, *Diode Lasers Series DL100*, <http://www.toptica.com/products/itemlayer/32/ProspektDL100Dezember2002-new-address.pdf> (Acessado em 2005).
- [4] M. Yousefi, D. Lenstra, G. Vemuri e A. Fischer, *Global bistability in a semiconductor laser with filtered optical feedback*, IEEE Proc. Optoelectron, **148**, 223 (2001).
- [5] T. Sano, *Antimode dynamics and chaotic itinerancy in the coherence collapse of semiconductor laser with optical feedback*, Phys. Rev. A, **50**, 2719 (1994).
- [6] C. E. Wieman e L. Hollberg, *Using diode lasers for atomic physics*, Rev. Sci. Instrum., **62**, 1 (1991).
- [7] M. de Labachellerie, C. Latrasse, P. Kernssu e P. Cerez, *The frequency control of laser diodes*, J. Phys. III France, **2**, 1557 (1992).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [8] P. A. Ruprecht e J. R. Brandenberger, *Enhancing diode laser tuning with a short external cavity*, Optics Communications, **93** (1992).
- [9] L. Viana, S. S. Vianna, M. Oriá e J. W. R. Tabosa, *Diode Laser mode selection using a long external cavity*, Applied Optics, **35** (1996).
- [10] M. J. ADams, *Physics and applications of optical bistability in semiconductor laser amplifiers*, Solid-State Electronics, **30**, 43 (1987).

Capítulo 9

Bi-estabilidade com Realimentação Ótica Incoerente

Sumário

9.1	Introdução	206
9.2	Realimentando o diodo laser	207
9.3	Equacionando a realimentação ótica incoerente	208
9.3.1	Variação de corrente	211
9.3.2	Variação de potência de realimentação	213
9.4	Simulação algébrica	216
9.5	Resultado experimental	218
9.6	Conclusão	221

9.1 Introdução

Os sistemas de controle podem ser tratados como circuitos abertos ou fechados [1]. A diferença é que nos circuitos fechados há a presença de um sensor e controle ou alguma forma de realimentação.

Sistemas físicos com realimentação têm a dinâmica determinada pela forma em que o sistema é realimentado. A dinâmica desses sistemas é descrita por meio de equações diferenciais ordinárias temporais cuja solução requer o conhecimento dos tempos de resposta de cada componente ou do conjunto de componentes de todo o sistema. Essas dinâmicas são estudadas há muito tempo e freqüentemente são descritas de forma completamente analítica no modelo de oscilador harmônico amortecido. Em sistemas mais simples ocorrem oscilações, relacionadas ao tempo ou fase entre a fonte e a quantidade do sinal de retorno.

Um exemplo de um componente eletrônico muito conhecido e utilizado como base de vários circuitos é o amplificador operacional, que é utilizado na grande maioria dos circuitos eletrônicos por ser facilmente descrito na configuração em que se tem a realimentação negativa¹, garantindo o uso da regra de ouro². Dependendo da configuração dos componentes, a resposta do sistema pode ser desde uma simples amplificação de sinal, filtros e até um oscilador.

Na presença de algum efeito não-linear, o resultado é mais complexo, pois é possível que a forma pelo qual o sistema evoluiu determine o estado final. O efeito de depender da história do sistema é chamado de histerese. Dessa forma, é possível encontrar-se mais de uma solução para as mesmas condições iniciais, isto é, diferentes condições iniciais ou “percursos” podem resultar em diferentes estados.

Neste capítulo, estuda-se o efeito de uma realimentação de um diodo laser

¹Não se descartando os circuitos com realimentação positiva e os mistos.

²A regra de ouro é que não há fluxo de corrente para o operacional e que não há diferença de tensão entre os dois pontos de entrada.

9.2. REALIMENTANDO O DIODO LASER

na configuração de realimentação ótica incoerente acoplada a uma transição atômica. Por causa da não-linearidade em frequência do sinal realimentado (absorção atômica), o resultado é a existência de uma bi-estabilidade em frequência.

A montagem é a mesma descrita no Capítulo 8, mas a diferença é a observação do comportamento do laser no domínio de frequência. Os resultados numéricos e experimentais são mostrados. As primeiras seções tratarão da parte numérica, relacionando os parâmetros às medidas realizadas. A Seção 9.3, descreve a forma e a medida dos parâmetros mais simples do experimento, como acoplamento da realimentação, e utilizados nas simulações. As simulações mais realistas, considerando o sistema em regime estacionário, é mostrado na Seção 9.4. A comparação dos resultados dessas simulações com os resultados experimentais são feitos na Seção 9.5. Baseado nos resultados e na teoria, conclui-se que o sistema forma, em certas circunstâncias, uma região de bi-estabilidade em frequência. Sendo, até onde se conhece, o primeiro sistema bi-estável em frequência.

9.2 Realimentando o diodo laser

Os lasers são formados basicamente de um meio de ganho e uma cavidade, como descrito no Capítulo 8. Dessa forma, a dinâmica do diodo laser livre é determinado por esses componentes. O meio de ganho é responsável pela amplificação da radiação e é formado de portadores ou par elétron-buraco capazes de recombinar. A cavidade é responsável, entre outras coisas, pela realimentação da radiação e tem como um parâmetro o caminho ótico, ligado ao meio com índice de refração n e ao comprimento L .

A introdução de uma realimentação externa modifica a saída do laser em dois aspectos básicos. O primeiro, é a criação de uma cavidade efetiva diferente da cavidade original, modificando os modos possíveis de oscilação da radiação. Nesse

CAPÍTULO 9. BI-ESTABILIDADE

ponto, é importante observar a coerência do feixe realimentado para que permita interferência dentro do laser com a radiação interna ao laser. Para a realimentação coerente, a questão de criar uma cavidade efetiva é bem estudada [2, 3] desde o seu surgimento e permite ou impede certas frequências de operarem no laser. O objetivo principal é o estreitamento da largura de linha com o aumento da qualidade da cavidade e possibilitar maiores varreduras de frequência em um mesmo modo.

O outro aspecto é a modificação do meio de ganho, porque os fótons reinjetados levam à recombinação dos portadores, isto é, com a redução do ganho. Nesse aspecto, é menor a quantidade de estudos. Entre esses estudos há o estudo para controle e estabilização tem-se as referências [4, 5], que são citadas no Capítulo 8 e estudos das dinâmicas com resultado pode ser instabilidades na oscilação laser [6], dinâmicas mais complexas com variações periódicas na frequência. Uma aplicação mais recente é a criptografia [7], neste caso a realimentação é eletrônica, porém com mesmo efeito de uma realimentação incoerente.

Não se pode tratar estes dois aspectos de forma completamente independentes porque a modificação do ganho implica em uma modificação do índice, modificando a cavidade. Entretanto, considera-se normalmente apenas o aspecto da cavidade, porém, neste capítulo, o aspecto da modificação de índice é que será levado em conta. Isto porque a realimentação ortogonal não interfere com a radiação dentro do laser.

9.3 Equacionando a realimentação ótica incoerente

De forma geral, equacionar um sistema físico, que é a idéia básica desta seção, significa conseguir com o menor número de parâmetros extrair toda a informação necessária para simular e melhor analisar os resultados obtidos do experimento.

9.3. EQUACIONANDO A REALIMENTAÇÃO ÓTICA INCOERENTE

Inicialmente, deve-se caracterizar o sistema laser e a realimentação.

- O laser é um diodo laser (AlGaAs) de índice $n \approx 3,5$ e comprimento $l \approx 300 \mu\text{m}$. Na operação livre, tem saída de radiação laser com potência P e na frequência ω , que dependem da corrente j e da temperatura T . A temperatura é considerada constante por causa do sistema de controle de temperatura. A potência de saída do laser deve variar linearmente com a corrente, de fato a potência cresce linearmente com a corrente, acima do limiar de operação j_{th} . Contudo, não foi observada variação significativa devido à variação de corrente, Δj , ser pequena em relação a corrente, j , e mesmo em relação a diferença com o limiar de operação, $j - j_{th}$. Não se observou também mudança na potência por causa da realimentação incoerente. A explicação disso é que a potência reinjetada que é uma fração da potência do laser que sai, que por sua vez é uma pequena fração da potência dentro do laser.
- A realimentação depende do percurso e dos componentes até a realimentação. Na figura 9.1, é mostrado o esquema dos componentes utilizados no

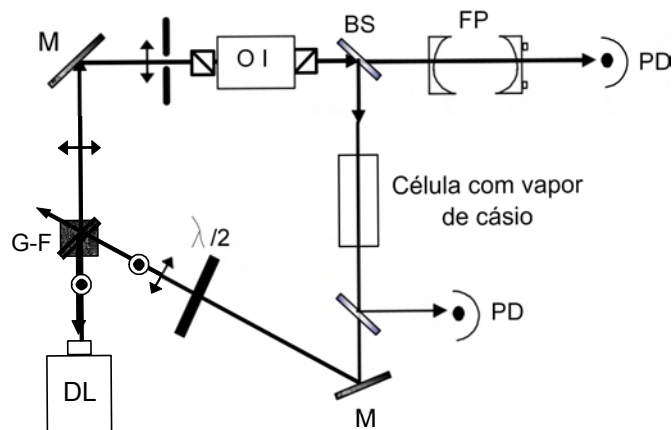


Figura 9.1: *Esquema do experimento de realimentação incoerente.*

CAPÍTULO 9. BI-ESTABILIDADE

experimento. O circuito ótico é o mesmo do Capítulo 8.

A potência reinjetada P_R é uma fração da potência de saída P :

$$P_R = tP, \quad (9.1)$$

onde $0 \leq t \leq 1$ é o fator de realimentação, que é função da perda pelos componentes. Esse fator t pode ser considerado como o produto da “transmissão” dos n componentes:

$$t = \prod_{i=1}^n t_i, \quad (9.2)$$

onde $0 \leq t_i \leq 1$ é o fator de “transmissão” do componente i . Pode-se agrupar os fatores de transmissão dos componentes fixos (lentes, interfaces, divisores, ...) e obter um fator α :

$$\alpha = \prod_{i=1}^{n'} t_i. \quad (9.3)$$

No experimento, $\alpha \leq 0,3$.

Os componentes com transmissão variável são o termo de absorção t_{abs} , ligado ao vapor atômico, e o termo da polarização t_{pol} , ligado ao conjunto de lâmina $\lambda/2$ e Glan-Foucault. Assim, o fator de realimentação é expresso por:

$$t = \alpha t_{\text{abs}} t_{\text{pol}}. \quad (9.4)$$

A transmissão do vapor é sensível à frequência do laser e quando a velocidade térmica u é muito maior que a largura de linha, γ , por número de onda, k , ($ku \gg \gamma$), pode ser descrita como:

$$t_{\text{abs}}(\omega) = 1 - a \exp\left(-\frac{(\omega - \omega_{\text{at}})^2}{(ku)^2}\right), \quad (9.5)$$

onde ω_{at} é a frequência da transição atômica e $0 \leq a \leq 1$ é a absorção.

O termo da polarização, t_{pol} , refere-se a transmissão do feixe da lâmina de atraso de fase até a saída do polarizador Glan-Foucault. Isso pode ser calculado utilizando-se a matriz (de propagação) de Jones e considerando que:

9.3. EQUACIONANDO A REALIMENTAÇÃO ÓTICA INCOERENTE

1. o feixe antes da lâmina esteja na horizontal, ou no mínimo em uma polarização linear;
2. a lâmina possa ter rotacionada o seu eixo ótico;
3. o polarizador só reflita para o diodo a polarização vertical.

A lâmina $\lambda/2$ muda a polarização continuamente de horizontal até vertical dependendo do ângulo do eixo ótico em relação ao horizontal, θ . O resultado é o termo da polarização ser dado por:

$$t_{\text{pol}}(\theta) = |\sin(2 * \theta)|^2. \quad (9.6)$$

O efeito é uma possibilidade de, rotacionando a lâmina, variar o termo entre 0 e 1, ou seja, pode-se variar a potência de realimentação sem modificar a corrente, a potência de saída do laser ou o percurso do feixe.

9.3.1 Variação de corrente

A compreensão desse efeito é diretamente ligado à redução do número de portadores N . Isso reduz o ganho g do meio. Considerando-se o índice composto de duas partes, parte real e imaginária, da forma: $n = n' - in''$, pode-se relacionar a variação de ganho [8] com a variação da parte imaginária do índice de refração:

$$\Delta n'' = -\frac{c}{2\omega} \Delta g. \quad (9.7)$$

Então, a redução do ganho implica em um aumento de n'' .

A parte real, ligada a propagação, e a parte imaginária, ligada ao ganho, do diodo laser estão interligadas e tem uma relação em relação às variações:

$$\alpha = \frac{\Delta n'}{\Delta n''}, \quad (9.8)$$

CAPÍTULO 9. BI-ESTABILIDADE

onde o valor de α obtido para os diodos lasers, baseados em AsGaAl, foi $\alpha \approx 5$ [8]. Assim, uma variação negativa do número de portadores, que aumenta a parte imaginária índice de refração, também aumenta a parte real índice.

Considerando que o diodo laser seja formado por uma cavidade do tipo Fabri-Perot com índice de refração real n' , então as frequências permitidas são inteiros de meio comprimento de onda:

$$\nu_m = m \frac{c}{2n'L}, \quad (9.9)$$

onde $m = 1, 2, 3, \dots$. Reescrevendo essa equação em termo de pequenas variações:

$$\Delta \nu_m = \Delta n' \frac{d\nu_m}{dn'} = -m \frac{c}{2Ln'} \frac{\Delta n'}{n'}. \quad (9.10)$$

Dessa forma, o aumento no índice n' implica em uma redução da frequência ν .

O efeito de um aumento de corrente é descrito no esquema mostrado abaixo, onde as setas para cima (baixo) indicam um aumento (diminuição).

$$\downarrow j \quad \downarrow N \quad \downarrow g \quad \uparrow n'' \quad \uparrow n' \quad \downarrow \nu$$

Observa-se experimentalmente uma linearidade entre a frequência emitida e a corrente, principalmente quando a corrente $j \gg j_{th}$. Pode-se escrever:

$$\Delta \nu = a \Delta j, \quad (9.11)$$

onde $\Delta \nu$ é a variação de frequência devido à variação de corrente Δj e a é o termo de proporção, que se espera positivo. Entretanto, observa-se experimentalmente que há um problema com o sinal de a . Isso é explicado por por Wieman *et al* na referência [3]: a variação da corrente afeta a temperatura de junção por causa do efeito Joule, que muda o tamanho da cavidade e o comprimento de onda. Assim, a curva do comprimento de onda pela corrente seja semelhante à curva com a temperatura. Para essa consideração térmica é necessário que a variação seja lenta ($< 1 \mu s$). Então, a regra para a corrente passa a ser:

$$\downarrow j \quad \downarrow T \quad \uparrow \nu$$

9.3. EQUACIONANDO A REALIMENTAÇÃO ÓTICA INCOERENTE

e a equação 9.11 continua valendo com $a = -3.75 \text{ GHz/mA}$.

O primeiro esquema é útil na condições em que não houver variação de temperatura como por potência de realimentação³ ou alta frequência.

9.3.2 Variação de potência de realimentação

O efeito da introdução de uma potência de radiação incoerente P'_R dentro do laser é a diminuição do número de portadores [5]. Que leva a pensar em um esquema semelhante ao esquema da corrente considerando o número de portadores:

$$\uparrow P'_R \quad \downarrow N \quad \downarrow g \quad \uparrow n'' \quad \uparrow n' \quad \downarrow \nu$$

Ao se considerar alguma forma de energia entrando no diodo laser, deve-se ocorrer um aumento da temperatura. Dessa forma, a potência de realimentação deve aquecer o diodo laser e por conseqüência mudar suas características, entre elas a frequência, conforme mostrado na sub-seção 9.3.1, então:

$$\uparrow P_R \quad \uparrow T \quad \downarrow \nu$$

Diferentemente da corrente, o aumento da potência tem duas contribuições aditivas: a diminuição de portadores e o aumento de temperatura.

Em um sistema com realimentação incoerente pode-se considerar, também, linear a variação da frequência pela variação da intensidade de realimentação:

$$\Delta \nu_I = \beta \Delta P_R, \quad (9.12)$$

onde $\Delta \nu_I$ é a variação de frequência devido a variação da intensidade de realimentação, e β é a constante de proporcionalidade.

Isso é possível se for considerado que o feixe de realimentação é apenas uma perturbação da densidade de portadores. Essa perturbação depende da relação

³Será visto na sub-seção 9.3.2 que pode haver variação de temperatura

CAPÍTULO 9. BI-ESTABILIDADE

entre a potências da radiação envolvidas. A relação da potência de saída P_s e a potência dentro do diodo, P_d , é dada pela relação de índice de refração n do diodo:

$$P_s = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^2 P_d. \quad (9.13)$$

A mesma relação é válida para a potência que entra no diodo, P_e . Considerando-se o pior caso, que é toda a potência sendo reinjetada, tem-se:

$$P_e = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^4 P_d. \quad (9.14)$$

Utilizando o valor $n = 3.5$ para laser do tipo utilizado (arseneto de gálio alumínio), tem-se um fator de $P_e \approx 26\%P_d$. Entretanto, não é trivial realimentar o laser com toda a potência de saída por causa de vários fatores:

1. divergência não simétrica. A saída do laser tem um formato gaussiano elíptico. Um espelho deveria ser curvo ou utilizar componentes óticos cilíndricos para tentar corrigir a saída e entrada.
2. perdas e dispersões. O uso de material sem tratamento específico, como superfície anti-reflexo, causam grande perdas. Por exemplo o material da lente utilizada, causa uma perda estimada em no mínimo 4% por interface, considerando a saída e o retorno do feixe tem-se a perda de mais de 15%, resultando em no máximo $P_e = 20\%P_d$.

Nessa montagem, conseguiu-se que apenas 30% do feixe depois da lente retorna-se à lente. Por isso, não se espera uma perturbação maior que 5%.

A determinação do valor de β é difícil, pois devido ao alinhamento, espalhamento e perdas não foi possível determinar o valor exato de P_R . O máximo que se pode saber é que, para dado alinhamento, uma potência de realimentação medida, P_R , tem uma potência, que é uma fração desse feixe, que realmente modifica o número de portadores. Assim, como resultado final da potência é que β pode ser

9.3. EQUACIONANDO A REALIMENTAÇÃO ÓTICA INCOERENTE

redefinida como a relação entre a potência medida em algum ponto pouco antes de ser reinjetada e o deslocamento em frequência:

$$\Delta\nu = \beta\Delta P_R, \quad (9.15)$$

onde ΔP_R é a variação de potência medida. Essa medida anterior à realimentação pode ser feita, por exemplo, com a ajuda de um divisor de feixes entre o Glan-Foucault e o diodo laser, que separaria uma pequena fração do feixe reinjetado.

Sabendo-se que a potência de realimentação vai de zero até um máximo $P_{\text{máx}}$, então, entre o mínimo e o máximo de potência, tem-se uma variação de frequência máxima:

$$\Delta\nu_{\text{máx}} = \beta(P_{\text{máx}} - P_{\text{min}}) = \beta P_{\text{máx}} = \chi, \quad (9.16)$$

onde χ é o máximo que a frequência do laser pode se deslocar. Para uma potência qualquer há o “fator de acoplamento”, $0 \leq D \leq \chi$. Esse fator D é facilmente mensurável e equivale, em frequência, o quanto o laser se desloca naquela configuração.

Foram feitas medidas do deslocamento de frequência pelos deslocamentos dos picos do Fabry-Perot. No gráfico da Fig. 9.2, mostra-se o resultado experimental do deslocamento da frequência do laser, para um dado alinhamento, com a potência de realimentação medida indiretamente com o auxílio de uma lâmina antes do diodo laser. Observa-se que a dependência do deslocamento é muito próximo da linear.

Com o conhecimento da dependência da frequência de emissão do laser com a corrente e com potência de realimentação, além do comportamento dos componentes do percurso da realimentação, pode-se fazer um sistema algébrico relacionando todos esses dados. Na seção 9.4, realiza-se cálculos numéricos e mostra-se a bi-estabilidade e a histerese.

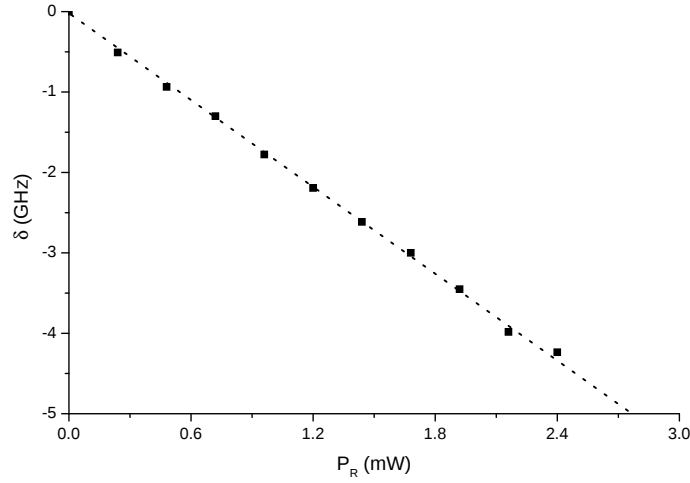


Figura 9.2: Dependência linear do frequência com a potência de realimentação medida. Os pontos são experimentais e a reta tracejada é um ajuste linear.

9.4 Simulação algébrica

O resultado do sistema composto de realimentação, absorção e corrente pode ser descrito pela soma de cada efeito independentemente:

$$\omega - \omega_{th} = a(j - j_{th}) - D_0, \quad (9.17)$$

onde D_0 é o fator de “acoplamento” sem a absorção do vapor.

Para o sistema com o vapor atômico, a potência de realimentação pode ser atenuada pela absorção, assim o fator de “acoplamento” depende da absorção:

$$D_0 = D \left[1 - a \exp \left(-\frac{(\omega - \omega_{at})^2}{(ku)^2} \right) \right]. \quad (9.18)$$

Ou seja, o fator de “acoplamento” depende da frequência e, pela equação 9.17, a frequência depende do fator de “acoplamento”. Esse sistema, que tem a forma recorrente, não é aparentemente trivial. De fato, ω não é função da corrente, isto é, existe mais de uma solução para a mesma corrente.

9.4. SIMULAÇÃO ALGÉBRICA

A solução desse problema é observar qual a corrente j para determinada frequência ω . Vale a pena salientar que o parâmetro controlável é a corrente. O gráfico desse tipo de interação é mostrado na Figura 9.3. Observa-se que fora da

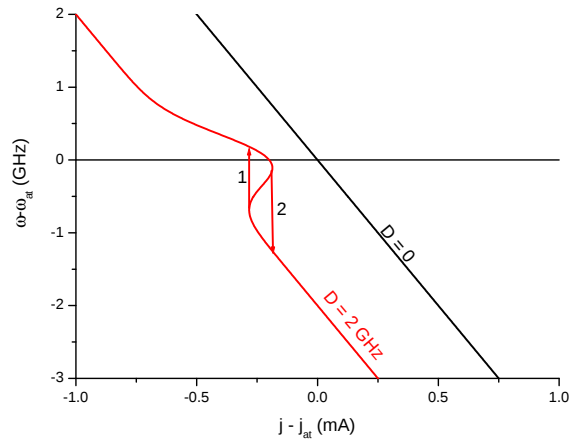


Figura 9.3: Gráfico teórico da frequência realimentação incoerente, para dois níveis de acoplamento $D = 0$ e 2 GHz .

ressonância $\omega \approx \omega_{at}$ a resposta da frequência com a corrente é linear. Por outro lado, na ressonância a dependência é mais complexa. De fato, entre as setas 1 e 2, observa-se que há mais de duas soluções para frequência para a mesma corrente, isto é a bi-estabilidade de frequência.

Outra forma de observar esse tipo de acoplamento é observar a curva de absorção. Essa observação é direta, a partir de parte do feixe após a célula. Na Figura 9.4, há um exemplo de acoplamento para uma absorção de 50% e dois níveis de acoplamento. A largura do espectro de absorção considerado é 500 MHz. Deve-se observar que o caminho que o sistema percorre é o indicado pelas setas 1 e 2. O caminho 1 é quando a corrente diminui e o caminho 2 é quando a corrente aumenta.

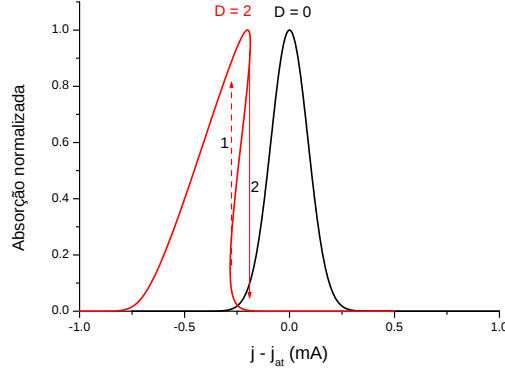


Figura 9.4: Gráfico teórico da absorção em uma realimentação incoerente, para dois níveis de acoplamento $D = 0$ e 2 GHz. O caminho 1 para corrente diminuindo e o caminho 2 para corrente aumentando.

9.5 Resultado experimental

O experimento foi realizado com a varredura na corrente do diodo laser, adicionando-se uma rampa triangular a um nível DC. A corrente variava, assim, entorno da corrente que resultava na frequência da transição atômica ($j \approx j_{at}$). A aquisição dos dados era feito pelo osciloscópio digital, que estava conectado a um computador. Devido a baixa resolução do osciloscópio, apenas parte da rampa era adquirida.

Na Figura 9.5, tem-se os gráficos experimentais em condição semelhante ao teórico da Figura 9.4. Os gráficos (a) e (c) são a referência de frequência dado pela transmissão do Fabry-Perot. A separação dos picos do Fabry-Perot é de $1,5$ GHz. O gráfico (b) é sem realimentação ou uma simples absorção linear. O gráfico (d) é com realimentação ótica incoerente, com um fator aproximado de $D = 2$ GHz.

Observa-se que os picos do Fabry-Perot da curva (c) não são igualmente separados, com na curva (a). Há, inclusive, diferença entre as larguras dos picos do sinal de transmissão do Fabry-Perot. Isso é efeito da não-linearidade da frequên-

9.5. RESULTADO EXPERIMENTAL

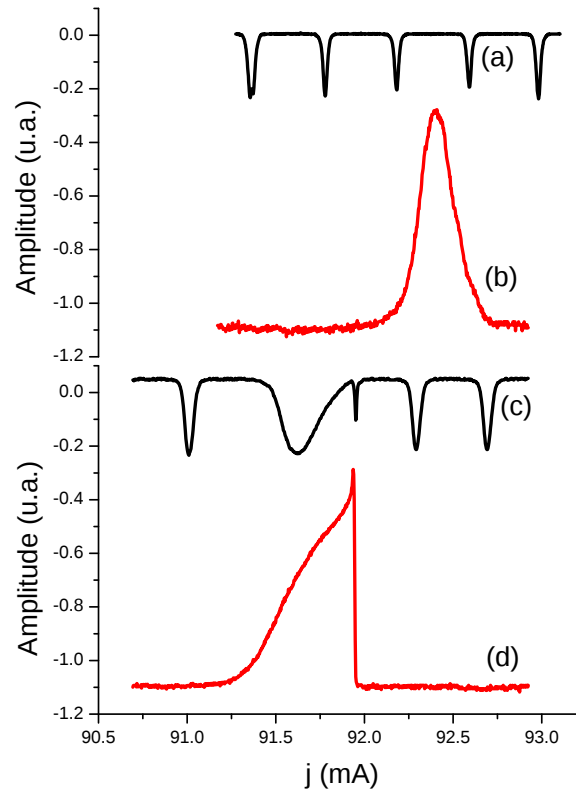


Figura 9.5: Gráfico teórico da absorção em uma realimentação incoerente, para dois níveis de acoplamento $D = 0$ e 2 GHz. (a) e (c) são os picos do Fabry-Perot, e (b) e (d) é a absorção linear. Os dois primeiros são sem realimentação, e os de baixo são com realimentação.

CAPÍTULO 9. BI-ESTABILIDADE

cia com a corrente, conforme mostrado teoricamente na Figura 9.4. Experimentalmente, um gráfico equivalente pode ser obtido. Porém, um gráfico de frequência não é trivial, pois deve contar com uma técnica de mistura de sinais (batimento) ou com discriminador de frequência. O uso simples de um discriminador de frequência não foi possível por causa da grande faixa de frequência ($> 2\text{GHz}$) necessária ao experimento. Mas o discriminador que utilizamos, F-P, tem transmissões periódicas em frequência e, além do mais, permite variação da cavidade com aplicação de tensão no PZT que está na base de um dos espelhos. Dessa forma, é conseguido com a deconvolução da frequência varrendo os picos do Fabry-Perot. Na Figura 9.6, observa-se o sinal de transmissão do Fabry-Perot com diferentes ten-

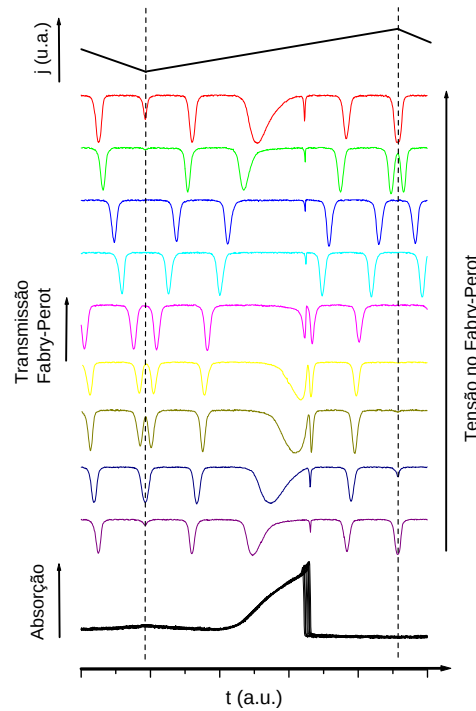


Figura 9.6: Gráfico do sinal de transmissão do Fabry-Perot aplicando diferentes tensões no PZT. Em cima, há a rampa aplicada a corrente do diodo laser, e em baixo a curva de absorção.

9.6. CONCLUSÃO

sões. Utilizando-se uma regra de três simples, é possível obter a frequência de cada ponto da rampa. A curva de absorção está inserida para mostrar que não houve variação significativa das condições experimentais entre as medidas. Na Figura 9.7, é

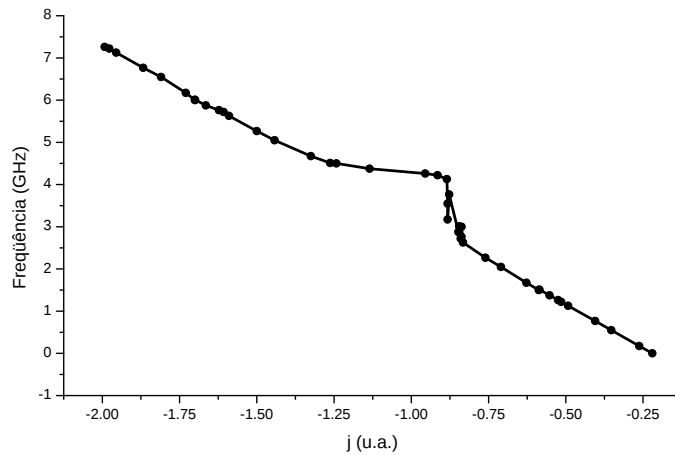


Figura 9.7: Resultado da deconvolução da frequência de emissão do laser pela corrente. Os pontos são experimentais, e a linha apenas conecta os pontos.

mostrado o resultado da deconvolução de frequência. Pode-se notar que a resposta não-linear da frequência pela corrente, conforme o resultado teórico mostrado na Figura 9.4.

Observa-se um pico na curva (d) que há um pequeno pico no ponto de mudança, que pode ser entendido como a passagem da frequência do laser pelo máximo de absorção.

9.6 Conclusão

Neste capítulo, observou-se um sistema bi-estável em frequência teórico e experimental, sendo possível quantificar os efeitos de bi-estabilidade.

Como perspectiva, a observação temporal mais detalhada com mudança

CAPÍTULO 9. BI-ESTABILIDADE

nas equações, que os cálculos iniciais mostram resolver os picos não existentes na teoria de resposta estática.

Referências Bibliográficas

- [1] G. F. Franklin, J. D. Powel e A. Emani-Naeini, *Feedback control of dynamic systems* (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994/1995), 3^a ed.
- [2] M. de Labachellerie, C. Latrasse, P. Kernssu e P. Cerez, *The frequency control of laser diodes*, J. Phys. III France, **2**, 1557 (1992).
- [3] C. E. Wieman e L. Hollberg, *Using diode lasers for atomic physics*, Rev. Sci. Instrum., **62**, 1 (1991).
- [4] A. F. A. da Rocha, P. C. S. Segundo, M. Chevrollier e M. Oriá, *Diode laser coupled to an atomic line by incoherent optical negative feedback*, Appl. Phys. Lett., **84**, 179 (2004).
- [5] H. Yasaka e H. Kawagushi, *Linewidth reduction ad optical frequency stabilization of a distributed feedback laser by incoherent optical negative feedback*, Appl. Phys. Lett., **53**, 1360 (1988), utiliza a realimentação ótica incoerente com a utilização do Fabri-Perot como meio não-linear, para a redução de linha de um diodo laser. Atingindo uma estabilização e redução na linha espectral do laser.
- [6] J. Houlihan, G. Huyet e J. McInerney, *Dynamics of a semiconductor laser with incoherent optical feedback*, Opt. Comm., **199**, 175 (2001), observação da oscilação da amplitude fortemente relacionado ao tempo de atraso da realimentação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [7] J.-P. Goedgebuer, L. Larger e H. Porte, *Optical Cryptosystem Based on Synchronization of Hyperchaos Generated by a Delayed Feedback Tunable Laser Diode*, Phys. Rev. Lett., **80**, 2249 (1998), um exemplo de sistema de criptografia e decriptografia usando diodos lasers. O sistema baseia-se em realimentação eletrônica com a modificação da corrente.
- [8] C. H. Henry, *Theory of Linewidth of Semiconductor Lasers*, IEEE Journal of Quantum Eletron., **QE-18**, 259 (1982), explica a medida da largura de linha e as equações de taxa da intensidade e da fase para o laser livre.

Parte III

Apêndices

Apêndice A

Modulação FM

Considera-se que na modulação FM a frequência é modulada de forma senoidal:

$$\omega(t) = \omega_c + M \cos(\omega_m t), \quad (\text{A.1})$$

onde M é a amplitude de modulação, ω_m é a frequência de modulação e ω_c é a frequência em torno da qual se modula.

O sinal $S(\omega)$ é modulado e em aproximação de primeira ordem, o sinal fica:

$$S(\omega(t)) = S(\omega_c) + M \cos(\omega_m t) \left. \frac{\partial}{\partial \omega} S(\omega) \right|_{\omega=\omega_c}. \quad (\text{A.2})$$

Com a detecção síncrona na frequência de modulação ω_m e fase ϕ , o sinal detectado é a média sobre um período de tempo T do produto do sinal S e uma modulação $\cos(\omega_m t + \phi)$:

$$S_{FM} = \frac{1}{T} \int_T S(t) \cos(\omega_m t + \phi) dt. \quad (\text{A.3})$$

Considerando a observação é realizada sobre tempos $T \gg 2\pi/\omega_m$, isto significa observar apenas o termo em $\cos(\omega_m t)$, resultando em

$$S_{RSFM} = \frac{M}{2} \left. \frac{\partial}{\partial \omega} S_{RS} \right|_{\omega_c} \cos(\phi). \quad (\text{A.4})$$

APÊNDICE A. MODULAÇÃO FM

Apêndice B

Estimativa teórica de C_3

Neste apêndice, calcula-se o coeficiente de van der Waals baseado em dados espectroscópicos sobre as transições atômicas do césio. É calculado, também, o coeficiente considerando-se a interação com algumas superfícies dielétricas dispersivas.

Para temperatura nula, o deslocamento do nível a é dado pela equação 2.32, que utilizando-se da simetria esférica ($D_z^2 = D_x^2 = D_y^2 = D^2/3$) escreve-se:

$$\delta\omega_a = \frac{-1}{(2\pi\hbar)12z^3} \sum_b |\langle a|D|b\rangle|^2 r(\omega_{ab}). \quad (\text{B.1})$$

Utilizando-se dos números quânticos n, J e m dos estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$, tem-se:

$$|\langle a|D|b\rangle| = |\langle n_a, J_a, m_a|D|n_b, J_b, m_b\rangle|. \quad (\text{B.2})$$

É demonstrado (a partir do teorema de Wigner-Eckart e das propriedades dos coeficientes de Clebsch-Gordan) que o deslocamento médio sobre todos os sub-níveis m do nível $|a\rangle$ é:

$$\langle\delta\omega_{n_a, J_a}\rangle(z) = \frac{-1}{(2\pi\hbar)12z^3} \frac{1}{2J_a + 1} \sum_{n_b, J_b} |\langle n_a, J_a|D|n_b, J_b\rangle|^2 r(\omega_{n_a J_a, n_b J_b}), \quad (\text{B.3})$$

onde $|\langle n_a, J_a|D|n_b, J_b\rangle|$ é um elemento de matriz reduzida que pode ser dado pela

APÊNDICE B. ESTIMATIVA TEÓRICA DE C_3

probabilidade total de emissão espontânea entre os níveis $|a\rangle$ e $|b\rangle$ [1]:

$$A_{a \rightarrow b} = \frac{4}{3\pi} \frac{k_{ab}^3}{2J_a + 1} \sum |\langle n_a, J_a | D | n_b, J_b \rangle|^2 \quad (\text{B.4})$$

para $E_a > E_b$, onde $k_{ab} = 2\pi/\lambda_{ab}$ e λ_{ab} é o comprimento de onda da transição $a \rightarrow b$.

Assim, tem-se $|\langle n_a, J_a | D | n_b, J_b \rangle|^2 = \frac{3\hbar}{4} \frac{2J_> + 1}{k_{ab}^3} A_{a \rightarrow b}$, onde $J_>$ corresponde ao valor de J para o nível de maior energia $|a\rangle$ ou $|b\rangle$. Desta forma, pode-se escrever o deslocamento como:

$$\Delta\omega_a(z) = -\frac{C_3}{z^3}, \quad (\text{B.5})$$

onde a constante C_3 para o nível $|a\rangle$ vale:

$$C_3 = \sum_b \left(\frac{2J_> + 1}{2J_a + 1} \right) \frac{A_{a \rightarrow b} \lambda_{ab}^3}{256\pi^4} r(\omega_{ab}). \quad (\text{B.6})$$

Deve-se conhecer todos os comprimentos de onda e as probabilidades de todas as transições dipolares, além da resposta da superfície $r(\omega)$. Para os comprimentos de onda λ_{ab} e as taxas de transição A_{ab} , utilizou-se da tabela do artigo de Weber e Sansonetti [2]. Esses valores divergem um pouco de outros artigos como [3], porém, espera-se que seja suficiente para uma boa estimativa teórica. Na seção B.1, será mostrado a contribuição de cada nível.

Para os valores de $r(\omega)$, foram utilizados os valores de ϵ da safira descritos em por Barker em [4] e o cálculo de $r(\omega)$ por Fichet et al. [5]. Na seção B.2, será mostrado os gráficos de $r(\omega)$, explicita-se também a contribuição de cada transição $a \rightarrow b$.

B.1. C_3 PARA O NÍVEL $8P_{3/2}$ DO CÉSIO

B.1 C_3 para o nível $8P_{3/2}$ do césio

Algumas das transições dipolares do nível $8P_{3/2}$ são mostradas na Figura B.1. Deve-se fazer a soma sobre as contribuições de todos os níveis. Essas

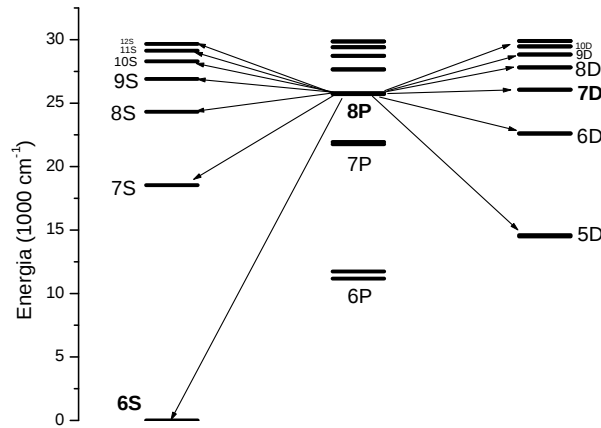


Figura B.1: Níveis atômicos do césio. As setas representam as transições dipolares a partir do nível $8P_{3/2}$.

contribuições são mostradas na tabela B.1. Onde cada nível tem um comprimento de onda λ associado a diferença de energia para o nível $8P_{3/2}$. O sinal de λ representa o tipo de transição a qual está associado, absorção ou emissão, que é importante para o cálculo do coeficiente dielétrico r .

A fração $\frac{2J_{>}+1}{2J_0+1}$ que entra no cálculo como um fator de ponderação, também é mostrada. O resultado da contribuição de cada transição está na coluna C_3^M , que é para o caso metálico.

O valor do coeficiente dielétrico r da safira é calculado na seção B.2 e tem seu valor para cada transição incluído na tabela. Por fim, a contribuição para o coeficiente C_3^S de van der Waals para a superfície de safira está indicada na última

APÊNDICE B. ESTIMATIVA TEÓRICA DE C_3

coluna.

Tabela B.1: Contribuição de cada nível para o valor de C_3 . Em negrito, estão as principais contribuições. O sinal na coluna λ informa o tipo de transição a qual está relacionada.

Nível	λ (μm)	$A(10^4 \text{ s}^{-1})$	$\frac{2J_{>+1}}{2J_0+1}$	$C_3^M(\text{kHz } \mu\text{m}^3)$	r_S	$C_3^S(\text{kHz } \mu\text{m}^3)$
5D _{3/2}	-0,89	37,9	1	<0,01	0,506	<0,001
5D _{5/2}	-0,89	37,9	1	0,01	0,506	0,005
6D _{3/2}	-3,12	61,8	1	0,08	0,421	0,032
6D _{5/2}	-3,16	61,8	1	0,71	0,419	0,296
7D_{3/2}	39,05	1,34	1	5,32	0,749	3,980
7D_{5/2}	36,09	1,34	3/2	37,78	0,744	28,111
8D _{3/2}	4,95	51,6	1	0,42	0,602	0,252
8D_{5/2}	4,92	51,6	3/2	3,70	0,602	2,226
9D _{3/2}	3,29	37,4	1	0,09	0,578	0,051
9D _{5/2}	3,28	37,4	3/2	0,80	0,578	0,460
10D _{3/2}	2,72	25,9	1	0,03	0,568	0,020
10D _{5/2}	2,72	25,9	3/2	0,31	0,568	0,117
11D _{3/2}	2,44	18,2	1	0,02	0,53	0,010
11D _{5/2}	2,43	18,2	3/2	0,16	0,553	0,089
12D _{3/2}	2,27	13,3	1	0,01	0,560	0,006
12D _{5/2}	2,27	13,3	3/2	0,09	0,560	0,052
6S _{1/2}	-0,39	125	1	<0,01	0,534	0,002
7S _{1/2}	-1,38	56,6	1	0,06	0,488	0,029
8S_{1/2}	-6,78	96,5	1	12,07	0,158	1,906
9S_{1/2}	8,94	122	1/2	11,63	0,643	7,477

B.2. COEFICIENTE DE REFLEXÃO DIELÉTRICO

Nível	λ (μm)	$A(10^4 \text{ s}^{-1})$	$\frac{2J_{>}+1}{2J_0+1}$	$C_3^M(\text{kHz } \mu\text{m}^3)$	r_S	$C_3^S(\text{kHz } \mu\text{m}^3)$
10S _{1/2}	3,99	45,1	1/2	0,38	0,588	0,225
11S _{1/2}	3,00	25,3	1/2	0,09	0,573	0,052
12S _{1/2}	2,58	15,4	1/2	0,04	0,566	0,020
Total				73,79		45,47

O resultado é que os coeficientes de van der Waals C_3^M e C_3^S , respectivamente do metal e da safira, são próximos e diferem apenas por um fator 1.6. Isto é devido as transições a partir do nível 8P estarem longe das ressonâncias da superfície de safira, conforme é mostrado na seção B.2.

Na tabela B.1, observa-se que os níveis mais próximos em energia, em negrito, isto é, grandes comprimentos de onda λ , são mais importantes que os demais níveis. Isto é explicado pela dependência com λ^3 de cada contribuição, ver equação B.6.

Na figura B.2, os principais níveis são mostrados com a largura das setas sendo aproximadamente a contribuição da transição. A escala em energia é em relação ao nível 8P_{3/2}. Note-se que a diferença de energia entre o 8P_{3/2} e o 7D_{1/2} ou 7D_{3/2} é da ordem de 400 K.

B.2 Coeficiente de reflexão dielétrico

O cálculo para o coeficiente de reflexão dielétrico r , deve levar em conta o tipo de transição associado, absorção ou emissão. É considerado apenas o caso de temperatura nula, que será justificado ao final desta seção. Na Figura B.3, considera-se o caso da absorção. Observa-se a forma monótona decrescente, e com valor entre 0.85 e 0.5 para essa faixa de frequência. Então, todas as contribuições das transições do tipo absorção serão reduzidas.

Na Figura B.4, considera-se o caso de emissão. Observa-se que pode haver

APÊNDICE B. ESTIMATIVA TEÓRICA DE C_3

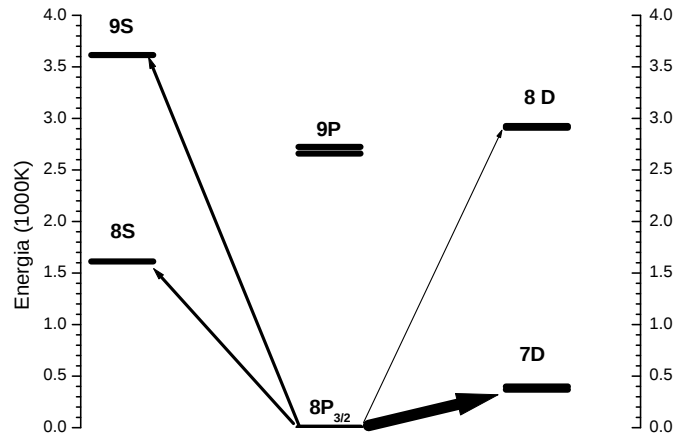


Figura B.2: Níveis atômicos do césio mais próximos ao nível $8P_{3/2}$.

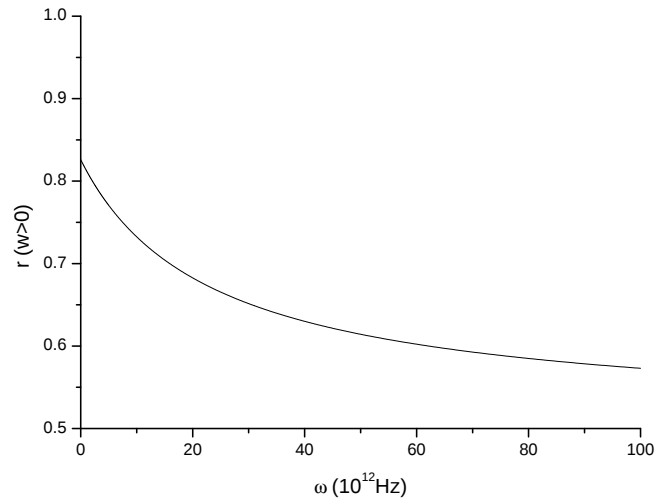


Figura B.3: Coeficiente de reflexão dielétrico $r(\omega > 0)$

B.2. COEFICIENTE DE REFLEXÃO DIELÉTRICO

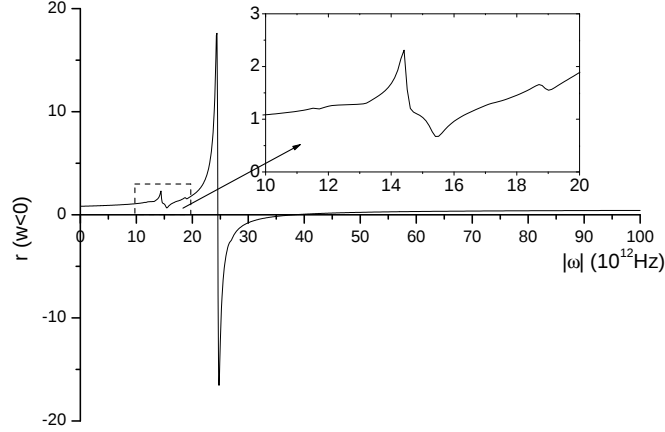


Figura B.4: Coeficiente de reflexão dielétrico $r(\omega < 0)$

uma amplificação da contribuição, e até mesmo uma modificação do sinal, caso que já foi verificado experimentalmente por Failache et al. [6].

É importante observar que não é todo o espectro do coeficiente r que participa no coeficiente C_3 , mas apenas as frequências correspondentes as transições dipolares. Desta forma e utilizando-se dos valores da tabela B.1, foi feito um gráfico (Figura B.5) para indicar cada transição e o seu peso (dado pela contribuição em C_3). Observa-se que não há fortes modificações no coeficiente porque todos os níveis estão fora das zonas de forte ressonâncias.

Conforme visto no Capítulo 6, o dielétrico pode interferir no tempo de vida. A modificação ocorre em termos da parte imaginária de $\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}$, mostrada na Figura B.6. Observa-se que todas as transições, principalmente as mais fortes, mesmo as associadas à absorção, estão longe da ressonância. Isto resulta em nenhuma modificação pela parte dispersiva do dielétrico.

Por causa da grande distância das transições dipolares a partir do $8P_{3/2}$ das

APÊNDICE B. ESTIMATIVA TEÓRICA DE C_3

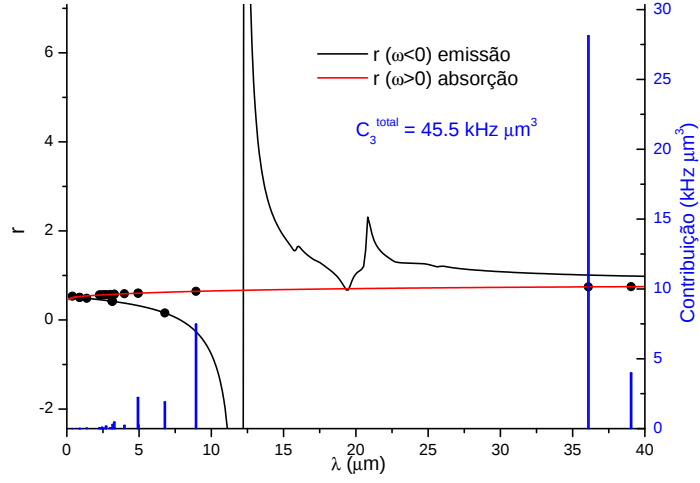


Figura B.5: Coeficiente de reflexão dielétrico marcado os pontos. As linhas verticais são as transições dipolares e a altura representa a contribuição para C_3

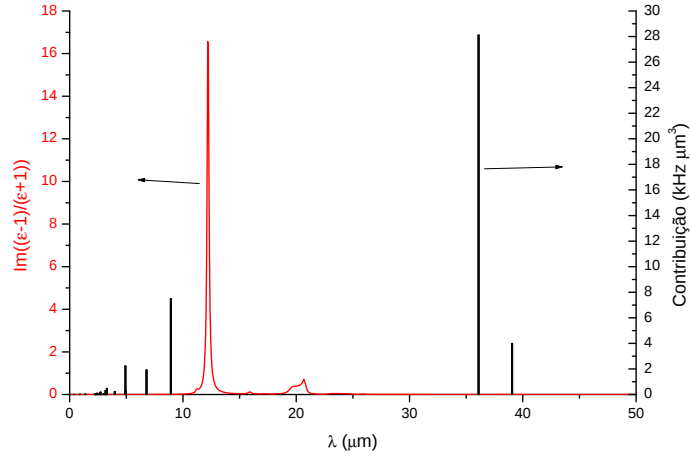


Figura B.6: Parte imaginária de $\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}$, ligado à modificação do tempo de vida. As linhas verticais são as transições dipolares e a altura representa a contribuição para C_3

B.2. COEFICIENTE DE REFLEXÃO DIELÉTRICO

ressonâncias da safira, não houve grande impacto na interação de van der Waals, dado pelas partes real e imaginária de $\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}$. Isso também influencia na dependência com a temperatura, porque o maior termo ligado ao nível $7P_{3/2}$, que contribui com quase 50% e tem uma diferença de energia de 400 K, está muito longe das ressonâncias da superfície.

APÊNDICE B. ESTIMATIVA TEÓRICA DE C_3

Referências Bibliográficas

- [1] A. Messiah, *Mécanique Quantique*, volume 2 (Ed. Dunod, 1995).
- [2] K.-H. Weber e C. J. Sansonetti, *Accurate energies of nS , nP , nD , nF and nG levels of neutral cesium*, Phys. Rev. A, **35**, 4650 (1987), contam os níveis de energia para muitos níveis do césio, n até 26.
- [3] B. Warner, *Atomic oscillator strengths - III. Alkali-like spectra*, Mon. Not. R. Astron. Soc., **139**, 115 (1968).
- [4] A. S. Barker, *Infrared lattice vibrations and dielectric dispersion in corundum*, Phys. Rev., **132**, 1474 (1963).
- [5] M. Fichet, F. Schuller, D. Bloch e M. Ducloy, *van der Waals interactions between excited-state atoms and dispersive dielectric surfaces*, Phys. Rev. A, **51**, 1553 (1995).
- [6] H. Failache, S. Saltiel, M. Fichet, D. Bloch e M. Ducloy, *Resonant van der Waals Repulsion between Excited Cs Atoms and Sapphire Surface*, Phys. Rev. Lett., **83**, 5467 (1999).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Apêndice C

χ^2 para o ajuste de curvas

Para os ajustes de curvas, foi utilizado o método usual de minimização de erro χ^2 . Neste apêndice, detalha-se esse método aplicado ao ajuste de 3 dos parâmetros para os espectros de reflexão seletiva. É verificada, também, a convergência do resultado para o ponto de erro mínimo.

C.1 Ajuste de 3 parâmetros

Tem-se o objetivo de minimizar o erro para os 3 parâmetros, isto é, encontrar o mínimo da função χ , já que essa função não possui um limite superior ou máximo. Se a curva χ for bem comportada, espera-se que o ponto que satisfaça a equação:

$$\nabla\chi = 0, \quad (\text{C.1})$$

seja um mínimo. Encontrar o mínimo da função significa obter então o ponto que satisfaça a equação C.1. Utiliza-se a aproximação de primeira ordem para a função derivada em cada componente que é dada por [1]:

$$\nabla\chi(\vec{r}_0) = \nabla\chi(\vec{r}) + (\Delta\vec{r} \cdot \nabla) \nabla\chi(\vec{r}), \quad (\text{C.2})$$

APÊNDICE C. χ^2 PARA O AJUSTE DE CURVAS

onde $\vec{r} = (C_{1S}, C_2, C_4)$ e $\vec{r}_0$ é o ponto que minimiza a função χ . Então, pode-se montar o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} 0 = \frac{\partial}{\partial C_2}\chi + \delta C_2 \frac{\partial^2}{\partial C_2^2}\chi + \delta C_{1S} \frac{\partial^2}{\partial C_2 \partial C_{1S}}\chi + \delta C_4 \frac{\partial^2}{\partial C_2 \partial C_4}\chi \\ 0 = \frac{\partial}{\partial C_{1S}}\chi + \delta C_2 \frac{\partial^2}{\partial C_2 \partial C_{1S}}\chi + \delta C_{1S} \frac{\partial^2}{\partial C_{1S}^2}\chi + \delta C_4 \frac{\partial^2}{\partial C_4 \partial C_{1S}}\chi \\ 0 = \frac{\partial}{\partial C_4}\chi + \delta C_2 \frac{\partial^2}{\partial C_2 \partial C_4}\chi + \delta C_{1S} \frac{\partial^2}{\partial C_{1S} \partial C_4}\chi + \delta C_4 \frac{\partial^2}{\partial C_4^2}\chi \end{cases} \quad (C.3)$$

em que δC_{1S} , δC_2 , δC_4 são as correções para C_{1S} , C_2 e C_4 , respectivamente, que conduziriam a partir de uma dada condição inicial (C_{1S}^j, C_2^j, C_4^j) para o ponto $(C_{1S}^{j+1}, C_2^{j+1}, C_4^{j+1}) = (C_{1S}^j + \delta C_{1S}, C_2^j + \delta C_2, C_4^j + \delta C_4)$, em que, pela aproximação de primeira, a derivada seria nula.

Primeiramente, serão explicitados os cálculos das derivadas parciais de χ que serão utilizados no programa:

$$\frac{\partial}{\partial C_2}\chi = -2C_{1S} \sum_I \{AA * BB\} \quad (C.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial C_{1S}}\chi = -2 \sum_I \{AA * CC\} \quad (C.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial C_4}\chi = -2 \sum_I \{AA\} \quad (C.6)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial C_2 \partial C_{1S}}\chi = \sum_I \{-2AA * BB + 2C_{1S}CC * BB\} \quad (C.7)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial C_2 \partial C_4}\chi = 2C_{1S} \sum_I \{BB\} \quad (C.8)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial C_{1S} \partial C_4}\chi = 2 \sum_I \{CC\} \quad (C.9)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial C_2^2}\chi = -2C_{1S} \sum_I \left\{ -C_{1S}(BB)^2 + (AA * DD) \right\} \quad (C.10)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial C_{1S}^2}\chi = 2 \sum_I \{CC^2\} \quad (C.11)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial C_4^2}\chi = 2 \sum_I \{1\} \quad (C.12)$$

onde definiram-se as novas variáveis AA , BB , CC e DD para simplificar as equações

C.2. VERIFICANDO O AJUSTE

e essas mesmas variáveis são usadas dentro do programa. Elas são dadas por:

$$AA = Y_e(I) - C_{1S}CC - C_4 \quad (C.13)$$

$$CC = t_a Y_1(II_1(I)) + t_b Y_2(II_2(I)) + Y_3(II_3(I)) \quad (C.14)$$

$$BB = t_a PF_1(II_1(I)) + t_b PF_2(II_2(I)) + PF_3(II_3(I)) \quad (C.15)$$

$$DD = t_a SF_1(II_1(I)) + t_b SF_2(II_2(I)) + SF_3(II_3(I)). \quad (C.16)$$

Aqui definem-se outras variáveis para as derivadas com respeito a C_2 . Para a derivada primeira, temos:

$$\begin{aligned} PF_j(II_j(I)) &= \frac{\partial}{\partial C_2} Y_j(II_j(I)) = \frac{\partial II_j(I)}{\partial C_2} \frac{dY_j(II_j(I))}{dII_j(I)} \\ &= -\frac{I-x_{0j}}{C_2^2} \frac{dY_j(II_j(I))}{dII_j(I)}, \end{aligned} \quad (C.17)$$

em que usou-se a regra da cadeia na equação C.17. Da mesma forma, obtem-se para a derivada segunda:

$$\begin{aligned} SF_j(II_j(I)) &= \frac{\partial^2}{\partial C_2^2} Y_j(II_j(I)) \\ &= \frac{\partial}{\partial C_2} \left(-\frac{I-x_{0j}}{C_2^2} \frac{dY_j(II_j(I))}{dII_j(I)} \right) \\ &= -\frac{2}{C_2^3} PF_j(II_j(I)) + \left(\frac{I-x_{0j}}{C_2^2} \right)^2 \frac{d^2 Y_j(II_j(I))}{dII_j^2(I)}. \end{aligned} \quad (C.18)$$

Na próxima seção verifica-se a validade desta técnica, comparando-a com uma técnica “exata” do mínimo quadrado que é possível com a retirada do ajuste em γ .

C.2 Verificando o ajuste

Nesta seção, compara-se o resultado da técnica de ajuste utilizada com o ajuste “exato”, que não depende de aproximação.

Para a obtenção de um valor “exato”, extrai-se o parâmetro γ como parâmetro de ajuste. Deixa-se χ como função explícita da amplitude C_{1S} e do off-set C_4 .

APÊNDICE C. χ^2 PARA O AJUSTE DE CURVAS

Dessa forma, o sistema tem o resultado único e direto dado por:

$$\chi = \sum_I (Y_{exp}(I) - C_{1S}Y_{teo}(I) - C_4)^2, \quad (C.19)$$

por isso foi chamado aqui de “exato”.

Minimizar χ resulta em encontrar os valores de C_{1S} e C_4 em que $\nabla\chi = 0$.

Tem-se que os valores para C_{1S} e C_4 são bem determinados e dados por:

$$\begin{aligned} C_{1S} &= \frac{(\sum Y_{exp}Y_{teo})\sum 1 - (\sum Y_{teo})(\sum Y_{exp})}{(\sum Y_{teo}^2)\sum 1 - (\sum Y_{teo})^2} \\ C_4 &= \frac{(\sum Y_{teo}^2)(\sum Y_{exp}) - (\sum Y_{teo}Y_{exp})\sum Y_{teo}}{(\sum Y_{teo}^2)\sum 1 - (\sum Y_{teo})^2}, \end{aligned} \quad (C.20)$$

onde as somas são feitas sobre todos os pontos experimentais I .

Constrói-se um gráfico do erro como uma função de γ , conforme a figura C.1. Percebe-se, nesse caso, que essa função tem um mínimo em torno de $\gamma =$

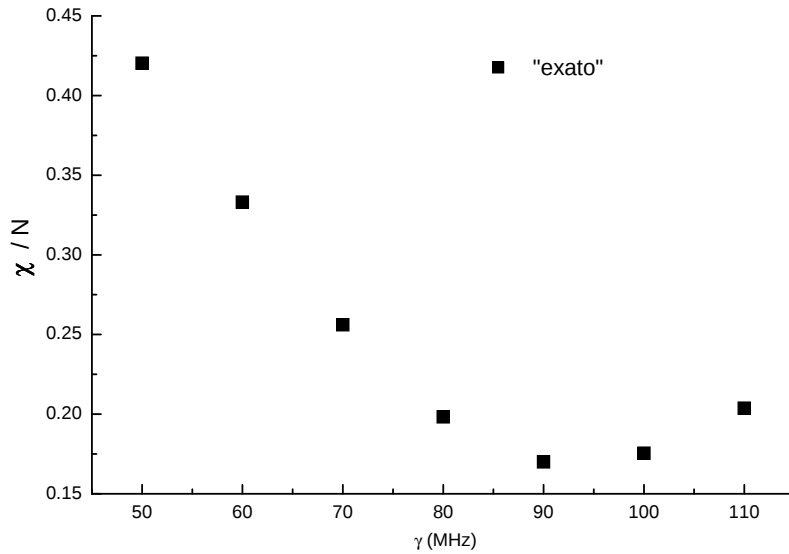


Figura C.1: Gráfico da função erro em função de γ .

90MHz. Para aumentar a precisão do valor encontrado é necessário fazer mais pontos, o que demanda maior tempo de processamento.

C.2. VERIFICANDO O AJUSTE

Comparar as duas técnicas, a rápida com a “exata”, significa saber se elas resultam no mesmo valor mínimo. Observa-se, na figura C.2, que, com poucas iterações a técnica rápida converge para o mínimo do erro “exato” com muitos pontos. Considerar-se-á, apenas, a técnica rápida em todo o Capítulo 5. Este pequeno

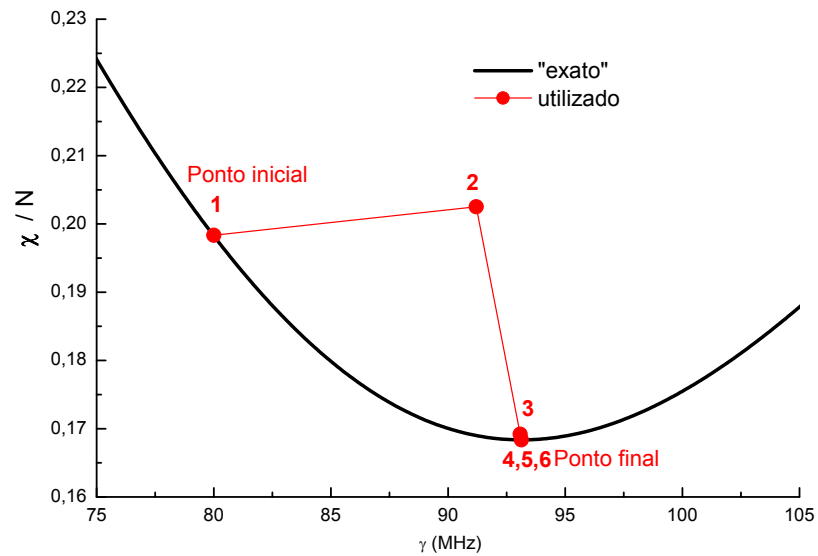


Figura C.2: Gráfico de comparação das técnicas rápida com “exata”.

número de iterações permite aumentar o número de pontos em outros parâmetros como A e δ .

Desta forma, mostrou-se que a técnica converge para o mínimo de χ^2 e utiliza poucas iterações.

APÊNDICE C. χ^2 PARA O AJUSTE DE CURVAS

Referências Bibliográficas

- [1] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1987), nesse livro podemos encontrar mais alguns métodos numéricos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Apêndice D

Lista de Símbolos

Símbolo	tipo	significado	capítulos
A	$\left(= \frac{C_3 k^3}{\gamma/2}\right)$ real	“acoplamento” átomo-superfície	2 a 5
a	$0 \leq a \leq 1$	absorção	9
D	real positivo	deslocamento em frequência (ROI)	9
C_3	real	coeficiente de van der Waals	1 a 6
ε	complexo	coeficiente dielétrico	1 a 4
ξ_k	$\left(= \frac{2k\pi k_B T}{\hbar}\right)$ real	frequências de Matsubara	2
k_B	$(=1,380650 \times 10^{-23} \text{ J/K})$	constante de Boltzmann	2, 3
T	real positivo	temperatura	1 a 5
V	real positivo	volume	1 e 3
P	real positivo	pressão	1 a 5
P	real positivo	polarização	3 e 6
$P[\frac{1}{x}]$	$\left(= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x+i\eta} + i\pi\delta(x)\right)$ operador	parte principal	2
R	$(= 8,317 \text{ J/mol} \cdot \text{K})$	constante dos gases perfeitos	1 e 3
n	inteiro	número de moles	1 e 3

Símbolo	tipo	significado	capítulos
a e b	constantes, reais positivos	fator de correção da equação de estado	1 e 3
$\hbar$	$(= 1,0545716 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})$	constante de Planck	2 a 7
$ \psi\rangle$	vetor	função de onda atômico	2 a 5
$ \alpha\rangle$	vetor	função de onda do centro de massa	5
$ a\rangle$	vetor	função de onda eletrônico	2 a 5
ω	real	frequência	2 a 8
ω_{ab}	$\left(= \frac{E_b - E_a}{\hbar}\right)$ real	frequência da transição $a \rightarrow b$	2 a 5
δ_{vdW}	real	deslocamento por van der Waals	2
δ_a	real	deslocamento do nível $ a\rangle$	2 a 7
Γ	real positivo	taxa de emissão espontânea	2 a 7
$\Gamma_{a \rightarrow b}$	real positivo	taxa de emissão espontânea de $ a\rangle$ para $ b\rangle$	2 a 7
λ	$\left(= \frac{2\pi c}{\omega}\right)$ real	comprimento de onda	2 a 7
k	$\left(= \frac{2\pi}{\lambda}\right)$ real	número de onda	2 a 7
z	real	distância à superfície	2 a 7
$\mathbf{d}$	vetor real	dipolo elétrico	2
$\mathbf{e}_z$	vetor unitário	vetor normal à superfície	2
$\hat{r}$	vetor unitário	vetor paralelo à superfície	2
$\mathbf{D}$	operador vetorial	momento dipolar elétrico do átomo	2
μ^{an}	complexo	dipolo elétrico da transição $ a\rangle \rightarrow n\rangle$	2
H_{vdW}	operador	hamiltoniano de van der Waals	2
H_{at}	operador	hamiltoniano do átomo livre	7
$ F, M_F\rangle$	vetor	estado eletrônico do átomo	2
F	inteiro positivo	número quântico	2
M_F	inteiro positivo	número quântico	2

APÊNDICE D. LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	tipo	significado	capítulos
$\overset{\leftrightarrow}{G}$	tensor complexo	ligado à polarizabilidade da superfície	2
α	tensor complexo	polarizabilidade atômica	2
$r(\omega)$	real	coeficiente de “reflexão dielétrica”	2
γ_n, ω_n e f_n	constantes reais	descrição do dielétrico	2
Im	real	parte imaginária	2
Re	real	parte real	2
v	real	velocidade	3 e 6
$R(\omega)$	real positivo	coeficiente de reflexão	3
n	complexo	índice de refração do dielétrico	3
n_v	complexo	índice de refração do vapor	3
$\vec{E}$	vetor complexo	campo elétrico	3
$W(v_z)$	real	distribuição de velocidade	3
ρ	($= \psi\rangle\langle\psi $) matriz complexa	matriz densidade	3
S_{RSFM}	real	sinal da reflexão seletiva FM	3
N_x	real positivo	densidade de átomos no nível x	6
Ω	($= \frac{2\mu E_L}{\hbar}$) real positivo	frequência de Rabi	3 e 6
B	real positivo	fator de transferência Förster	6
P_R	real positivo	potência de realimentação	8
N	real positivo	número de portadores	8
g	real	ganho	8
n'	real	parte real do índice de refração	8
n''	real	parte imaginária do índice de refração	8
ν	real	frequência de emissão do diodo	8
θ_{inc}	real	ângulo de incidência do feixe	3

Símbolo	tipo	significado	capítulos
ϕ	real	ângulo da polarização do feixe	8
θ	real	ângulo do polarizador com a normal	8
δ	real	dessintonia entre átomo e laser	3 a 9
Δ	real	dessintonia entre átomo livre e vapor atômico	3 a 9

APÊNDICE D. LISTA DE SÍMBOLOS

Ata da Sessão Pública de Defesa Tese de
Doutorado do Aluno Pedro Chaves de Souza
Segundo, candidato ao Título de Doutor em Física
na Área de Concentração "Física Atômica e
Molecular", realizada em 24 de novembro de 2005.

1
2 Aos vinte e quatro dias do mês de novembro do ano dois mil e cinco, às dez horas, na sala
3 de Reuniões do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da
4 Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para examinar o
5 candidato ao grau de Doutor em Física, na área de
6 "Física Atômica e Molecular", o Sr. Pedro Chaves de Souza Segundo. A comissão
7 examinadora composta pelos professores doutores: Martine Chevrollier (DF-UFPB),
8 Orientadora e Presidente da Banca Examinadora, Orlando Di Lorenzo Filho (DF - UFPB),
9 Daniel Bloch (Université de Paris) participando através de vídeo-conferência, José Roberto
10 Rios Leite (DF/UFPE) e Lúcio Hora Acioli (DF/UFPE). Dando início aos trabalhos, a Profª
11 Martine Chevrollier (Presidente da Banca) cumprimentou os presentes, comunicou aos
12 mesmos a finalidade da reunião e passou a palavra ao candidato para que o mesmo fizesse,
13 oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado "átomos próximos à
14 superfície: Interação de Van der Waals e diodo laser acoplado à transição atômica,
15 realimentação incoerente". Concluída a exposição, o candidato foi argüido pela Banca
16 Examinadora, que emitiu o seguinte parecer: "aprovado". Assim sendo, deve a
17 Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na
18 forma da lei e, para constar, eu, Ana Virginia Chaves de Melo, servindo de secretária,
19 lavrei a presente ata que vai assinada por mim mesmo e pelos membros da Banca
20 Examinadora. João Pessoa, 24 de novembro de 2005.

21
22 Ana Virginia Chaves de Melo

23 Prof. Dr.ª Martine Chevrollier
Orientadora

Prof. Dr. Diógenes Reyes Ardilla
Titular (DF-UFPB)

Prof. Dr. Orlando Di Lorenzo Filho
Titular (DF-UFPB)

Prof. Dr. José Roberto Rios Leite
Titular (DF/UFPE)

Prof. Dr. Lúcio Hora Acioli
Titular (DF/UFPE)

24 Em tempo, acrescenta-se à lista de
participantes titulares da banca
da linha 07 à 10 o nome do prof.
sor Diógenes Reyes Ardilla (DF-UFPB).
A.P.M.