

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF**

Formação: Mestrado em Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO OBTIDA POR  
**KATIANNE FERNANDES DE ALCANTARA**

**SIMULAÇÃO DE RESFRIAMENTO A LASER EM ARMADILHA**  
**MAGNÉTICA E CONSTRUÇÃO DE LASER DE**  
**CAVIDADE ESTENDIDA**

Apresentada em 11/03/2010 Perante a Banca Examinadora:

Dr. André Luiz de Oliveira - CCT/UDESC (Presidente)

Dr. Cláudio Lenz César - IF/UFRJ

Dra. Kilvia M. F. Magalhães - IFSC/USP

Dr. Holokx Abreu Albuquerque - CCT/UDESC

Joinville

2010

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Mestranda: Katianne Fernandes de Alcantara.

Orientador: Prof. Dr. André Luiz de Oliveira - CCT/UDESC

Coorientador: Prof. Dr. Cláudio Lenz César - IF/UFRJ

SIMULAÇÃO DE RESFRIAMENTO A LASER EM ARMADILHA  
MAGNÉTICA E CONSTRUÇÃO DE LASER DE CAVIDADE  
ESTENDIDA

DISSERTAÇÃO APRESENTADA PARA  
OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM  
FÍSICA DA UNIVERSIDADE DO ESTADO DE  
SANTA CATARINA, CENTRO DE CIÊNCIAS  
TECNOLÓGICAS - CCT, ORIENTADA PELO  
PROF. DR. ANDRÉ LUIZ DE OLIVEIRA E  
COORIENTADA PELO PROF DR. CLÁUDIO  
LENZ CÉSAR.

Joinville

2010

*Aos meus pais.*

## FICHA CATALOGRÁFICA

<b>NOME:</b> ALCANTARA, Katianne Fernandes de	
<b>DATA DA DEFESA:</b> 11/03/2010	
<b>LOCAL:</b> Joinville, CCT/UDESC	
<b>NÍVEL:</b> Mestrado	Número de Ordem: <b>07</b> - CCT/UDESC
<b>FORMAÇÃO:</b> Física	
<b>ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:</b> Física	
<b>TÍTULO:</b> Simulação de Resfriamento a Laser em Armadilha Magnética e Construção de Laser de Cavidade Estentida <b>PALAVRAS - CHAVE:</b> Laser de Diodo. Resfriamento a Laser. Armadilha Magnética. <b>NÚMERO DE PÁGINAS:</b> iv, 78 p.	
<b>CENTRO/UNIVERSIDADE:</b> Centro de Ciências Tecnológicas da UDESC.	
<b>PROGRAMA:</b> Pós Graduação em Física - PPGF	
<b>CADASTRO CAPES:</b> 41002016011P-9	
<b>ORIENTADOR:</b> Dr. André Luiz de Oliveira	
<b>PRESIDENTE DA BANCA:</b> Dr. André Luiz de Oliveira <b>MEMBROS DA BANCA:</b> Dr. André Luiz de Oliveira, Dr. Cláudio Lenz Cesar, Dra. Kilvia M. F. Magalhães, Dr. Holokx Abreu Albuquerque.	

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer aos meus orientadores André e Cláudio pela contribuição na minha formação profissional e pessoal.

Ao Paolo Crivelli(Pol) que teve grande participação nesse trabalho e em todas as discussões, sempre cheio de paciência e disposição para ajudar.

Ao Ricardo Lambo e a Luísa Scudeller pela cooperação, ajuda no dia-a-dia do laboratório, pela amizade e pelas risadas.

Ao Marcos, João, Fábio, Mariana, Chico, Guessser, Cíntia e Naiara, amigos pra falar de Física mas também pra falar e rir da vida.

Ao pessoal da salinha do café que torna os momentos após o almoço no instituto de física da UFRJ sempre mais descontraído e animado.

Ao pessoal da pós graduação da UDESC e da UFRJ que sempre foram solícitos e atenciosos, em especial ao professor Ben Hur e a Tânia.

Aos professores de graduação e do mestrado que sempre ficarão lembrados com carinho, representados aqui por Cíntia Aguiar, Holokx Abreu de Albuquerque e Júlio Miranda Pureza.

Aos meus pais Ademir e Beatriz, aos meus irmãos Maicon e Marlon, a minha cunhada Pamela e aos meus familiares por todo amor e carinho que eu sempre recebi tanto estando perto, quanto estando longe.

Ao Bruno pela compreensão nos momentos difíceis, pelo amor, carinho e toda ajuda com o Latex.

E a Deus por tudo acima e todo o resto.

Essa dissertação foi parcialmente financiada por FAPESC e CAPES.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Resumo sobre Resfriamento e Aprisionamento</b>	<b>4</b>
2.1	Motivação . . . . .	4
2.2	Aprisionamento Magnético . . . . .	5
2.3	Pré-Resfriamento . . . . .	7
2.3.1	Métodos de Pré-resfriamento . . . . .	7
2.4	Resfriamento Evaporativo . . . . .	16
2.5	Resfriamento Solidário . . . . .	17
2.6	Mecanismos de Perda da Amostra . . . . .	18
2.6.1	Perda por Transição de Majorana . . . . .	18
2.6.2	Mecanismos de Perda por Colisões . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Resfriamento a Laser de Lítio em um Campo Magnético Externo</b>	<b>21</b>
3.1	Motivação . . . . .	21
3.2	Descrição Quântica e Estrutura Fina $^7Li$ . . . . .	22
3.3	Simulação de Monte Carlo para o Resfriamento a Laser de Li e Resultados . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Laser de Semicondutor</b>	<b>33</b>
4.1	Introdução Histórica . . . . .	33
4.2	Características e Operação . . . . .	34
4.3	Laser de Diodo M9 975 0300 S30 . . . . .	36
4.4	Laser de Diodo em Cavidade Estendida . . . . .	37
4.4.1	Visão Geral sobre o LDCE . . . . .	37
4.4.2	Configuração Littrow . . . . .	38

4.4.3	Largura de Linha em LDCE . . . . .	41
4.4.4	Realimentação Óptica . . . . .	43
4.4.5	Sintonia Ótima em Cavity Littrow . . . . .	43
4.4.6	Montagem Experimental e Resultados . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>49</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>51</b>
	<b>Apêndice A</b>	<b>59</b>
	<b>Apêndice B</b>	<b>77</b>

# Resumo

**ALCANTARA, Katianne Fernandes de. Simulação de resfriamento a laser em armadilha magnética e construção de laser de cavidade estendida.** 2010. 78 f. Dissertação (Mestrado em Física - Área: Física Atômica e Molecular) - Universidade do Estado de Santa Catarina. Programa de pós graduação em Física. Joinville, 2010.

O resfriamento a laser em altos campos magnéticos, apresenta uma série de dificuldades devido ao alargamento inhomogêneo da transição causado pelo efeito Zeeman. Na primeira parte desse trabalho investigamos o resfriamento a laser de Lítio através de uma simulação de Monte Carlo, na transição  $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$  em 670.96 nm, em uma armadilha magnética com as características da armadilha em funcionamento no laboratório LASER do instituto de Física da UFRJ. Na segunda parte, foi construído um laser de diodo em cavidade estendida emitindo em 972 nm utilizando a configuração de Cavidade Estendida de Littrow. O propósito desse laser é após um duplo dobramento de frequência, utilizá-lo para estudo do átomo de Hidrogênio na transição  $1S \rightarrow 2S$  em 243 nm.

**Palavras-chave:** Resfriamento a Laser. Laser de Diodo. Armadilha Magnética.



# Abstract

**ALCANTARA**, Katianne Fernandes de. **Simulation of laser cooling in magnetic trap and building of laser with extended cavity**. 2010. 78 f. Dissertation (Mestrado em Física - Área: Física Atômica e Molecular) - Universidade do Estado de Santa Catarina. Programa de pós graduação em Física. Joinville, 2010.

Laser cooling in high magnetic fields, presents a series of difficulties due to inhomogeneous broadening of the frequency due to Zeeman Effect. In the first part of this work we investigate the laser cooling of Li by a Monte Carlo simulation, the  $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$  transition at 670.96 nm in a magnetic trap under the characteristics of trap operating at the LASER laboratory of the Institute of Physics, UFRJ. In the second part, we built a diode laser with extended Littrow cavity emitting in 972 nm using the configuration of extended cavity Littrow. The purpose of this laser is, after a double frequency doubling, to use it to study the hydrogen atom in the transition  $1S \rightarrow 2S$  at 243 nm.

**Key-words:** Laser Cooling. Laser Diode. Magnetic Trap.

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo do Hidrogênio e suas propriedades têm contribuído sobremaneira para o desenvolvimento da Física, por ser este o sistema mais simples que se conhece. Neste sentido o melhor conhecimento do espectro do Hidrogênio na transição do nível 1S-2S contribui para a medida de uma das mais bem definidas constantes físicas, a constante de Rydberg. A impressionante precisão de 14 algarismos significativos foi atingida por Hänsch e colaboradores usando um feixe atômico a 6 K [1] depois de 20 anos de contínuas melhorias experimentais, chegando à resolução limite que pode ser alcançada usando esta técnica. Como foi colocado por Cesar e Kleppner [2], para alcançar a resolução final que essa transição 1S-2S oferece, o hidrogênio deve ser magneticamente aprisionado e resfriado a temperaturas de algumas dezenas de  $\mu K$ . Com uma análise cuidadosa da forma das linhas se poderia, então, conseguir uma precisão de  $10^{-18}$  [3]. Tal precisão não apenas conduziria a testes rigorosos da Eletrodinâmica Quântica (QED), mas também poderia ser usada para testar a variação das constantes fundamentais [4] e para testar o teorema da Conjugação da Carga, Paridade e do Tempo (CPT) fazendo comparação com anti-hidrogênio [5, 6], propósito fundamental do laboratório LASER do Instituto de Física da UFRJ.

Partindo do primeiro aprisionamento magnético de um átomo neutro (Na) em 1985 por Midgall [7], nos últimos 25 anos o estudo de aprisionamento cresceu rapidamente sendo que uma grande parte dos elementos são aprisionáveis pelas técnicas em existência hoje. No entanto, a melhoria destas técnicas e a busca por novas técnicas continuam com o intuito de aumentar a fração desses elementos aprisionáveis, e melhorar as condições de aprisionamento, como tempo de vida da amostra, densidade e temperatura.

A proposta de uma nova técnica para o carregamento da armadilha está baseada nos resultados publicados recentemente para espectroscopia do Cromo (Cr) [6]. Neste artigo, foi demonstrado que átomos poderiam ser liberados a temperaturas criogênicas de  $\approx 18K$  a partir de uma matriz sólida de Neônio (Ne). O mecanismo de carregamento da armadilha consiste em capturar a fração com baixa energia desses átomos paramagnéticos liberados enquanto átomos de Ne neutros, que não sentem o campo magnético, vão para as paredes das células experimentais cobertas com carvão. O substrato atualmente utilizado no experimento para ablação é o Hidreto de Lítio (LiH), pois existem algumas vantagens em ter o Li junto ao H; primeiro ter um eficiente resfriamento por evaporação - pois a seção de choque Li-H é cerca de 1200 vezes maior do que a de H-H [8] - e também verificar a possibilidade de um pré-resfriamento a Laser do Li que, uma vez resfriado, pode resfriar solidariamente o H via colisões. Com apenas H na armadilha, teríamos que esperar muito tempo para realizar o resfriamento evaporativo, com a presença de Li teremos um número de colisões muito maior e esse tempo será diminuído em grande escala, por essa razão o resfriamento solidário apresentou-se como uma alternativa muito interessante [5]. A idéia principal do trabalho de todo grupo é construir uma armadilha para armazenar hidrogênio e então fazer a espectroscopia na transição 1S-2S para comparar com a espectroscopia da mesma transição de antihidrogênio, uma vez que este trabalho está inserido na colaboração ALPHA/AD5 no CERN que produz antihidrogênio frio.

O resfriamento a laser em altos campos magnéticos, apresenta uma série de dificuldades devido ao alargamento do espectro devido ao efeito Zeeman. A motivação principal dessa parte do trabalho, foi uma simulação desse processo. Essa simulação de Monte Carlo é muito importante para verificar a viabilidade e caso ela exista, como proceder o processo de implementação e ajuste dos parâmetros dessa técnica experimentalmente.

A segunda parte do trabalho consistiu na construção da primeira etapa de um laser para hidrogênio utilizando um laser semiconductor. Fontes comerciais de radiação coerente emitindo no infravermelho com características especiais para uso em espectroscopia atômica estão disponíveis no mercado à altos preços e muitas vezes com pouca estabilidade, o que torna o trabalho com esses lasers muitas vezes penoso e não produtivo.

Para tanto, o desenvolvimento de fontes contínuas e sintonizáveis de laser no infravermelho para experimentos com átomos neutros requer características especí-

ais para torná-las viáveis para espectroscopia atômica. A transição ressonante do hidrogênio, por exemplo, possui uma largura de linha natural de 1.3 Hz em 121 nm [9]. Portanto a fonte laser deve obrigatoriamente ter largura de linha menor do que isso para estudo eficiente, desta transição.

Essa etapa do trabalho envolveu a montagem e estabilização de um laser de diodo em 972 nm que irá ser utilizado após fazer um duplo dobramento de frequência para estudo da transição 1S-2S do Hidrogênio em 243 nm.

A utilização de lasers de semicondutor torna-se uma opção viável para espectroscopia, pois tais lasers quando atuam em uma cavidade estendida operam em modos longitudinais únicos e são razoavelmente sintonizáveis, além de serem lasers de baixo custo se comparados com lasers de estado sólido ou gás.

Esta dissertação está organizada em 5 capítulos. No capítulo 2, uma revisão sobre técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos é apresentada. A descrição quântica da estrutura fina do  ${}^7\text{Li}$  e os resultados para o resfriamento a laser desse átomo em um campo magnético são apresentados no capítulo 3. Já no capítulo 4, nos dedicamos a falar de laser de diodo, primeiro fazendo uma revisão geral e em seguida apresentando o laser de diodo com cavidade Littrow que foi desenvolvido e caracterizado. Conclusões e perspectivas são apresentadas no capítulo 5. Também é apresentado um apêndice onde está o código em C++ desenvolvido para a implementação da simulação de Monte Carlo para o resfriamento a laser de Li.

# Capítulo 2

## Resumo sobre Resfriamento e Aprisionamento

Neste capítulo apresentamos os mais importantes princípios para o resfriamento e aprisionamento de átomos neutros. Também há um breve resumo das principais técnicas que existem.

### 2.1 Motivação

Entre os primeiros motivos para aprisionamento e resfriamento está a descoberta de novos estados de matéria. Resfriamento a temperaturas de alguns kelvins revelaram a superfluidez do  $^4\text{He}$  em 1938 [10], enquanto resfriamento à temperaturas de milikelvins revelaram a superfluidez do  $^3\text{He}$  em 1972 [11]. Resfriamento a laser seguido por evaporação forçada permitiu a obtenção de temperaturas muito baixas e a produção de condensados de Bose-Einstein (BEC) com gás de rubídio resfriado a 170 nK em 1995 [13].

Uma das mais fortes e interessantes motivações continua sendo a espectroscopia de alta resolução. Como exemplo próximo ao laboratório, temos a colaboração ALPHA no CERN que tem como meta a produção de antihidrogênio frio confinado, que vai possibilitar testes importantes de CPT e antigravidade. A intenção é comparar o espectro da transição 1S-2S em antihidrogênio com o espectro da mesma transição em hidrogênio, as quais a teoria de CPT prevê serem iguais [14].

## 2.2 Aprisionamento Magnético

A possibilidade de produzir altos campos elétricos e a grande força de interação elétrica facilitam o aprisionamento de partículas carregadas. Contrariamente, átomos neutros são menos susceptíveis a campos elétricos, logo o uso de armadilhas magnéticas continua sendo o método mais utilizado para o aprisionamento sem paredes.

O uso de gradientes do campo magnético para aprisionar átomos neutros só é possível devido ao momento magnético intrínseco de prótons, neutrons e elétrons e ao momento magnético orbital dos elétrons. No caso dos gases nobres e dos alcalinos terrosos a soma destas interações produz átomos sem nenhum momento magnético, nesse contexto são utilizadas as armadilhas ópticas [12].

A energia de interação entre uma partícula com momento de dipolo  $\vec{\mu}$  e um campo externo  $\vec{B}$  é dada por:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.1)$$

Para aprisioná-la é necessária uma configuração de campo magnético que produza um mínimo local na energia de interação. Para espécies que têm o momento de dipolo contra alinhado ao campo magnético (*low-field seekers*) isto requer uma região em que o módulo do campo tenha um mínimo. Para espécies que têm o seu momento de dipolo alinhado na mesma direção ao campo magnético (*high-field seekers*) isto requer uma região em que o módulo do campo tenha um máximo. Como as leis de Maxwell proibem a criação de um máximo de campo estático em um espaço livre, somente os *low-field seekers* podem ser aprisionados com o uso exclusivo de campos magnéticos.

Um campo não-homogêneo com um mínimo local é tipicamente produzido por dois tipos de armadilha: bobinas na configuração Ioffe-Pritchard e bobinas na configuração anti-Helmholtz. A configuração Ioffe-Pritchard normalmente consiste de quatro barras de corrente na direção axial e, nos extremos das barras de corrente, duas bobinas com a corrente circulando no mesmo sentido [13], como podemos observar na figura 2.1. O resultado é um mínimo parabólico na direção axial e um mínimo linear na direção radial em torno de um resultante finito no meio da armadilha. Variações no número de barras de correntes são possíveis.

A configuração anti-Helmoltz (usada na simulação) é constituída de duas bobi-

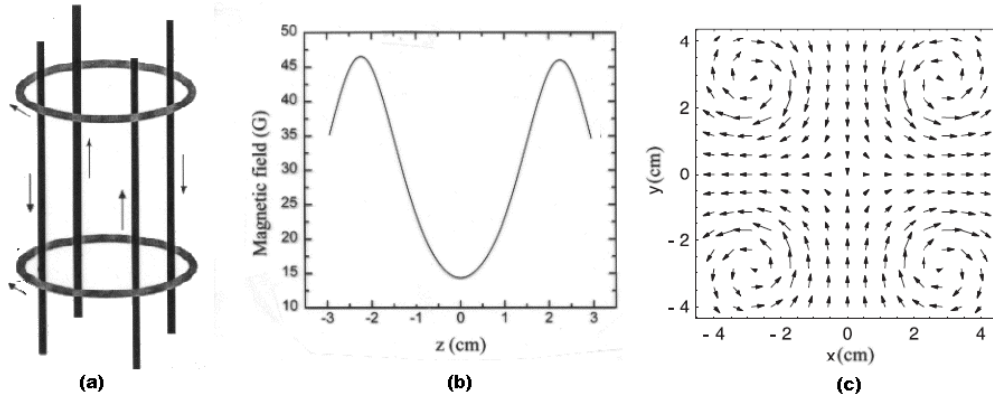


Fig. 2.1: (a) Configuração Ioffe-Pritchard com quatro barras de corrente na direção axial e duas bobinas com corrente no mesmo sentido. (b) Perfil do campo magnético ao longo do eixo z. (c) Perfil do campo magnético no plano x-y.

nas, com a corrente em cada bobina andando num sentido contrário à outra. O campo gerado é um quadrupolo esférico descrito por:

$$B(r, z) = \sqrt{(r^2 + 4z^2)} \frac{dB}{dr}, \quad (2.2)$$

onde  $z$  é o eixo de simetria cilíndrica,  $r$  é a distância radial e  $dB/dr$  é uma constante que depende da geometria e da corrente nas bobinas. As equipotenciais do campo formam superfícies elipsoidais e o potencial é na forma de um “V”, provendo um bom confinamento.

O principal problema da configuração anti-Helmholtz é a presença de um campo nulo no meio da armadilha, que pode induzir perdas da amostra através de transições de Majorana (descrita na última seção deste capítulo) em que a partícula muda de um estado aprisionável *low-field seeker* para um estado não aprisionável *high-field seeker*. Para contornar este problema, além da configuração Ioffe-Pritchard, existem outras mais elaboradas [15] desenhadas para evitar a criação de um campo nulo no meio da armadilha.

Estes campos podem ser produzidos por magnetos permanentes, bobinas de fios sem propriedades especiais ou de fios condutores [16]. Em um ambiente típico criogênico, bobinas de fio supercondutores são as preferidas. Dessa forma pode-se obter campos intensos com uma dissipação de potência mínima, o limite superior destes campos atualmente permitidos pela tecnologia dos supercondutores é da ordem de 5 T.

## 2.3 Pré-Resfriamento

A palavra resfriar no que se refere a aprisionamento de partículas significa dissipar sua energia cinética. Esta necessidade surge da natureza do campo magnético. O potencial de interação do momento magnético com o campo é conservativo, isto é, em uma armadilha magnética a energia total da partícula é uma constante do seu movimento. Logo, a energia que a partícula ganha ao entrar na armadilha é suficiente para que ela saia. Para permanecer na armadilha é necessário que a energia cinética seja dissipada.

Se a energia cinética média da amostra aprisionada for maior do que  $U_{trap}$ , que é a profundidade da armadilha, a maior parte das partículas serão perdidas para as paredes. Se a energia cinética média for bem menor do que  $U_{trap}$ , somente as partículas no extremo da distribuição de Maxwell-Boltzman terão energia suficiente para deixar a armadilha, enquanto a maior parte das partículas permanecerá dentro da armadilha. A condição para aprisionamento é  $\eta > 1$ , onde  $\eta$  é razão entre a profundidade da armadilha e a energia térmica ( $k_B T$ ) típica da amostra.

$$\eta = \frac{U_{trap}}{k_B T}, \quad (2.3)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzman e  $T$  temperatura da amostra.

Para uma dada profundidade de campo, a temperatura para qual a espécie tem que ser resfriada para ser aprisionada depende do momento de dipolo magnético das suas partículas. Para uma partículas de  $1 \mu_B$ , como hidrogênio ou lítio em uma profundidade de campo de 5 T,  $\frac{U_{trap}}{k_B} = 3$  K, que implica que precisamos resfriar a amostra para abaixo desta temperatura para aprisioná-la eficientemente, (desta maneira a temperatura também pode ser usada como uma medida de profundidade da armadilha).

### 2.3.1 Métodos de Pré-resfriamento

#### Resfriamento a Laser

Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji e William D. Phillips ganharam o prêmio Nobel de Física de 1997 por sua contribuição para o desenvolvimento de métodos para aprisionar e resfriar átomos com laser. Os novos métodos de pesquisa desenvolvidos contribuíram muito para o conhecimento sobre a interação entre radiação



e a matéria. Em particular, eles abriram caminho para um entendimento mais profundo sobre o comportamento quântico de gases em baixas temperaturas. Entre as grandes vantagens do resfriamento a laser está a sua eficiência [17, 18]. Através deste processo, átomos podem ser resfriados a temperaturas da ordem de  $100 \mu\text{K}$ , e então aprisionados em armadilhas magnéticas menos profundas.

Cada fóton do campo eletromagnético carrega não só energia  $h\nu$ , onde  $h$  é a constante de Planck e  $\nu = c/\lambda$  (sendo  $c$  a velocidade da luz no vácuo e  $\lambda$  o comprimento de onda do fóton emitido), mas também momento angular  $h/2\pi$  e momento linear  $h/\lambda$ . Logo, ao absorver um fóton, pela conservação da energia e do momento do processo, o átomo armazena energia  $h\nu$  indo para um estado excitado; ele armazena momento angular  $h/2\pi$  na forma de movimento interno de seus elétrons; ele absorve momento  $h/\lambda$  recuando da fonte de radiação. Essa variação na velocidade do átomo é a razão entre a variação de momento absorvido da luz  $h/\lambda$  e a massa do átomo conhecida como velocidade de recuo.

$$v_R = \frac{h}{m\lambda} \quad (2.4)$$

O átomo permanece nesse estado excitado durante um intervalo de tempo que depende do campo de radiação (frequência de Rabi) e das flutuações de vácuo do campo eletromagnético (decaimento espontâneo). Após esse intervalo de tempo, o átomo pode então perder essa energia de excitação por emissão espontânea ou estimulada de um fóton. Se essa emissão for estimulada pelo feixe de laser que originalmente excitou o átomo, o fóton é emitido no mesmo modo do campo de laser e não haverá nenhuma transferência efetiva de momento para o átomo ao final do processo. No caso do decaimento do nível excitado ocorrer espontaneamente, o fóton será emitido em uma direção aleatória (todas as direções são igualmente prováveis). Por conservação de momento total, o átomo recua em sentido contrário à emissão. Em outras palavras, a cada absorção o átomo absorve uma quantidade de movimento  $\Delta\vec{p}_A = mv_r\vec{k}_L$ , onde  $\vec{k}_L$  é o sentido do vetor de onda definido pelo feixe do laser. Já na emissão espontânea, a variação na quantidade de movimento é  $\Delta\vec{p}_E = mv_r\vec{k}_R$ , onde  $\vec{k}_R$  é a direção do fóton emitido. Como a emissão espontânea é um processo randômico, após  $N$  eventos de absorção seguida de emissão espontânea, a variação total no momento do átomo será  $N\Delta\vec{p}_A$ . Por esse motivo a sintonização da frequência do laser é tão importante. Imagine em uma armadilha com laser em ambos os sentidos, se a frequência do laser não for sintonizada corretamente, corre-

se o risco de absorver fótons no mesmo sentido em que o átomo está se movendo, nesse caso o átomo não receberá um recuo e sim um impulso, sendo aquecido e não resfriado. Dessa forma o ajuste da frequência do laser, com ausência de campo magnético, é sempre um pouco abaixo da frequência de transição do átomo, pois devido ao efeito doppler o átomo preferencialmente irá absorver fótons do laser com sentido contrário ao seu movimento.

## Resfriamento Doppler e Melaço Óptico

O método de resfriar átomos com luz laser descrito acima foi desenvolvido por volta de 1985 por Steven Chu e seus colaboradores no *Bell Laboratories* em Nova Jersey. Eles usaram seis feixes de lasers, colocados em três pares com sentidos opostos e formando ângulos retos. Primeiramente, os átomos de sódio de um feixe no vácuo foram parados por um feixe de laser oposto e depois eles foram conduzidos para a intersecção dos seis feixes de laser refrigeradores.

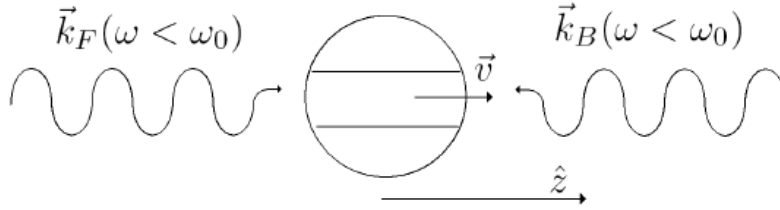


Fig. 2.2: Feixes de laser atingindo um átomo, que está com velocidade  $\vec{v}$

A luz em todos os feixes de lasers deve estar ligeiramente desviada para o vermelho quando comparada com a cor característica absorvida pelo átomo no estado estacionário ( $\omega < \omega_0$ ). O efeito é que, para qualquer direção que os átomos tentem se mover, eles terão maior probabilidade de absorver fótons que se propagam em direção contrária e então tendem a ser resfriados. Este tipo de resfriamento é chamado de *Resfriamento Doppler*.

A curva de absorção de fótons por um átomo (em um modelo de sistema de dois níveis) é tipicamente dada por uma Lorentziana. Seguindo os passos da referência [19] a Lorentziana da figura 2.3 é dada por:

$$g(\omega) = \frac{S_0}{1 + S_0 + \left[ \frac{2(\omega - \omega_0)}{\gamma} \right]^2}, \quad (2.5)$$

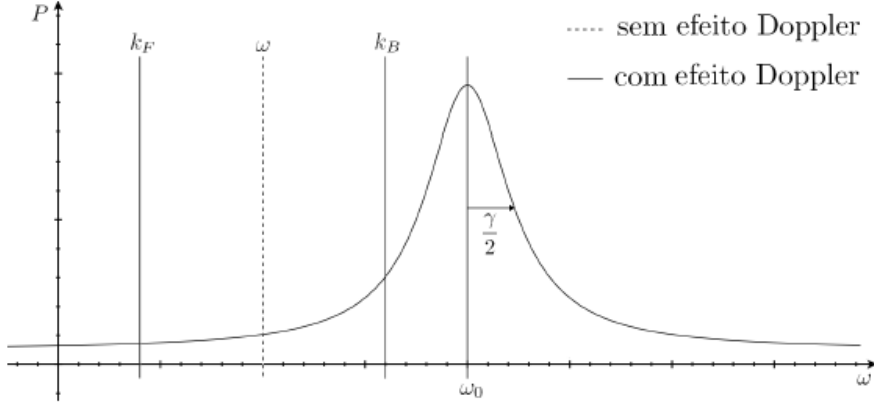


Fig. 2.3: Probabilidade  $P$  de absorção do fóton pelo átomo em função da frequência  $\omega$

onde  $S_0 = \frac{I}{I_s}$  é o parâmetro de saturação,  $I$  é a intensidade do laser,  $I_s = 2,56 \frac{mW}{cm^2}$  [19] é a intensidade de saturação do Lítio,  $\gamma$  é a largura de linha angular de transição,  $\gamma/2$  é a meia largura da Lorentziana e  $\omega_0$  é a frequência com maior probabilidade absorção no átomo estacionário.

A probabilidade do átomo absorver um fóton do laser é então dada por:

$$P = \frac{S_0}{1 + S_0 + \left[ \frac{2(\omega_D + \omega_B + \delta)}{\gamma} \right]^2}, \quad (2.6)$$

onde  $\delta = \omega_{laser} - \omega_0$ ,  $\omega_D = -\vec{k}_{laser} \cdot \vec{v} = \frac{2\pi v}{\lambda}$  e  $\omega_B$  é a frequência de deslocamento Zeeman do átomo, caso exista a presença de um campo magnético.

Neste caso, a força óptica sobre o átomo (em repouso) é:

$$\vec{F}_{ot} = \frac{\gamma}{2} g(\omega) \hbar \vec{k} \quad (2.7)$$

Então, a força que o átomo “sente” na situação ilustrada na figura 2.2 é dada pela soma das seguintes equações:

$$\begin{cases} \vec{F}_{esq} = \frac{\gamma}{2} \hbar k \hat{z} g(\omega - kv) \\ \vec{F}_{dir} = -\frac{\gamma}{2} \hbar k \hat{z} g(\omega + kv) \end{cases} \quad (2.8)$$

Logo, fazendo  $\Delta \equiv \omega_0 - \omega$ :

$$\vec{F}_{res} = \frac{\gamma}{2} \hbar k \hat{z} \left[ \frac{S_0}{1 + S_0 + \frac{4(\Delta + kv)^2}{\gamma^2}} - \frac{S_0}{1 + S_0 + \frac{4(\Delta - kv)^2}{\gamma^2}} \right] \quad (2.9)$$

E, no limite de baixas velocidades, expandindo a equação acima temos:

$$\vec{F}_{res} = -\frac{8S_0\gamma\hbar k^2\Delta}{\gamma^2\left(1+S_0+\frac{4\Delta^2}{\gamma^2}\right)^2} v\hat{z} \Rightarrow \vec{F}_{res} = -b\vec{v} \quad (2.10)$$

Que é a expressão para uma força viscosa. Isto é, na intersecção dos feixes de laser, os átomos se movem como em um líquido viscoso, por isso o nome *melaço óptico*.

Temos ainda que levar em conta a dispersão devido a emissão espontânea, que dará uma energia de recuo ao átomo. Logo, a taxa de variação da energia do átomo é:

$$\frac{dW}{dt} = \gamma_{abs} \frac{\langle P_{em}^2 \rangle}{2m} - bv^2 \quad (2.11)$$

A equação da energia cinética no estado estacionário é dada por [20]:

$$E_c = \left(\frac{\hbar\gamma}{8}\right) \left(\frac{2|\delta|}{\gamma} + \frac{\gamma}{2|\delta|}\right) \quad (2.12)$$

Essa equação tem um mínimo em  $\delta = -\frac{\gamma}{2}$ , e por esse motivo sem o efeito Zeeman a frequência do laser deve ser variada até esse ponto, resultando em um  $E_{min} = \frac{\hbar\gamma}{4}$ . Da mecânica estatística temos que  $E_c = \frac{1}{2}k_B T$  em uma dimensão, e então temos a expressão para a energia mínima como:

$$E_{min} = \frac{\hbar\gamma}{2} \quad (2.13)$$

Vamos estimar aqui como exemplo a temperatura mínima para átomos de Lítio (por ser esse o elemento que vamos estudar nesse trabalho), com largura de linha angular de transição  $\gamma = 37.2$  MHz conhecida como temperatura Doppler.

$${}^7\text{Li} \rightarrow E_{min} = \frac{\hbar\gamma}{2} = \frac{1.054 \times 10^{-34} \times 37.2 \times 10^6}{2} = 1.96 \times 10^{-27} \text{ J} \quad (2.14)$$

$$T_{min} = \frac{E_{min}}{k_B} = \frac{1.96 \times 10^{-27}}{1.38 \times 10^{-23}} = 142 \text{ } \mu\text{K}$$

Os átomos na interação apenas com lasers são resfriados, mas não aprisionados. A gravidade faz com que eles saiam do melaço óptico em aproximadamente um segundo. Para realmente aprisionar átomos foi feito, em 1987 [21], uma armadilha de alta eficiência, chamada de *magneto-optical trap* (MOT), que discutiremos na próxima seção.

O principal problema do resfriamento a laser é a sua limitação a sistemas com transições próximas à que se deseja excitar o fóton. Depois da primeira absorção o átomo deve decair para o seu estado original para poder absorver novamente a frequência do laser e continuar o processo de resfriamento. Se existe a possibilidade de decaimento para outros estados, mais lasers são necessários para rebombear a espécie para o seu estado original, algo que as vezes se torna inviável para a maioria dos átomos e moléculas.

Outras limitações existem para esta técnica, pois dependendo da configuração e do átomo a ser resfriado, muitas vezes são necessários laser de alta potência para os feixes de resfriamento e rebombeamento. Uma outra consequência da questão da necessidade de potência, são os limites no tamanho e na densidade de amostra. Elas são ordens de grandeza menores que os limites fundamentais, devido a natureza das armadilhas magnéticas.

Por estas razões as espécies com as quais o resfriamento a laser tem obtido mais sucesso são os alcalinos e os gases nobres em estado metaestáveis. Excluídos estão elementos importantes como hidrogênio, cobre, prata e ouro, que têm as suas transições principais no ultravioleta [22].

Por esse motivo a idéia de fazer resfriamento solidário do Hidrogênio com o Lítio, fazendo o resfriamento a laser do Lítio nos pareceu uma idéia interessante para ser estudada.

## Armadilha Magneto-Óptica

Vamos analisar agora o funcionamento da mais versátil armadilha para átomos neutros, a armadilha magneto-óptica (MOT). A primeira demonstração experimental de confinamento espacial com essa técnica ocorreu em 1987 com átomos de sódio [21].

Como já discutimos anteriormente no item resfriamento a laser, na absorção de um fóton ocorre conservação de energia (passagem do estado fundamental para o excitado), conservação do momento linear (responsável pelo recuo) e conservação do momento angular total. A conservação do momento angular implica em que um átomo inicialmente no estado fundamental,  $J = 0$ ,  $m_J = 0$ , ao absorver um fóton com polarização circular à direita ( $\sigma_+$ ), passa para o nível  $J = 1$ ,  $m_J = +1$ . No caso da luz ser polarizada circularmente à esquerda ( $\sigma_-$ ), o estado final do átomo será  $J = 1$ ,  $m_J = -1$ , como representado esquematicamente na Figura 2.4. Na ausência de campo magnético, a probabilidade de um átomo em repouso absorver

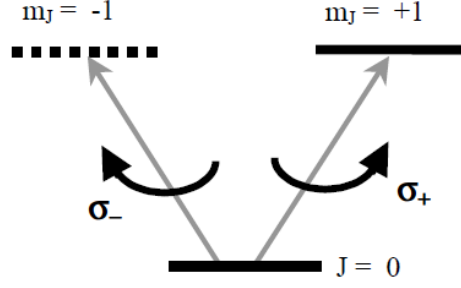


Fig. 2.4: Conservação do Momento Angular na absorção de fótons com diferentes polarizações.

fótons de um feixe  $\sigma_+$  é idêntica à probabilidade de absorver de um  $\sigma_-$ . Entretanto, na presença de um campo magnético em configuração anti-Helmholtz, ocorre um desdobramento Zeeman  $\omega_B$  em direções contrárias para os níveis  $m_J = +1$  e  $m_J = -1$ . Fazendo uma aproximação e colocando o átomo na presença de um campo magnético variável no espaço do tipo  $\vec{B}(x) = B_0\vec{x}$ , desprezando as componentes de campo nas demais dimensões, o desdobramento Zeeman dos níveis excitados depende da posição, como mostrado na Figura 2.5. O nível fundamental  $J=0$  não é afetado pelo campo magnético. Nessa figura, o nível  $m_J = +1$  é representado pela linha cheia e  $m_J = -1$ , pela linha tracejada. A configuração de feixes laser contrapropagantes de polarizações  $\sigma_+$  e  $\sigma_-$  pode ser obtida facilmente pela retro-reflexão de um dos feixes após passar por uma placa de um quarto de onda [20]. Com o laser dessintonizado para o vermelho,  $\delta < 0$ , como representado na Figura 2.5, na ausência do campo magnético teríamos a ação de um melaço óptico uni-dimensional.

Na presença do campo, considerando um átomo em repouso em  $x = x_1$ , o feixe laser  $\sigma_-$  está bem mais próximo da ressonância com o nível  $m_J = -1$  do que o feixe  $\sigma_+$  com nível  $m_J = +1$ . Logo, em  $x = x_1$ , a probabilidade de absorção de um fóton do feixe  $\sigma_-$  é bem maior do que a probabilidade de absorção de um fóton do feixe  $\sigma_+$ . Já em  $x = x_2$ , a probabilidade de absorção do feixe circular à direita,  $\sigma_+$ , é bem maior. Portanto, a pressão de radiação sempre impulsiona o átomo ao zero de campo magnético, o centro da armadilha.

Quando a magnitude de  $\delta$  não é maior do que algumas larguras de linha, o átomo sente um potencial praticamente harmônico [20]. Esse esquema de confinamento unidimensional pode ser estendido para três dimensões adicionando dois pares de feixes laser similares nos outros eixos cartesianos e um campo de quadrupolo

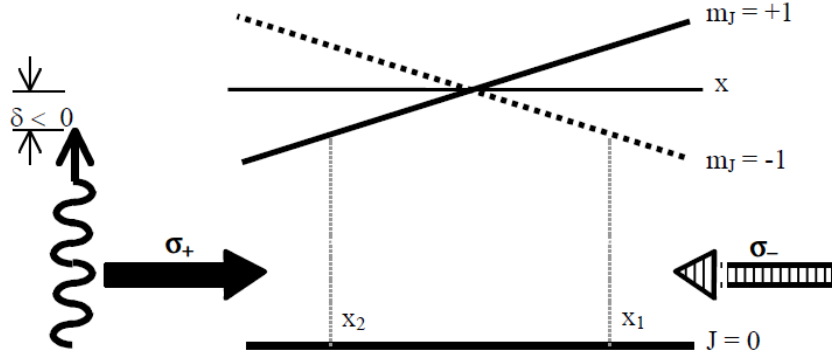


Fig. 2.5: Diagrama esquemático do funcionamento de um MOT em uma dimensão. Para  $B > 0$ , o nível  $m_J = +1$  (linha cheia) sofre um deslocamento positivo e o nível  $m_J = -1$  (linha tracejada), um deslocamento negativo e vice-versa para  $B < 0$ .

magnético esférico gerado por duas bobinas na configuração anti-Helmholtz.

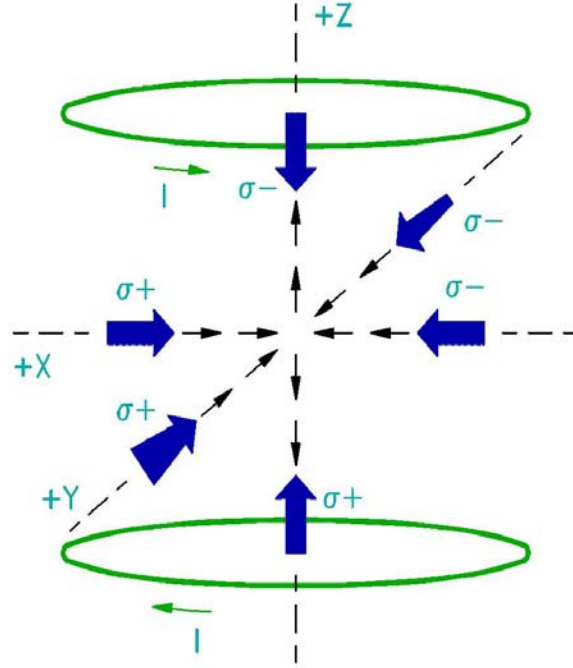


Fig. 2.6: Esquema da armadilha com bobinas anti-Helmholtz e feixes polarizados

É importante ressaltar que, em uma armadilha magneto-óptica, os átomos não somente são aprisionados, mas também são resfriados. Considere um átomo inicialmente em repouso em  $x = x_1$ . Esse átomo será impulsionado em direção ao centro pelo feixe  $\sigma_-$  até o ponto em que adquira uma velocidade tal que a probabilidade de

absorção pelo feixe contrapropagante  $\sigma_+$  seja maior devido ao deslocamento Doppler, começando assim a atuar o efeito óptico.

## Desaceleradores Stark e Zeeman

Entre outras formas de resfriamento para o carregamento de armadilhas magnéticas, atualmente em desenvolvimento, um dos mais familiares é o *coilgun* atômico de Mark Raizen, na Universidade de Texas [23]. Como nos deceleradores usados no carregamento de armadilhas magneto-ópticas [24], ele aproveita o efeito Zeeman, mas também utiliza uma série de bobinas magnéticas pulsadas com o intuito de parar os átomos completamente e carregá-los diretamente em uma armadilha magnética sem resfriamento por radiação.

Primeiramente um feixe atômico é produzido por expansão adiabática em vácuo de um gás a alta pressão através de uma abertura pequena. A temperatura do gás é da ordem de milikelvins [25], mas a entalpia do gás é convertida em energia cinética resultando em velocidades altas. Átomos podem ser inseridos nestes feixes supersônicos por ablação a laser, passando o feixe por uma célula de vapor ou ainda aquecendo essas amostras em fornos. Estes átomos são então resfriados junto com o feixe.

No *coilgun*, o campo magnético divide os átomos em *high-field seekers* and *low-field seekers* pelo efeito Zeeman. Os *low-field seekers* ganham energia potencial quando eles entram numa região de intensidade magnética alta. Quando eles chegam no máximo deste potencial magnético, o campo magnético é rapidamente desligado. Pela conservação de energia, a energia cinética dissipada é equivalente ao deslocamento Zeeman:

$$\Delta E = g\mu_B m_J B, \quad (2.15)$$

onde  $g$  é o fator Landé, e  $m_J$  é a projeção do momento angular total no eixo de quantização.

Uma outra técnica para desacelerar um feixe supersônico, análogo aos desaceleradores Zeeman, é realizada via efeito Stark, usando eletrodos em série para produzir campos elétricos pulsados [26, 27] ou eletrostáticos [28]. Isto tem sido usado para aprisionar amônia desde 2002 a temperaturas de 30 mK, e OH polarizado desde 2005 [29, 30].



## 2.4 Resfriamento Evaporativo

Estando a amostra aprisionada em uma armadilha magnética, ela irá naturalmente iniciar um processo de resfriamento. Este fenômeno é chamado de resfriamento evaporativo ou evaporação. A evaporação ocorre naturalmente, mas não indefinidamente numa amostra aprisionada. Esta idéia de prosseguir com o resfriamento por evaporação de átomos neutros confinados foi proposta em 1985 por Harald Hess e colaboradores, sendo observado pela primeira vez em 1987 com hidrogênio atômico [31]. O resfriamento evaporativo se tornou uma técnica muito utilizada e poderosa para obter gases atômicos frios e densos [31, 32]. Destacando-se a produção de condensados de Bose-Einstein [33, 34, 35] e de gases de Fermi degenerados [36, 37].

Podemos dizer que o resfriamento evaporativo em armadilhas atômicas é uma consequência das colisões elásticas num potencial confinante de profundidade finita. Numa amostra atômica aprisionada, os átomos podem adquirir, por meio de colisões elásticas, energia suficiente para escapar do poço de potencial de forma irreversível. Como a energia que se perde com a saída dessas partículas é maior que a energia térmica média da amostra, os átomos que permanecem na armadilha irão termalizar, por meio de colisões elásticas, à uma temperatura mais baixa, de forma que a amostra vai sendo resfriada. Embora todo o processo resulte numa diminuição do número de átomos, pode haver um aumento da densidade no espaço de fase, o que na verdade é uma das vantagens desta técnica. Ainda vale destacar que esse processo possui aplicabilidade dentro de um extenso intervalo de temperaturas e densidades, sem contar o fato de que a técnica possibilita a redução da temperatura da amostra em algumas ordens de grandeza.

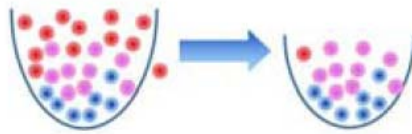


Fig. 2.7: Resfriamento evaporativo pela redução da magnitude do potencial confinante.

A evaporação inicia naturalmente, mas não ocorre indefinidamente. Na verdade, a taxa de resfriamento vai diminuindo e a amostra atinge uma temperatura estacionária após algum tempo [38]. Deve-se lembrar que este processo não é o

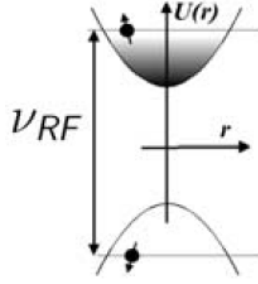


Fig. 2.8: Resfriamento evaporativo por pulso de radiofrequência na armadilha, removendo somente os átomos de uma classe de energias bem definida

único processo ao qual os átomos estão sujeitos em armadilhas magnéticas. Conforme a temperatura vai diminuindo, por evaporação, a probabilidade de continuar ocorrendo evaporação também diminui e os processos de perda e aquecimento passam a competir com o resfriamento evaporativo, de forma que as taxas de aquecimento e resfriamento acabam se cancelando. Porém, é possível impedir que o resfriamento da amostra seja interrompido, através da técnica conhecida como resfriamento evaporativo forçado. Como o próprio nome já diz, a idéia consiste em forçar a evaporação, o que se pode fazer de duas maneiras diferentes: (a) reduzindo a magnitude do potencial confinante, como podemos observar na figura 2.7 [31] ou (b) introduzindo um pulso de radiofrequência na armadilha, que remove somente os átomos de uma classe de energias bem definida [39, 40], tornando estados *low-field seekers* em *high-field seekers*, figura 2.8.

O sucesso do resfriamento evaporativo requer que o tempo de termalização dos átomos seja muito curto comparado ao tempo de vida da amostra. O tempo de termalização é dada pela taxa de colisão elástica, enquanto que o tempo de vida é dado pelas perdas e aquecimento causados pelas colisões inelásticas [41].

## 2.5 Resfriamento Solidário

Resfriamento solidário é o processo em que partículas de uma determinada espécie atômica, resfriam partículas de outra espécie. Normalmente, íons e átomos que podem ser diretamente resfriados por laser, são utilizados para resfriar os átomos ou íons nas proximidades, por meio de interação Coulombiana. Esta técnica permite o resfriamento de íons e átomos que não podem ser resfriados diretamente pelo

resfriamento do laser. No entanto, o resfriamento solidário é mais eficiente quando razão carga/massa das duas espécies atômicas ou iônicas são semelhantes [42].

O resfriamento de átomos neutros desta forma foi pela primeira vez demonstrado por Christopher Myatt e colaboradores em 1997 [43]. Aqui, uma técnica com campos elétricos e magnéticos foi utilizada, onde os átomos com spin em uma determinada direção estavam mais fracamente confinados do que átomos com spin no sentido oposto. Os átomos fracamente confinados com uma alta energia cinética escapam mais facilmente, diminuindo a energia cinética total, resultando em um resfriamento dos átomos fortemente confinados. Myatt e colaboradores também mostraram utilidade da sua versão de resfriamento solidário para a criação de condensados de Bose Einstein.

No caso do Lítio e Hidrogênio, que são os átomos que estamos trabalhando, a grande vantagem está na seção de choque Lítio - Hidrogênio que é cerca de 1200 vezes maior que a seção de choque Hidrogênio - Hidrogênio [8], dessa forma o resfriamento solidário e evaporativo é muito mais eficiente. Isso porque, como vimos na seção sobre resfriamento evaporativo, o sucesso deste processo está em o tempo de termalização dos átomos ser menor que o tempo de vida da amostra. Sendo o tempo de termalização dado pela taxa de colisão elástica dos átomos, é perceptível a importância da seção de choque nesse contexto.

## 2.6 Mecanismos de Perda da Amostra

Toda armadilha está sujeita a perdas da amostra. Como discutimos anteriormente, somente as partículas neutras em estados *low-field seeking* podem ser aprisionadas. Então todo processo que leva ao decaimento do átomo para estados *high-field seeking* causa a sua ejeção da armadilha.

### 2.6.1 Perda por Transição de Majorana

Perda por transição de Majorana ocorre em qualquer armadilha com um ponto de campo nulo ou próximo de nulo, sendo então de interesse para sistemas que usam armadilhas na configuração anti-helmoltz. Podemos imaginar os átomos em uma armadilha como dipolos magnéticos num campo magnético externo. O dipolo estará sujeito a um torque dado por:  $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ , precessando então com a frequência de

Larmor  $\omega_L$ .

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \quad (2.16)$$

Como resultado o dipolo precessa em torno da direção definida pelo vetor  $\mathbf{B}$  com uma frequência angular  $\omega_L$ , mantendo sua componente nessa direção. A frequência  $\omega_L$  é denominada frequência de Larmor e pode ser escrita como:

$$\omega_L = \frac{(\mu B)}{\hbar} \quad (2.17)$$

Numa armadilha magnética, tanto a direção quanto o módulo do campo variam ponto a ponto. No referencial do átomo se movimentando na armadilha, a direção e a magnitude dipolo magnético do átomo estarão precessando em torno da direção local do campo com a frequência de Larmor. Para a partícula permanecer confinada é necessário que o seu momento de dipolo  $\vec{\mu}$  acompanhe a variação espacial da direção de  $\vec{B}$ , sempre realizando o movimento de precessão ou, em outras palavras, a direção do campo deve variar de maneira suficientemente lenta para que o dipolo do átomo possa segui-la adiabaticamente. A condição para seguimento adiabático numa armadilha harmônica, isto é, que o potencial varia com  $\frac{1}{r^2}$  é dada por  $\frac{dL}{dt} \ll \omega_L^2$ . A violação desta condição pode resultar na transição do átomo para um estado não aprisionável. Este fenômeno constitui um mecanismo de perda de átomos em armadilhas magnéticas, sendo denominado transição de Majorana (*Majorana flip*). Um exemplo claro de violação da condição de adiabaticidade acontece numa armadilha do tipo quadrupolar esférica. Este tipo de armadilha tem em seu centro um ponto onde o campo magnético é nulo. Átomos que se aproximem desta região em um estado aprisionável podem sofrer uma transição de Majorana e ser ejetados da armadilha. A taxa de perda por transição de Majorana torna-se bastante significativa à medida que a amostra atômica vai sendo resfriada por meio da evaporação. Os grupos que buscaram a condensação de Bose-Einstein em armadilhas magnéticas do tipo quadrupolo constataram este fato. A condensação só se tornou possível por meio da utilização de métodos como plugue óptico [35], o potencial girante (a armadilha TOP, de *time orbiting potential* [44]) ou pelo uso de armadilhas nas quais o campo não é nulo no ponto de mínimo [45].

### 2.6.2 Mecanismos de Perda por Colisões

Existem dois tipos de colisões: elásticas e inelásticas. Os dois tipos podem levar a perdas da amostra. Em colisões elásticas o estado interno das partículas interagindo se mantêm o mesmo e o seu momento é alterado. Podemos dizer que o resfriamento evaporativo em armadilhas atômicas é uma consequência das colisões elásticas num potencial confinante de profundidade finita. Numa amostra atômica aprisionada, os átomos podem adquirir, por meio de colisões elásticas, energia suficiente para escapar do poço de potencial de forma irreversível. Como a energia levada por estas partículas é maior do que a energia térmica média do restante da amostra, os átomos remanescentes vão termalizar, por meio de colisões elásticas, a uma temperatura mais baixa, de forma que a amostra vai sendo resfriada, o que nesse caso é uma perda positiva no ponto de vista de resfriamento.

No caso das colisões inelásticas, o estado interno de pelo menos uma das partículas envolvidas é alterado, o que também resulta em perdas nas armadilhas magnéticas, sendo que nenhum tipo de benefício pode ser atribuído a este tipo de colisão. Embora existam vários mecanismos de colisão inelástica [40], os tipos mais relevantes para a operação de armadilhas magnéticas são as colisões de relaxação de spin, capazes de mudar o estado Zeeman da partícula e a recombinação de três corpos [40, 46, 47]. Existem alguns mecanismos através dos quais as colisões de relaxação de spin podem ocorrer, podemos dividi-los em duas classes: a troca de spin [40, 48, 49] e a relaxação dipolar [47, 50, 51].

## Capítulo 3

# Resfriamento a Laser de Lítio em um Campo Magnético Externo

Neste capítulo mostraremos o modelo utilizado para descrever o resfriamento a laser do lítio em um campo magnético externo e a importância de realizar uma simulação de Monte Carlo desse processo.

### 3.1 Motivação

Como foi apresentado na introdução, a proposta de uma nova técnica para o carregamento de armadilha magnética está baseada nos resultados publicados recentemente para espectroscopia do Cromo(Cr). Neste artigo [6], foi demonstrado que átomos poderiam ser liberados a temperaturas criogênicas de  $\approx 18 K$ . Essa fonte criogênica se baseia na implantação, e posterior liberação, de átomos/moléculas paramagnéticas de uma matriz de Neônio(Ne) sólido. Uma vez liberadas do Ne, as espécies paramagnéticas podem ser magneticamente aprisionadas por duas rotas: (a) usando o gás de Ne liberado como um gás termalizador temporário, onde colisões com o gás e posterior desconexão ocorrendo no meio de uma armadilha magnética provêem o mecanismo de dissipação necessário para o aprisionamento da fração em baixas energias; e (b) pelo chaveamento de um magneto miniatura, de baixa indutância quando a amostra desconectada já se encontra na região da armadilha. Com essa técnica, especialmente com a rota (b), deve ser possível construir armadilhas simples que permitam aprisionar Hidrogênio(H) e Lítio(Li) conjuntamente, além de moléculas leves com dipolos elétrico e magnético.

A motivação principal é o aprisionamento de H para realizar espectroscopia de alta resolução e então comparar com a espectroscopia de antihidrogênio que está sendo produzido na colaboração ALPHA no CERN. Para isso a idéia de adicionar Li na armadilha é ter um eficiente resfriamento por evaporação - pela adição de Lítio que tem uma enorme seção de choque com hidrogênio - e também verificar a possibilidade de um pré-resfriamento a laser do Li, que uma vez resfriado pode resfriar solidariamente o H via colisões.

## 3.2 Descrição Quântica e Estrutura Fina ${}^7\text{Li}$

Vamos começar esta seção discutindo um efeito extremamente importante que ocorre quando um átomo está sujeito a um campo magnético, o efeito Zeeman. Este efeito é o deslocamento que pode ocorrer dos níveis de energia de átomos (ou moléculas) na presença de um campo magnético externo. Por meio deste efeito, alguns estados de energia degenerados podem ser desdobrados em uma certa quantidade de estados não degenerados. Os estados cuja energia cresce com o campo magnético aplicado são os chamados *low-field seeking* e como vimos são os únicos estados aprisionáveis. Os estados não aprisionáveis, chamados de *high-field seeking*, terão uma energia que decresce com o campo.

O Hamiltoniano Zeeman de um átomo com momento angular de spin  $\vec{S}$ , momento angular orbital  $\vec{L}$  e spin nuclear nulo, submetido a um campo magnético  $\vec{B}$ , tem a seguinte forma [52]:

$$H = g_J \mu_B \vec{J} \cdot \vec{B}, \quad (3.1)$$

onde  $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$  é o momento angular eletrônico total,  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $g_J$  é o fator de Landé, dado por:

$$g_J = g_L \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)} + g_S \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (3.2)$$

sendo S, L e J os números quânticos associados ao momento angular de spin, momento angular orbital e momento angular eletrônico total, respectivamente. No limite de baixos campos, os momentos angulares S e L podem ser acoplados, resultando no momento angular total J (caracterizado pelo número quântico J). Cada

valor de  $J$  tem  $(2J + 1)$  projeções ( $m_J = -J, -J + 1, \dots, +J$ ) no eixo de quantização definido pela direção de  $\vec{B}$ . Os autoestados de energia na base  $|J, m_J\rangle$  são dados por:

$$E = m_J g_J \mu_B B \quad (3.3)$$

No limite de campos altos, os bons números quânticos passam a ser as projeções  $m_S$  e  $m_L$  no eixo de quantização dos momentos angulares  $S$  e  $L$ , respectivamente. Os números quânticos de spin  $m_S$  e magnético  $m_L$  podem assumir  $(2S + 1)$  e  $(2L + 1)$  valores, respectivamente. Os autovalores do Hamiltoniano 3.1 na base  $|m_L, m_S\rangle$  serão:

$$E = m_S g_S \mu_B B + m_L g_L \mu_B B \quad (3.4)$$

Uma análise semelhante, porém um pouco mais complexa pode ser feita para um átomo com spin nuclear  $\vec{I}$ . Neste caso, o átomo pode apresentar uma estrutura hiperfina, sendo seu momento angular total representado por  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$ . Uma descrição geral mais detalhada deste caso pode ser encontrada na referência [53]. Devemos observar que em todos os casos a energia de interação entre o átomo e o campo magnético depende do estado em que o átomo se encontra. Podemos portanto dizer que o potencial de uma armadilha terá diferentes profundidades para diferentes estados de uma mesma espécie atômica.

Como vamos trabalhar com o átomo de Lítio nesta dissertação, aqui vamos calcular a estrutura fina para este átomo composto por três prótons e três elétrons. Na presença de um campo magnético, o estado fundamental desse átomo é influenciado pela interação hiperfina (entre os momentos magnéticos do próton e do elétron) e pela interação Zeeman (dos momentos magnéticos do próton e do elétron com o campo magnético). Aqui, por questão de simplicidade vamos desprezar os efeitos hiperfinos para o nível P. A matriz do Hamiltoniano total que é dado pela soma do Hamiltoniano de acoplamento spin-órbita com o Hamiltoniano Zeeman [54] na base  $|m_s, m_l\rangle$ , dada por  $\{|m_s = 1/2, m_l = -1\rangle, |m_s = -1/2, m_l = 0\rangle, |m_s = 1/2, m_l = 0\rangle, |m_s = -1/2, m_l = 1\rangle, |m_s = 1/2, m_l = 1\rangle, |m_s = -1/2, m_l = -1\rangle\}$  é escrita como:



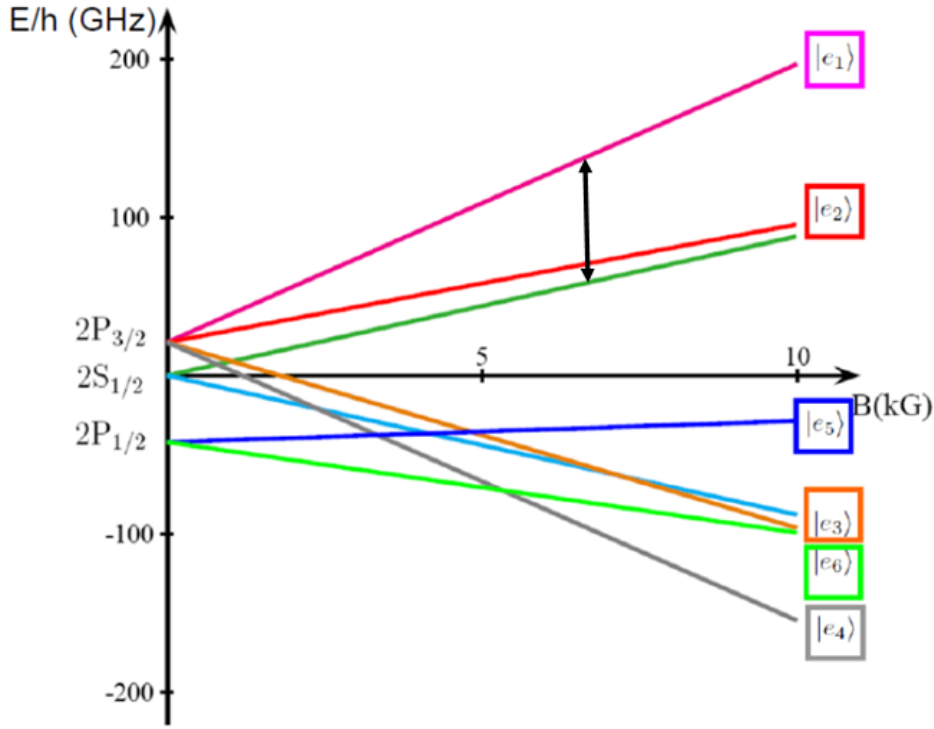


Fig. 3.1: Estrutura Fina  ${}^7\text{Li}$  com nível S deslocado em  $\sim 670$  nm.

$$\begin{pmatrix} (-1 + \frac{g_s}{2})\mu_B B - \frac{\xi}{2} & \frac{\xi}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\xi}{\sqrt{2}} & -\frac{g_s}{2}\mu_B B & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{g_s}{2}\mu_B B & \frac{\xi}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\xi}{\sqrt{2}} & (1 - \frac{g_s}{2})\mu_B B - \frac{\xi}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1 + \frac{g_s}{2})\mu_B B + \frac{\xi}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (-1 - \frac{g_s}{2})\mu_B B + \frac{\xi}{2} \end{pmatrix}$$

onde a grandeza  $g_s$  é denominada fator g (giromagnético) de spin e vale 2.00232(2) [55] e  $\xi$  é a divisão na estrutura fina do lítio do nível 2P e vale 6702.16 MHz [56].

Diagonalizando a matriz do Hamiltoniano que é bloco-diagonal é possível escrever os autoestados com as suas respectivas amplitudes de probabilidade e obter o gráfico da estrutura fina do  ${}^7\text{Li}$ . Note que na figura 3.1 o nível S está deslocado em  $\sim 670$  nm para aparecer no mesmo gráfico.

Nós queremos excitar a transição  $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$  em  $\lambda = 670.96$  nm com  $\gamma = 37$  MHz. Aqui vamos escrever os vetores de estado encontrados a partir da diagonalização do Hamiltoniano. Devemos notar que temos dois estados puros no

nível  $2P_{3/2}$  e que os demais estados do nível  $2P_{3/2}$  e  $2P_{1/2}$  são estados de mistura com diferentes componentes de  $m_s$  e  $m_l$ . Para nível de identificação com o código em C++ no apêndice A, iremos chamar os autoestados em função do campo magnético de  $e_1$ ,  $e_2$ ,  $e_3$ ,  $e_4$ ,  $e_5$  e  $e_6$ .

$$|e_1\rangle : \left| \frac{1}{2}, 1 \right\rangle \quad (3.5)$$

$$|e_2\rangle : \frac{(2B(-1+g_s)\mu_B + \xi + \sqrt{4B^2(-1+g_s)^2\mu_B^2 + 4B(-1+g_s)\mu_B\xi + 9\xi^2})}{2\sqrt{2}\xi} \left| \frac{1}{2}, 0 \right\rangle + \left| \frac{-1}{2}, 1 \right\rangle \quad (3.6)$$

$$|e_3\rangle : \frac{(2B(-1+g_s)\mu_B - \xi + \sqrt{4B^2(-1+g_s)^2\mu_B^2 - 4B(-1+g_s)\mu_B\xi + 9\xi^2})}{2\sqrt{2}\xi} \left| \frac{1}{2}, -1 \right\rangle + \left| \frac{-1}{2}, 0 \right\rangle \quad (3.7)$$

$$|e_4\rangle : \left| \frac{-1}{2}, 1 \right\rangle \quad (3.8)$$

$$|e_5\rangle : \frac{(2B(-1+g_s)\mu_B + \xi - \sqrt{4B^2(-1+g_s)^2\mu_B^2 + 4B(-1+g_s)\mu_B\xi + 9\xi^2})}{2\sqrt{2}\xi} \left| \frac{1}{2}, 0 \right\rangle + \left| \frac{-1}{2}, 1 \right\rangle \quad (3.9)$$

$$|e_6\rangle : \frac{(-2B(-1+g_s)\mu_B + \xi + \sqrt{4B^2(-1+g_s)^2\mu_B^2 - 4B(-1+g_s)\mu_B\xi + 9\xi^2})}{2\sqrt{2}\xi} \left| \frac{1}{2}, -1 \right\rangle + \left| \frac{-1}{2}, 0 \right\rangle \quad (3.10)$$

Como a transição realizada pelo fóton é uma transição de dipolo elétrico, e esta por sua vez não depende do spin, isso significa que a componente do spin do elétron ( $m_s$ ) não muda pelos fenômenos de emissão estimulada ou absorção. Isso quer dizer que apenas é possível excitar um fóton do estado  $2S_{1/2}$  representado pelo vetor de estado  $|\frac{1}{2}, 0\rangle$  para um outro estado com  $m_s = 1/2$ . Porém como este estado é um estado com  $m_s$  e  $m_l$  diferentes, um estado de mistura devido ao acoplamento causado pelo campo magnético, no momento em que esse fóton é emitido e decai, como o sistema evolui com o tempo, é possível sair de um estado com  $m_s = 1/2$  e dependendo da probabilidade ir para um outro estado com  $m_s = -1/2$ .

Da mecânica quântica temos que seja o sistema representado por um determinado estado qualquer representado aqui por  $|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$  a probabilidade para  $|a'\rangle$  estando o ket  $|\alpha\rangle$  normalizado é dada por [54]:

$$P(a') = |\langle a' | \alpha \rangle|^2 \quad (3.11)$$

Com essa equação podemos calcular as probabilidades para cada um dos estados descritos acima como função do campo magnético.

### 3.3 Simulação de Monte Carlo para o Resfriamento a Laser de Li e Resultados

O nome “Monte Carlo” foi popularizado pelos físicos Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John Von Neumann, e Nicholas Metropolis, entre outros, o nome é uma referência ao Cassino em Mônaco. O uso da aleatoriedade e a natureza dos processos repetitivos são análogos às atividades realizadas em um cassino.

Nós simulamos o movimento de átomos de lítio dentro de uma armadilha magnética com as mesmas características da existente no Laboratório de Super Espectroscopia do Rio de Janeiro - LASER, do Instituto de Física da UFRJ. A profundidade da armadilha é de 1 T aproximadamente e o acesso óptico é apenas em um eixo e o raio da armadilha é de 5 mm. O potencial gerado pelas bobinas na configuração anti-helmholtz para o nosso sistema pode ser aproximado para a seguinte equação [57]:

$$V = |\mu|\alpha\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}, \quad (3.12)$$

onde no nosso caso  $\alpha = 200$  e caracteriza a força do campo.

Os átomos têm sua posição inicial no centro da armadilha magnética e suas velocidades são sorteadas por uma rotina geradora de números aleatórios que obedece à distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann com  $T=10$  K. Uma rotina de Runge-Kutta move a posição e a velocidade no tempo a cada incremento de tempo. Uma melhor compreensão do programa pode ser obtida observando o fluxograma no apêndice A.

Se o átomo for aprisionado, isto é, se sua energia total for menor que a profundidade da armadilha de aproximadamente 0.6 K, verifica-se se ele está interagindo com o laser, caso esteja então calcula-se a probabilidade dada pela equação 2.5, onde aqui consideramos a frequência devido ao desvio dos níveis pelo campo magnético. No momento em que calculamos essa probabilidade levamos em conta também a componente da polarização do laser que está atuando no estado e os coeficientes de probabilidade mostrados nas equações 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.9 e 3.10.

Como o fóton incidente carrega apenas uma unidade de ( $\hbar$ ) de momento angular, apenas as transições com  $\Delta m = 0$  ou  $\pm 1$  são permitidas.

Os estados  $m_J$  são autoestados da interação do momento magnético com o campo externo;  $m_J$  é a projeção do momento angular ao longo do campo  $\vec{B}$ . O fóton tem momento angular  $+\hbar$  ( $\sigma_+$ ) ou  $-\hbar$  ( $\sigma_-$ ) ao longo da direção de propagação do fóton. A direção de propagação do fóton escolhida foi ao longo de  $\hat{z}$  (que na simulação é sempre o eixo ao longo da armadilha magnética), com polarização em  $\hat{x}$ .

A probabilidade de um fóton  $\sigma_+$  ter a projeção adequada ao longo do eixo do campo para conduzir à uma transição com  $\Delta m_J = +1$ , pelo qual a componente paralela ao campo é responsável, é dada pela equação 3.13, mas somente se a projeção de  $\hat{z}$  ao longo de  $\vec{B}$  é positiva. Da mesma forma, a probabilidade de um fóton  $\sigma_+$  ter a projeção adequada para conduzir à uma transição com  $m_J = -1$  também é dada pela equação 3.13, mas somente se a projeção de  $\hat{z}$  ao longo de  $\vec{B}$  é negativa. O mesmo se aplica, com o sinal trocado, para fótons  $\sigma_-$ . Já para conduzir a uma transição com  $\Delta m = 0$  pelo qual a componente perpendicular ao campo é responsável, chamada de polarização  $\pi$ , a probabilidade de um fóton ter a projeção adequada é dada pela equação 3.14.

$$Probabilidade \sigma_{\pm} = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}} \right)^2 \quad (3.13)$$

$$Probabilidade \pi = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{y^2 + 4z^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}} \right)^2 \quad (3.14)$$

A probabilidade é calculada separadamente para cada um dos estados possíveis para excitar o átomo. O estado  $e_4$  (equação 3.8) possui  $m_s = -1/2$  e por isso não pode ser acessado, logo foi desprezado na implementação do código. O estado  $e_6$  (equação 3.10) está muito longe da ressonância e por esse motivo também foi desprezado. Em cada estado é calculada a probabilidade de absorver um fóton do laser com sentido contrário ao movimento do átomo e do laser no mesmo sentido. Por exemplo, a probabilidade total é:  $P = \sum_{i=1}^6 p_i$ , onde o índice  $i$  representa os seis estados possíveis,  $p_i = p_{i+} + p_{i-}$  onde  $p_{i\pm}$  são as probabilidades em relação ao sentido do laser positivo e negativo. Caso a probabilidade total seja maior que o número aleatório sorteado pelo programa, o átomo irá absorver um fóton do laser, mas é preciso saber para qual estado ele será excitado e de qual sentido do laser que ele absorveu. O código cuida bem desses detalhes e uma vez escolhido o estado e o laser, é

preciso saber em que estado ele vai decair ao emitir o fóton. Como vimos estados com  $m_s = -1/2$  são átomos que procuram máximos de campo, e dessa forma escapam da armadilha. Assim se o átomo decair em um desses estados, devemos contá-lo como átomo perdido. O fóton emitido terá direção aleatória, logo para corrigir a velocidade do átomo após esses eventos adicionamos o módulo do momento ganho, e multiplicamos esse módulo por um vetor sorteado que é isotrópico no espaço. A cada passo re-calculamos a energia do átomo e armazenamos em um contador que no fim do programa irá nos dar o valor da energia média dos átomos restantes na armadilha. E então podemos ter informação direta sobre a temperatura já que a energia média total na armadilha é  $9/2k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura.

De acordo com a “hipótese de ergodicidade”, originalmente formulada por Boltzmann [58], quando uma certa energia está presente em um sistema fechado, então todos os estados que podem ser acessados com esta energia serão acessados ao longo do tempo. Supondo que a nossa armadilha possui ergodicidade, após um determinado instante de tempo, chamado de tempo de ergodicidade que na simulação utilizamos como  $10^{-3}$  segundos, o vetor velocidade é redistribuído no espaço sendo multiplicado por um vetor isotrópico. Isso simula os processos de colisões entre os átomos na armadilha, uma vez que ao colidir a direção e o sentido do vetor velocidade do átomo podem ser alterados.

Para que pudéssemos testar todo o código implementado e confiar nos resultados futuros dessa simulação, foi implementado a simulação com as características anteriormente descritas, buscando reproduzir a temperatura Doppler prevista pela teoria sem o efeito Zeeman. O resultado foi alcançado utilizando o parâmetro de saturação  $s_0 = 2$  e a frequência do laser variando de  $-200\gamma$  a  $-\gamma/2$ . O resultado pode ser visualizado nos gráficos 3.2 e 3.3.

Certos de que o código estava implementado corretamente, realizamos a implementação dos níveis Zeeman para o átomo de Lítio. A grande dificuldade de manter o átomo em ressonância com o laser, foi rapidamente percebida. Os seguintes parâmetros foram variados: saturação, raio e frequência do laser, dessintonia (quanto o laser está fora da ressonância) e tempos envolvidos no processo de resfriamento. Na figura 3.4 é possível visualizar facilmente a dificuldade à qual estamos nos referindo, pois nesse gráfico temos variações de praticamente  $2000\gamma$  do estado  $|\frac{1}{2}, 0\rangle$  para o estado  $|\frac{1}{2}, 1\rangle$ .

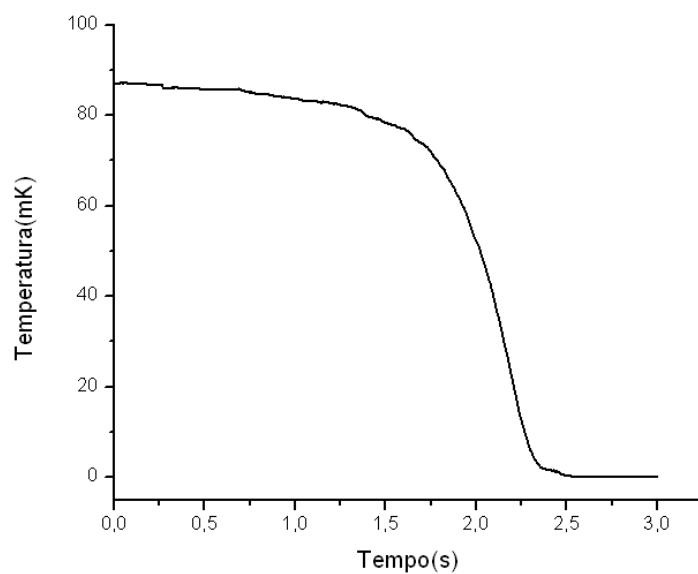


Fig. 3.2: O gráfico apresenta a curva de resfriamento a laser, onde atingimos para 1000 átomos a temperatura média de  $142\mu K$  a temperatura doppler para o átomo de lítio.

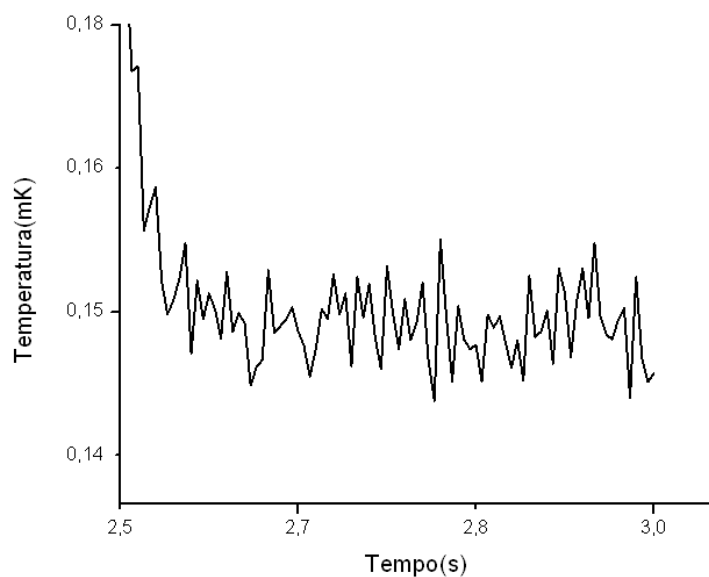


Fig. 3.3: Uma modificação na escala, melhora a visualização da temperatura doppler de  $142\mu K$  em alguns pontos entre 2,5 e 3 segundos.

Com as mais diversas combinações e exaustivas variações desses parâmetros, não foi possível observar um resfriamento significativo dos átomos com o laser no

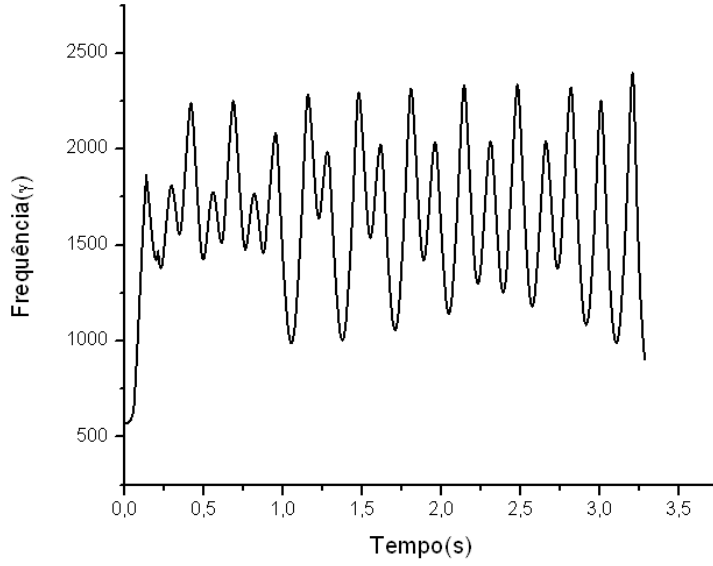


Fig. 3.4: Variação da frequência de um átomo devido ao campo magnético ao longo do tempo.

centro da armadilha. Foi nesse ponto que decidimos variar a posição do laser e não apenas deixá-lo fixo no centro. A idéia inicial foi tentar “acompanhar” os átomos com maior energia cinética que se encontram nas bordas da armadilha, e ir resfriando-os até levá-los ao centro, enquanto isso tentaríamos acompanhar sempre o átomo com o laser. Essa idéia não foi bem sucedida, pois não foi possível “acompanhar” os átomos dessa forma. O melhor resultado obtido é mostrado no gráfico 3.5 onde atingiu-se uma temperatura de 30 mK, porém com uma amostra restante de 14,8% no término de dois segundos. Nesse caso, nós fixamos o laser em uma posição a 3 mm do centro da armadilha (lembrando que o raio da armadilha é de 5 mm), ajustamos o parametro de saturação  $s_0$  como 10, e a frequência do laser fixamos em  $10\gamma = 10 \times 37.2\text{MHz}$ , esse valor foi fixado porque verificou-se que variar a frequência no tempo nesse caso não ajudava devido a enorme variação da dessintonia. Nessa região da armadilha a dessintonia devido ao efeito Zeeman é menor, mas também é menor o efeito Doppler do átomo, fazendo com que o resfriamento da amostra não seja muito grande. Apesar disso foi possível encontrar essa frequência do laser que, na maior parte do tempo foi ressonante com os átomos e observar o resfriamento.

Um resfriamento dessa ordem já seria um ganho para o experimento, já que implementaríamos o resfriamento evaporativo na sequência do resfriamento a laser. O grande problema é que para o resfriamento evaporativo uma amostra de 15%

dos átomos iniciais tende a ser muito pequena pois nesse processo os átomos mais energéticos são retirados da armadilha diminuindo ainda mais a amostra restante.

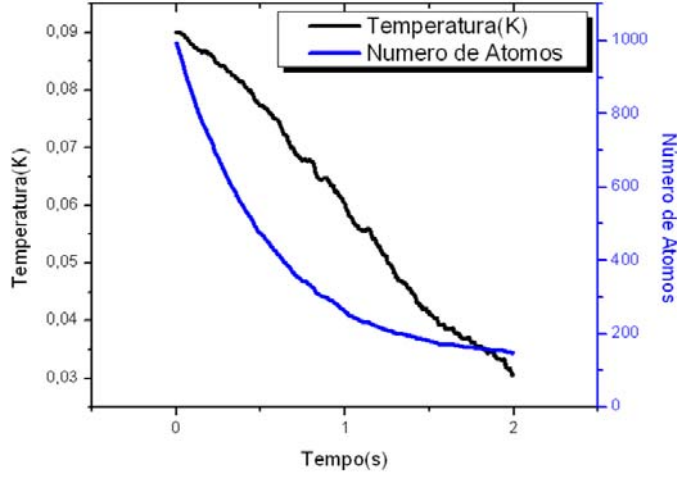


Fig. 3.5: Gráfico do resfriamento a laser de 1000 átomos de Lítio, o laser foi deslocado de 3mm do centro da armadilha, o parametro de saturação  $s_0$  foi ajustado como 10, e a frequência do laser ajustada em  $10\gamma = 10 \times 37.2\text{MHz}$ , o resultado obtido foi uma temperatura de 30 mK com uma amostra restante de 14,8% dos átomos.

Nos perguntamos se esse resfriamento de 30 mK obtido, não poderia ser apenas resultante da amostra ter termalizado a uma temperatura mais baixa após 85% dos átomos, podendo ter a maior parte deles energia maior do que a média, terem saído da armadilha, e não resultante de um resfriamento a laser efetivo. Para responder a essa pergunta plotamos os gráficos 3.6 e 3.7. Podemos visualizar no gráfico 3.6 a distribuição da temperatura média inicial da amostra aprisionada a 88,7 mK, deste histograma observamos que 15% dos átomos menos energéticos estão abaixo de 0.2 K correspondendo a uma temperatura média de 26,4 mK. A partir do gráfico 3.7, obtido com os mesmos parâmetros utilizados no gráfico 3.5, observamos que apesar de ambos os processos levarem praticamente a mesma temperatura, como o que se procura é o maior número de átomos com menor temperatura, no decorrer do processo é possível verificar que o resfriamento a laser é menos eficiente do que retirar os átomos mais energéticos da armadilha. Dessa forma, podemos observar que nesse caso não é realmente viável utilizar o resfriamento laser em uma armadilha nessa configuração, já que somente com um resfriamento evaporativo eficiente a amostra pode resfriar a temperaturas muito próximas de 30 mK.



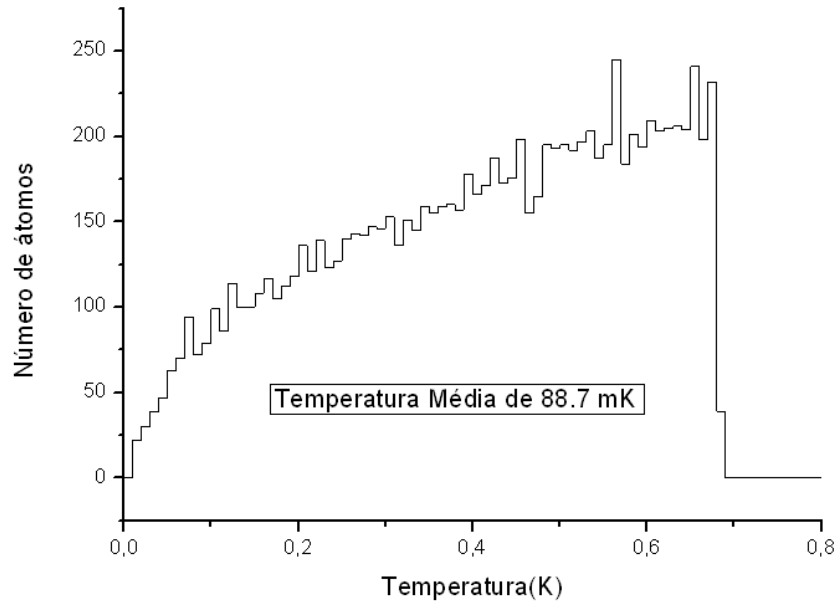


Fig. 3.6: Distribuição da temperatura inicial de uma amostra aprisionada de  $10^4$  átomos, temperatura média de 88,7 mK.

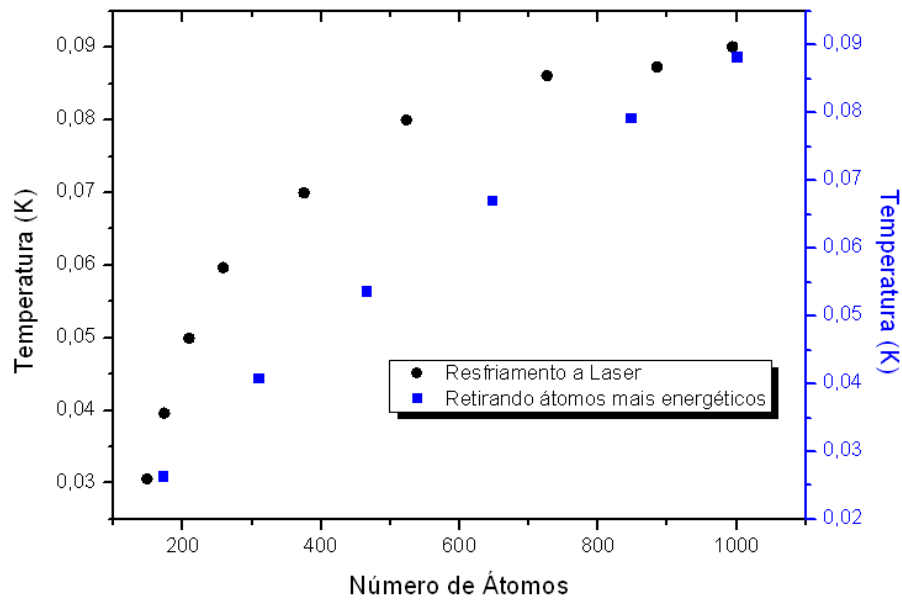


Fig. 3.7: Os pontos em forma de círculo representam a temperatura em função do número de átomos para uma amostra resfriada a laser e os pontos em forma de quadrado representam um histograma da temperatura em função do número de átomos sendo retirados da armadilha.

# Capítulo 4

## Laser de Semicondutor

O objetivo deste capítulo é apresentar brevemente uma revisão sobre lasers de diodo bem como o funcionamento e as principais características destes tipos de lasers. Uma abordagem menos sucinta pode ser encontrada nas referências [59], [60] e [61].

### 4.1 Introdução Histórica

A origem dos lasers de diodo data do período de 1961, quando surgiram várias considerações sobre a possibilidade de usar semicondutores como materiais lasers. Contudo uma razoável compreensão das exigências para a existência de lasers de semicondutores só foi possível após Bernand e Duraffourg [62] em 1961, estabelecerem condições necessárias para emissão laser nestes materiais. Segundo Casey e Panish [63] teria sido Von Neuman, em anotações não publicadas, o primeiro a sugerir a possibilidade de amplificação da luz pelo uso de emissão estimulada em um semicondutor bombeado por uma corrente de injeção através de uma junção p-n. Em 1962, vários grupos noticiaram a ação laser em semicondutores, com Hall [64] tendo observado definitivamente emissão de luz laser de uma junção p-n de GaAs diretamente polarizada a 77 K.

A maioria dos lasers de semicondutores consistia de um único tipo de semicondutor ( $\text{GaAs}$  ou  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ ), por isso chamados de lasers de homoestrutura. Os primeiros lasers eram obtidos simplesmente cortando-se pequenos pedaços, chips, de semicondutores e polindo duas faces paralelas (comportando-se assim como espelhos). Assim duas condições essenciais para operação laser já eram obtidas diretamente: um meio de ganho e realimentação positiva. Em lasers convencionais o meio de ganho

pode ser um gás, um cristal ou um corante, que ao serem colocados em uma cavidade óptica garantem a realimentação positiva. O plano de junção p-n era perpendicular ao das faces polidas, o que tornava o semicondutor uma pequena cavidade Fabry-Perot. Porém tais lasers possuíam uma densidade de corrente de limiar muito alta à temperatura ambiente, o que impedia seu uso contínuo. Era necessário resfriar o laser a temperaturas muito baixas, da ordem de 77 K, o que fez seu uso diminuir a partir de 1965.

Já nesta época aparece uma nova classe de laser de semicondutores, os lasers de heteroestrutura. Em 1963 Kroemer [65], Alferov e Kasarinov [66], propuseram esta nova classe de laser de semicondutores que consistia em um semicondutor entre dois outros semicondutores diferentes, numa espécie de “sanduíche”, com gaps de energia maior. A junção de dois semicondutores diferentes (heterojunção) origina uma barreira de potencial que confina os elétrons injetados nessa região. O fato de um semicondutor possuir um gap de energia maior implica em um índice de refração menor, fato este que obriga um confinamento da luz na região em que ocorre emissão laser. Com isso mostrou-se ser possível operar laser de semicondutores à temperatura ambiente. Os primeiros sucessos em operação com laser de semicondutor à temperatura ambiente surgiram em 1969 com laser do tipo GaAs/AlGaAs [67, 68]. Estes primeiros lasers foram chamados de heteroestrutura única, pois somente um lado da região ativa ficava em contato com uma camada de *band gap* maior. Lasers com estruturas mais complexas surgiram em 1970, os chamados lasers de heteroestrutura dupla. Nestes lasers a região ativa têm duas faces em contato com camadas de maior gap [66, 69]. Novos lasers foram desenvolvidos utilizando-se novas técnicas de deposição de materiais semicondutores como MBE (*molecular beam epitaxy*), CBE (*chemical beam epitaxy*) e MO-CVD (*metal organic chemical vapor deposition*) [70]. Um exemplo de uma nova classe de laser surgida foram os lasers de poços quânticos (*Quantum Well Laser*) [71].

## 4.2 Características e Operação

A luz emitida por um laser de diodo surge da recombinação de elétrons com buracos numa junção p-n quando uma corrente flui através do diodo. Um elétron da banda de condução da camada n recombina-se com um buraco da camada p, emitindo energia na forma de radiação eletromagnética. Se a corrente for grande o suficiente e

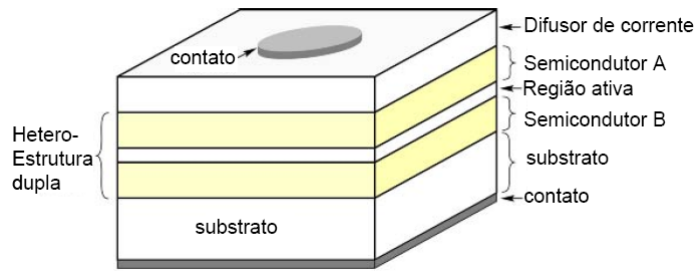


Fig. 4.1: Ilustração de um laser de heteroestrutura dupla consistindo de uma região ativa e dois lados confinantes compostos por semicondutores distintos ou com diferentes dopagens.

a região de recombinação for pequena, o processo radiativo prevalecerá, mas outros processos podem ser observados e causam perdas no sistema, como emissão de fônons. Os elétrons se dirigem até a junção através da corrente de injeção no diodo. Outras formas de excitação incluem bombeamento óptico, por exemplo.

Para a fabricação de um laser de diodo é necessário obtermos duas condições simultâneas: um meio ativo para amplificar a radiação eletromagnética que se propaga em seu interior e um mecanismo de retroalimentação óptica para confinar a radiação. A cavidade óptica de um laser de diodo é obtida polindo-se duas extremidades paralelas do diodo, que atuarão como espelhos da cavidade. As sucessivas reflexões nestes espelhos aumentam a intensidade de radiação, condição necessária para a ação laser em um determinado modo da cavidade.

Os lasers de diodo distinguem-se de outros tipos de laser por várias características:

1. Reduzido tamanho, como exemplo o laser monomodo utilizado nessa dissertação de  $750\mu\text{m} \times 300\mu\text{m} \times 150\mu\text{m}$ , que permite sua incorporação em diversos instrumentos e circuitos.
2. Bombeamento via corrente elétrica com baixa potência (da ordem de dezenas de miliampéres com uma tensão de alguns volts).
3. Permite modulação da luz via corrente de injeção com taxas que podem ultrapassar 20 GHz, o que permite sua utilização em sistemas de comunicações ópticas.

4. Sua produção utiliza a mesma tecnologia empregada na indústria de semicondutores, permitindo sua produção em larga escala;
5. Alta sintonia de comprimento de onda via corrente ou temperatura. Ainda do ponto de vista da radiação emitida, os lasers de semicondutores tem as seguintes características:
  - (a) Nos lasers de diodo as transições ocorrem entre bandas contínuas de energia ;
  - (b) Devido às dimensões reduzidas da região ativa (da ordem de  $\mu\text{ m}$ ) os lasers de diodo apresentam uma divergência do feixe laser maior do que as tipicamente observadas em outros lasers;
  - (c) As propriedades das junções, como band gap e índice de refração, influenciam as características espaciais e espectrais do laser de diodo;
  - (d) As altas taxas de modulações em que os lasers de diodo podem operar são influenciadas pelo curto tempo de vida dos fótons na cavidade laser;
  - (e) Nos lasers de semicondutor a população a ser invertida é formada por elétrons e buracos que se recombinam e geram um fóton cuja energia é maior que a energia do gap. Mas esta condição só é obtida quando o semicondutor apresenta gap direto, apresentando maior probabilidade para que ocorra inversão de população, porque não há mudança de momento. Já para ocorrer inversão de população via gap indireto, haveria necessidade desta ser induzida via fônons, uma vez que deverá ocorrer uma mudança de momento do fóton [72] .

### 4.3 Laser de Diodo M9 975 0300 S30

O laser de diodo usado para o desenvolvimento desta dissertação foi um laser de diodo modelo M9 975 0300 S30 da marca Axcel Photonics com comprimento de onda em 975 nm e variação de  $\pm 3$  nm. Este diodo opera em regime monomodo. Algumas características deste laser são mostradas na tabela 4.3:

Apesar de emitir em um único modo transversal e possuir grande sintonia de comprimento de onda, a largura de linha deste laser é da ordem de dezenas de GHz, tornando sua aplicação em física atômica muito restrita. Implementamos este laser

Característica	Valor
Potência CW total ( $P_0$ )	300 mW
Comprimento de onda ( $\lambda$ )	$975 \pm 3\text{nm}$
Largura de linha FWHM	0.5 nm - 183 GHz
Eficiência de conversão ( $\frac{dP}{dI}$ )	$0.9 \frac{W}{A}$
Corrente de limiar ( $I_{th}$ )	30 a 50 mA
Corrente de operação ( $I_0$ )	370 mA
Tensão de operação ( $V_0$ )	1.8 V

Tab. 4.1: Características do laser modelo M9 975 0300 S30 utilizado nessa dissertação.

em configuração de cavidade estendida, que dentre várias características, permite a redução de sua largura de linha.

## 4.4 Laser de Diodo em Cavidade Estendida

A utilização de lasers de diodo em cavidades estendidas, que a partir desse ponto passaremos a chamar de LDCE, é muito difundida, principalmente para aplicação em espectroscopia de transições atômicas, devido principalmente ao fato da considerável redução da largura de linha que estas cavidades estendidas impõem ao sistema laser. Neste capítulo mostraremos as diversas características do laser de diodo operando nessa configuração tipo Litrow e discutiremos os resultados obtidos na caracterização deste laser.

### 4.4.1 Visão Geral sobre o LDCE

O uso de laser de diodo em cavidade estendida parte do fato de os lasers de diodo serem extremamente sensíveis à retroalimentação (*feedback*) óptica, característica que os distingue dos demais lasers. Poucos microwatts de potência reinjetada no laser de diodo já são suficientes para alterar seu espectro de emissão. Essa sensibilidade é decorrente da baixa *finesse* da cavidade intrínseca do laser. A realimentação tem grande influência sobre a potência de saída do laser e sobre o espectro de emissão, sendo possível selecionar um modo dentro do perfil de emissão espontânea e estreitar a largura de linha. Cavidades de laser de diodo geralmente têm baixa *finesse*, pois

são formadas pelas faces clivadas do semicondutor, resultando em um baixo fator de qualidade. O acoplamento de algum meio dispersivo, como uma grade de difração ou prisma, no laser de diodo já é suficiente para proporcionar um *feedback* óptico necessário para forçar a oscilação laser de um único modo selecionado pelo meio dispersor. Ou seja, cavidades estendidas são ressonadores externos que servem para aumentar o fator de qualidade  $Q$  de cavidades ópticas, no nosso caso as de lasers de semicondutor. Algumas características são esperadas ao se acoplar um laser de diodo a estes ressonadores externos:

- Redução dramática da largura de linha;
- Sintonia fina do comprimento de onda;
- Diminuição da corrente de limiar;
- Operação em um único modo longitudinal;

Diversos são os tipos de LDCE, dentre eles destacam-se dois tipos: Littman [73] e Littrow [74]. Um tipo mais recente de LDCE utiliza como meio dispersor um prisma [75], esta cavidade é usada em situações onde é necessária perda mínima de potência. Trataremos aqui apenas do caso Littrow usado ao longo desta dissertação.

#### 4.4.2 Configuração Littrow

Nesta configuração a cavidade estendida é composta simplesmente por uma grade de difração. A grade de difração é disposta de tal forma que a primeira ordem de difração é refletida diretamente de volta ao laser de diodo, como se pode observar na Fig. 4.2.

O comprimento de onda de emissão da cavidade é o selecionado pela grade de difração e retrorefletido para o diodo laser. A sintonia de modos longitudinais é feita através da rotação da grade de difração em torno de um pivô. Como a sintonia é feita girando a grade de difração, o feixe de saída sofre um pequeno desvio, o que prejudica o uso desta configuração em certos experimentos.

Seja a equação para a grade de difração:

$$\sin \alpha + \sin \beta = \frac{m\lambda}{d}, \quad (4.1)$$

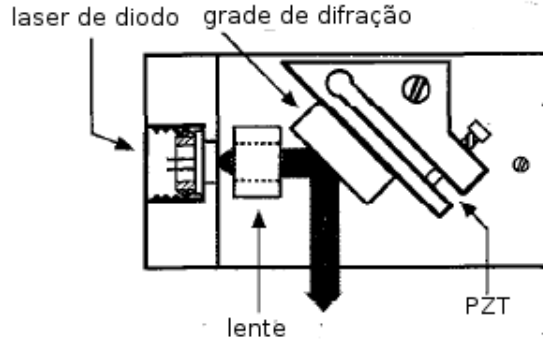


Fig. 4.2: A configuração Littrow utiliza apenas uma grade de difração que gira em torno de um pivô, retrorefletindo a primeira ordem difratada para o laser. Uma cerâmica piezoelétrica (PZT) é utilizada para girar a grade. Figura retirada da referência [76].

onde  $\alpha$  é o ângulo de incidência,  $\beta$  é o ângulo difratado,  $m$  é a ordem de difração,  $d$  é inverso do número de linhas por milímetro da grade de difração e  $\lambda$  é o comprimento de onda.

Para que a primeira ordem de difração retorne ao laser devemos ter que o ângulo de incidência deve ser igual ao ângulo difratado, isto é  $\alpha = \beta$ , e dessa forma temos que:

$$\sin \alpha = \frac{m\lambda}{2d} \quad (4.2)$$

Para uma configuração com  $\lambda = 972,0 \text{ nm}$ ,  $d = 1800 \frac{\text{linhas}}{\text{milímetro}}$ ,  $m = 1$ , temos que  $\alpha = 61^\circ$ .

O *Free Spectral Range* da cavidade semicondutora é dado por [77]:

$$\delta\nu = \frac{c}{2nl_0} \frac{1}{1 + \frac{\nu}{n} \frac{dn}{d\nu}}, \quad (4.3)$$

onde  $l_0 = 750 \text{ } \mu\text{m}$  é o comprimento do diodo laser  $n \approx 3,5$  é o índice de refração,  $\frac{dn}{d\nu}$  é a dispersão do meio ativo onde  $\left(\frac{\nu}{n} \frac{dn}{d\nu}\right) \approx 1,5$ . Com estes valores, obtemos 22 GHz. Já o *Free Spectral Range* da cavidade Littrow é dado por:

$$\Delta\nu_L = \frac{c}{2L} \quad (4.4)$$

Para  $L = 76.71 \text{ mm}$  temos que  $\Delta\nu_L = 1950 \text{ MHz}$ .



A potência que é retrorefletida para o laser depende da polarização incidente sobre a grade. O gráfico 4.3 do fabricante da grade mostra a sua eficiência para diferentes polarizações e comprimentos de onda. Nós medimos essa dependência da potência retrorefletica com a polarização para dois ângulos diferentes com diferença de aproximadamente  $10^\circ$  entre eles, o resultado é mostrado no grafico 4.4.

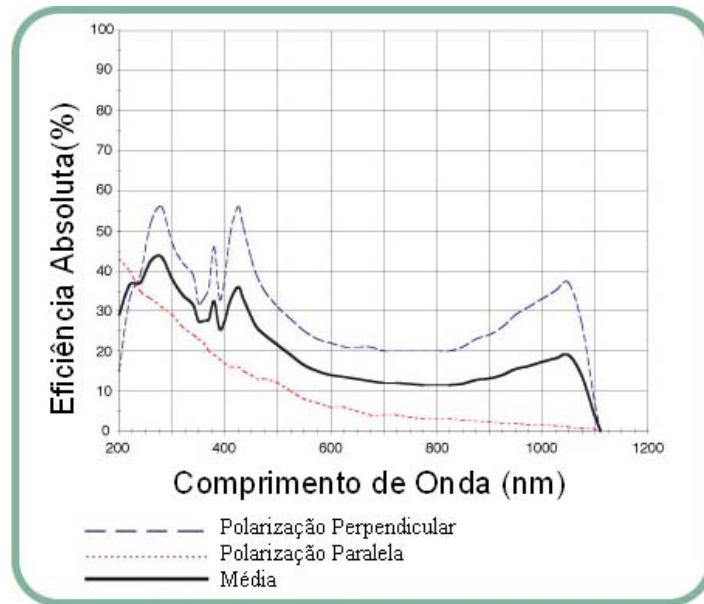


Fig. 4.3: Curvas de eficiência da grade de difração para diferentes polarizações e comprimentos de onda. Retirado de <http://www.thorlabs.com/images/TabImages/p653-5.jpg>

Se o modo de transmissão da cavidade não estiver no máximo de ganho, poderão ocorrer propagações de dois ou mais modos simultâneos podendo o laser perder a coerência em uma situação caótica [77]. O poder de tornar um laser de diodo multimodo em monomodo é ilustrado na figura 4.5. Pode-se alterar o perfil de ganho do meio semiconductor alterando, por exemplo, sua temperatura. Seus modos internos são também deslocados. Também o perfil da rede pode ser alterado mudando sua inclinação e assim pode-se selecionar outro modo longitudinal. Estas situações são corrigidas diminuindo o tamanho da cavidade ou alterando o ângulo de incidência do feixe na grade de difração. Quando a situação descrita é atingida, um ajuste apenas na excursão do PZT é suficiente para a correção deste fenômeno, buscando um modo onde sua transmissão seja máxima na curva de ganho da grade.

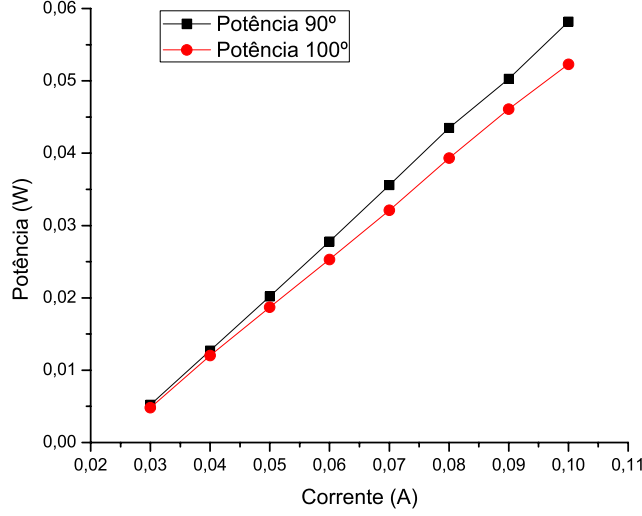


Fig. 4.4: Diferença de potência retrorefletida para o laser devido à polarização do feixe incidente.

#### 4.4.3 Largura de Linha em LDCE

Uma das mais importantes características da luz laser é sua pureza espectral e coerência. É importante conhecer os mecanismos de alargamento de linha. O alargamento de linha dos lasers monomodo se deve a dois mecanismos básicos: ruídos técnicos devido a vibrações mecânicas na cavidade e outras fontes de ruído externo e de natureza fundamental que não podem ser eliminados nos processos de estabilização. No caso de lasers semicondutores o alargamento de linha se deve principalmente, ao fato da cavidade laser ser muito pequena o que torna o *Free Spectral Range* da cavidade muito grande, alargando assim a linha.

A largura de linha para um laser é dada pela fórmula de Schawlow-Townes [59]:

$$\Delta\nu_L = \frac{\pi h\nu}{P} (\Delta\nu_{cavidade})^2 n_{sp}, \quad (4.5)$$

onde  $h\nu$  é a energia do fóton,  $P$  a potência de saída,  $\Delta\nu_{cavidade}$  é a largura de banda da cavidade laser e  $n_{sp}$  representa um fator devido à emissão espontânea. Já para lasers de semicondutores a expressão 4.5 é modificada por um parâmetro  $\alpha$  que representa um fator de alargamento de largura de linha ou de acoplamento fase/amplitude, definido como a razão entre a parte imaginária e a parte real da variação do índice de refração em relação a densidade de portadores.

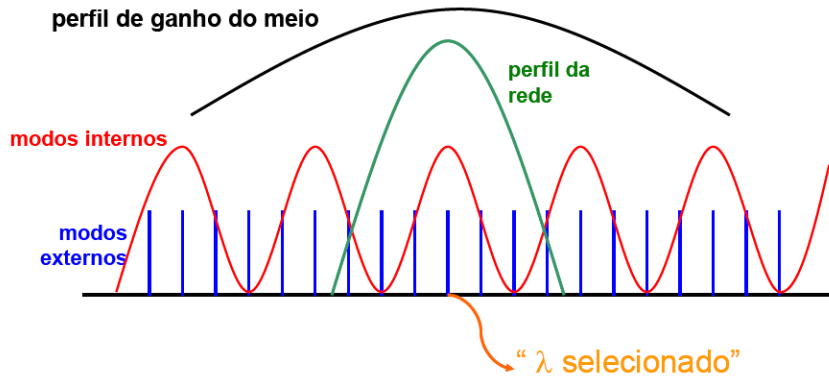


Fig. 4.5: Esquema de seletividade dos modos acessíveis em uma cavidade estendida. Na curva em negro perfil de ganho do diodo laser e em vermelho os modos de oscilação laser em um diodo solitário. Já em verde a curva representa a banda passante da grade de difração e em azul os modos da cavidade externa.

$$\Delta\nu_{diodo} = (\Delta\nu_L)^2(1 + \alpha^2) \quad (4.6)$$

A expressão 4.6 é conhecida como a fórmula de Schawlow-Townes modificada [59]. Já a largura de banda da cavidade laser de um semiconductor é dada por:

$$\Delta\nu_{cl} = (2\pi)^{-1} \frac{c}{nl} (\alpha l - \ln \sqrt{R_1 R_2}), \quad (4.7)$$

onde  $n$  é o índice de refração do semiconductor,  $l$  é o tamanho da cavidade laser e  $R_{1,2}$  são as refletividades das faces clivadas do semiconductor.

Para um laser de diodo em cavidade estendida, a largura de banda é:

$$\Delta\nu_{EC} = (2\pi)^{-1} \frac{c}{nl + L} (\alpha l - \ln \sqrt{R_1 R_g}) \quad (4.8)$$

Sendo  $L$  o tamanho da cavidade estendida e  $R_{1,g}$  são as refletividades do espelho de retroalimentação óptica e da grade respectivamente.

A redução da largura de linha do LDCE se dá principalmente pelo grande aumento no comprimento da cavidade, como fica claro pela equação 4.8, que aumenta o tempo de vida dos fótons e reduz a influência relativa a flutuações do índice de refração do meio ativo produzidas por eventos de emissão espontânea [78].

#### 4.4.4 Realimentação Óptica

Sem dúvida um fator importante em um LDCE é o controle do nível de realimentação (*feedback*) óptica. Este nível é determinado basicamente pela alteração ou não da refletividade natural das faces do laser de diodo pela presença de camadas antirefletoras AR). O parâmetro de feedback é obtido na referência [79]:

$$C = \kappa\tau\sqrt{1 + \alpha^2}, \quad (4.9)$$

onde  $\tau$  é o *round trip time*, ou seja o tempo de ida e volta do fóton  $\tau = \frac{2L_{ext}}{c}$  sendo  $L_{ext}$  o tamanho da cavidade externa) e  $\kappa$  é a razão de feedback dada por:

$$\kappa = \frac{(1 - R_m)}{\tau_L} \left( \frac{\eta_c R_{ext}}{R_m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

Sendo  $R_m$  a refletividade da face do diodo laser,  $\tau_L$  o *round trip time* da cavidade laser (tipicamente da ordem de  $10ps$ ),  $\eta_c$  é o fator de acoplamento do laser com o espelho de saída e  $R_{ext}$  a refletividade do espelho externo. Lasers sem camada AR (anti-reflexo) requerem alto nível de retorno óptico, que tipicamente deve ter valor superior ao apresentado pelas faces do diodo [80] para operarem no regime estável de realimentação forte. Já para camadas AR com baixa refletividade, ou seja, menor que 1% , consegue-se estabilizar o nível de realimentação na faixa de 5% o que implica em uma eficiência da grade de 20%.

As perdas em um LDCE estão associadas à grade de difração, sendo que o requisito principal é fornecer a realimentação necessária para operação estável do laser.

#### 4.4.5 Sintonia Ótima em Cavidade Littrow

Devemos considerar que a face do diodo e a grade de difração formam uma cavidade Fabry-Perot, sendo assim para que não ocorra mudanças de modo na cavidade, a variação do comprimento de onda devido a grade deve ser igual a variação do comprimento de onda devido ao Fabry-Perot(FP), isto é,  $d\lambda_{grade} = d\lambda_{FP}$ . Para isso devemos levar em conta a geometria do nosso design, mostrado na Fig. 4.6, sendo  $\alpha$  o ângulo de incidência do feixe na grade, desta geometria temos a seguinte relação:

$$L_{FP} = x_p + y_p \tan \alpha \quad (4.11)$$

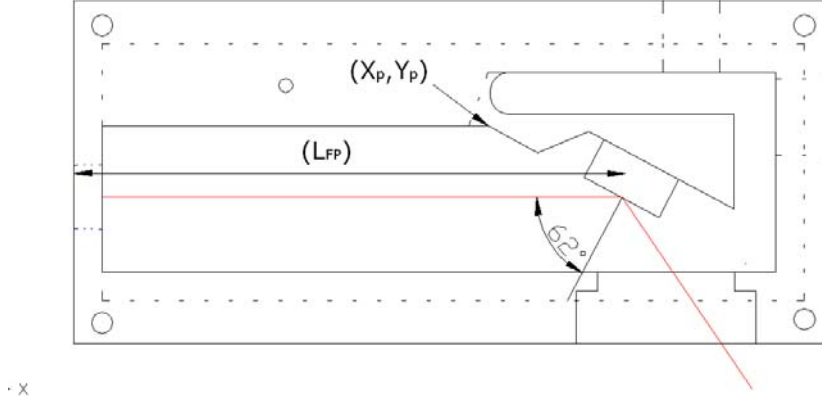


Fig. 4.6: Vista de cima do design do laser,  $x_p$  e  $y_p$  representam o ponto de pivô da grade e  $L_{FP}$  é o tamanho da cavidade fabry perot formada pelo diodo com a grade de difração.

Seja  $d\lambda_{FP} = \frac{\lambda}{L_{FP}} dL_{FP}$  temos então que:

$$d\lambda_{FP} = \frac{\lambda y_p}{(x_p \cos \alpha + y_p \sin \alpha) \cos \alpha} \quad (4.12)$$

Já para a seleção de comprimento de onda pela grade difração, derivando a expressão 4.2 em função de  $\lambda$  tem-se:

$$d\lambda_{grade} = 2d \cos \alpha \quad (4.13)$$

Igualando a expressão 4.12 com 4.13 temos uma dependência do tamanho da cavidade em função do ponto de pivô, basta fixar  $y_p$  ou  $x_p$  que obtém-se  $L_{FP}$ , no nosso design fixamos  $y_p = 10$  mm e obtivemos  $x_p = 58.67$  mm e  $L_{FP} = 76.71$  mm.

#### 4.4.6 Montagem Experimental e Resultados

Como todo laser de diodo possui uma grande divergência, é necessário a utilização de uma lente colimadora colocada próximo da janela de saída. A lente usada em nosso sistema tem uma distância focal de 4.51 mm, que é rosqueada na peça de latão.

Este laser que utilizamos emite em  $\lambda = 975$  nm, porém o intuito de se trabalhar com este laser é fazer um duplo dobramento de frequência e utilizá-lo em  $\lambda = 243$  nm para acessar a transição 1S - 2S do hidrogênio, de forma que devemos ser capazes de sintonizá-lo em  $\lambda = 972$  nm. Todo o laser foi montado sobre um controlador de

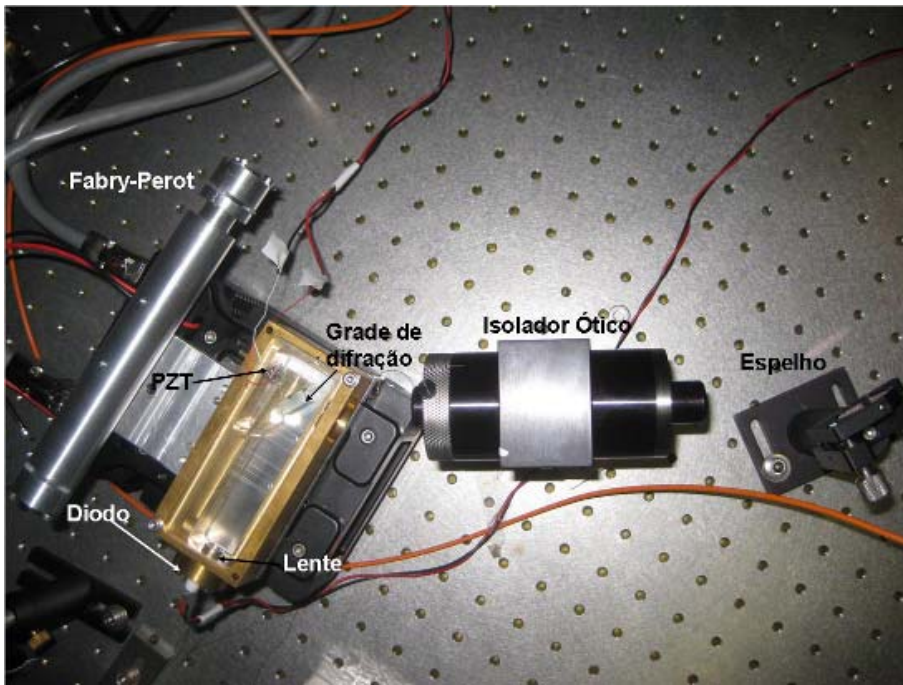


Fig. 4.7: Foto da montagem experimental da cavidade Littrow desenvolvida. Esta montagem é protegida com tampas de acrílico, que reduzem poeira, ruídos acústicos e evitam correntes de ar na cavidade. O isolador óptico na montagem é usado para evitar realimentação óptica vinda de fora da cavidade estendida.

temperatura e corrente comercial. Acreditamos que devido à grande massa térmica da peça de latão, o laser não foi sensível a pequenas mudanças de temperatura. Toda a montagem é fechada com tampas de acrílico que evita ruídos acústicos, poeira e corrente de ar na cavidade Littrow (Fig. 4.7). Posteriormente todo o latão foi banhado em prata para evitar a oxidação.

A grade de difração utilizada é do tipo holográfica de 1800 linhas/mm com eficiência de transmissão em torno de 50% neste comprimento de onda. Um parafuso micrométrico é utilizado nesse design para ajustar o comprimento de onda selecionado pela grade. Note que a grade já está próxima do ângulo de  $61^\circ$ .

A potência obtida com uma corrente de injeção de 200 mA foi de 100 mW, mais do que o necessário pois a idéia de utilização desse laser é passá-lo por um amplificador óptico antes de fazer os dobramentos de frequência.

A sintonia de comprimento de onda via *feedback* óptico da cavidade é realizado por um elemento piezoelétrico, PZT, colado em espaço apropriado atrás da grade de difração, como pode-se observar na Fig. 4.7. A sintonia máxima sem *mode hopping*

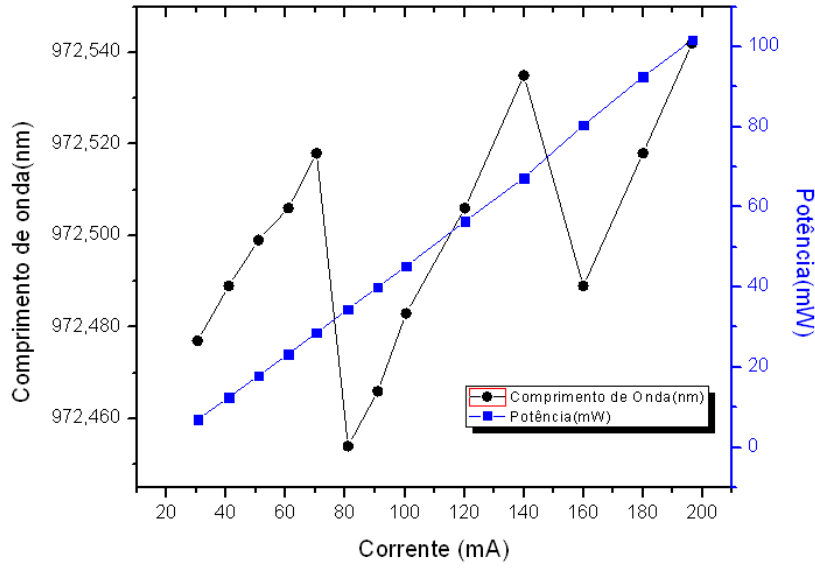


Fig. 4.8: Gráfico da variação de potência e comprimento de onda em função da corrente de injeção. As medidas do comprimento de onda foram feitas utilizando um medidor de comprimento de onda comercial com erro de  $\pm 0.001$  nm.

(sintonia continua sem mudanças de modo) obtida, com excursão só do PZT foi de 2.2 GHz (Fig. 4.9). Neste gráfico é possível observar a intensidade dos modos em ressonância na cavidade Fabry-Perot.

Medimos no osciloscópio que um *Free Spectral Range* do Fabry-Perot equivale à 20 V aplicado no PZT, e que  $50 \mu\text{s}$  equivalem a 160 mV. A largura da Lorentziana que medimos foi de aproximadamente  $42 \mu\text{s}$  (Fig. 4.10) que equivale a 133.76 mV e que em termos de frequência resulta em uma largura de 6.7 MHz. Sendo a *finesse* desse Fabry-Perot 447 temos que a sua largura de linha é aproximadamente 2.2 MHz, logo a largura de linha que predomina no osciloscópio é mesmo a largura do laser, mas não pode-se descartar a influência do Fabry-Perot nessa medida. Aproximando para o caso em que essas curvas são perfis gaussianos, é válida a seguinte relação:

$$\sigma_T^2 = \sigma_{FP}^2 + \sigma_L^2, \quad (4.14)$$

onde  $\sigma_T$  é a largura de linha total medida,  $\sigma_{FP}$  é a largura de linha do fabry perot que calculamos e  $\sigma_L$  é a largura de linha do laser. Dessa relação obtemos  $\sigma_L = (6.3 \pm 0.9)$  MHz. Essa incerteza de 0.9 MHz vem do fato de não termos precisão ao medir a refletividade do espelhos utilizados no fabry perot, de forma que não

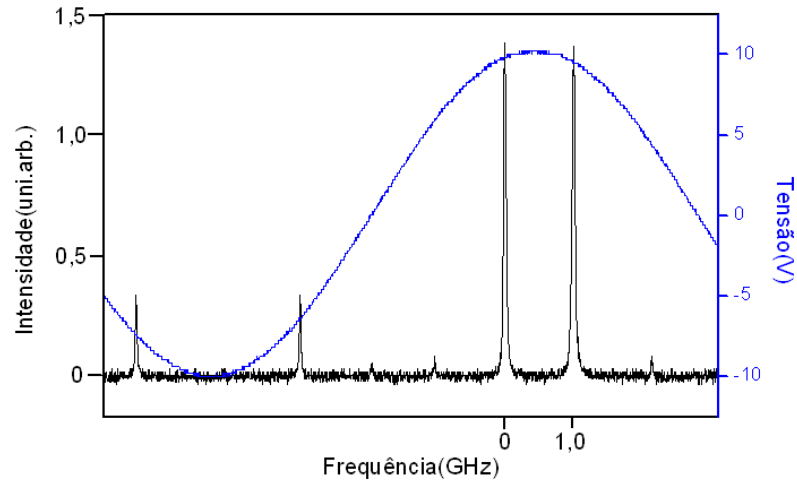


Fig. 4.9: Modos do laser analisados em um Fabry-Perot com Free Spectral Range de 1.0 GHz.

podemos ser precisos quanto à sua *finesse* e conseqüentemente quanto a sua largura de linha.

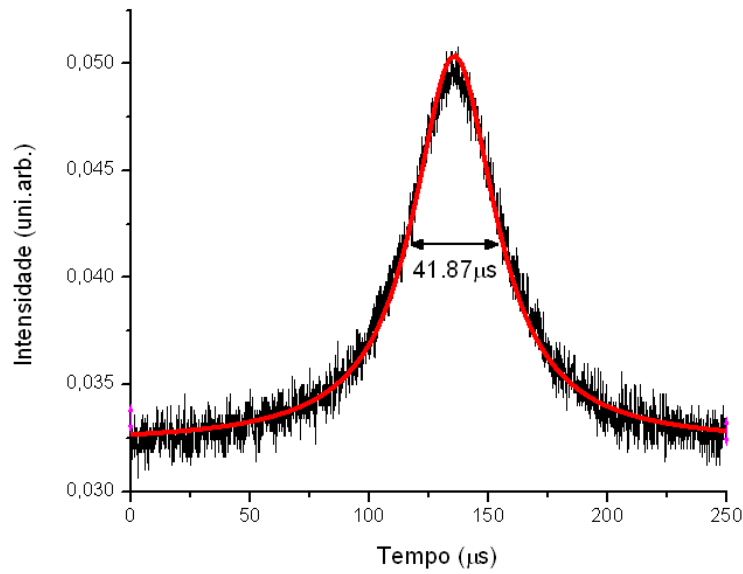


Fig. 4.10: Largura total medida no osciloscópio de  $41.87 \mu s$  que equivalem à 6.7 MHz

Como a intenção é utilizar este laser para Hidrogênio que tem uma largura de



linha em 243 nm de  $\approx 0.7$  Hz, é preciso ainda realizar um trabalho de redução da largura de linha antes de realizar os dobramentos de frequência.

Essa redução pode ser obtida realizando o travamento da frequência do laser com uma cavidade externa, um Fabry-Perot externo menor, com temperatura controlada e melhor isolado de ruídos. Esse Fabry-Perot pode ser construído com um material de baixo coeficiente de expansão térmica (*ULE* - *ultra low expansion coefficient glass*, ou *ZeroDur*), com espelhos contactados opticamente (mera atração de van de Waals entre superfícies ultra polidas) e dentro de uma câmara em alto vácuo. Para obter um bom sinal de erro para travar o laser à cavidade, pode-se utilizar uma técnica bastante sensível de espectroscopia por modulação de fase, chamado “*Pound-Drever-Hall*” [81].

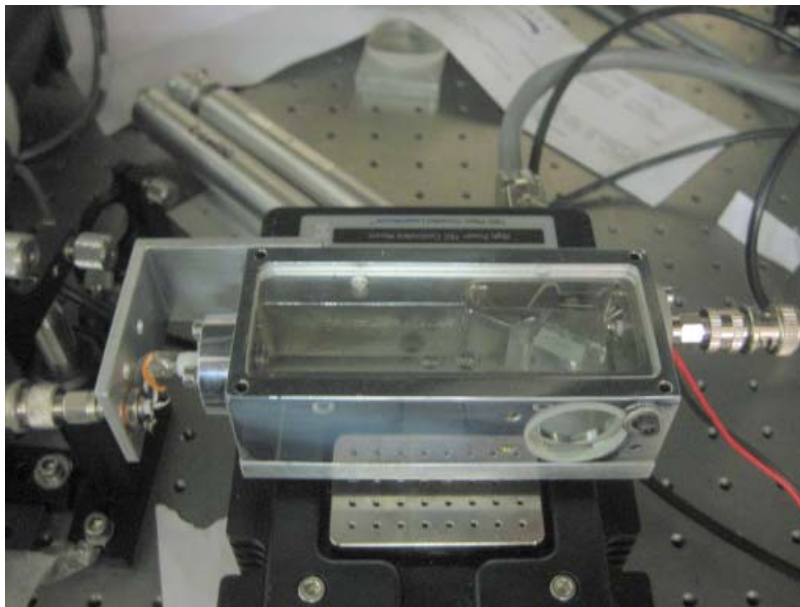


Fig. 4.11: Imagem final do laser com o banho de prata para evitar a oxidação e os conectores para o PZT e para o diodo. Não foram observadas mudanças no comportamento do laser quanto a variação de temperatura, corrente ou comprimento de onda após o banho de prata.

# Capítulo 5

## Conclusões

Tendo em vista a grande dificuldade que foi observada para encontrar uma região onde seria possível realizar o resfriamento e então ajustar os parâmetros corretamente, a simulação computacional se mostra mais uma vez uma ferramenta muito importante para os físicos experimentais, pois direciona o trabalho e ajusta uma série de parâmetros e evita como nesse caso que muito tempo de trabalho seja empregado em uma idéia com poucas possibilidades de sucesso, o trabalho computacional serviu para o grupo do laboratório LASER do Instituto de Física da UFRJ, já partir para outras idéias e possibilidades, uma vez que o resfriamento a laser do Lítio em uma armadilha com as características da existente não se mostra viável. Variações do *software* simples de serem implementadas se mostram muito interessantes para o grupo, pois podemos ver previamente o espectro do Li que esperamos medir brevemente, apenas descartando no código implementado os processos de emissão e fazendo um histograma dos eventos de absorção em função da frequência.

Foi apresentado e construído um sistema compacto de geração de radiação laser no infravermelho, estabilizada em frequência. Essa fonte poderá ser utilizada para estudar a transição 1S-2S do hidrogênio fazendo um duplo dobramento de frequência. Potências em torno de 100 mW para o comprimento de onda de 972 nm foi obtida mas do que o suficiente para o projeto à que esse laser se propõe, uma vez que é previsto a utilização de um amplificador ótico do qual é necessária apenas a potência de 30 mW de entrada.

A largura de linha que medimos foi de  $\sigma_L = (6.3 \pm 0.9) MHz$ , muito longe do que precisamos para o hidrogênio, logo o passo seguinte é a implementação de uma outra cavidade acoplada ao laser para realizar a estabilização na largura de linha

natural do hidrogênio.

A variação que conseguimos variando somente o *piezoelétrico* foi de 2.2 GHz sem saltos de modo, um valor relativamente pequeno e que gostaríamos que fosse maior para outras aplicações, mas que no entanto é suficiente para realizar a espectroscopia de hidrogênio e antihidrogênio. Artigos discutem que laser com cavidades menores tem uma maior estabilidade [82], para que pudéssemos comparar e de repente obter variações maiores de frequência, um outro design seguindo os moldes do que foi apresentado mas com uma cavidade menor foi projetado e está em fase de finalização.

# Bibliografia

- [1] T. W. Hansch, *Nobel Lecture: Passion for precision*, Rev. Mod. Phys. **78**, 1297, 2006.
- [2] C. L. Cesar, D. Kleppner, *Two-photon Doppler-free spectroscopy of trapped atoms*, Phys. Rev. A **59**, 4564, 1999.
- [3] C. L. Cesar, *Zeeman effect on the 1S-2S transition in trapped hydrogen and antihydrogen*, Phys. Rev. A **64**, 023418, 2001.
- [4] Peik E., Lipphardt B., Schnatz H., Schneider T., Tamm C., Karshenboim S. G., *Limit on the Present Temporal Variation of the Fine Structure Constant*, Phys. Rev. Lett. **93**, 170801, 2004.
- [5] M. Mudrich, S. Kraft, K. Singer, R. Grimm, A. Mosk, M. Weidemuller, *Sympathetic Cooling with Two Atomic Species in an Optical Trap*, Phys. Rev. Lett. **88**, 253001, 2002.
- [6] R. Lambo, C. C. Rodegheri, D. M. Silveira, C. L. Cesar, *Spectroscopy of low-energy atoms released from a solid noble-gas matrix: Proposal for a trap-loading technique*, Phys. Rev. A, **76**, 061401, 2007.
- [7] A. L. Midgall, John V. Prodan, William D. Phillips, Thomas H. Bergeman, Harold J. Metcalf, *First Observation of Magnetically Trapped Neutral Atoms*, Phys. Rev. Lett., **54**, 2596, 1985.
- [8] R. deCarvalho, N. Brahm, B. Newman, J M. Doyle, D. Kleppner, T. Greytak, *A new path to ultracold hydrogen*, Canadian Journal Physics **83**, 2005.
- [9] Th. Udem, A. Huber, B. Gross, J. Reichert, M. Prevedelli, M. Weitz, e T. W. Hänsch, *Phase-Coherent Measurement of the Hydrogen 1S-2S Transition*

- Frequency with an Optical Frequency Interval Divider Chain*, Phys. Rev. Lett. **79**,14, 1997.
- [10] Kapitza P. L. , *Viscosity of liquid helium at temperatures below lambda point*, Nature **141** (3558), 74, 1938.
  - [11] D. D. Osheroff, R. C. Richardson, D. M. Lee, *Evidence for a New Phase of Solid He3*, Phys. Rev. Lett. **28**, 14, 1972.
  - [12] A. Ashkin, *Acceleration and trapping of particles by radiation pressure*. Phys. Rev. Lett. **24**, 156 (1970).
  - [13] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman and E.A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*. Science **269** (5221), 1995
  - [14] G. Luders, *Proof of the TCP theorem* , Ann. Phys. ,**2**, 1, 1957.
  - [15] T. Bergeman, Gidon Erez, Harold J. Metcalf , *Magnetostatic trapping fields for neutral atoms*, Phys. Rev. A., **35**, 1535, 1987.
  - [16] J. J. Tollett, C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet , *Permanent magnet trap for cold atoms*, Phys. Rev. A., **51**, R22, 1995.
  - [17] C. E. Wieman, D. E. Prichard, D. J. Wineland, *Atom Cooling, Trapping, and. Quantum Manipulation*, Rev. Mod. Phys., **71**, 253-262, 1999.
  - [18] K. Sengstock , W. Ertmer, *Laser Manipulation of Atoms*, Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics, Academic Press, New York, **35**, 1-44, 1995.
  - [19] H. Metcalf, P. van der Straten, *Laser Cooling and Trapping of Neutral Atoms*, Phys. Reports **244**, 203, 1994.
  - [20] H. Metcalf, P. van der Straten, *Laser Cooling and Trapping*, Springer-Verlag, New York, 1999.
  - [21] E.L. Raab , M. Prentiss, A. Cable , S. Chu and D.E. Pritchard D.E., *Trapping of neutral atoms with radiation pressure*, Phys. Rev. Lett. **59**, 1987.

- [22] M. B. Gaarde, R. Zerne, Luo Caiyan, Jiang Zhankui, J. Larsson, and S. Svanberg, *Determination of radiative lifetimes of excited states in neutral gold using time-resolved vacuum-ultraviolet laser spectroscopy*, Phys. Rev. A., **50**, 209, 1994.
- [23] E. Narevicius, A. Libson, C. G. Parthey, I. Chavez, J. Narevicius, U. Even, and M. G. Raizen, *Stopping Supersonic Beams with a Series of Pulsed Electromagnetic Coils: An Atomic Coilgun*, Phys. Rev. Lett., **100**, 093003, 2008.
- [24] W. D. Phillips, H. Metcalf, *Laser Deceleration of an Atomic Beam*, Phys. Rev. Lett., **48**, 596, 1982.
- [25] R. Campargue, *Atom and Molecular Beams: The State of the Art 2000.*, Springer, Berlin, 2001.
- [26] H. L. Bethlem, G. Berden, G. Meijer, *Decelerating Neutral Dipolar Molecules*, Phys. Rev. Lett., **83**, 1558, 1999.
- [27] H. L. Bethlem, G. Meijer, *Production and application of translationally cold molecules*, Int. Rev. Phys. Chem., **22**, 73, 2003.
- [28] H. L. Bethlem, F. M. H. Crompvoets, R. T. Jongma, S. Y. T. van de Meerakker, and G. Meijer, *Deceleration and trapping of ammonia using time-varying electric fields*, Phys. Rev. A., **65**, 053416, 2002.
- [29] S. Y. T. van de Meerakker, P. H. M. Smeets, N. Vanhaecke1, R. T. Jongma, and G. Meijer, *Deceleration and Electrostatic Trapping of OH Radicals*, Phys. Rev. Lett., **94**, 023004, 2005.
- [30] B. C. Sawyer, B. L. Lev, E. R. Hudson, B. K. Stuhl, M. Lara, J. L. Bohn, and J. Ye *Magneto-electrostatic Trapping of Ground State OH Molecules*, Phys. Rev. Lett. **98**, 253002, 2007.
- [31] H. F. Hess, G. P. Kochanski, J. M. Doyle, N. Masuhara, D. Kleppner, and T. J. Greytak, *Magnetic trapping of spin-polarized atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **59**, 672, 1987.
- [32] H. F. Hess, *Evaporative cooling of magnetically trapped and compressed spin-polarized hydrogen*, Phys. Rev. B **34**, 3476, 1986.

- [33] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science **269**, 198, 1995.
- [34] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak, *Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811, 1998.
- [35] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969, 1995.
- [36] B. DeMarco and D. S. Jin *Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas*, Science **285**, 1703, 1999.
- [37] R. V. Krems and A. Dalgarno, *Quantum-mechanical theory of atom-molecule and molecular collisions in a magnetic field: spin depolarization*, J. Chem. Phys. **120**, 2296, 2004.
- [38] N. Masuhara, J. M. Doyle, J. C. Sandberg, D. Kleppner, T. J. Greytak, H. F. Hess, and G. P. Kochanski, *Evaporative cooling of spin-polarized atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **61**, 935, 1988.
- [39] A. G. Martin, K. Helmerson, V. S. Bagnato, G. P. Lafyatis, and D. E. Pritchard, *RF spectroscopy of trapped neutral atoms*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2431 (1989).
- [40] W. Ketterle, N. J. van Druten, *Evaporative cooling of trapped atoms*, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **37**, 181, 1996.
- [41] Jinha Kim, *Buffer-gas Loading and Magnetic trapping of Atomic Europium*, Tese de Doutorado, Harvard, 1997.
- [42] S. Schiller, Lammerzahl, *Molecular dynamics simulation of sympathetic crystallization of molecular ions*, Phys. Rev. A , **68**, 2003.
- [43] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, *Production of Two Overlapping Bose-Einstein Condensates by Sympathetic Cooling*, Phys. Rev. Lett., **78**, 586, 1997.

- [44] W. Petrich, M. H. Anderson, J. R. Ensher, E. A. Cornell, *Stable, tightly confining magnetic trap for evaporative cooling of neutral atoms*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3352, 1995.
- [45] M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. vanDruten, D. M. Kurn, D. S. Durfee, W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a tightly confining dc magnetic trap*, Phys. Rev. Lett. **77**, 416, 1996.
- [46] A. J. Moerdijk, H. M. J. M. Boesten, and B. J. Verhaar, *Decay of trapped ultracold alkali atoms by recombination*, Phys. Rev. A **53**, 916 (1996).
- [47] A. J. Moerdijk and B. J. Verhaar, *Collisional two- and three-body decay rates of dilute quantum gases at ultralow temperature*, Phys. Rev. A **53**, R19 (1996).
- [48] I. F. Silvera and J. T. M. Walraven, *Spin-polarized atomic hydrogen*, In Progress in low temperature physics, Amsterdam, Holland, D. F. Brewer, 1986.
- [49] R. J. Knize, Z. Wu, and W. Happer, *Optical pumping and spin exchange in gas cell*, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **24**, 223, 1987.
- [50] R. deCarvalho, *Inelastic scattering of magnetically trapped atomic chromium*, Tese de Doutorado , Harvard, 2003.
- [51] J. M. Gerton, C. A. Sackett, B. J. Frew, and R. G. Hulet, *Dipolar relaxation collisions in magnetically trapped  $^7\text{Li}$* , Phys. Rev. A **59**, 1514, 1999.
- [52] G. Herzberg, *Atomic Spectra and Atomic Structure*, Dover, 1945.
- [53] N. F. Ramsey, *Molecular Beams*, Oxford University Press, 1955.
- [54] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu , F. Laloe, *Quantum Mechanics*, John Wiley e Sons, Paris, 1977.
- [55] R. Eisberg, R. Resnick, *Física Quântica*, quarta edição, Campus, 1988.
- [56] E. Arimondo, M. Inguscio, P. Violino, *Experimental Determinations of the hyperfine structure in the alkali atoms*, Rev. Mod. Phys. **49** ,1, 1977.
- [57] Robert Michniak, *Enhanced Buffer Gas Loading: Cooling and Trapping of Atoms with Low Effective Magnetic Moments*. Tese de doutorado, Harvard, 2004.



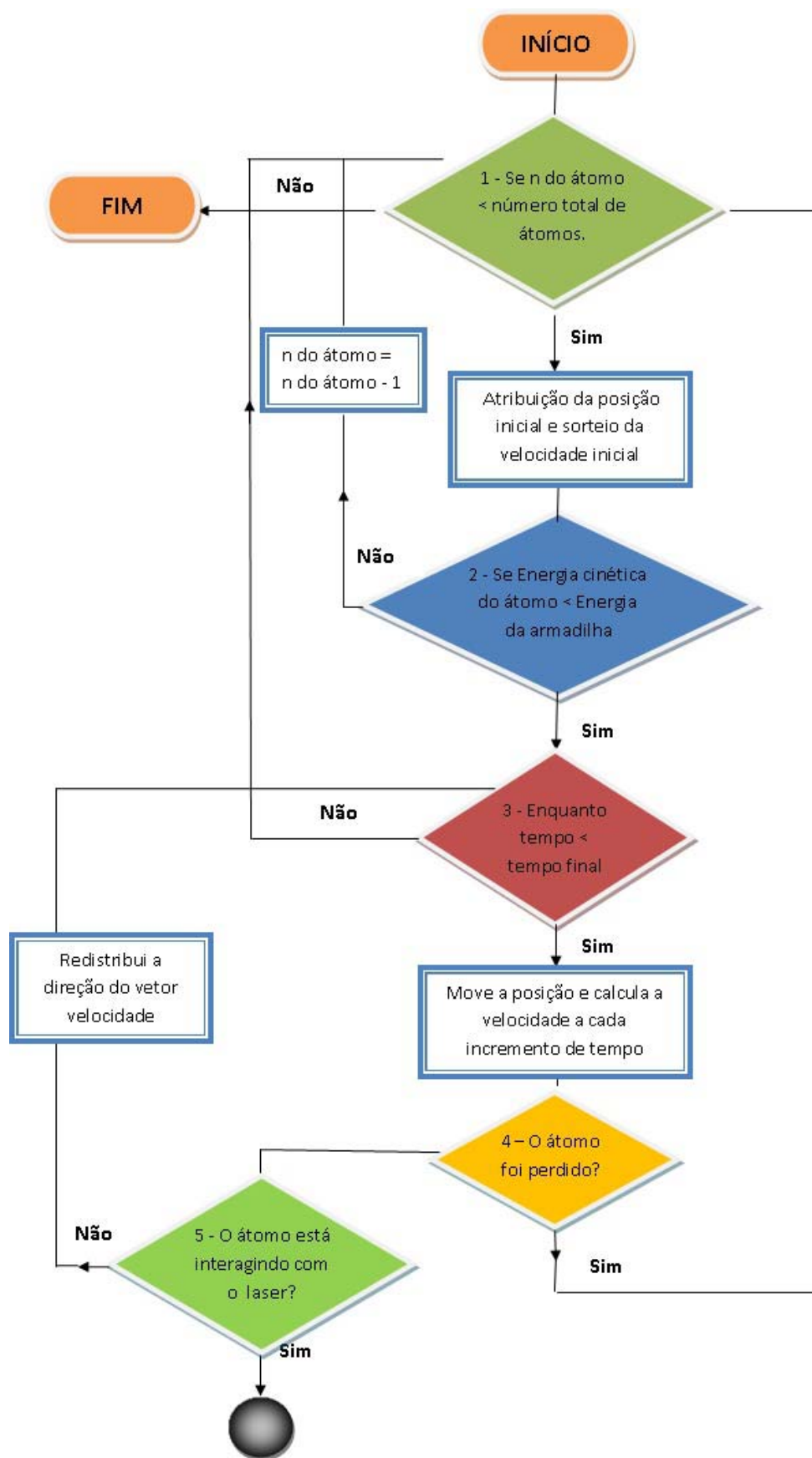
- [58] J. von Plato, *Boltzmann's ergodic hypothesis*, Springer Berlin/ Heidelberg, 1991.
- [59] A. Yariv, *Quantum Electronics*, 3rd Edition, Willey, 1989.
- [60] W. Demtroder, *Laser Spectroscopy - Basic Concepts and Instrumentation*, 2nd Edition, Springer Verlag, 1998.
- [61] M. Young, *Optics and Lasers*, Springer Verlag, 1993.
- [62] M. G. A. Bernard, G. Duraffourg, *Laser Conditions in Semiconductors*, Phys. Stat. Solidi 1, 699, 1961.
- [63] H. C. Casey, M. B. Panish, *Heterostructure Lasers Part A: Fundamental Principles*, New York: Academic Press, 1978.
- [64] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, R. O. Carlson, *Coherent Light Emission from GaAs Junctions*, Phys. Rev. Lett. **9**, 366, 1962.
- [65] H. Kroemer, *A Proposed Class of Heterojunction Injection Lasers*, Proc. IEEE **51**, 1782, 1963.
- [66] I. Zh. Alferov, R. F. Kazarinov, *Semiconductor laser with electric pumping*, Inventor's Certificate No. 181737 [in Russian], 1963.
- [67] H. Kressel, H. Nelson, *Close-confinement gallium arsenide PN junction Lasers with reduced optical loss at room temperature*, RCA Review. **30**, 106, 1969.
- [68] I. Hayashi, M. B. Panish e P. W. Foy, *A Technique for the Preparation of Low-Threshold Room-Temperature GaAs Laser Diode Structures*, IEEE J. Quantum Electron. **QE-5**, 211, 1969.
- [69] I. Hayashi, M. B. Panish, P. W. Foy e S. Sumski, *Junction lasers which operate continuously at room temperature*, Appl. Phys. Lett. **17**, 109, 1970.
- [70] Y. Suematsu e A. R. Adams, *Handbook of Semiconductors Lasers and Photonics Integrated Circuits*, Londres, Chapman & Hill, 1994.
- [71] H. Henry Charles, *Quantum Well Lasers* editado por Peter S. Zory Jr., Academic Press, 1993.

- [72] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* , Wiley Publishers - USA, 7th Edition, 1997.
- [73] M.G. Littman, *Single-mode operation of grazing-incidence pulsed dye laser*, Opt. Lett. **3**, 138, 1978.
- [74] C. E. Wieman, L. Hollberg, *Using diode lasers for atomic physics*, Rev. Sci. Instrum. **62**, 1, 1991.
- [75] D. A. Manoel, R. L. Cavasso-Filho, A. Scalabrin, D. Pereira e F. C. Cruz, *Frequency doubled diode laser in alternative extended cavity*, Optics Communic. **201**, 157-163, 2002.
- [76] L. Ricci, M. Weidemüller, T. Esslinger, A. Hemmerich, C. Zimmermann, V. Vuletic, W. Kijng, T. W. HSnsch, *A compact grating-stabilized diode laser system for atomic physics*, Optics Communications **117**, 541-549, 1995.
- [77] K. Petermann, *Laser Diode Modulation and Noise*, Klunker Academic Press, 1988.
- [78] K. Harvey e C. Myatt, *External-cavity diode laser using a grazing-incidence diffraction grating*, Optics Letters **16**, 910 1991.
- [79] M. W. Pan , B. P. Shi, G. R. Gray, *Semiconductor laser dynamics subject to strong optical feedback*, Optics Letter **22**, 166, 1997.
- [80] R. Fox, A. Zibrov, L. Hollberg, *Semiconductor Diode Laser - Methods in Experimental Physics*, Academic Press, 1995.]
- [81] E. D. Black, *An introduction to Pound-Drever-Hall laser frequency stabilization*, Am. J. Phys. **69**, 1, 79, 2001.
- [82] S. D. Saliba, M. Junker, L. D. Turner e R. E. Scholten, *Mode stability of external cavity diode lasers*, Applied Optics, **48**, 35, 2009.
- [83] Crícia de Carvalho Rodegheri. *Tese de Mestrado*, UFRJ, 2006.
- [84] H. Press Willian, A. Teukolsky Saul, T. Vetterling Willian, P. Flannery Brian, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, 1982.

- [85] Fernando Catalani. *Tese de Mestrado*, UNICAMP, 1997.
- [86] Jonathan David Weinstein. *Tese de Doutorado*, Harvard, 2001.

# Apêndice A - Código em C++ para o resfriamento a Laser do Li em uma Armadilha Magnética

```
.  
  
//Este programa reproduz o movimento de átomos de Li através de uma armadilha magnética  
e interagindo com um laser  
//O campo magnético tem valor de 1 T ao longo do eixo z,  
//O raio da armadilha é de 0.005m  
//Este programa utiliza um sofisticado código para resolver ODE a partir do livro Numerical Recipes  
  
#include <string.h> //string manipulation  
#include <stdio.h> // file I/O  
#include <math.h> // alternate math functions  
#include <time.h> // time functions  
#include <iostream.h>  
  
double magmom;  
double mass=(7*1.67E-27);  
int nqn ;  
//radtrp é o raio da armadilha  
const double melec = 9.109e-31, echrg = 1.602e-19,c=2.99792458e8,  
pi = double(2)*asin(double(1)),radtrp = 0.005,h= 6.626e-34,hbar = 6.626e-34*0.5/pi,  
ALPHA= 200, gama = 3.7e7, lambda= 670.96e-9,timerg= 1.0e-3,csi=(6702.16*h*1.e6),  
//unidade de energia em Joule campo em Tesla  
gs=2.00232,wtrans=(2*pi*c)/lambda;//wtrans é a frecuencia de transição  
  
const int npart = 6 ; // tamanho da matriz xv, dyvdt...  
  
//Parametros geradores dos numeros aleatórios
```



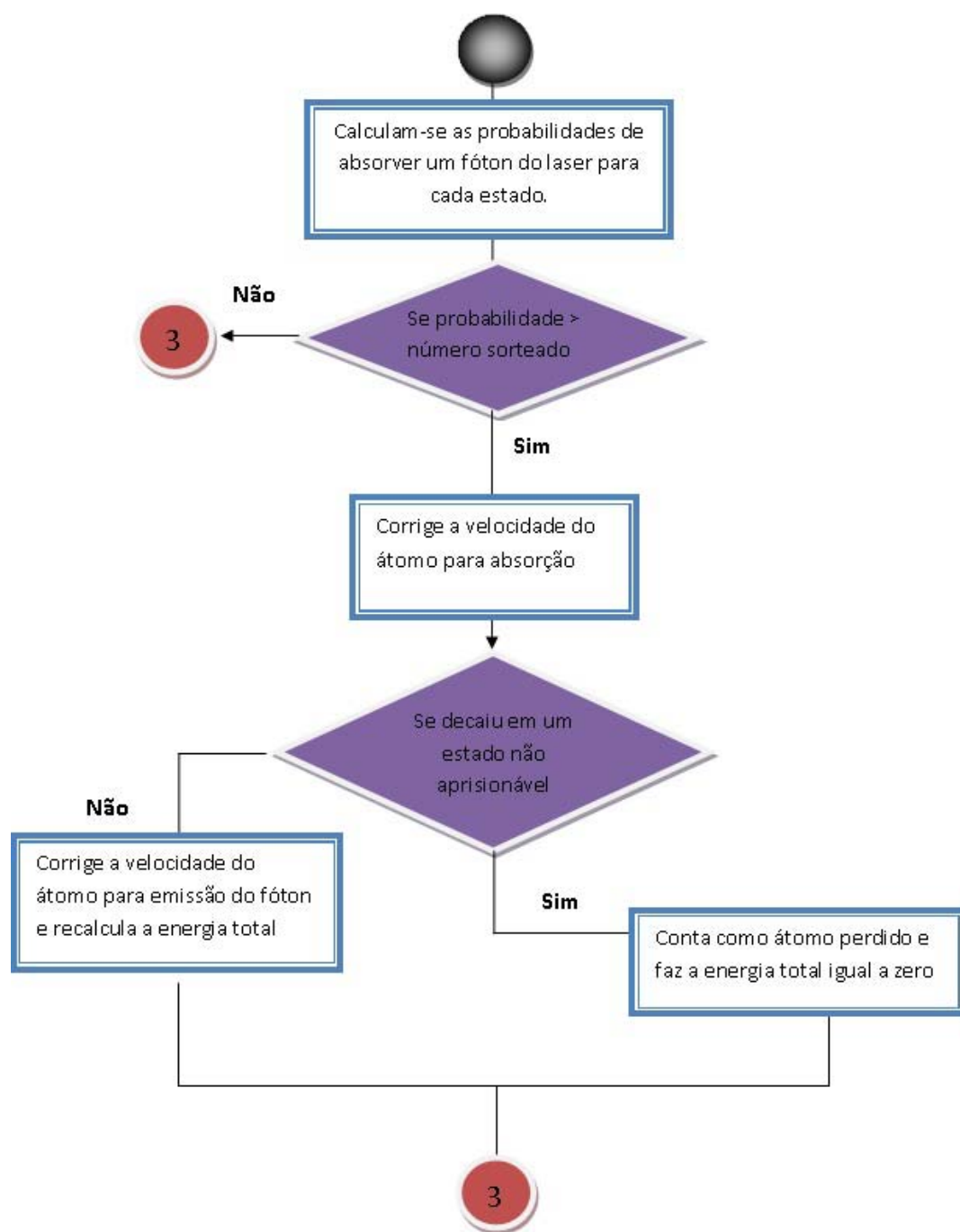


Fig. 1: Fluxograma do código implementado em C++

```

const long int ntab = 32;
const long int ndiv2 = 1+(2147483563-1)/ntab;
long int iv1[ntab];

//Função que inicializa o gerador de numeros aleatorios
void InitRan(long int& i1, long int& i2) ;

//Função que retorna um número aleatório
double SimRan1(long int& i1, long int& i2) ;

//Função que calcula a força
void Force(double x[],double frc[]) ;

//Função que calcula a energia
double Energy(double v[], double x[]) ;

//Função que calcula o módulo do campo magnético
double Bmag(double x[]) ;

//Calcula as derivadas espaciais
void Dydt(double t, double xv[], double dxvdt[]) ;

//Solução das ODE
void Rkqs(double y[], double dydx[], int n, double x, double htry, double eps,
    double yscal[], double *hdid, double *hnext
    , void (*derivs)(double, double [], double [])) ;
void Rkck(double y[], double dydx[], int n, double x, double h,
    double yout[], double yerr[],
    void (*derivs)(double, double [], double []));

//main program
int main(int argc, char **argv)
{
//parametros

double r[3];
double kboltz, kt, pos[3], vel[3], dtim, vinit,
tim, wrk0[3],tfin,tfin2,dum,dum2,phi,temphbar,xv[npart], yscal[npart],dxvdt[npart],
bmag0,bin,emw, ebound,energiamedia[500],temp,s0,nnn,xL,pplus3,pminus3,pplus5,
//xL é o deslocamento do laser com relação ao centro da armadilha
xvja[npart],w0,ep,ec,newenergy,wLaser,dessintonia,cosTheta,sinTheta,modv,modv1,

```

```

e0,e1,e2,e3,e5,wB1,wB2,wB3,wB5,p,p1,p2,p3,p5,gplus1,gminus1,gplus2,gminus2,gplus3,
gminus3,pminus2,pminus5,p2plus,p2minus,p3plus,p3minus, p5plus,p5minus,c2plus,
c2plusnorm,c3plus,c3plusnorm,c5plus,c5plusnorm,polparalela,polperp,a,gplus5,
gminus5,pplus1,pminus1,pplus2,
eps, dtdid, dtnext, bres, xvj[npart];

    long int i1, i2, j, irep, mqn, nqn0,atomoperdido=0,perdido=0;
int i,inode, nproc, ndim, ichange, nrep, inodeadd , novobin,
    velhobin,atomosrestantes[500],intervalos=500,trans[500],trans1=0,trans2=0,trans3=0,trans5=0;

    time_t timst, timfin, timint ;
//FILE *output1 ,*output2,*output3, *output4, *output5;
FILE *output1,*output2,*output3,*output4,*output5;
output1 = fopen("dados.txt","w");
output2 = fopen("transicoes.txt", "w");
output3 = fopen("Temperatura.txt", "w");
output4 = fopen("dessintonia.txt", "w");
output5 = fopen ("FrequenciadoLaser.txt", "w");

for (i=0;i<500;i++)
{
    energiamedia[i]=0.0;atomosrestantes[i]=0;trans[i]=0;
}

int count; count=0;
//Atomos sao lançados com velocidades aleatórias obedecendo a distribuição de Maxwell Boltzmann
    FILE *inpdat ; inpdat = fopen("com_motion_inp.datt","r") ;
    fscanf(inpdat,"%i %i %lf %lf",&nrep,&inodeadd,&temphbar,&s0) ;
    fclose(inpdat) ;

    inode += inodeadd ;inode=0;
    time(&timst) ;

//Calculo de constantes fundamentais e energia térmica
    kboltz = 1.381e-23 ;
    kt = kboltz*1.0 ;
//initialize random # generator
    i1 = 5+2836*(inode+56) ; i2 = 123+12211*(inode+56) ; InitRan(i1,i2) ;
//w0 raio do laser,
    w0=0.002;
    nnn=0;

```



```

//temp= (hbar*gama)/(6.0*kboltz); //temperatura Doppler do litio
//printf("%2.4E", temp);
//getchar();

//irep e o loop sob as diferentes trajetórias
for(irep = 0 ; irep < nrep ; irep ++)
{
velhobin= 0; tim=0.0;
// pos[0] = rhofin*fac*sth*cos(phi) ; pos[1] = rhofin*fac*sth*sin(phi) ; pos[2] = zfin*fac*cth;
pos[0] = 0.0 ; pos[1] = 0.0 ; pos[2] = 0.0 ;
//calcula velocidade aleatorias dos atomos de Li
//velocidade incial, vinit
//se desejar lança-los com velocidade especifica apenas troque duas linhas para vinit
phi = 2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
vinit = 1.0*sqrt(-2.0*kboltz*temphbar*log(SimRan1(i1,i2))/mass) ;
vel[0] = vinit*cos(phi); vel[1] = vinit*sin(phi);
phi = 2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
vinit = 1.0*sqrt(-2.0*kboltz*temphbar*log(SimRan1(i1,i2))/mass) ;
vel[2] = vinit*cos(phi) ;
//dessintonia= - 2.0*pi*sqrt(vel[0]*vel[0] + vel[1]*vel[1] + vel[2]*vel[2])/lambda;
//printf("%2.4E", dessintonia);
// getchar();

//calcula o momento magnético e a energia
mqn = 1 ;
magmom = 0.5*echrg*hbar*double(mqn)/melec;
wrk0[0] = 0.0 ; wrk0[1] = 0.0 ; wrk0[2] = 0.0 ;
dxvdt[0] = radtrp; dxvdt[1] = 0.0 ; dxvdt[2] = 0.0 ;
dum = Energy(vel,pos)/kboltz ;//energia total
ebound = (Bmag(dxvdt)-Bmag(wrk0))*magmom/kboltz ; //ebound é a energia da armadilha
//printf (" dum = %2.6E\t , ebound= %2.6E\n", dum, ebound);
//getchar();

    if (dum < ebound)
{
    printf("irep=%d\t (x,y,z)=(%4.4E,%4.4E,%4.4E) \t
(Vx,Vy,Vz)=(%4.4E,%4.4E,%4.4E)\n", irep,pos[0],pos[1],pos[2],vel[0],vel[1],vel[2]);

//inicializa o tempo, n e dt
dtim = 1.e-12 ;
//escala de tempo

```

```

    tfin = 2.0;

//xv é o vetor posição e velocidade
for(j = 0 ; j < 3 ; j++) {xv[j] = pos[j] ; xv[j+3] = vel[j] ; }
dtnext = 0.001*radtrp/sqrt(vel[0]*vel[0] + vel[1]*vel[1] + vel[2]*vel[2]) ;

// Parametros para a propagação numérica
for(j = 0 ; j < 3 ; j++) {yscal[j] = radtrp ; yscal[j+3] = sqrt(kt/mass) ; }

bmag0 = Bmag(xv);
ichange = 0 ;
ep = magmom*Bmag(xv) ;
ec = 0.5*mass*(xv[3]*xv[3] + xv[4]*xv[4] + xv[5]*xv[5]) ;
bin= ((float)tfin/intervalos);
//printf("%2.4E", (ec+ep)/(4.5*kboltz));

//loop de propagação do tempo

while((tim < tfin) && ((xv[0]*xv[0]+xv[1]*xv[1]) < (radtrp*radtrp)) && (fabs(xv[2]) < 0.0025))
{
    if (atomoperdido>perdido)
    {
        perdido=atomoperdido;
        //printf("tim=%2.4E\tatomoperdido=%d",tim, atomoperdido);
        //getchar();
        break;}
    else {
        dtim = dtnext ;
        eps = 1.0e-12;
        Dydt(tim,xv,dxvdt) ;
        ndim = 6 ;
        //move a posição e velocidade a cada passo
        Rkqs(xv, dxvdt, ndim, tim, dtim, eps, yscal, &dtdid, &dtnext, Dydt) ;
        //tempo corrente
        dtim = dtdid ; tim += dtim ;
        novobin = ((int)(tim/bin));

```

//xL é o deslocamento do laser em relação ao centro da armadilha,  
para coloca-lo no centro basta fazer xL=0

```

xL= 0.003;

// variando a frequencia do laser wL
//wLaser= ((1350.0*gama*tim)/tfin )+1350.0*gama ;

wLaser = 10.0*gama;

if(((xv[0]-xL)*(xv[0]-xL)+(xv[1]*xv[1]))< w0*w0)
{
//Se estiver, vamos verificar se ele é absorvido
//os termos e1,e2,e3 e e5 são as equações que geram as linhas 1,2,3 e 5
da estrutura fina em função do campo

e0 = (gs/2.0)*magmom*Bmag(xv);// e0 representa a linha do nível S 1/2
e1= (gs/2.0 + 1.0)*magmom*Bmag(xv) + (csi/2.0);
e2= 0.25*(2.0*magmom*Bmag(xv)-csi+ sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)-
8.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs)+(4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs*gs)-
4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)+ (4.0*Bmag(xv)*magmom*csi*gs)+(9.0*csi*csi)));
e3= 0.25*(-2.0*magmom*Bmag(xv)-csi+sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)-
8.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs)+(4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs*gs)+
4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)-(4.0*Bmag(xv)*magmom*csi*gs)+(9.0*csi*csi)));
e5= 0.25*(2.0*magmom*Bmag(xv)-csi-sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)-
(8.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs)+(4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs*gs)-
(4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)+(4.0*Bmag(xv)*magmom*csi*gs)+(9.0*csi*csi)));

wB1= (e1-e0)/hbar; // calculo da frequencia de uma linha para outra.
wB2= (e2-e0)/hbar;
wB3= (e3-e0)/hbar;
wB5= (e5-e0)/hbar;
//printf("frequencias de transição %2.4E\t%2.4E\t%2.4E\t%2.4E\t",wB1,wB2,wB3,wB5);
//getchar();
// equações para calcular a probabilidade devido a polarização do laser.
polparalela= xv[0]/(sqrt(xv[0]*xv[0]+xv[1]*xv[1]+4.0*xv[2]*xv[2]));
//printf("%2.4E\t%2.4E",polparalela,polperp);
//getchar();
polperp=sqrt((xv[1]*xv[1]+4*xv[2]*xv[2])/(xv[0]*xv[0]+xv[1]*xv[1]+4*xv[2]*xv[2]));
// a = (2.0*pi*xv[5]/lambda)+wB1;
// printf(" %2.4E %2.4E ", a ,wLaser);
// getchar();
// equações para calcular as probabilidades de absorção para cada estado,

```

```

        nesse caso 4 probabilidades na direção +z e -z
c2plus= 1.0/((2*sqrt(2.0)*csi)*(2.0*magmom*Bmag(xv)+csi+
                sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)+
                (4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)+(9.0*csi*csi))));
c2plusnorm=c2plus/sqrt(1.0+c2plus*c2plus);
c3plus= 1.0/((2*sqrt(2.0)*csi)*(2.0*magmom*Bmag(xv)-csi+
                sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)-
                (4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)+(9.0*csi*csi))));
c3plusnorm=c3plus/sqrt(1.0+c3plus*c3plus);
c5plus= 1.0/((2*sqrt(2.0)*csi)*(2.0*magmom*Bmag(xv)+csi-
                sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)+
                (4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)+(9.0*csi*csi))));
c5plusnorm= c5plus/sqrt(1.0+c5plus*c5plus);
        gplus1= (4.0*(wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB1)*
                (wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB1))/(gama*gama);
if(irep==0){fprintf(output4, "%2.4E\n",wB1);}
pplus1= (s0*(gama/2.0)*dtim/(1.0+s0+gplus1))*(polperp*polperp)/2.0;
gminus1= (4.0*(wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB1)*
        (wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB1))/(gama*gama);
pminus1= (s0*(gama/2.0)*dtim/(1.0+s0+gminus1))*(polperp*polperp)/2.0;
gplus2=(4.0*(wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB2)*
        (wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB2))/(gama*gama);
pplus2= ((c2plusnorm*c2plusnorm*s0*(gama/2.0)*dtim)/(1.0+s0+gplus2))*
        (polparalela*polparalela)/2.0;
gminus2= (4.0*(wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB2)*
        (wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB2))/(gama*gama);
pminus2= ((c2plusnorm*c2plusnorm*s0*(gama/2.0)*dtim)/(1.0+s0+gminus2))*
        (polparalela*polparalela)/2.0;
gplus3= (4.0*(wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB3)*
        (wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB3))/(gama*gama);
pplus3= ((c3plusnorm*c3plusnorm*s0*(gama/2.0)*dtim)/(1.0+s0+gplus3))*
        (polperp*polperp)/2.0;;
gminus3= (4.0*(wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB3)*
        (wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB3))/(gama*gama);
pminus3=((c3plusnorm*c3plusnorm*s0*(gama/2.0)*dtim)/(1.0+s0+gminus3))*
        (polperp*polperp)/2.0;;
gplus5=(4.0*(wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB5)*
        (wLaser-(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB5))/(gama*gama);
pplus5= ((c5plusnorm*c5plusnorm*s0*(gama/2.0)*
        dtim)/(1.0+s0+gplus5))*(polparalela*polparalela)/2.0;
gminus5= (4.0*(wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB5)*

```

```

(wLaser+(2.0*pi*xv[5]/lambda)-wB5))/(gama*gama);
pminus5= ((c5plusnorm*c5plusnorm*s0*(gama/2.0)*
dtim)/(1.0+s0+gminus5))*(polparalela*polparalela)/2.0;
                                p1=(pminus1+pplus1);

p2=(pminus2+pplus2);
p3=(pminus3+pplus3);
p5=(pminus5+pplus5);
p= (p1+p2+p3+p5);

// calculadas as probabilidades esse if irá escolher para qual estado o átomo foi excitado.
dum= SimRan1(i1,i2); // sorteia um número aleatório entre 0 e 1
if ( p > dum)
// passando desse if ele irá absorver , mas tem que testar se do +z ou -z,
e para qual estado ele irá
{
if (dum<p1)// aqui ve se o átomo vai para o estado 1, nesse estado mj=3/2 so pode decair em 1/2
{
trans1++;//printf("absorveu em p1 tim= %2.4E", tim);
//getchar();
if (p1-pminus1>dum) // aqui testa se ele absorveu do laser +z
{
// correção da velocidade para a emissão e absorcao do foton
cosTheta = 2.0*SimRan1(i1,i2)-1.0;
sinTheta = sqrt(1.0-cosTheta*cosTheta);
phi =2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
xv[3]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*cos(phi);
xv[4]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*sin(phi);
xv[5]+= (h/(mass*lambda))*(cosTheta+1.0);
}else {
// ele absorveu do laser -z
cosTheta = 2.0*SimRan1(i1,i2)-1.0;
sinTheta = sqrt(1.0-cosTheta*cosTheta);
phi =2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
xv[3]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*cos(phi);
xv[4]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*sin(phi);
xv[5]+= (h/(mass*lambda))*(cosTheta-1.0);
}
} else {
if (dum<p1+p2)
// aqui ele está no estado 2, nesse estado pode decair em 1/2 ou -1/2 precisa testar
{

```

```

trans2=trans2+1;

                                                                    //printf("absorveu em p2 tim= %2.4E", tim);

//getchar();
if (p1+p2-pminus2 > dum) // aqui testa se ele absorveu do laser +z
{
// correção da velocidade para a absorcao do foton apenas
xv[5]+= (h/(mass*lambda));

}else {
// ele absorveu do laser -z
xv[5]+= (h/(mass*lambda))*(-1.0);
}

// vamos escolher em que estado ele vai decair, pois se decair em -1/2 apenas
precisamos lembrar de contar esse átomo cpmo perdido
// as probabilidades de um estado ou outro sao dadas pelos coeficientes c2+ e c2-, onde c2-=1
c2plus= (1.0/(2*sqrt(2.0)*csi))*(-2.0*magmom*Bmag(xv)+2.0*magmom*Bmag(xv)*gs+csi+
sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)-(8.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs)+
(4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs*gs)-(4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)+
(4.0*Bmag(xv)*magmom*csi*gs)+(9.0*csi*csi)));
// p2plus é a prob de decair no estado +1/2 e p2minus no estado -1/2
p2plus=(c2plus*c2plus)/((c2plus*c2plus)+1);
p2minus=(1.0)/((c2plus*c2plus)+1);
// printf("p2+= %2.4E,p2-= %2.4E,p2total=%2.4E\n", p2plus,p2minus,p2plus+p2minus);
// getchar();
dum2= SimRan1(i1,i2);
if(dum2>p2plus)
{ // o atomo decaiu no estado -1/2 então eu nao conto a energia
desse átomo e para que ela nao entre na soma da energia total faço igual a zero
//printf("perdemos o atomo p2 tim= %2.4E", tim);
//getchar();
atomoperdido++;
ec=0.0;
ep=0.0;
} else { // decaiu no estado +1/2 então tenho que emitir o fóton e corrigir a velocidade
cosTheta = 2.0*SimRan1(i1,i2)-1.0;
sinTheta = sqrt(1.0-cosTheta*cosTheta);
phi =2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
xv[3]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*cos(phi);
xv[4]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*sin(phi);
xv[5]+= (h/(mass*lambda))*(cosTheta);
}

```

```

} else {

                                if (dum<p1+p2+p3)

// aqui ele está no estado 3, nesse estado pode decair em 1/2 ou -1/2 precisa testar
{
trans3++;

                                // printf("absorveu em p3 tim= %2.4E", tim);

// getchar();
if (p1+p2+p3-pminus3 > dum) // aqui testa se ele absorveu do laser +z
{
        // correção da velocidade para a absorcao do foton apenas
xv[5]+= (h/(mass*lambda));
}else {
// ele absorveu do laser -z
xv[5]+= (h/(mass*lambda))*(-1.0);
}
// vamos escolher em que estado ele vai decair, pois se decair em -1/2
        apenas precisamos lembrar de contar esse átomo como perdido
// as probabilidades de um estado ou outro sao dadas pelos coeficientes c3+ e c3-, onde c3-=1
c3plus= (1.0/(2*sqrt(2.0)*csi))*(-2.0*magmom*Bmag(xv)-2.0*magmom*Bmag(xv)*gs+csi-
sqrt((4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom)-(8.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs)+
(4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs*gs)+(4.0*Bmag(xv)*magmom*csi)-
4.0*Bmag(xv)*magmom*csi*gs)+(9.0*csi*csi)));
// p3plus é a prob de decair no estado +1/2 e p3minus no estado -1/2
p3plus=(c3plus*c3plus)/((c3plus*c3plus)+1);
p3minus=1.0/((c3plus*c3plus)+1);
// printf("p3+= %2.4E,p3-= %2.4E,p3total=%2.4E\n", p3plus,p3minus,p3plus+p3minus);
// getchar();
dum2= SimRan1(i1,i2);
if(dum2>p3plus)
{ // o atomo decaiu no estado -1/2 então eu nao conto a energia desse átomo
        e para que ela nao entre na soma da energia total faço igual a zero

// printf("perdemos o atomo p3 tim= %2.4E", tim);
// getchar();
atomoperdido++;
ec=0.0;
ep=0.0;
{ else { // decaiu no estado +1/2 então tenho que emitir o fóton e corrigir a velocidade
cosTheta = 2.0*SimRan1(i1,i2)-1.0;
sinTheta = sqrt(1.0-cosTheta*cosTheta);
phi =2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
xv[3]+= (h/(mass*lambda))*sinTheta*cos(phi);

```

```

xv[4] += (h/(mass*lambda))*sinTheta*sin(phi);
xv[5] += (h/(mass*lambda))*(cosTheta);
}
}else {
    trans5++; // aqui ele está no estado 5, nesse estado pode decair em 1/2 ou -1/2 precisa testar
    // printf("absorveu em p5 tim= %2.4E", tim);
    // getchar();
    if (p1+p2+p3+p5-pminus5 > dum) // aqui testa se ele absorveu do laser +z
    {
        // correção da velocidade para a absorcao do foton apenas
        xv[5] += (h/(mass*lambda));
    }else {
        // ele absorveu do laser -z
        xv[5] += (h/(mass*lambda))*(-1.0);
    }
    // vamos escolher em que estado ele vai decair, pois se decair em -1/2
        apenas precisamos lembrar de contar esse átomo como perdido
    // as probabilidades de um estado ou outro sao dadas pelos coeficientes c5+ e c5-, onde c5-=1

    c5plus = (1.0/(2*sqrt(2.0)*csi))*(-2.0*magmom*Bmag(xv)+2.0*magmom*Bmag(xv)*gs +csi-
    sqrt(4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom-8.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs+
    4.0*Bmag(xv)*Bmag(xv)*magmom*magmom*gs*gs-4.0*Bmag(xv)*magmom*csi+
    4.0*Bmag(xv)*magmom*csi*gs+9.0*csi*csi));
    // p5plus é a prob de decair no estado +1/2 e p5minus no estado -1/2
    p5plus = (c5plus*c5plus)/((c5plus*c5plus)+1);
    p5minus = ((1.0)/((c5plus*c5plus)+1));
    //printf("p5+= %2.4E,p5-= %2.4E,p5total=%2.4E\n", p5plus,p5minus,p5plus+p5minus);
    //getchar();
    dum2 = SimRan1(i1,i2);
    if(dum2>p5plus)
    {
        atomoperdido++;
        // printf("perdemos o atomo p5 em tim= %2.4E", tim);
        // getchar();
    } else { // decaiu no estado +1/2 então tenho que emitir o fóton e corrigir a velocidade
        cosTheta = 2.0*SimRan1(i1,i2)-1.0;
        sinTheta = sqrt(1.0-cosTheta*cosTheta);
        phi = 2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
        xv[3] += (h/(mass*lambda))*sinTheta*cos(phi);
        xv[4] += (h/(mass*lambda))*sinTheta*sin(phi);
        xv[5] += (h/(mass*lambda))*(cosTheta);
    }
}

```



```

}
}

}
}
} // loop que testa se absorveu
} // loop que verifica se está no laser


dum= SimRan1(i1,i2);
if (timerg > dum)
{
cosTheta = 2.0*SimRan1(i1,i2)-1.0;
sinTheta = sqrt(1.0-cosTheta*cosTheta);
phi =2.0*pi*SimRan1(i1,i2) ;
// printf("antes da erg %2.4E\t%2.4E\t%2.4E",xv[3],xv[4],xv[5]);
modv= sqrt(xv[3]*xv[3] + xv[4]*xv[4] + xv[5]*xv[5]);
xv[3]= modv*sinTheta*cos(phi);
xv[4]= modv*sinTheta*sin(phi);
xv[5]= modv*(cosTheta);
// printf("\ndepois da erg %2.4E\t%2.4E\t%2.4E",xv[3],xv[4],xv[5]);
// getchar();
//modv1= sqrt(xv[3]*xv[3] + xv[4]*xv[4] + xv[5]*xv[5]);
//printf("oi %2.4E\t%2.4E",modv,modv1);
// getchar();
}

if (atomoperdido>perdido) {ec=0;ep=0;}
else {ep = magmom*Bmag(xv) ;
ec = 0.5*mass*(xv[3]*xv[3] + xv[4]*xv[4] + xv[5]*xv[5]) ;

}


if ((novobin != velhobin))
{
if (atomoperdido == perdido) atomosrestantes[velhobin]++;
energiamedia[velhobin]+= ec+ep;
//if (irep == nrep-1)
//{
// fprintf(output2, "%2.5E\t%2.6E\n",tim,energiamedia[velhobin]);
fprintf(output1,"%2.5E\t%2.5E\t\n",xv[0],Bmag(xv));
//}

```

```

        velhobin=novobin;

    }

    //getchar();
    } //fecha com o primeiro else depois do while
    }//fim do loop de propagação do tempo.

    if ((ep+ec) > ebound)
    {printf("ALARME");
    getchar();}

    }else {irep--;}//fim do loop que ve se tem energia para armadilhar

    }//fim do loop de atomos

    //imprimira os histogramas
    for (i=0;i<500;i++)
        fprintf(output3," %2.5E\t%2.5E\t%d\t\n",(float)(i)*bin,
            ((energiamedia[i]/(4.5*kboltz*atomosrestantes[i]))),atomosrestantes[i]);
        fprintf(output2,"%d\t%d\t%d\t%d\t\n",trans1,trans2,trans3,trans5);

    }//fim do main
    double Energy(double v[], double x[])
    {
    double dum ;
    dum = 0.5*mass*(v[0]*v[0] + v[1]*v[1] + v[2]*v[2]) + magmom*Bmag(x) ;
    return dum;
    }
    void Force(double x[],double frc[])
    {
    double rp[3], rm[3], dx ;
    int j, i ;
    dx = 0.00001 ;
    for(i = 0 ; i < 3 ; i++)
    {
    for(j = 0 ; j < 3 ; j++) {rp[j] = x[j] ; rm[j] = x[j] ;}
    rp[i] += dx/2 ; rm[i] -= dx/2 ;
    frc[i]=-magmom*(Bmag(rp) - Bmag(rm))/dx;
    }
    }

```

```

//Cálculo do campo analítico diretamente
double Bmag(double r[])
{
return ALPHA*sqrt(r[0]*r[0] + r[1]*r[1] + 4*r[2]*r[2]);
//fprintf(output2,"2.4E\n",ALPHA*sqrt(r[0]*r[0] + r[1]*r[1] + 4*r[2]*r[2]));
}

void InitRan(long int& i1, long int& i2)
{
int iran ;
for(iran = 0 ; iran < 152 ; iran++)
{
i1 = 16807*(i1%127773) - 2836*(i1/127773) ; if(i1 <= 0) i1+= 2147483647 ;
i2 = 40014*(i2%53668) - 12211*(i2/53668) ; if(i2 <= 0) i2+= 2147483563 ;
}
for(iran = 0 ; iran < ntab ; iran++)
{
i1 = 16807*(i1%127773) - 2836*(i1/127773) ; if(i1 <= 0) i1+= 2147483647 ;
i2 = 40014*(i2%53668) - 12211*(i2/53668) ; if(i2 <= 0) i2+= 2147483563 ;
iv1[iran] = i1 ;
}
}

//random number generator
double SimRan1(long int& i1, long int& i2)
{
long int k, j1 ;
i1 = 16807*(i1%127773) - 2836*(i1/127773) ; if(i1 <= 0) i1+= 2147483647 ;
i2 = 40014*(i2%53668) - 12211*(i2/53668) ; if(i2 <= 0) i2+= 2147483563 ;
k = i2/ndiv2 ; j1 = iv1[k] ; iv1[k] = i1 ;
return ((j1 - 0.5)*4.656612875245797E-10) ;
}

void Dydt(double t, double xv[],double dxvdt[])
{
int j ; double wrk[3] ;

for(j = 0 ; j < 3 ; j++) dxvdt[j] = xv[j+3] ;
Force(xv,wrk) ;
for(j = 0 ; j < 3 ; j++) dxvdt[j+3] = wrk[j]/mass ;

}

void Rkqs(double *y, double *dydx, int n, double x, double htry, double eps,
double *yscal, double *hdid, double *hnext

```

```

    , void (*derivs)(double, double [], double []))
{
    int i;
    double errmax,h,xnew,yerr[npart],ytemp[npart];
    const double SAFETY = 0.9, PGROW = -0.2, PSHRNK = -0.25, ERRCON = 1.89E-4 ;

    h=htry; errmax = 5.0 ;
    while(errmax > 1.0)
    {
        Rkck(y,dydx,n,x,h,ytemp,yerr,derivs);
        errmax=0.0;
        for (i=0;i<n;i++)
        {
            if(errmax<fabs(yerr[i])/ *(yscal+i))errmax=fabs(yerr[i])/ *(yscal+i);
        }
        errmax /= eps;
        if (errmax > 1.0)
        {
            h *= SAFETY*pow(errmax,PSHRNK);
            xnew=x+h*32;
            if (xnew == x)
            {
                printf("stepsize underflow in rkqs\n");
                *hnext = -1. ;
                break ;
            }
        }
        else
        {
            if (errmax > ERRCON) *hnext=SAFETY*h*pow(errmax,PGROW);
            else *hnext=5.0*h;
            *hdid = h ;
            x += h ;
            for (i=0;i<n;i++) *(y+i) = ytemp[i];
            break;
        }
    }

    void Rkck(double *y, double *dydx, int n, double x, double h, double *yout,
        double *yerr, void (*derivs)(double, double [], double []))
    {

```

```

int i;
static double a2=0.2,a3=0.3,a4=0.6,a5=1.0,a6=0.875,b21=0.2,
b31=3.0/40.0,b32=9.0/40.0,b41=0.3,b42 = -0.9,b43=1.2,
b51 = -11.0/54.0, b52=2.5,b53 = -70.0/27.0,b54=35.0/27.0,
b61=1631.0/55296.0,b62=175.0/512.0,b63=575.0/13824.0,
b64=44275.0/110592.0,b65=253.0/4096.0,c1=37.0/378.0,
c3=250.0/621.0,c4=125.0/594.0,c6=512.0/1771.0,
dc5 = -277.0/14336.0;
double dc1=c1-2825.0/27648.0,dc3=c3-18575.0/48384.0,
dc4=c4-13525.0/55296.0,dc6=c6-0.25;
double ak2[40],ak3[40],ak4[40],ak5[40],ak6[40],ytemp[40];

for (i=0;i<n;i++)
ytemp[i]=*(y+i)+b21*h* *(dydx+i);
(*derivs)(x+a2*h,ytemp,ak2);
for (i=0;i<n;i++)
ytemp[i]=*(y+i)+h*(b31* *(dydx+i)+b32*ak2[i]);
(*derivs)(x+a3*h,ytemp,ak3);
for (i=0;i<n;i++)
ytemp[i]=*(y+i)+h*(b41* *(dydx+i)+b42*ak2[i]+b43*ak3[i]);
(*derivs)(x+a4*h,ytemp,ak4);
for (i=0;i<n;i++)
ytemp[i]=*(y+i)+h*(b51* *(dydx+i)+b52*ak2[i]+b53*ak3[i]+b54*ak4[i]);
(*derivs)(x+a5*h,ytemp,ak5);
for (i=0;i<n;i++)
ytemp[i]=*(y+i)+h*(b61* *(dydx+i)+b62*ak2[i]+b63*ak3[i]+b64*ak4[i]+b65*ak5[i]);
(*derivs)(x+a6*h,ytemp,ak6);
for (i=0;i<n;i++)
*(yout+i)=*(y+i)+h*(c1* *(dydx+i)+c3*ak3[i]+c4*ak4[i]+c6*ak6[i]);
for (i=0;i<n;i++)
*(yerr+i)=h*(dc1* *(dydx+i)+dc3*ak3[i]+dc4*ak4[i]+dc5*ak5[i]+dc6*ak6[i]);
}

```

# Apêndice B - Cálculo para a energia média na armadilha utilizando o programa Mathematica versão 5

Distribuição de Maxwell-Boltzman normalizada:

```
In[1]:= fMB3d[v_] := 4 π  $\left(\frac{m}{2 \pi k_B t}\right)^{3/2} v^2 \text{Exp}[-m v^2 / (2 k_B t)]$ ;  
Integrate[fMB3d[v], {v, 0, ∞}, Assumptions → {m > 0, (kB t) > 0}]  
Out[2]= 1
```

## ■ Energia Cinética Média (com ou sem potencial):

```
In[3]:= Integrate[(m v^2 / 2) fMB3d[v], {v, 0, ∞}, Assumptions → {m > 0, (kB t) > 0}]  
Out[3]=  $\frac{3 k_B t}{2}$ 
```

### ■ Harmonic Potencial:

```
In[4]:= ϕ[r_] := α r2;
        n[r_] := e-ϕ[r]/(kB t);
```

```
ntotal = Integrate[4 π r2 n[r], {r, 0, ∞}, Assumptions → {α > 0, (kB t) > 0}]
```

```
Out[8]=  $\frac{\pi^{3/2} (kB t \alpha)^{3/2}}{\alpha^3}$ 
```

### ■ Energia Potencial Média:

```
In[13]:= eptotal = Integrate[4 π r2 ϕ[r] n[r], {r, 0, ∞}, Assumptions → {α > 0, (kB t) > 0}]
```

```
Out[13]=  $\frac{3 \pi^{3/2} (kB t)^{5/2}}{2 \alpha^{3/2}}$ 
```

```
In[14]:= epm = FullSimplify[eptotal / ntotal]
```

```
Out[14]=  $\frac{3 (kB t)^{5/2} \alpha^{3/2}}{2 (kB t \alpha)^{3/2}}$ 
```

### ■ Spherical Quadrupole Potencial:

```
In[15]:= ϕSQ[r_] := α r;
        nSQ[r_] := e-ϕSQ[r]/(kB t);
```

```
In[17]:= nttotalSQ = Integrate[2 π r2 nSQ[r], {r, 0, ∞}, Assumptions → {α > 0, (kB t) > 0}]
```

```
Out[17]=  $\frac{4 kB^3 \pi t^3}{\alpha^3}$ 
```

### ■ Energia Potencial Média:

```
In[18]:= epttotalSQ = Integrate[2 π r2 ϕSQ[r] nSQ[r], {r, 0, ∞}, Assumptions → {α > 0, (kB t) > 0}]
```

```
Out[18]=  $\frac{12 kB^4 \pi t^4}{\alpha^3}$ 
```

```
In[19]:= epmSQ = FullSimplify[epttotalSQ / nttotalSQ]
```

```
Out[19]= 3 kB t
```

Conclusão : Energia total média = (3 + 3 / 2) kB T = (9 / 2) kB T