Processos binários em átomos de Rydberg

Lucas Larcher Caliri

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências: Física Básica.

Orientador: Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa

São Carlos

2006

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Caliri, Lucas Larcher

"Processos binários em átomos de Rydberg".
Lucas Larcher Caliri – São Carlos, 2006

Dissertação (Mestrado) – Área de Física Básica do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo.-.2006 - Páginas: 75

Orientador: Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa
1- Processos binários, 2- Átomos de Rydberg

I. Título

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400,
13560-970 São Carlos, SP

Fone/Fax 16 3373 9777
www.if.sc.usp.br
wladerez@ifsc.usp.br

*MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **LUCAS LARCHER CALIRI** APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 21/12/2006.*

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa (Orientador e Presidente) - IFSC/USP

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr (IFSC/USP)

Prof. Dr. Luiz Eduardo Evangelista de Araújo (UNICAMP)

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

DEDICATÓRIA

DOMINUS ILLUMINATIO MEA

Aos meus pais, meus irmãos, minha noiva,
meus amigos e meus professores

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Marcassa, meu orientador, pelo exemplo de dedicação e profissionalismo, assim como pelos momentos de amizade;

Ao Professor Vanderlei Bagnato, por estar sempre disposto a discutir problemas e experimentos e pelo exemplo de motivação;

Ao Professor Reginaldo Napolitano, por nunca deixar de me atender quando uma análise fenomenológica fosse necessária;

Aos colegas do Grupo de Óptica: Valter Aragão, André Luiz, Daniel Magalhães, Gustavo Telles, Carlos Menegatti, Emanuel Henn e Edmir Ramos, pelas constantes discussões e oportunidades de aprendizagem;

Aos funcionários do Grupo de Óptica, Biblioteca, do Serviço de Graduação e Pós-Graduação, por tornar tudo factível;

Aos amigos do IFSC e da USP: Ivan, Gerson, Matheus, Fernando, Guilherme, Rafael, Alexandre, Rodrigo, Magnus, Dênis e Thiago, por inúmeros churrascos, cervejas e risadas;

Por fim, ao Instituto de Física de São Carlos, à Universidade de São Paulo e à FAPESP pela educação de altíssima qualidade.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

RESUMO

O presente trabalho procura investigar alguns dos processos colisionais de átomos de Rydberg ultrafrios. Utilizando uma armadilha Magneto-Óptica (MOT), foi possível aprisionar átomos de ^{85}Rb, um elemento alcalino metálico, numa região da ordem de 1mm a temperaturas da ordem de poucas centenas de μK, regime chamado de "ultrafrio" na literatura. Os átomos de ^{85}Rb são então excitados para estados de alto número quântico principal, também chamados de estados de Rydberg, através de um laser pulsado. Nesses estados excitados, os átomos apresentam propriedades exageradas devido ao tamanho da órbita do elétron de valência, sendo uma delas os potenciais de longo-alcance. Em nossos experimentos, após a excitação, são detectados atómos em estados vizinhos ao originalmente excitado, evidenciando a existência de transições. Como esses estados são muito próximos em energia, a presença de potenciais de longo alcance pode fazer a energia de um par de átomos de Rydberg no seu estado inicial ficar ressonante com a energia do mesmo par numa combinação de outros estados, tornando então possível transições para esses estados. Nosso estudo visa quantificar de certa forma essas observações, assim como estimar a importância do movimento desses átomos nas transições observadas.

ABSTRACT

This dissertation seeks to address some of the characteristics of collisional processes in ultracold Rydberg atoms. With a Magneto-Optical Trap (MOT), we trapped a sample of ^{85}Rb, an alkaline metal element, in a region of about 1mm at a temperature of a few hundreds of μK, known in the literature as the "ultracold" regime. The ^{85}Rb atoms are then excited to high principal quantum number states, also known as Rydberg states, with a pulsed laser. In these states, the atoms present exaggerated properties due to the large valence electron orbit, such as long-range potentials. In our experiments, after excitation, we have detected atoms in neighboring states to the originally excited state, an evidence of atomic transitions. Since these states have similar energy, the presence of long-range potentials can make the energy of a pair of atoms in the initial state be resonant with the energy of the same pair in a combination of different states, making it possible to have transitions to these nearby states. Our work tries to quantify these observations, as well as to gauge the role of atomic movement in these transitions.

SUMÁRIO

1-INTRODUÇÃO 1

2-ÁTOMOS DE RYDBERG 7

2.1 - HISTÓRICO 7
2.2 - FUNÇÕES DE ONDA 11
2.3 - EFEITO STARK 17
2.4 - COLISÕES DE ÁTOMOS DE RYDBERG 20
2.5 - DINÂMICA DE COLISÃO 26
2.6 - RADIAÇÃO DE CORPO NEGRO 32

3 - ÁTOMOS DE RYDBERG ULTRAFRIOS 39

3.1 - APRISIONAMENTO E RESFRIAMENTO DE ÁTOMOS NEUTROS 39
3.2 - APARATO EXPERIMENTAL: SISTEMA DE VÁCUO 43
3.3 - APARATO EXPERIMENTAL: LASERS DE APRISIONAMENTO 44
3.4 - PRODUÇÃO E DETECÇÃO DE ÁTOMOS DE RYDBERG 46
3.5 - SEQÜÊNCIA TEMPORAL E SISTEMA DE AQUISIÇÃO 50

4 - RESULTADOS EXPERIMENTAIS 52

4.1 - MEDIDAS DEPENDENTES DA DENSIDADE 52
4.2 - SUPRESSÃO DE COLISÕES 64

5 - CONCLUSÕES 70

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 - *Potencial sentido pelo elétron, sem considerar as camadas internas.* 15
FIGURA 2.2 - *Densidade de Probabilidade de se encontrar o elétron em determinada distância, calculada numericamente.* 16
FIGURA 2.3 - *Mapa Stark para o Sódio na região de n=15, m=0.* 19
FIGURA 2.4 - *çntera ão Dipolo-Dipolo e orienta ão do par de átomos em rela ão ao campo elétrico.* 21
FIGURA 2.5 - *çlustra ão de um cruzamento de potenciais.* 27
FIGURA 2.6 - *Modelo de Landau-Zener.* 30
FIGURA 2.7 - *Exemplo de dinâmica de colisão para o estado 35P resultante da solisão 35S + 35S, q=0.3.* 32
FIGURA 2.8 - *Número médio de fótons em fun ão da freqüência da radia ão.* 34
FIGURA 2.9 - *Freqüência da radia ão que acopla os estados nP e nS .* 34
FIGURA 2.10 - *Esquema da dinâmica proposta por Einstein, supondo estados não degenerados.* 35

FIGURA 3.1 - *Funcionamento da armadinha magneto-óptica.* 41
FIGURA 3.2 - *Lasers de armadilhamento e rebombeio.* 43
FIGURA 3.3 - *Esquema simplificado do aparato experimental.* 46
FIGURA 3.4 - *Espectro típico obtido em uma de nossas medidas.* 48
FIGURA 3.5 - *Sinal de eletrons resolvido no tempo mostrando dois estados.* 49
FIGURA 3.6 - *Seqüência temporal do experimento, envolvendo a detec ão por ioniza ão e a integra ão analógica da popula ão* 51

FIGURA 4.1 - *Figura 4.1 - Diferen a de energia entre os canais de entrada e saída da colisão 4.1* 53
FIGURA 4.2 - *Evolu ão temporal das popula ões 32S (iniciando em cerca de 1) e 32P* 54
FIGURA 4.3 - *Dependência da popula ão do estado 32P, produto da colisão, com a densidade do estado inicial 32S - em diferentes instantes após excita ão.* 55

FIGURA 4.4 - *Expoente de lei de potência, Extraído do gráfico 4.1* 58
FIGURA 4.5 - *Pontos experimentais da figura 4.4 e previsões do modelo para várias taxas de colisão.* 60
FIGURA 4.6 - *Potenciais nS+nS e nP+(n-1)P, n=36 a 39, calculados de acordo com Singer et al. [14]* 60
FIGURA 4.7 - *Resultados experimentais e modelo de equa ões de taxas, com taxa de colisão efetiva ajustada.* 61
FIGURA 4.8 - *Dependência com a densidade nas colisões nS + nS para diferentes números quânticos.* 62
FIGURA 4.9 - *Dependência com a densidade nas colisões nD + nD para diferentes números quânticos para um tempo entre excita ão e detec ão de 4*μs 63
FIGURA 4.10 - *Esquema da supressão* 65
FIGURA 4.11 - *Efeito de RF (350MHz) na popula ão de elétrons resolvido no tempo, após 6 μs da excitação.* 66
FIGURA 4.12 - *Popula ão relativa do produto de colisão (43P) em fun ão da potência da RF (350MHz)* 67
FIGURA 4.11 - *Potenciais 41D + 41D, calculados conforme Singer et al. [14]* 68

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1 - *Resultados de Balmer, extraído de seu trabalho original [2], comparando os comprimentos de onda medido e os resultados de sua fórmula* 8

TABELA 2.2 - *Algumas Propriedades dos Átomos de Rydberg* 10

TABELA 2.3 - *Cálculo analítico e numérico (na linha de baixo, em itálico) dos elementos de matriz* $\int_0^\infty R_{n1} r R_{n2} r^2 dr$ 14

TABELA 4.1 - *Taxas de transferência induzida por radia ão de corpo negro* $\Gamma_{n1,n'1'}$, *calculadas conforme as observa ões do capítulo 2.* 59

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 - INTRODUÇÃO

O estudo de átomos altamente excitados é um assunto recorrente na física âtomica. Desde Demócrito, o átomo era apenas a unidade indivisível da matéria e após algumas especulações e experimentos de como cargas positivas e negativas se organizavam na estrutura interna no século anterior, finalmente experimentos decisivos estavam sendo conduzidos [1]. As séries de linhas espectrais, obtidas com grande precisão ainda no século XIX graças às técnicas de difração, foram um dos primeiros indícios da estrutura atômica moderna. Apesar de não apresentar uma explicação física, Balmer mostrou em 1885 que havia uma fórmula matemática que resumia os comprimentos de onda das linhas

espectrais observadas nos anos anteriores [2]. A largada para a busca de um novo modelo havia sido dada. No início do século XX, Bohr apresentou seu revolucionário modelo para o átomo de hidrogênio. O verdadeiro *coup de maître* de Bohr foi deduzir de seu modelo a mesma equação que Balmer obteve, inclusive para estados altamente excitados [1].

Após alguns trabalhos na década de 1930 envolvendo propriedades magnéticas dos átomos de Rydberg, os estudos de átomos em estados excitados deram lugar a estudos mais fundamentais, empurrados pelo rápido avanço da Mecânica Quântica. Uma das complicações dos experimentos de átomos excitados nessa época era a mistura de estados na amostra: como os estados excitados eram obtidos através de descargas elétricas em gases, não havia um controle dos estados atômicos na amostras, e nem das colisões que ajudam no rápido decaimento dos estados excitados [3]. Curiosamente, pouco tempo depois, o espaço interestelar se mostrou um ótimo laboratório para os átomos de Rydberg, onde foram observados linhas espectrais de átomos de hidrogênio com $n>100$, situação então impossível nas altas temperaturas terrestres, já que a energia de ionização nesses estados é muito inferior à térmica [4].

Com o advento do laser sintonizável, e sua grande precisão e pequena largura no espectro de freqüência, o

interesse em estados excitados voltou, já que tornou-se factível excitar uma amostra em apenas um estado quântico e conseqüentemente, um estudo mais apurado das propriedades dos átomos de Rydberg [5]. Assim, no início da década 1970, os átomos de Rydberg voltaram a ser de extremo interesse e durante a década e meia seguinte, os experimentos com átomos excitados foram um verdadeiro laboratório da mecânica quântica, como por exemplo nos estudos de defeito quântico (QDT), efeito Stark em átomos alcalinos, radiação de corpo negro e superradiância, entre outros [1]. Após esse grande período produtivo, as idéias para novos experimentos começaram a se esgotar, pouco antes da metade da década de 1980.

As técnicas de aprisionamento e resfriamento de átomos desenvolvidas nas década de 1980 e 1990 revolucionaram os experimentos em física atômica, e conseqüentemente, os estudos de átomos de Rydberg. Um tradicional ícone dessas técnicas, a armadilha magneto-óptica, usa a pressão de radiação para criar uma força restauradora numa região pequena (alguns milímetros) de alto vácuo e resfria os átomos a temperaturas da ordem de centenas de μK. Essas condições levaram a um controle maior na densidade e temperatura dos átomos, implicando maior precisão nas medidas de energia e aumentando a diversidade de

experimentos utilizando átomos de Rydberg que puderam ser realizados. Um exemplo desse avanço é a possibilidade de se medir com grande precisão o tempo de vida desses estados excitados [6]. Outros exemplos incluem as transições para os estados de alto momento angular, que possuem altos tempos de vida; a investigação de pacotes eletrônicos, fundamental para o estudo do limite clássico em física atômica; o estudo da formação de móleculas ultrafrias em estados excitados, um importante passo em direção à chamada super química [7] e a formação de plasmas ultrafrios gerados através de átomos em estados próximos da energia de ionização [8], um novo ramo para a física de plasmas.

Por fim, os átomos de Rydberg são um dos melhores candidatos a experimentos de computação quântica – o próximo grande desafio da física atômica [9]. No entanto, ainda há muitas questões em aberto na área, principalmente no estudo de interações e colisões atômicas. Alguns trabalhos sugerem interação de muitos corpos, como experimentos de átomos de Rydberg em cavidades [10], ionização de átomos excitados com rádio-freqüência [11], difusão de excitação ou a formação de plasmas ultrafrios [8]. Por outro lado, outros resultados apontam para interações de dois corpos como mais relevante em algumas situações, especialmente na formação de móleculas, colisões

atômicas [12], supressão de transições por rádio-freqüência, e curiosamente, também na formação de plasmas ultrafrios [13].

De uma forma geral, as oportunidades mais fascinantes trazidas pelos átomos de Rydberg é o uso de suas propriedades exageradas que permite executar experimentos impossíveis em outros sistemas, como a extrema sensibilidade a campos externos ou enorme momentos de dipolo - e conseqüentemente, enorme interação [14].

Neste trabalho, procuramos estudar alguns processos colisionais de átomos de ^{85}Rb em estados de Rydberg, e mais especificamente, o papel do movimento internuclear no produto dessas colisões - na tentativa de compreender melhor o papel das interações nas colisões de átomos de Rydberg. Procuramos nos concentrar mais especificamente na colisão:

$$nS+nS \rightarrow (n-1)P+nP \quad (1.1)$$

ou em palavras, um par de átomos no estado nS colide, resultando em um átomo no estado (n-1)P e outro átomo no estado nP. Essas colisões envolvendo transferência de excitação são possíveis graças à pequena diferença de energia entre os estados de pares de átomos, que pode se

tornar nula quando incluímos a interação entre os átomos como uma perturbação no sistema original - uma situação similar ao modelo de Landau-Zener [1].

Nossas observações experimentais foram feitas utilizando uma armadilha magneto-óptica, uma montagem experimental difundida entre grupos de física atômica pela sua robustez e facilidade de manuseio. Nessa montagem experimental, como citado anteriormente, a amostra de átomos de Rydberg fica restrita a uma pequena região de alto vácuo e a uma baixíssima temperatura, eliminando muitos efeitos indesejáveis como alargamento Doppler, colisões com átomos "de fundo" e imprecisões resultantes em experimentos com baixas densidades.

No segundo capítulo desta dissertação, procuramos expôr um pouco das teorias desenvolvidas no estudo de átomos excitados, bem como alguns métodos e características relevantes que foram utilizados nos cálculos em nossos modelos. O capítulo seguinte é dedicado às técnicas experimentais e sistemas que utilizamos. O quarto capítulo é por sua vez consagrado aos nossos resultados experimentais e algumas análises em colisões de átomos de Rydberg e a supressão das mesmas. O quinto capítulo contém as considerações finais e conclusões.

CAPÍTULO 2

ÁTOMOS DE RYDBERG

2.1 - HISTÓRICO

Os primeiros estudos experimentais de átomos em estados excitados foram realizados no século dezenove. Em 1853, Ångström apresentou à *Real Academia Sueca de Ciências* seus resultados da medida precisa de quatro linhas do espectro do hidrogênio, graças às técnicas desenvolvidas por Young e Fraunhofer, cerca de meio século antes. Posteriormente, outras medidas foram feitas por outros cientistas, inclusive em outras partes do espectro, sem no entanto contar com uma explicação física consistente [15]. Em 1885, Balmer publicou um artigo [2] em que sugere uma simples fórmula matemática (até então sem

fundamento físico) que relaciona as linhas do espectro de emissão do hidrogênio. Seus resultados (tabela 2.1) reproduziram com grande precisão os comprimentos de onda medidos em diferentes partes do espectro, e como conclusão, ainda propôs que outras linhas deveriam ser observadas.

Tabelle der Wellenlänge für die Wasserstofflinien in 10^{-7} mm.

Fraunhofer's Bezeichnung:	$H\alpha = \frac{9}{8}h$ C	$H\beta = \frac{4}{3}h$ F	$H\gamma = \frac{25}{21}h$ vor G	$H\delta = \frac{9}{7}h$ h	$H\varepsilon = \frac{9}{40}h$ nahe vor H_1	Ultraviolett $H_\zeta = \frac{16}{15}h$	$H_\eta = \frac{81}{77}h$	$H\vartheta = \frac{25}{24}h$	$H_\iota = \frac{121}{120}h$	Mittelwerthe der Grundzahl h
Beobachter:										
Van d. Willigen[1])	6565,6	4863,04	4342,80	4103,8	(H_1 = 3971,30)	—	—	—	—	h = 3647,521
Ångstrom	6562,10	4860,74	4340,10	4101,2	(H_1 = 3968,1)	—	—	—	—	h = 3645,589
Mendenhall	6561,62	4860,16	—	—	—	—	—	—	—	h = 3645,282
Mascart	6560,7	4859,3	—	—	(H_1 = 3967,2)	—	—	—	—	h = 3644,342
Ditscheiner	6559,5	4859,74	4338,60	4100,0	(H_1 = 3966,8)	—	—	—	—	h = 3644,160
Huggins	—	für die ultravioletten H-Linien weisser Sterne				3887,5	3834	3795	3767,5	h = 3643,846
Vogel	—	—	—	—	3969	3887	3834	3795	6769	h = 3644,379
Formel: $H = \frac{m^2}{m^2-2^2}h$	$m = 3$	$m = 4$	$m = 5$	$m = 6$	$m = 7$	$m = 8$	$m = 9$	$m = 10$	$m = 11$	
h = 3645,6	6562,08	4860,8	4340	4101,3	3969,65	3888,64	3834,08	3797,5	3770,2	
h = 3645	6561	4860	4339,283	4100,625	3969	3888	3834,35	3796,875	3769,615	

1) Wenn man diesen, durchschnittlich um $\frac{1}{1500}$ höher stehenden Werthen nur $\frac{1}{3}$ soviel Gewicht beilegt, wie den übrigen Beobachtungen, so erhält man als genauen Mittelwerth für h: 3645.

J. J. Balmer.

83

Tabela 2.1 -Resultados de Balmer, extraído de seu trabalho original [2], comparando os comprimentos de onda medido e os resultados de sua fórmula

Sua fórmula original, para comprimentos de onda

$$H = \frac{m^2}{m^2 - 2^2} 3645{,}6 \text{ mm } 10^{-7} \quad (2.1)$$

viria a se tornar o grande trunfo de Bohr ao propor seu modelo atômico à *Sociedade de Física de Copenhagen*, em 1913. Uma simples manipulação da fórmula acima, para descrever a freqüência da luz emitida ao invés do comprimento de onda (para $n=2$) nos dá

$$\nu = \left(\frac{1}{4b}\right)\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (2.2)$$

que mostra claramente a diferença de energia entre o estado $n=2$ e outros com número quântico principal maiores. Posteriormente, Liveing e Dewar perceberam que as linhas de sódio poderiam ser agrupadas em diferentes séries, e ainda verificaram a existência de dubletos (devido à estrutura fina do estado $3p$) bem definidos em algumas linhas e difusos para outras [1]. Como alguns de seus predecessores, Rydberg trabalhou no estudo de linhas espectrais de vários elementos alcalinos. Sua classificação em séries de linhas *Sharp*, *Principal* e *Diffuse* foram de fundamental importância, e sua tentativa em quantificar as freqüências das linhas em

$$\nu_i = \nu_{\infty i} - \frac{Ry}{(n-\delta i)^2}; i = s, p, d \qquad (2.3)$$

onde $\nu_{\infty i}$, δ_i e Ry representam o limite da série, defeito quântico e cosntante de Rydberg respectivamente, permitiu o estudo quantitativo de outros átomos além do hidrogênio. No entanto, uma verdadeira explicação física de alguns desses fenômenos só foi possível com o modelo atômico de Bohr, que supôs o momentum angular do elétron quantizado em unidades de $\hbar$ e que a luz emitida pelos átomos não compunha um espectro contínuo, como previsto pela teoria clássica de campos eletromagnéticos, mas sim freqüências bem definidas, dependendo das transições entre os estados quânticos. Apesar das conhecidas limitações do modelo atômico de Bohr, podemos verificar através dele as características exageradas dos átomos de Rydberg, que tornam o seu estudo interessante (Tabela 2.2) [1]:

Propriedade	**Dependência em *n***
Energia de ligação	n^{-2}
Energia entre estados adjacentes	n^{-3}
Raio orbital	n^{2}
Momento de dipolo $\langle nd \lvert er \rvert nf \rangle$	n^{2}
Polarizabilidade	n^{7}
Tempo de vida radiativo	n^{3}

Tabela 2.2 – Algumas Propriedades dos Átomos de Rydberg

2.2 - FUNÇÕES DE ONDA

A principal diferença entre átomos alcalinos excitados e o hidrogênio é que os elétrons das camadas mais internas nos alcalinos influenciam o elétron de valência. Quando afastado dessas camadas, o elétron "vê" uma carga elétrica efetiva de grandeza *1e*. No entanto, para os estados em que a probabilidade de se achar o elétron perto da origem é mais relevante, a interação com as camadas internas dificulta a descrição do sistema. Para incluir esses efeitos, é introduzido o *defeito quântico* δ, que leva em conta a diminuição da energia dos estados dos átomos alcalinos através de um número quântico principal efetivo

$$n^{*} = n - \delta \quad \textbf{(2.4)}$$

onde o defeito quântico depende dos números quânticos principal, de momento angular total e azimutal [1]. O defeito quântico foi extensamente estudado nas décadas passadas, resultando em grande precisão em seus valores [16]. A principal motivação para o defeito quântico é a

energia abaixo da ionização do átomo de Rydberg (em unidades atômicas):

$$W = -\frac{1}{2(n-\delta)^2} \qquad (2.5)$$

Supondo que as camadas internas e o núcleo formam um potencial de Coulomb, podemos escrever a equação de Schrödinger estacionária para o elétron sem spin no referencial do centro de massa [17]

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2\mu} - \frac{1}{r}\right)\psi = W\psi \,. \qquad (2.6)$$

Separando a solução da equação 2.6 em variáveis angulares e radial $\psi(r,\theta,\phi) = Y(\theta,\phi)R(r)$ vemos que a parte angular é semelhante à do átomo de hidrogênio, dando origem aos harmônicos esféricos $Y_{lm}(\theta,\phi)$ e que a parte radial pode ser escrita em função de $U(r) = R(r)r$

$$\left(-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}\right)U(r) = WU(r), \qquad (2.7)$$

onde identificamos o primeiro termo à esquerda como a energia cinética, o segundo como o potencial de Coulomb e o terceiro como o potencial centrífugo. Como W não é auto-valor dessa equação (devido à introdução do defeito quântico), a solução diverge perto da origem, dando origem a uma propriedade indesejada nas funções de onda (2.7). Para encontar a função de onda na equação 2.7, optamos por integrá-la numericamente. Como a freqüência de oscilação da função de onda aumenta conforme nos aproximamos da origem, *Bhatti* propôs uma outra substituição [18] onde a freqüência se mantém praticamente constante, sendo desnecessário regular o passo de integração

$$\begin{aligned} &u = \sqrt{r}; \\ &\chi = r^{3/4} R(r); \\ &\left(-\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{4u^2}{(n-\delta)^2} - \frac{(2l+1/2)(2l+3/2)}{u^2} \right) \chi = 8\chi. \end{aligned} \qquad (2.8)$$

Para realizar a integração numérica, utilizamos o método de Numerov [19] onde dada uma equação

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x)u(x) \qquad (2.9)$$

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

podemos usar a seguinte rotina para integrá-la:

$$[1-T(x+h)]u(x+h)+[1-T(x-h)]u(x-h)=[2+10T(x)]u(x)-O(h^6),$$

(2.10)

onde h é o passo de integração e $T(x)=(h^2/12)f(x)$. Para dar início aos cálculos, supomos que $R(r)=\varepsilon<<1$ e que $dR(r)/dr=0$ dado que r é suficientemente grande. Assim, começamos a integração a uma distância suficientemente maior que o ponto de retorno mais externo clássico do elétron, e posteriormente, normalizamos a função de onda. É conveniente usar ainda a função $\chi(u)$, com a seguinte integral equivalente [18]

$$\int_0^\infty R_{n1} r^k R_{n2} r^2 dr = \int_0^\infty \chi_{n1} u^{2k} \chi_{n2} u^2 du \qquad (2.11)$$

Para verificar a validade desse método, fizemos a seguinte comparação com funções de onda hidrogenóides, cujos valores podem ser calculados analiticamente

Estado	**2P**	**5D**	**20P**	**32P**
1S	1.29027	0.19128	0.02432	0.01198
	1.24548	*0.18979*	*0.02254*	*0.01110*
2S	-5.19615	-0.97956	0.07529	0.03685
	-5.23253	*-0.97999*	*0.07478*	*0.03660*
32S	0.01064	-0.03433	3.42068	-1535.25
	0.01047	*-0.03434*	*3.42070*	*-1535.25*
40S	0.00760	-0.02409	1.73707	14.3792
	0.00748	*-0.02410*	*1.73710*	*14.3792*

Tabela 2.3 - Cálculo analítico e numérico (na linha de baixo, em itálico) dos elementos de matriz $\int_0^\infty R_{n1} r R_{n2} r^2 dr$.

Como dito anteriormente, as funções de onda de estados de Rydberg calculadas dessa forma (2.10) divergem conforme nos aproximamos da origem, e por essa razão, nosso algoritmo anula a função de onda quando ela penetra na região classicamente proibida (mesmo no caso da energia ser um autovalor da equação, nosso programa faz essa aproximação - Figuras 2.1 e 2.2). Isso leva a erros nos cálculos como o acima (Tabela 2.3), principalmente quando o valor da função na região próxima à origem é relevante, o que fica evidenciado nos acoplamentos de estados de baixo *n*.

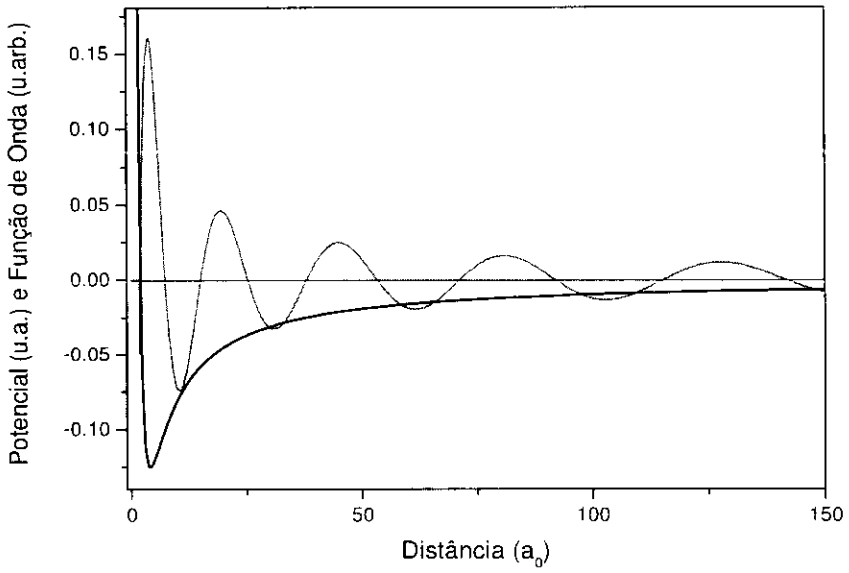

Figura 2.1 - Potencial sentido pelo elétron, sem considerar as camadas internas. A função de onda não está em escala.

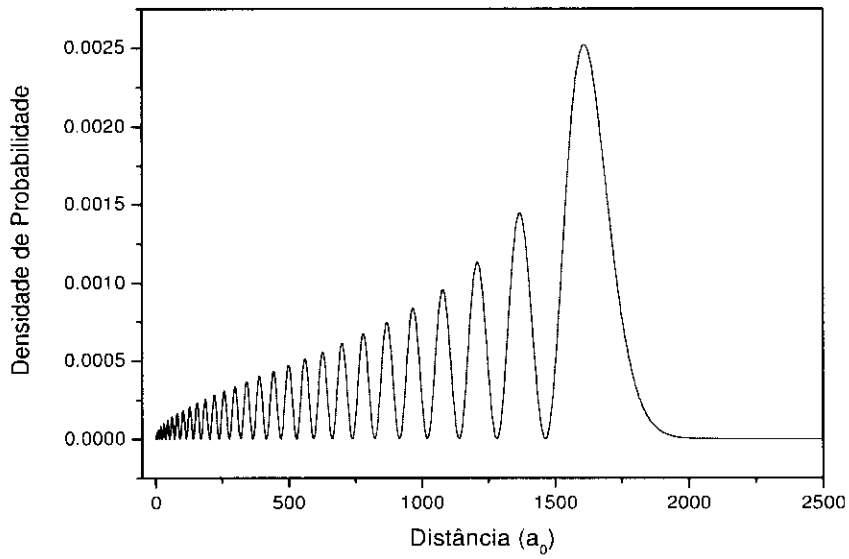

Figura 2.2 - Densidade de Probabilidade de se encontrar o elétron em determinada distância, calculada numericamente.

No entanto, vemos que para os estados altamente excitados há razoável concordância entre os resultados, e acreditamos que o método é preciso o suficiente para os estados que estudamos.

2.3 - EFEITO STARK

Como os átomos de Rydberg possuem grandes dipolos elétricos e polarizabilidades, eles são extremamente sensíveis à presença de campos elétricos. Na aproximação em que ignoramos as camadas eletrônicas internas, o potencial sentido pelo elétron na presença de um campo elétrico uniforme é dado por [17]

$$V = -\frac{1}{r} + Ez \qquad (2.12)$$

e como

$$z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\theta,\phi) \qquad (2.13)$$

podemos escrever o elemento de matriz na forma

$$\langle nlm|Ez|n'l'm'\rangle = E\langle nlm|\sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_1^0(\theta,\phi)|n'l'm'\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}E\mu\langle lm|Y_1^0(\theta,\phi)|l'm'\rangle$$

(2.14)

onde

$$\mu = \langle nl|r|n'l'\rangle \qquad (2.15)$$

é a integral na coordenada radial. A integral nas coordenadas angulares podem ser calculadas usando [20]

$$\langle lm|Y_1^0(\theta,\phi)|l'm'\rangle = (-1)^{l'+1}\left[\frac{3(l+m+1)(l-m+1)}{4\pi(2l+3)(2l+1)}\right]^{1/2} \qquad \begin{cases} l' = l+1 \\ m' = m \end{cases}. \qquad (2.16)$$

Assim, vemos que o campo elétrico acopla os estados através de um fóton com polarização linear. Para utilizar a fórmula acima, verifica-se inicialmente se $\Delta m = 0$ e se $\Delta l = \pm 1$. Assim, define-se *l'* como o maior dos números *l*. Essa integral também pode ser escrita em função dos *símbolos 3j* [20]

$$\langle lm|Y_1^0(\theta,\phi)|l'm'\rangle = A(l',m',l,m) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}(-1)^{l'-m'}\sqrt{\max(l,l')}\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & 0 & m \end{pmatrix}$$

(2.17)

No caso de acoplamentos entre estados *S* e *P*, o único termo não nulo é

$$A(0,0,1,0) = -\sqrt{\frac{1}{4\pi}} \,. \qquad (2.18)$$

Escrevendo-se então a matriz composta pelos elementos calculados para as funções da base escolhidas, e diagonalizando-a, obtém-se o mapa Stark [21]. Normalmente, dado um certo *n*, é preciso levar em conta todos os valores de *l* e *m* permitidos, além de alguns estados dos *n* adjacentes (se a energia for próxima - Figura 2.3), fato que leva a matriz crescer rapidamente com *n*.

Essa grande sensibilidade dos átomos de Rydberg ao campo elétrico (figura 2.3) é de extrema importância, já que a técnica mais utilizada para a detecção desses átomos, chamada Detecção por Campo Ionizante, utiliza-se dessa característica. Nessa técnica, um forte campo elétrico que varia no tempo é aplicado na região da amostra, ionizando os átomos ao mesmo tempo em que os elétrons são detectados. Assim, podemos identificar em que estado os átomos estavam quando analizamos quando eles foram ionizados [5].

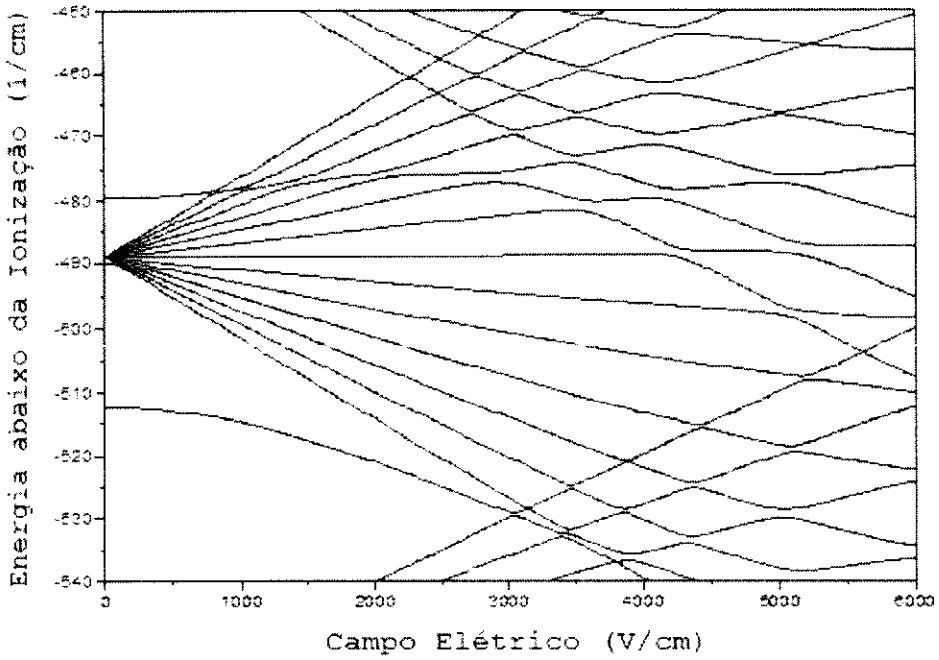

Figura 2.3 - Mapa Stark para o sódio na região de n=15, m=0

2.4 - COLISÕES DE ÁTOMOS DE RYDBERG: INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO

Devido aos grandes momentos de dipolo (e polarizabilidade), os átomos de Rydberg interagem fortemente entre si, mesmo a grandes distâncias. Colisões são uma grande oportunidade para testar modelos que prevêem essa interação, normalmente através de cálculos

de potenciais de longo alcance. Como os estados de Rydberg possuem uma pequena diferença de energia entre si, o efeito de um acoplamento entre os estados é extremamente relevante, fato que pode ser evidenciado ao analisarmos o efeito de uma perturbação não-diagonal, que acopla diferentes estados (não degenerados, por simplicidade) [17]

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p\neq n}\sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_i^0} |\varphi_p^i\rangle \qquad (2.19)$$

Assim, percebemos que as funções de onda perturbadas são na verdade uma mistura das funções de onda não perturbadas - o que pode causar transições entre estados originalmente ortogonais [17].

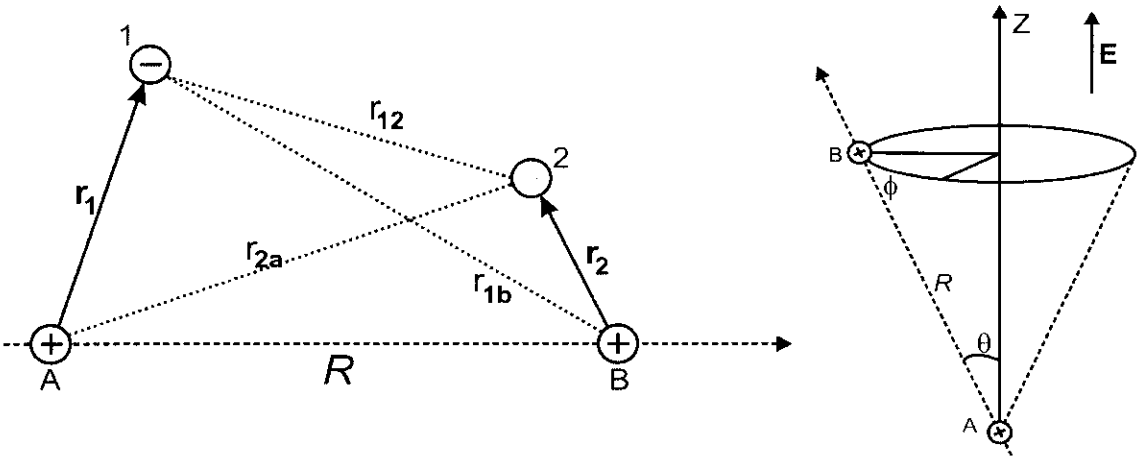

Figura 2.4 - Interação Dipolo-Dipolo e orientação do par de átomos em relação ao campo elétrico

Como mostrado na tabela 2.2, o raio orbital de um átomo de Rydberg cresce com n^2, levando a átomos com raios superiores a 0.5 μm para estados próximos a $n=30$. Como fizemos antes, vamos supor que um átomo excitado pode ser representado por um caroço de carga efetiva +e e um elétron de valência (Figura 2.4). Assim, supondo que os dois átomos se encontram a uma distância internuclear R, inicialmente fixa (aproximação de *Born-Oppenheimer*), e na presença de um campo elétrico (uma situação mais geral) escrevemos a Hamiltoniana

$$H = H_0 + H', \qquad (2.20)$$

onde

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \qquad (2.21)$$

descreve os dois átomos de forma independente, e

$$H' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \qquad (2.22)$$

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

a interação interatômica. Para grandes distâncias internucleares (quando a separação entre os átomos é bem maior que a o tamanho dos dois átomos), H' torna-se pequena em relação a H_0 e um tratamento por Teoria de Perturbação torna-se viável. Expandindo H' em potências negativas de R ($r_1, r_2 << R$), o principal termo de interação vem dos dois dipolos $\boldsymbol{p}_1 = -e\boldsymbol{r}_1$ e $\boldsymbol{p}_2 = -e\boldsymbol{r}_2$:

$$H' = \frac{\bar{p}_1 \cdot \bar{p}_2}{R^3} - 3\frac{(\bar{p}_1 \cdot \vec{R})(\bar{p}_2 \cdot \vec{R})}{R^5} \qquad (2.23)$$

e podemos então usar as auto funções da Hamiltoniana não perturbada que já calculamos anteriormente como base. As funções de onda são dadas pelo produto tensorial dos dois espaços:

$$|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle . \quad (2.24)$$

Supondo que a distância internuclear tem coordenadas (Fig. 2.4)

$$\begin{aligned} R_x &= R\sin(\theta)\cos(\phi) \\ R_y &= R\sin(\theta)\sin(\phi) \qquad (2.25) \\ R_z &= R\cos(\theta), \end{aligned}$$

escrevemos o operador H' em função das coordenadas cartesianas e angulares

$$H' = \frac{e^2}{R^3}[x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$$
$$-3(x_1\sin(\theta)\cos(\phi) + y_1\sin(\theta)\sin(\phi) + z_1\cos(\theta))(x_2\sin(\theta)\cos(\phi) + y_2\sin(\theta)\sin(\phi) + z_2\cos(\theta))]$$

(2.26)

Percebemos pela Figura 2.4 a simetria do problema em torno do eixo z, então fazendo uma média em ϕ, obtemos:

$$H' = \frac{e^2}{R^3}[x_1x_2(1-3\sin^2(\theta)) + y_1y_2(1-3\sin^2(\theta)) + z_1z_2(1-3\cos^2(\theta))].$$

(2.27)

Assim, percebemos que a interação depende do ângulo entre o vetor distância com o campo elétrico. Na ausência de um campo, fazemos θ=0 e obtemos o resultado conhecido para interações dipolo-dipolo [14]. Para calcular os elementos de matriz de H', lembramos que

$$x = \sqrt{\frac{4\pi}{6}}r[Y_1^{-1}(\theta,\phi) - Y_1^1(\theta,\phi)]$$
$$y = \sqrt{\frac{4\pi}{6}}ri[Y_1^1(\theta,\phi) + Y_1^{-1}(\theta,\phi)] \qquad (2.28)$$
$$z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_1^0(\theta,\phi),$$

onde os Y_l^m são os harmônicos esféricos. Introduzimos então as variáveis

$$\xi = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^1$$
$$\xi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^{-1} \qquad (2.29)$$

e reescrevemos H' como

$$H' = -\frac{e^2}{R^3}\left[\zeta_1\zeta_2^+(1-3\sin^2(\theta)) + \zeta_1^+\zeta_2(1-3\sin^2(\theta)) - z_1 z_2(1-3\cos^2(\theta))\right],$$

(2.30)

que é mais simples de calcular, usando as propriedades de integrais de harmônicos esféricos 2.16 e 2.17.

Seja por meio de cálculo de perturbação para estados degenerados ou calculando-se os elementos de matriz e diagonalizando-a, essa interação dá origem aos potenciais dos átomos de Rydberg [14], normalmente calculados na ausência de campos. O termo típico desses potenciais é - C_6/R^6, normalmente chamado de potencial de Van-der-Waals - mas muitos outros termos relevantes geralmente aparecem. A dependência dos potenciais com R é devida a vários

fatores, mas dada principalmente pelos estados envolvidos, onde se deve considerar as simetrias dos estados moleculares [14]. Com o termo de interação (2.23), podemos incluir a interação de dipolo nos potenciais calculados por outros métodos. Como a maioria dos grupos utiliza potenciais calculados com teoria de perturbação, optamos por utilizar os mesmos potenciais disponíveis na literatura para sermos capazes de comparar melhor nossos resultados com os obtidos por outros grupos.

2.5 - DINÂMICA DE COLISÃO: MODELO SEMI-CLÁSSICO

Nosso modelo para a dinâmica das colisões de Rydberg é uma adaptação de um modelo proposto para a interação dipolar [22], em que o par é atraído para uma região onde há um cruzamento de potenciais (*crossing*), e com uma certa probabilidade, o par troca de curvas potenciais completando assim uma transição para outro estado. A probabilidade de troca de potenciais no *crossing* é calculada usando-se o modelo de Landau-Zener [23,24]. Nesse modelo semi clássico, calculamos a trajetória do par classicamente até o ponto de cruzamento dos

potenciais, onde decidimos (de forma quântica) se o par troca ou não de potenciais (Figura 2.5). Apesar de ser limitado, esse modelo apresenta grande validade se as condições necessárias de aplicabilidade forem garantidas [25]. Para saber quantos pares atingem o ponto de cruzamento após um certo atraso em relação à excitação,

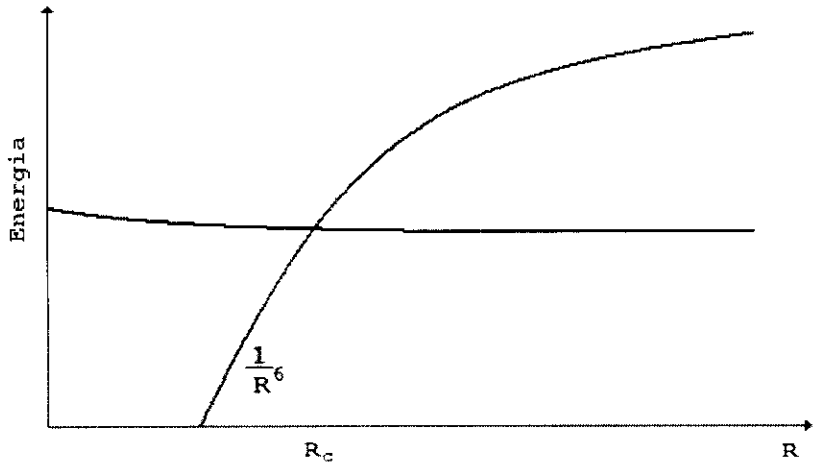

Figura 2.5 - *Ilustração de um cruzamento de potenciais*

supomos que há uma distribuição inicial $n(R_0)$ de pares com distância internuclear R_0 (medida em relação ao cruzamento). Assim, o número pares que estão separados por uma distância R_0 mais ou menos dR_0, é dada por

$$\Delta N = 4\pi n(R_0)R_0^2 dR_0 \qquad (2.31)$$

Podemos então supor que esse grupo de pares dentro de uma faixa infinitesimal demorará o mesmo tempo para atingir a região de interesse. Assim, partindo da equação de energia para um par inicialmente a uma distância R_0 do *crossing* e em repouso (no referencial do centro de massa), encontramos que

$$dt = \left(\frac{\mu}{2C_6}\right)\frac{dR}{(1/R^6 - 1/R_0^6)} \quad . \qquad (2.32)$$

Com uma mudança de variáveis e alguns cálculos, concluímos que o tempo necessário para chegar na origem, dada a distância inicial é

$$t(R_0) = \left(\frac{\mu a}{C_6}\right)R_0^4 \qquad (2.33)$$

onde μ é a massa reduzida, C_6 é o termo do potencial e a é uma constante (na verdade, como não podemos medir o número absoluto, apenas relativo de pares chegando, esse número não é de fundamental importância nos nossos resultados). Assim, combinando (2.31) e (2.33), obtemos

$$\Delta N \propto nt^{-1/4}. \qquad (2.34)$$

Naturalmente, se as distâncias forem consideráveis, a dependência da população com o tempo é afetada pelo tempo de vida τ do estado excitado. Assim, a probabilidade do par chegar na origem sem decair é

$$P = e^{-2t/\tau} \qquad (2.35)$$

que é o principal termo responsável pela "amortização" do sinal medido. Continuando, precisamos conhecer a probabilidade do par realizar a transição desejada, usando o modelo de Landau-Zener. O modelo de Landau-Zener é na verdade a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo com algumas simplificações, que avalia a possibilidade de haver um cruzamento não adiabático, isto é, de continuar no potencial anterior à perturbação. Todos os cálculos são feitos classicamente até se chegar à região de menor diferença de energia entre os potenciais, onde todos os efeitos quânticos são resumidos com uma probabilidade efetiva de transição naquele instante. Decidimos se há ou não troca de

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

potenciais, dada a probabilidade P de cruzamento não-adiabático

$$P_{LZ} = e^{-A} \quad \text{onde} \quad A = \frac{2\pi\Omega_{12}^2}{\hbar v \left| dV/dR \right|} \qquad (2.36)$$

e Ω_{12} representa o acoplamento de dipolo entre os estados, v a velocidade relativa do par no ponto de *crossing* e

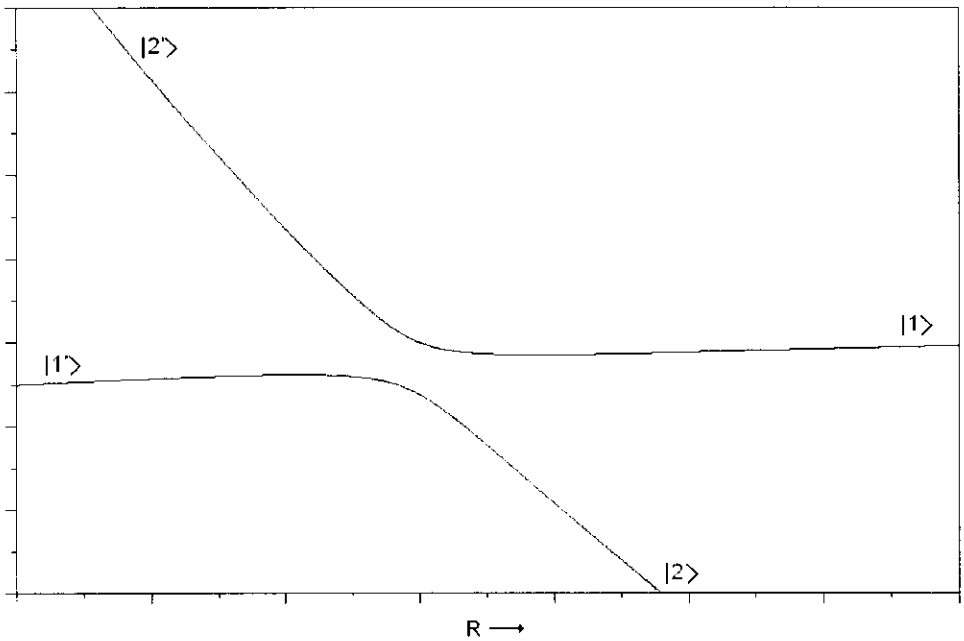

Figura 2.6 - Modelo de Landau-Zener. A probabilidade P do estado $|1\rangle$ fazer uma transição para o estado $|2'\rangle$ (adiabático) é dado pela equação (2.36). Na região de cruzamento os estados se misturam, mas conforme se afastam desse ponto, voltam a apresentar características individuais.

$|dV/dR|$ o módulo da diferença da derivada dos dois potenciais [23,24].

Considerando que o par precisa sair como o estado $|2\rangle$ na figura acima para ser medido (já que estamos detectando átomos nesse estado), e que o par pode oscilar entre os estados $|2'\rangle$ e $|1\rangle$ assim como $|1'\rangle$ e $|1\rangle$ antes de transicionar para o canal de saída, obtemos a probabilidade de transição final para $|2\rangle$ (já considerando o tempo de vida)

$$P_T = \frac{e^{-2t/\tau} q}{1-(1-q)e^{-4t/\tau}} \quad (2.37a)$$

$$q = 2(1-P_{LZ})P_{LZ} \quad (2.37b)$$

Considerando finalmente a população que transicionou para o estado de saída mas não sofreu decaimento espontâneo após um tempo τ_l, devido ao tempo de vida dos estados de saída, e (2.37), (2.35) e (2.34), encontramos que a população no canal de saída após um tempo τ_l é dada por

$$N \propto \int_0^{\tau_l} t^{-1/7} \frac{e^{-2t/\tau} q}{1-(1-q)e^{-4t/\tau}} e^{-(\tau_l - t)/\tau'} dt \qquad (2.38)$$

Para obter a curva da dependência da população com o tempo , precisamos integrar numericamente a integral acima, e obtemos curvas como a abaixo (figura 2.7):

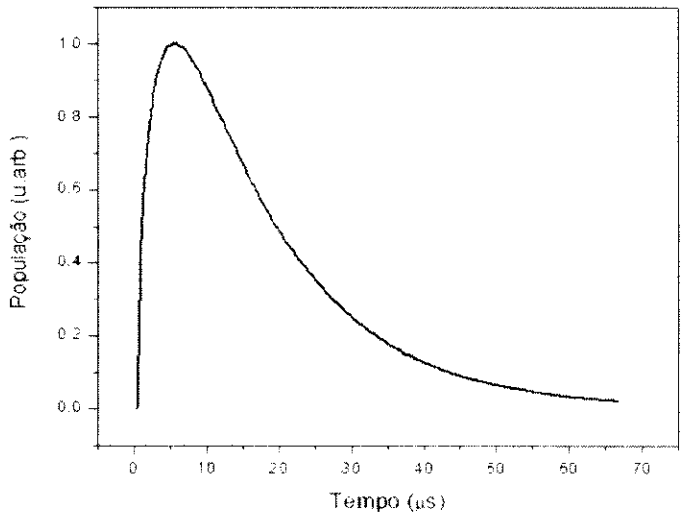

Figura 2.7 - *Exemplo de dinâmica de colisão para o estado 35P resultante da colisão 35S+35S, q=0.3*

2.6 - RADIAÇÃO DE CORPO NEGRO

Conforme avançamos no número quântico principal *n* de um átomo, a diferença de energia entre níveis próximos como *S* e *P* ou *P* e *D* diminui. Por exemplo, a diferença de energia entre os estados $32S_{1/2}$ e $32P_{3/2}$ é de 1,3 10^{11}Hz, ou 130 GHz - região das microondas (*figura 2.9*). A interação dos átomos de Rydberg com a radiação de Corpo Negro

provinda da região próxima dos átomos é de extrema importância, já que o laboratório normalmente se encontra à temperatura próxima de 300 K - que possui muitos fótons nesta região espectral (*figura 2.8*). A interação com essa radiação que acopla estados próximos em energia acaba alterando os tempos de vida em relação aos do vácuo, já que alguns estados estão agora mais acoplados entre si. Esse efeito normalmente é descrito ao inserirmos um termo que aumenta a probabilidade de decaimento para fora do estado [1]:

$$\frac{1}{\tau^T} = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau^{bb}} \quad (2.39)$$

ou seja, o tempo de vida à uma temperatura T pode ser escrito como uma combinação do tempo de vida do átomo no vácuo e uma contribuição da Radiação de Corpo Negro do Ambiente.

A dinâmica dessas transições pode ser entendida de forma simplificada ao supormos um átomo de dois níveis, na presença de uma radiação com densidade de energia $\overline{W}(\omega)$ que acopla os dois estados de forma ressonante. Assim, dividimos as transições em três tipos (figura 2.10):

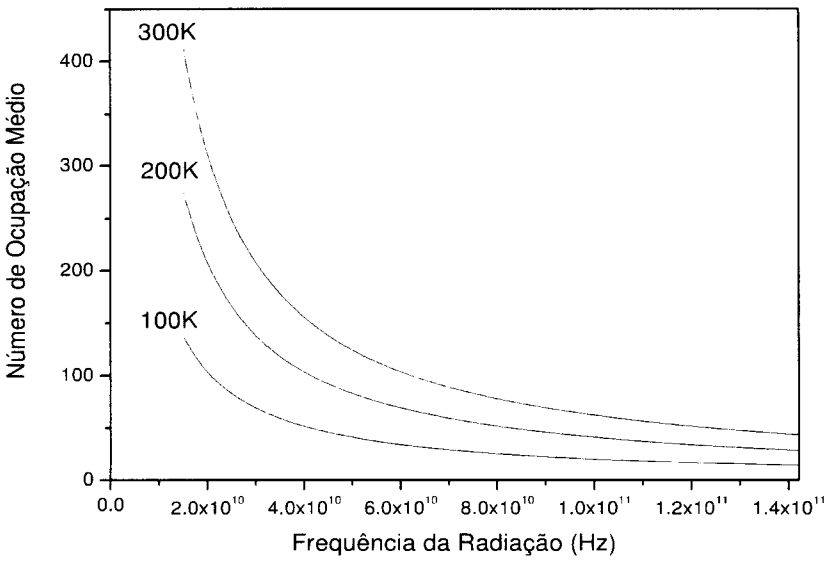

Figura 2.8 - *Número médio de fótons em função da freqüência da radiação. Para freqüências altas, o número médio de fótons para todas as temperaturas vai a zero*

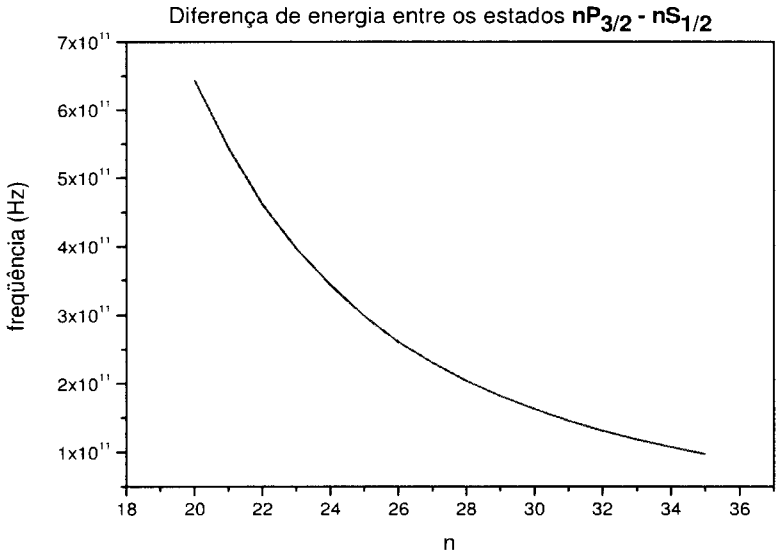

Figura 2.9 - Freqüência da radiação que acopla os estados nP e nS

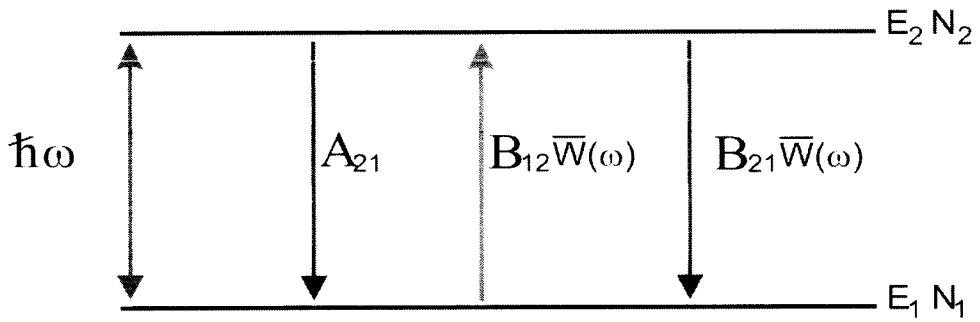

Figura 2.10 - Esquema da dinâmica proposta por Einstein, supondo estados não degenerados.

Supondo $E_2 > E_1$ (Figura 2.10)

i) Se o átomo se encontra no estado *2*, de maior energia, há uma probabilidade A_{21} que o átomo decaia espontaneamente para o estado *1*, emitindo assim um fóton de energia $\hbar\omega$.

ii) Na ausência de radiação, uma transição do estado *1* para o estado *2* seria proibida, já que não há como o sistema conservar energia. No entanto, a radiação $\overline{W}(\omega)$ permite que o átomo absorva um fóton de energia $\hbar\omega$ e passe para o estado de maior energia, a uma taxa $B_{12}\overline{W}(\omega)$.

iii) A radiação $\overline{W}(\omega)$ pode estimular o decaimento para o estado de menor energia, através da emissão estimulada, a uma taxa $B_{21}\ \overline{W}(\omega)$.

Essa dinâmica foi originalmente proposta por Einstein, que já via os fótons como bósons antes de 1920 [26]. Assim, podemos escrever a seguinte equação de taxa para a população do estado *1*:

$$\frac{dN_1}{dt} = N_2 A_{21} - N_1 B_{12} \overline{W}(w) + N_2 B_{21} \overline{W}(w)\ . \quad (2.40)$$

Evidentemente,

$$\frac{dN_2}{dt} = -\frac{dN_1}{dt}\ . \quad (2.41)$$

Assim, dadas certas condições iniciais, é possível obter a dinâmica do sistema - se conhecermos A_{21}, B_{12} e B_{21}. A forma que Einstein propôs foi considerar que não há radiação presente além da térmica, ou seja $\overline{W}(\omega) = \overline{W}_T(\omega)$, o que não altera o problema de encontrar os coeficientes já que eles não dependem da presença da radiação. Assim, no equilíbrio:

$$\frac{dN_1}{dt} = 0 = N_2 A_{21} - N_1 B_{12} \overline{W_T}(\omega) + N_2 B_{21} \overline{W_T}(\omega) \quad (2.42).$$

Ou seja

$$\overline{W_T}(\omega) = \frac{N_2 A_{21}}{N_1 B_{12} - N_2 B_{21}} = \frac{A_{21}}{(N_1 / N_2) B_{12} - B_{21}} \quad (2.43)$$

Comparando com a Lei de Planck:

$$\overline{W_T}(\omega) d\omega = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{\exp(\hbar\omega / kT) - 1}, \quad (2.44)$$

encontramos que

$$B_{12} = B_{21}; \quad (2.45)$$

$$\frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21} = A_{21}; \quad (2.46)$$

$$B_{21} \overline{W}(\omega) = A_{21} \bar{n}, \quad (2.47)$$

onde

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / kT) - 1} \quad (2.48)$$

é o número médio de fótons no modo ω selecionado, à temperatura T. A soma das taxas de emissão é então:

$$B_{21}\overline{W}(\omega)+A_{21}=A_{21}(\overline{n}+1) \quad (2.49)$$

Podemos resumir esse resultado da seguinte forma [27]:

$$\gamma_{ij}=A_{ij}(\overline{n}+\theta_{ij}) \quad (2.50)$$

onde

$$\theta_{ij}=\begin{cases} 1 se E_i \rangle E_j \\ 0 se E_i \langle E_j \end{cases} \quad (2.51)$$

e

$$\frac{dN_i(t)}{dt}=-\sum_j(\gamma_{ij}N_i(t)-\gamma_{ji}N_j(t)) \quad (2.52)$$

dá a dinâmica da populações envolvidas, para dois ou mais estados. Os coeficientes A_{ij}, também conhecidos como *Coeficientes A de Einstein,* podem ser calculados com a mecânica quântica, calculando-se o acoplamento entre o campo elétrico da luz e o átomo. Ele é dado por [1]:

$$A_{n'l',nl}=\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\frac{l_{\max}}{2l+1}\left|\langle n'l'|r|nl\rangle\right|^2, \quad (2.53)$$

onde o estado $|nl\rangle$ possui energia maior. A inserção de outros estados, estendendo o modelo para vários níveis, é direta, observando as equações *2.50-2.53*.

CAPÍTULO 3

ÁTOMOS DE RYDBERG ULTRAFRIOS

3.1 - APRISIONAMENTO E RESFRIAMENTO DE ÁTOMOS NEUTROS: A ARMADILHA MAGNETO ÓPTICA

Os primeiros passos para aprisionar e esfriar átomos usando lasers foram dados em 1975, de forma independente por Hänsch [28] e Wineland [29]. Poucos anos depois, os primeiros resultados experimentais começaram a surgir, e em 1981 Phillips conseguiu desacelerar um feixe de sódio em uma direção, usando pressão de radiação ressonante [30]. Pouco tempo depois, Chu estendeu o princípio em três direções e em 1987, o primeiro MOT foi demonstrado [31], onde luz quase-ressonante foi usada junto com um campo magnético para criar uma força restauradora linear,

aprisionando e resfriando átomos de sódio. O resfriamento de átomos neutros resulta da conservação de momentum entre os átomos e o feixe laser [20]. Podemos descrever de forma muito simplória esse resfriamento usando um sistema de dois níveis, um estado excitado $|e\rangle$ e um fundamental $|f\rangle$. Apesar dessa simplificação ser irreal, as regras de seleção para transições de dipolo com luz circularmente polarizada torna mais aceitável essa aproximação. Na presença de um campo magnético, há um desdobramento Zeeman dos níveis magnéticos m_j do nosso sistema hipotético, com uma energia linearmente dependente do campo magnético então ajustamos dois feixes de laser contra-propagantes com polarizações $\sigma+$ e $\sigma-$ que acoplam o estado fundamental $|f, J=0, m=0\rangle$ aos estados $|e, J=1, m=1\rangle$ e $|e, J=1, m=-1\rangle$ respectivamente. Como mostrado na figura abaixo, o laser de aprisionamento (trap laser) é ajustado com um desvio para o vermelho em relação à transição de campo zero, o que fará com que o átomo absorva um fóton de determinada polarização com maior ou menor probabilidade, dependendo de sua posição. No exemplo da figura 3.1, o átomo se encontra numa posição tal que o nível $|e, J=1, m=1\rangle$ possui uma diferença de

energia $\Delta+$ maior em relação à freqüência do laser do que a diferença $\Delta-$ do estado $|e, J=1, m=-1\rangle$. Isso proporciona uma absorção maior de fótons com polarização $\sigma-$ e conseqüentemente uma pressão de radiação em direção ao centro da armadilha. Dessa forma, cria-se uma força

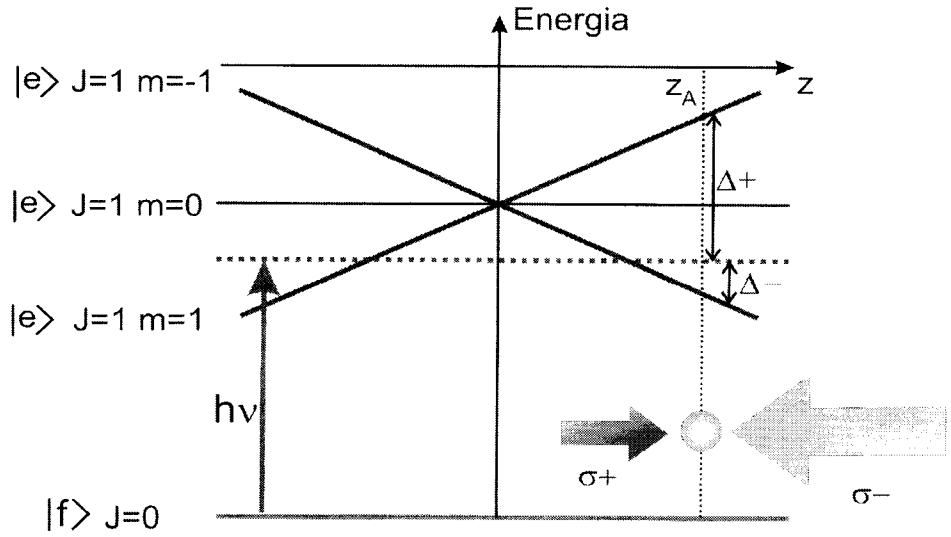

Figura 3.1 - Funcionamento da Armadilha Magneto-Óptica.

restauradora que obriga o átomo a ficar em certa região da armadilha. Um fino balanço entre o campo magnético, a largura de linha, e *detuning* do laser é necessário para que a armadilha funcione. Estendendo o conceito para três

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

dimensões, obtém-se a Armadilha Magneto-Óptica. No entanto, nossa aproximação de dois níveis deve ser estendida para que o MOT funcione corretamente. O elétron de valência do ^{85}Rb ocupa o estado 5S, dando um *spin* eletrônico total de ½, e momentum angular total $J=S+L=½$. O spin total F é formado acoplando-se o *spin* nuclear I (que para o ^{85}Rb é $I=5/2$) a J. Assim, o estado fundamental $5S_{1/2}$ pode ter os níveis $F=2$ *ou* 3, enquanto o estado excitado $5P_{3/2}$ pode ter $F=1,2,3$ *ou* 4. Os lasers usados para resfriar e aprisionar os átomos são ajustados aproximadamente 5 MHz abaixo da transição ($5S_{1/2}$, F=3) → ($5P_{3/2}$, F=4), que possui um comprimento de onda de 780.0 nm. No entanto, o nível ($5P_{3/2}$, F=3) está a apenas 120 MHz do nível ($5P_{3/2}$, F=4), gerando assim uma transferência de população a esse nível, ao invés do desejado. Apesar dessa transferência ser pequena (~0.1%), como o estado ($5P_{3/2}$, F=3) decai espontaneamente para o estado ($5S_{1/2}$, F=2) que está a 3 GHz do estado ($5S_{1/2}$, F=3), o sistema não é auto-sustentável, no sentido que os átomos vão "escapando" para um nível em que o laser não acopla mais o estado fundamental ao excitado. Assim, é introduzido um outro laser para a transição ($5S_{1/2}$, F=2) → ($5P_{3/2}$, F=3), chamado de laser de rebombeio (*repumping laser*).

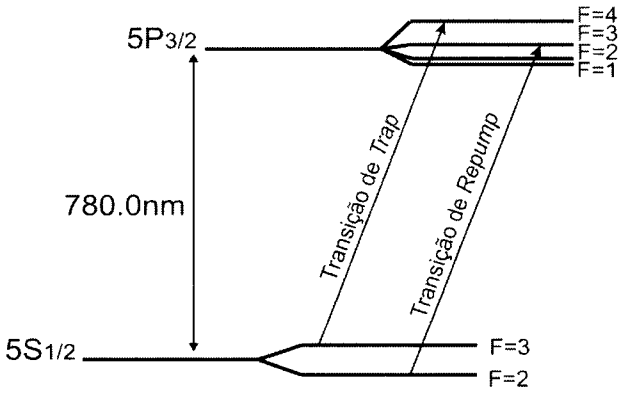

Figura 3.2 - Lasers de armadilhamento e rebombeio : os lasers não são exatamente ressonantes com as transições.

3.2 - APARATO EXPERIMENTAL: SISTEMA DE VÁCUO

Em nosso sistema, utilizamos uma câmara de inox de alto vácuo (~10^{-8} Torr) onde inserimos gás aquecido de ^{85}Rb, com o auxílio de um *dispenser*. A câmara permite acesso óptico através de 10 janelas, nos eixos *z*, *x*, *y*, *x+y*, *x-y*. As janelas são fechadas com flanges do tipo *gasket* de cobre, que garantem o vácuo necessário. O vácuo é obtido e mantido através de uma bomba turbo e uma iônica. A bomba turbo, como o nome sugere, é uma turbina com centenas de pás que gira constantemente a uma taxa de milhares de rotações por minuto, gerando um fluxo de

cerca de 80 litros por segundo - expelindo assim os gases no interior da câmara. No entanto, o vácuo obtido apenas com essa bomba é normalmente insuficiente, e por isso acoplamos o sistema de vácuo também a uma bomba iônica, que ioniza os átomos com uma alta tensão e os mantém na superfície de um eletrodo, retirando permanentemente os átomos do sistema.

3.3 - APARATO EXPERIMENTAL: LASERS DE APRISIONAMENTO

Para gerar o laser necessário ao aprisionamento dos átomos de rubídio, que necessita de um comprimento de onda na região do infravermelho, são necessários vários processos. Inicialmente, usamos o laser de estado sólido *Verdi* da marca *Coherent*. Esse laser usa luz de diodos que passam através de um cristal de $Nd:YVO_4$, criando um campo laser com comprimento de onda de 532nm. Como a luz gerada não possui a freqüência necessária, usamos essa luz para "bombear" um outro cristal de Ti:Safira (também da *Coherent*) e toda sua óptica, que permite um ajuste na cavidade externa para obtermos a freqüência desejada. Para colocar e manter o laser na linha, usamos um sistema de absorção saturada com uma amostra de gás de ^{85}Rb à

temperatura ambiente e um sistema de travamento (*Lock*), que constantemente varre a freqüência numa pequena faixa, e consegue assim estabilizar o laser no pico de absorção. Para gerar o laser de rebombeio, usamos um modulador eletro-óptico. Esse modulador gera uma mudança de freqüência de 3 GHz ao passar por um cristal submetido a uma tensão modulada por um sinal de rádio-freqüência, que altera o índice de refração do cristal. Para o laser de *trap*, aprisionamento usamos um modulador acústo-óptico para gerar o desvio de 40 MHz para vermelho necessário.

Todo o sistema óptico é montado de forma a termos os feixes entrando pelos eixos $z, x-y$ e $x+y$, gerando os contra propagantes por reflexão e uma lâmina $\lambda/4$ antes do espelho, causando assim uma inversão na polarização (Figura 3.3). Podemos acompanhar visualmente a armadilha através de uma câmera CCD sensível ao infravermelho.

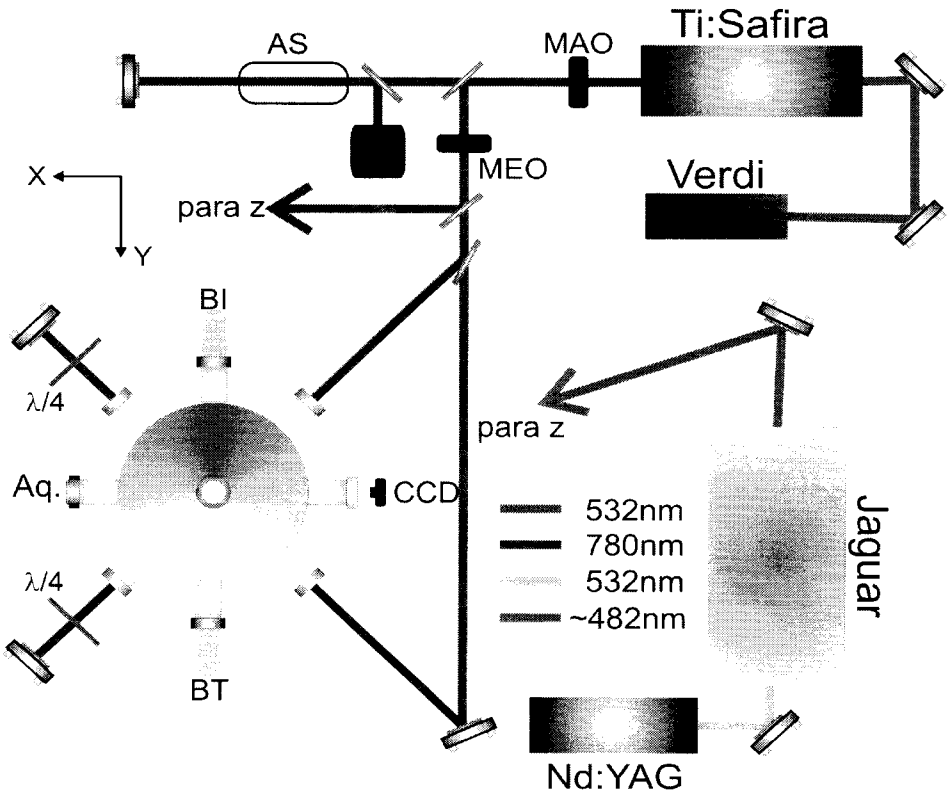

Figura 3.3 - Esquema simplificado do aparato experimental. Legendas: MAO - Modulador Acusto-Óptico; MEO - Modulador Eletro-Óptico; AS - Absorção Saturada; BI - Bomba Iônica; BT - Bomba Turbo; Aq. - Aquisição. Repare que alguns feixes saem do plano mostrado para o eixo z. (Comprimentos de onda na fig.)

3.4 - PRODUÇÃO E DETECÇÃO DE ÁTOMOS DE RYDBERG

Para excitar o átomo a um nível de Rydberg em nosso experimento, são necessários dois fótons. Como vimos, aproximadamente metade dos átomos aprisionados estão no

estado $5P_{3/2}$, então usamos um outro laser para levá-lo a um estado excitado. O comprimento de onda para levar o elétron do estado de aprisionamento $5P_{3/2}$ até um estado próximo de *n=30*, é da ordem de 480.5 nm, enquanto a energia de ionização está por volta de 479 nm (Figura 3.4). Como precisamos "varrer" em certos valores de freqüência e é conveniente usar pulsos de luz ao invés de uma onda contínua, usamos como laser de excitação um

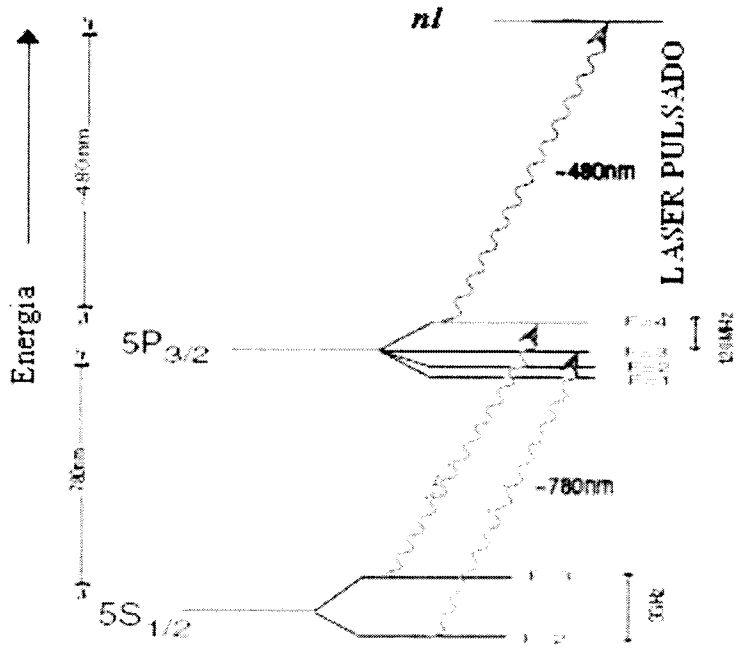

Figura 3.4 - Esquema de Excitação

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Laser Continuum Jaguar de corante (*Exciton Coumarin 480*) bombeado por um *Continuum Surelite* de Nd:YAg, excitado por *flashes* em uma freqüência de 20 Hz (largura temporal de 9 ns, 25 mJ/pulso, 0.2 cm^{-1} de largura de linha). A vantagem de se trabalhar com um laser pulsado é que o experimento pode ser repetido várias vezes por segundo, além de poder estudar os efeitos de colisões ao longo do tempo sem interferência da luz, fato que não seria possível mantendo o laser de excitação em um estado de onda contínua.

A seção de choque para excitar um átomo de Rydberg é dada por

$$\sigma(n) = \frac{\sigma_{PI}}{\Delta W n^3} \qquad (3.3)$$

onde ΔW é a resolução da energia de excitação, e σ_{PI} é a seção de choque de fotoionização próximo ao limite de ionização. Assim, dado uma potência do laser, esperamos que o número de átomos excitados diminua com o número quântico principal (Figura 3.5).

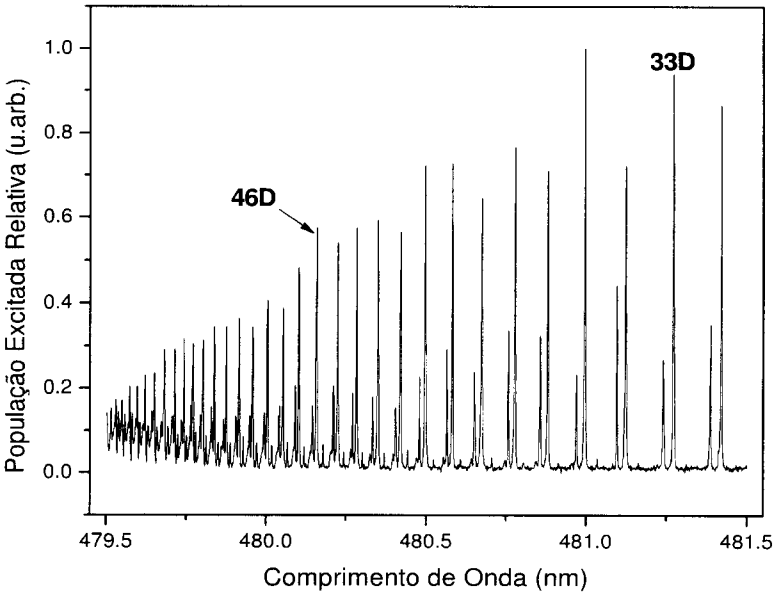

Figura 3.5 - Espectro típico obtido em uma de nossas medidas. Neste gráfico, podemos observar duas características importantes dos átomos de Rydberg: a dependência decrescente da seção de choque em relação à n e a alta sensibilidade dos átomos a campos elétricos - na figura, um campo espúrio ioniza os estados mais energéticos.

Essa dependência com n^{-3} torna necessário uma potência relativamente alta para acessarmos os níveis mais altos com uma população significativa. Dados esses fatores, excitamos entre 5-10% dos átomos inicialmente na armadilha, obtendo finalmente uma densidade da ordem de 10^6-10^7 átomos/cm^3 [4].

Devida à grande sensibilidade dos átomos de Rydberg, a detecção é feita aplicando-se uma rampa de campo elétrico e detectando-se os elétrons emitidos através de uma multiplicadora de elétrons. O campo elétrico uniforme acaba baixando o potencial sentido pelo elétron, sendo que este se ioniza na presença de um campo de magnitude $E = 1/16n^4$ [1]. Conforme variamos o campo ao longo do tempo e coletamos os elétrons, obtemos um espectro de tempo de vôo, como o da figura 3.6 abaixo:

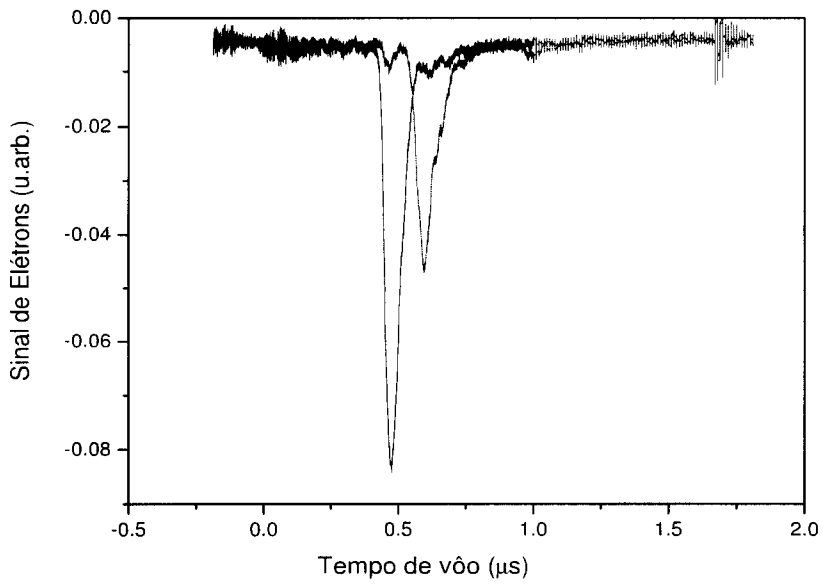

Figura 3.6 - Sinal de eletrons resolvido no tempo mostrando dois estados. À esquerda, o estado 32S e à direita, o estado 32P.

3.5 - SEQÜÊNCIA TEMPORAL E SISTEMA DE AQUISIÇÃO

Como mencionado na seção anterior, a detecção dos átomos de Rydberg nos dá um gráfico da população medida resolvido no tempo (Figura 3.6). No entanto, é preciso transformar esse espectro em um número que representa a população medida, e um bom número é a integral embaixo da curva obtida, a uma taxa de 20Hz (a freqüência em que o experimento é repetido). Um sistema extremamente útil que utilizamos é o chamado *Boxcar Integrator,* (National Instruments) que permite, entre outras coisas, fazer médias para vários espectros obtidos assim como obter uma estimativa para a população total através de um integrador analógico do próprio sistema. A integração é feita selecionando a região e largura da janela *(gate)*, uma função degrau que usamos para selecionar a região de interesse. O sistema *Boxcar* é conectado a um gerador de atraso *(delay)*, de forma a ser possível regular o tempo Δt (Figura 3.6) entre a excitação dos átomos e a detecção, uma montagem essencial para se observar a dinâmica dos estados de Rydberg, como por exemplo, o tempo de vida. Abaixo, podemos ver um esquema da seqüência temporal do experimento:

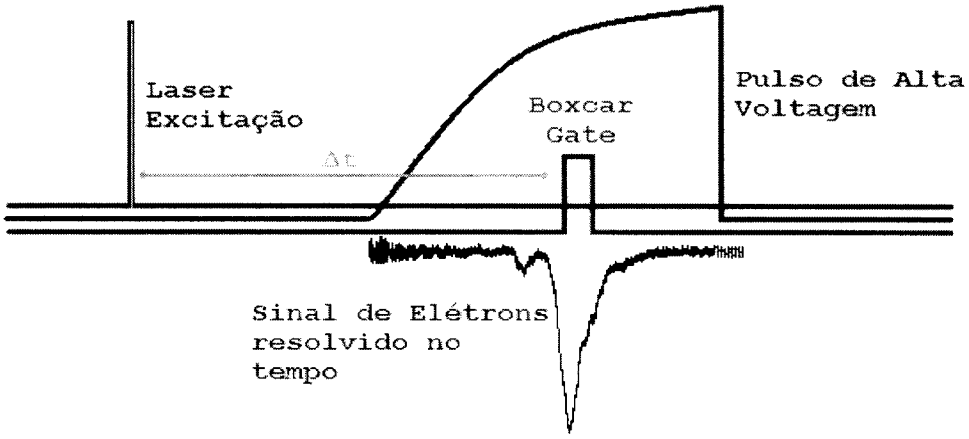

Figura 3.7 - Seqüência temporal do experimento, envolvendo a detecção por ionização e a integração analógica da população

Como esses experimentos geralmente requerem muitos pontos, utlizamos um software criado usando LabVIEW especialmente para nossa seqüência temporal de forma a termos uma aquisisão quase completamente automatizada. Como exemplo, nas medidas de tempo de vida, o software ajusta o tempo entre a excitação e a detecção enquanto salva os dados enviados pelo integrador analógico do *Boxcar*. Dessa forma, podermos repetir o experimento várias vezes e conseqüentemente obter resultados estatisticamente mais significaticos. Obviamente, o pulso de alta tensão e a *gate* são mantidos ajustados para que a *gate* meça o estado desejado.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS EXPERIMENTAIS

4.1 - MEDIDAS DEPENDENTES DA DENSIDADE

Nossas medidas procuraram inicialmente investigar a dependência da população *nP* resultante da colisão 4.1:

$$nS + nS \rightarrow nP + (n-1)P \qquad (4.1)$$

para estimar a importância das colisões de dois corpos na transferência de população. Escolhemos essa colisão em específico por sua simplicidade em relação às outras possíveis. As colisões do tipo nP + nP geralmente requerem um campo elétrico para sintonizar a energia dos canais de entrada e saída e as colisões nD + nD podem

envolver muitos potenciais moleculares, devido ao relativamente alto momento angular [1]. Essas complicações podem ocultar a essência das colisões, o que justifica nossa opção inicial. Nossos experimentos investigam a população do estado *nP* em função da densidade inicial *nS*, para *n* entre 29 e 37, de forma a termos diferentes faixas de energia entre os canais de entrada nS+nS e saída nP+(n-1)P (Figura 4.1). Para obter uma curva dependente da densidade, variamos a quantidade de átomos inicialmente na armadilha (de forma a termos um controle sobre a densidade inicial) controlando a potência do laser de rebombeio, de forma a termos uma

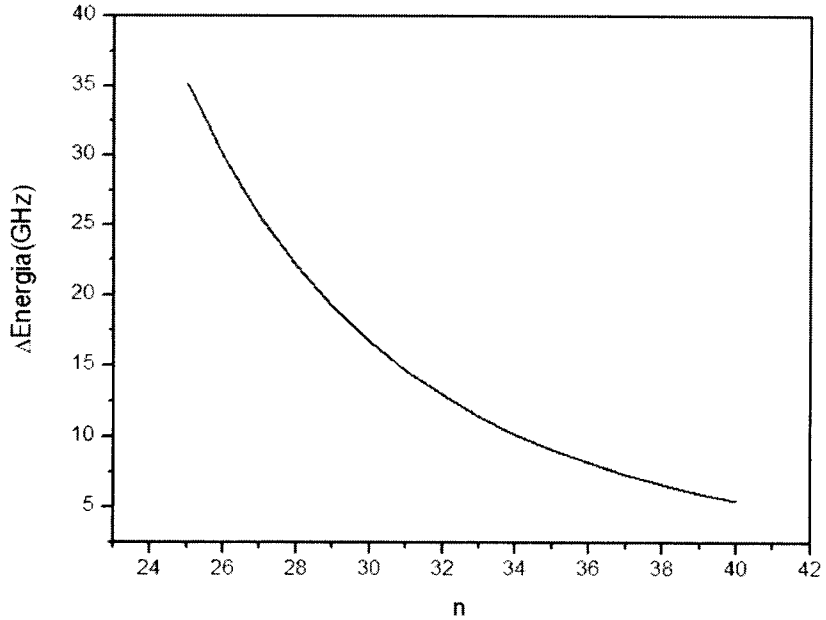

Figura 4.1 - Diferença de energia entre os canais de entrada e saída da colisão 4.1, calculada.

armadilha numa densidade maior ou menor, conforme desejado. Apesar de não medirmos a densidade absoluta de átomos, como o volume da armadilha se mantém constante, a densidade deve ser aproximadamente proporcional à população de átomos medida, fato que já foi observado em medidas anteriores de estudo de perdas em atomos aprisionados [32].

As medidas de densidade são altamente afetadas pelo tempo em que essas medidas são feitas, já que a transfe-

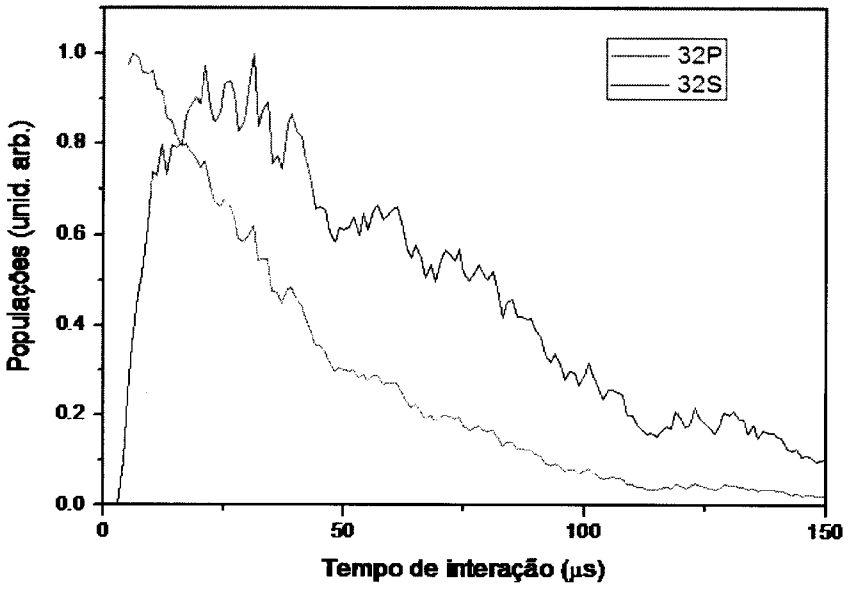

Figura 4.2 - Evolução temporal das populações 32S (iniciando em cerca de 1) e 32P. A população em 32P é produzida pela colisão 4.1. As curvas foram normalizadas para permitir uma análise mais clara.

-rência de população se dá principalmente em instantes curtos (Figura 4.2), de forma que medidas para apenas tempos relativamente altos podem não representar de forma apropriada as dependências na densidade. Dessa forma, procuramos fazer nossos experimentos em diversos instantes entre cerca de 4μs e 50μs (Figura 4.3).

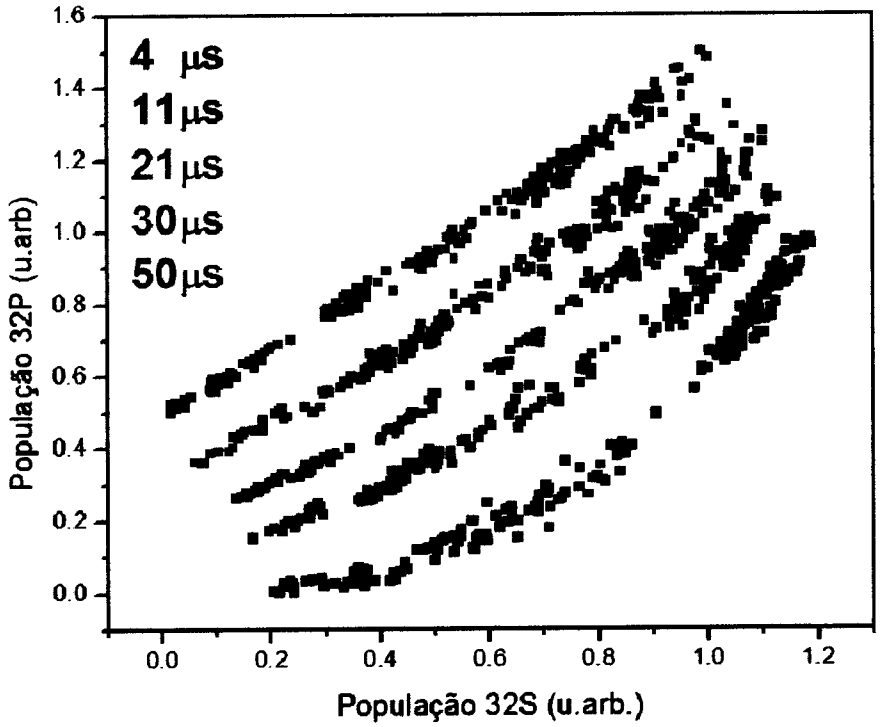

Figura 4.3 - Dependência da população do estado 32P, produto da colisão, com a densidade do estado inicial 32S - em diferentes instantes após excitação. As curvas foram normalizadas e espaçadas para facilitar a visualização.

Medimos as populações com o auxílio do integrador *boxcar* e um programa em Labview, onde mantivemos o tempo entre excitação e detecção fixo mas variamos a densidade da armadilha ao longo do tempo de forma a repetirmos o experimento com densidades iniciais diferentes. Percebemos que para tempos menores, a dependência aparenta seguir uma forma quadrática, e para tempos maiores, linear (Figura 4.3). Uma outra forma de apresentar esses resultados é supor uma simples lei de potência para o comportamento apresentado:

$$N_{32P} = \alpha N_{32S}{}^{\beta} \qquad (4.2)$$

Nessa equação, estamos mais interessados no expoente β, por sua importância em determinar o tipo de processo de transferência de populações. Obviamente, a equação 4.2 é uma simplificação do comportamento da solução do sistema de equações de taxas [33]

$$\begin{aligned}
\frac{dN_{32S}}{dt} &= -\frac{N_{32S}}{\tau_{32S}} - \gamma_{32S32P}N_{32S} - \gamma_{32S31P}N_{32S} - \gamma_C N^2{}_{32S} + \gamma_{32P32S}N_{32P} + \gamma_{31P32S}N_{31P} \\
\frac{dN_{32P}}{dt} &= -\frac{N_{32P}}{\tau_{32P}} - \gamma_{32P32S}N_{32P} + \frac{\gamma_C}{2}N^2{}_{32S} + \gamma_{32S32P}N_{32S} \qquad (4.3) \\
\frac{dN_{31P}}{dt} &= -\frac{N_{31P}}{\tau_{31P}} - \gamma_{31P32S}N_{31P} + \frac{\gamma_C}{2}N^2{}_{32S} + \gamma_{32S31P}N_{32S}
\end{aligned}$$

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Essas equações levam em conta o decaimento radiativo ($1/\tau$), as transferências induzidas por radiação de corpo negro ($\gamma_{nl,n'l'}$) e a transferência por colisão (γ_C). Em princípio, outros estados poderiam ser incluídos no sistema 4.3. Uma análise inicial com 5 estados, mostrou desnecessário incluir mais estados, devido ao fato de que as taxas de transferência por corpo negro são razoavelmente menores para estados mais afastados em energia, e por isso, optamos por incluir apenas esses três estados.

Iniciamos nossa análise extraindo o expoente β para os diferentes instantes em que as medidas foram feitas (Figura 4.3). Como podemos observar, as curvas apresentam expoentes próximos a 2 para tempos pequenos, e tendem a valores próximos a 1 em algumas dezenas de microssegundos (Figura 4.4).

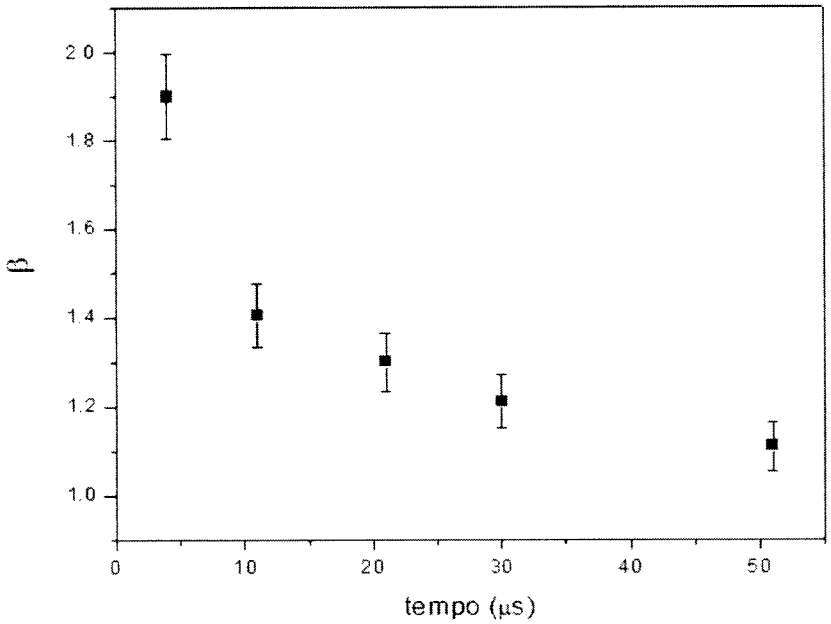

Figura 4.4 - Expoente de lei de potência, extraído do gráfico 4.1

Usando o modelo de equações de taxas (Equação 4.3), podemos resolver o sistema integrando numericamente as equações e comparar as previsões desse modelo com os resultados obtidos. Para facilitar a análise e estimativas de γ_C, o coeficiente de colisão, adotamos uma quantidade padrão de taxa - o coeficiente de Einstein para os estados 32P e 32S, que vale aproximadamente:

$$A_{32P,32S} = 156\ s^{-1} \quad (4.4)$$

Obtendo a solução numérica das equações 4.3, (usando as taxas da tabela 4.1 abaixo) propomos a mesma relação entre as populações 32S e 32P (Equação 4.2) para então extrair o valor do expoente para diferentes instantes.

	32S	**31P**	**32P**
32S	0	2524 s^{-1}	2463 s^{-1}
31P	7403s^{-1}	0	0
32P	7545s^{-1}	0	0

Tabela 4.1 - Taxas de transferência induzida por radiação de corpo negro $\Gamma_{nl,n'l'}$, calculadas conforme as observações do capítulo 2.

Algumas curvas do expoente em função do tempo geradas com esse modelo podem ser vistas na figura 4.5, junto com os pontos experimentais. Como visto, nenhum valor de taxa de colisão reproduz com precisão satisfatória os resultados obtidos experimentalmente. No entanto, devemos nos lembrar que ao escrevermos as equações de taxa 4.3, automaticamente supomos que a taxa de colisão não depende do tempo. Infelizmente nao temos como propor uma dependência *ab initio* da taxa de colisão em função do tempo utilizando o modelo semi clássico que envolve movimento apresentando no capítulo 2, já que os potenciais nS + nS na literatura [14] sao apenas repulsivos (Figura 4.6).

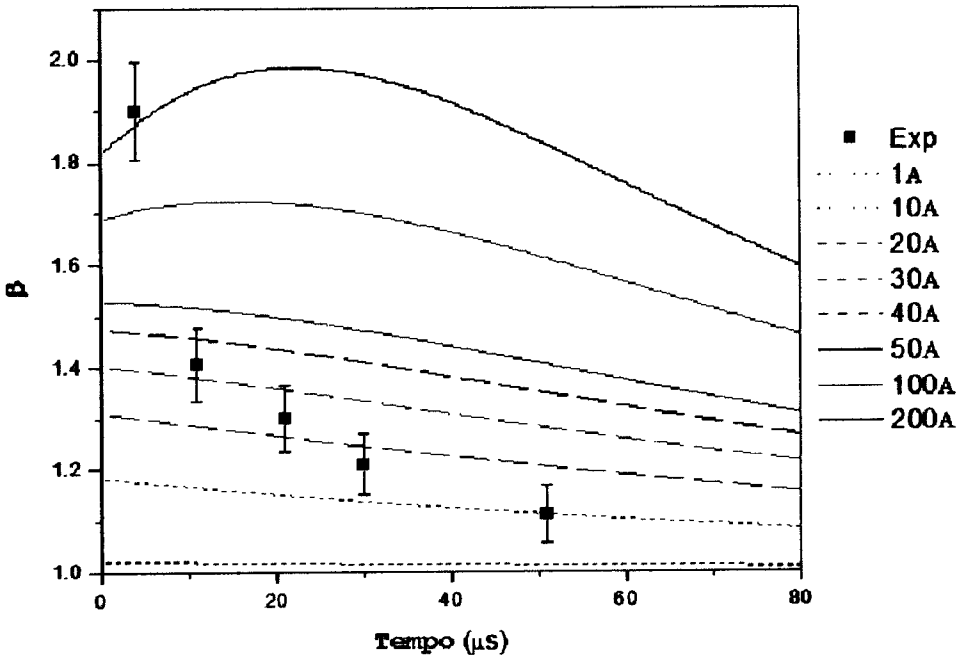

Figura 4.5 - Pontos experimentais da figura 4.4 e previsões do modelo para várias taxas de colisão. As taxas são apresentadas em unidades de A (4.5)

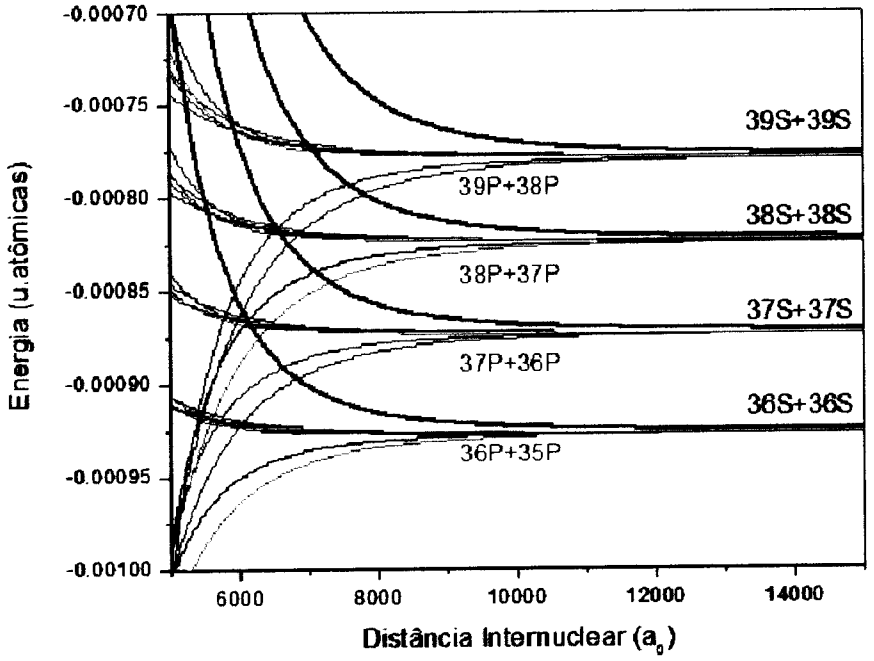

Figura 4.6 - Potenciais nS+nS e nP+(n-1)P, n=36 a 39, calculados de acordo com Singer et al. [14]

Apesar disso, podemos procurar uma taxa efetiva dependente do tempo, isto é, como deveria ser a taxa efetiva até dado instante de tal forma que nosso modelo coincida com os resultados obtidos. Agindo dessa forma, obtemos as seguintes dependências com a densidade (para cada tempo):

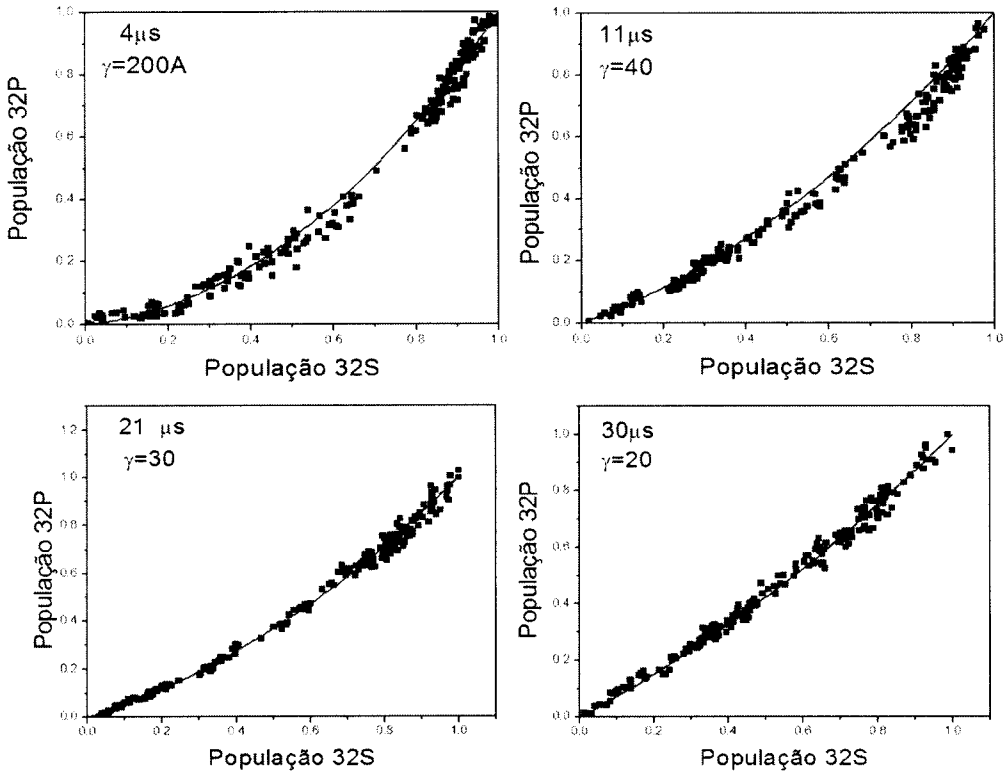

Figura 4.7 - Resultados experimentais e modelo de equações de taxas, com taxa de colisão efetiva ajustada. As curvas estão em unidades arbitrárias de população.

Um estudo das dependências com a densidade para outros números quânticos sugere um comportamento similar para tempos de 4 microsegundos (quadrático):

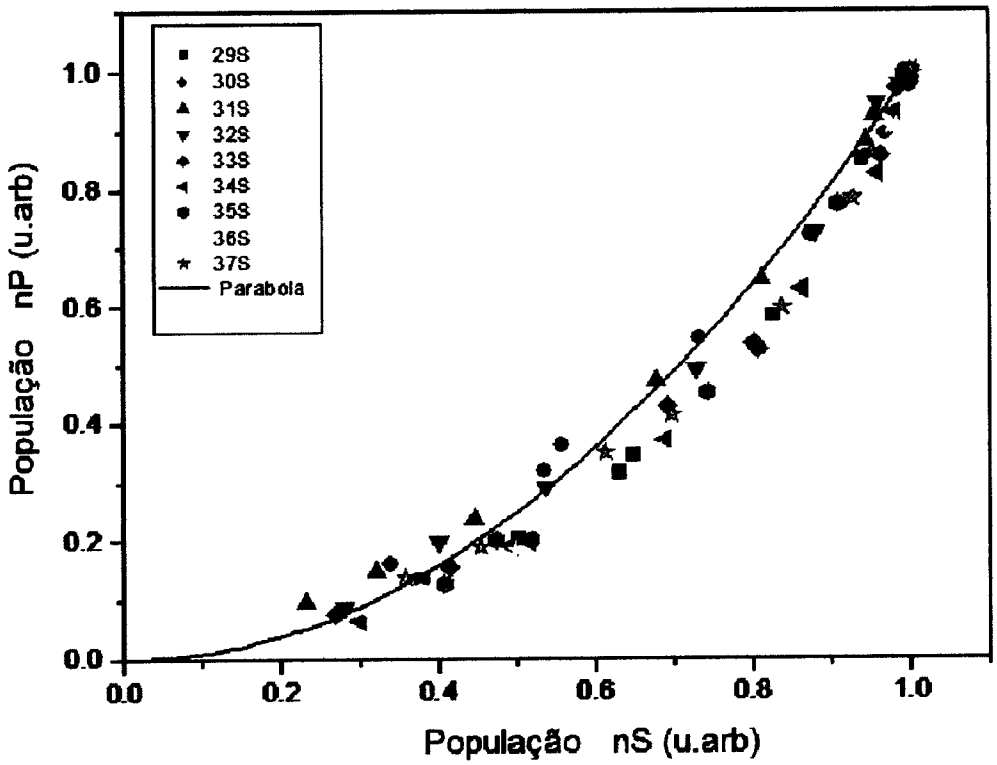

Figura 4.8 - Dependência com a densidade nas colisões nS + nS para diferentes números quânticos.

Acreditamos que esses resultados são evidência da importância da colisão de dois corpos na transferência de populações. Mais especificamente, acreditamos que a transferência causada por colisões se dá em curtos

instantes após a colisão, em taxas efetivas iniciais superiores às taxas de transferência por transferência de corpo negro - que por sua vez, por possuir taxas independentes do tempo, possui uma importância maior para tempos maiores. Uma análise preliminar para as colisões nD + nD mostrou um resultado similar para tempos curtos, isto é, uma dependência aproximadamente quadrática para um tempo de 4 μs.

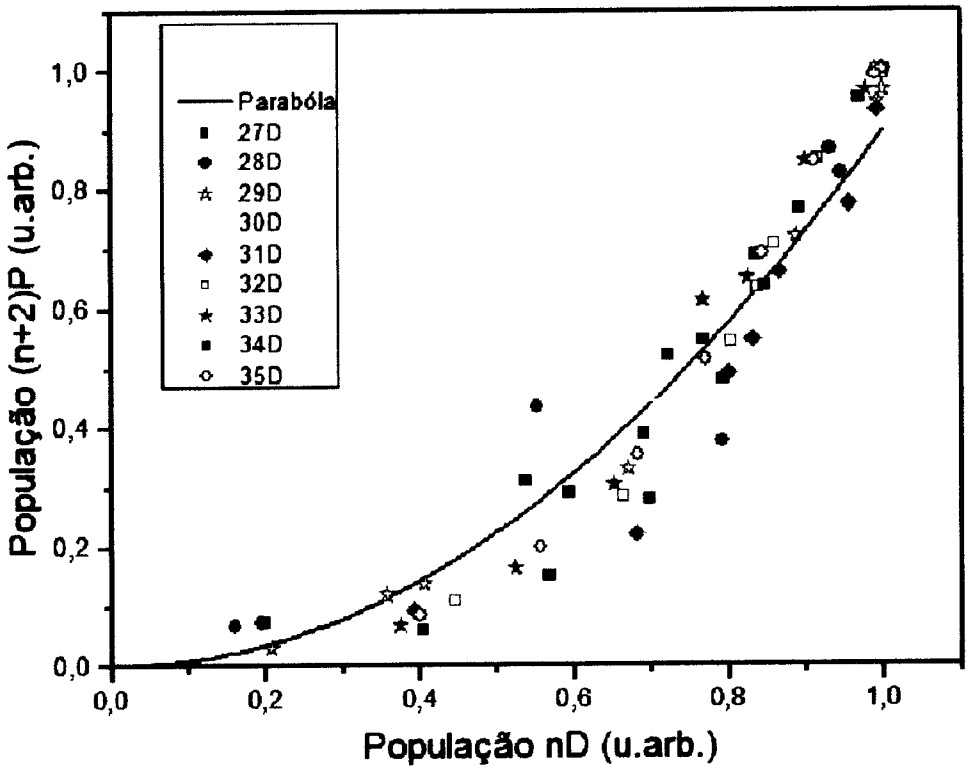

Figura 4.9 - *Dependência com a densidade nas colisões nD + nD para diferentes números quânticos para um tempo entre excitação e detecção de 4μs*

4.2 - SUPRESSÃO DE COLISÕES

Procurando entender melhor o papel do movimento interatômico nas transferências de populações, idealizamos um outro experimento em que seria possível avaliar se as colisões de dois corpos é o fator predominante na transferência de população observada. Assim, decidimos utilizar uma técnica de supressão de colisão por rádio-freqüência (RF), utilizada com sucesso anteriormente em experimentos similares [13]. Escolhemos RF já que não possuímos equipamentos para microondas disponível - o que também requereria uma outra montagem experimental. O experimento consiste em inserir rádio-freqüência na câmara onde a amostra se encontra através de uma antena circular, de forma a acoplar duas simetrias diferentes - levando o par de átomos a um potencial repulsivo ou não tão atrativo quanto o inicial, evitando a colisão e conseqüentemente a transferência de população.

Dentre as várias colisões possíveis, escolhemos as colisões do tipo

$$nD + nD \rightarrow (n-2)K + (n+2)P \qquad (4.5)$$

por proporcionarem um sinal de colisão melhor e pelo fato de que as interações nD + nD são ótimas candidatas a possuírem diversas simetrias diferentes (nK representa um dos estados com momento angular superior ao D).

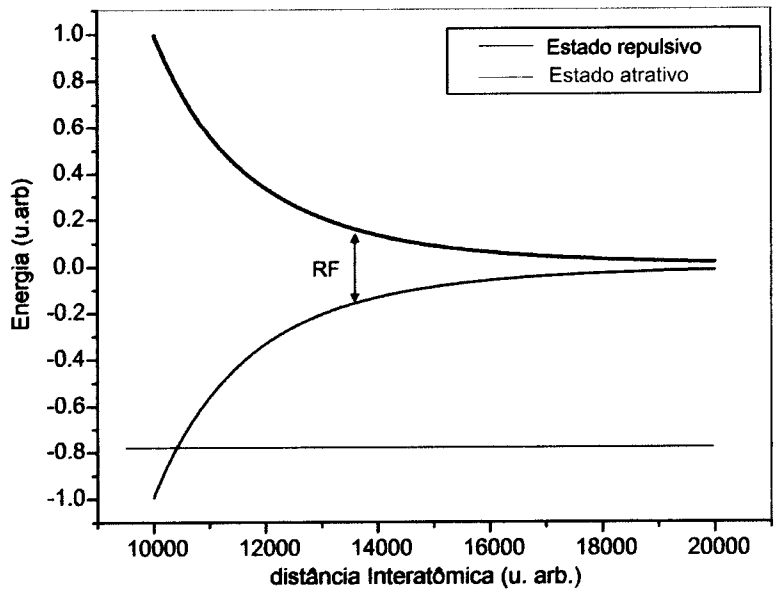

Figura 4.10 - Esquema da supressão - Ao invés do par se aproximar (pot. atrativo) até a região de colisão e transisionar para outro estado (pot. plano), o par é excitado para outro estado não tão atrativo (pot.repulsivo)

As colisões nD+nD foram estudadas com certo detalhe na literatura, e é sabido que possuem potenciais atrativos que podem inclusive levar à criação de plasmas ultrafrios [13].

Nosso primeiro experimento foi simplesmente verificar o que acontecia com o sinal de elétrons resolvido no tempo ao inserirmos a RF na câmara, com uma antena circular. Nossa primeira observação foi de que o sistema antena-cabos possuía uma ressonância em 350MHz, nos forçando a ficar nessa freqüência para transmitir uma maior potência dentro da câmara.

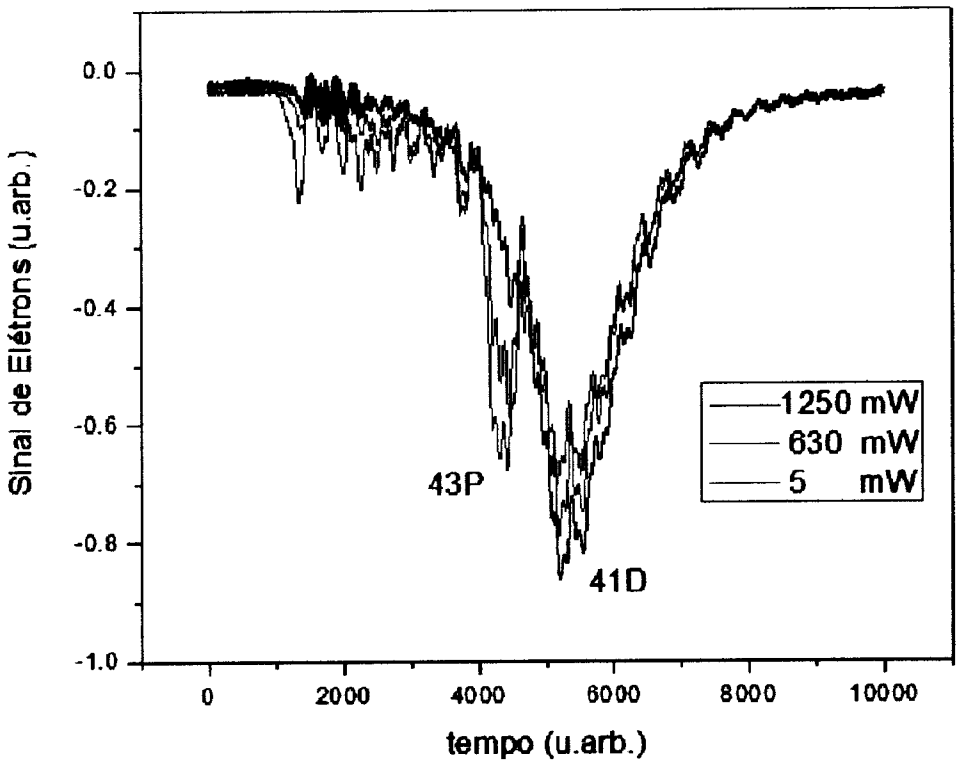

Figura 4.11 - Efeito de RF (350MHz) na população de elétrons resolvido no tempo, após 6 μs da excitação.

Variando a potência no gerador de RF, observamos que a transferência de população é sensivelmente afetada pela presença da RF na câmara (figuras 4.11 e 4.12).

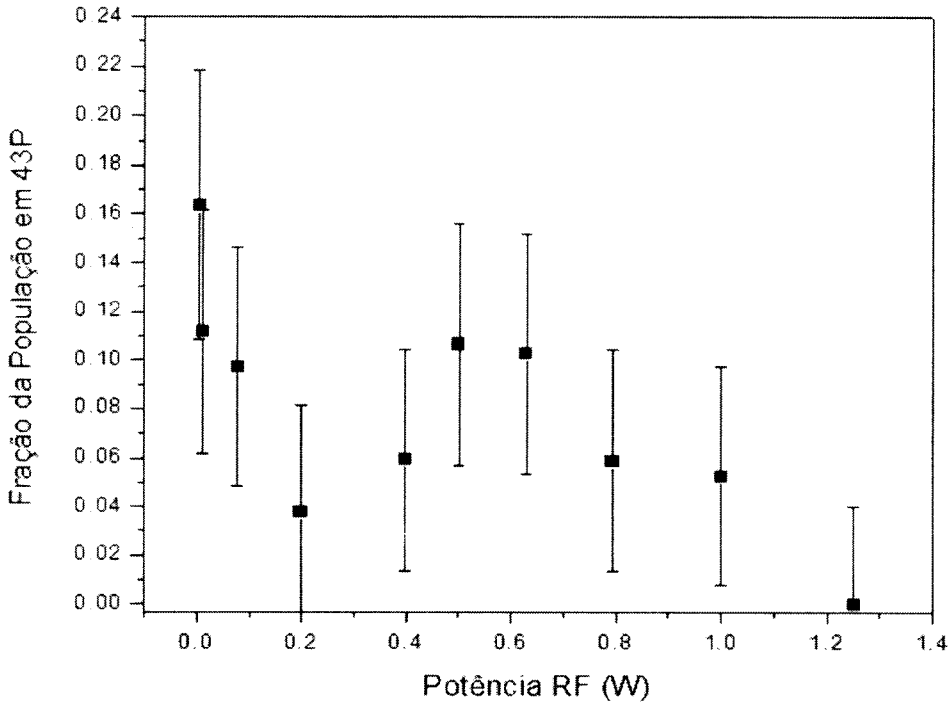

Figura 4.12 - População relativa do produto de colisão (43P) em função da potência da RF (350MHz).

Como podemos observar (figura 4.12), conforme aumentamos a potência da RF, a população em 43P é gradualmente reduzida, atingindo praticamente zero para uma potência de cerca de 1.25W. O gráfico mostra também um comportamento inesperado entre cerca de 0.2W e 0.6W, já

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

que esperaríamos que a porcentagem de pares transferidos para o outro potencial fosse uma função monotônica decrescente com a potência. Esse comportamento pode ter sido gerado por simples erro experimental ou alguma outra estrutura complexa dos potenciais envolvidos. Uma análise dos potenciais calculados por *Singer et al.* [14] apresenta apenas potenciais atrativos para o par 41D + 41D:

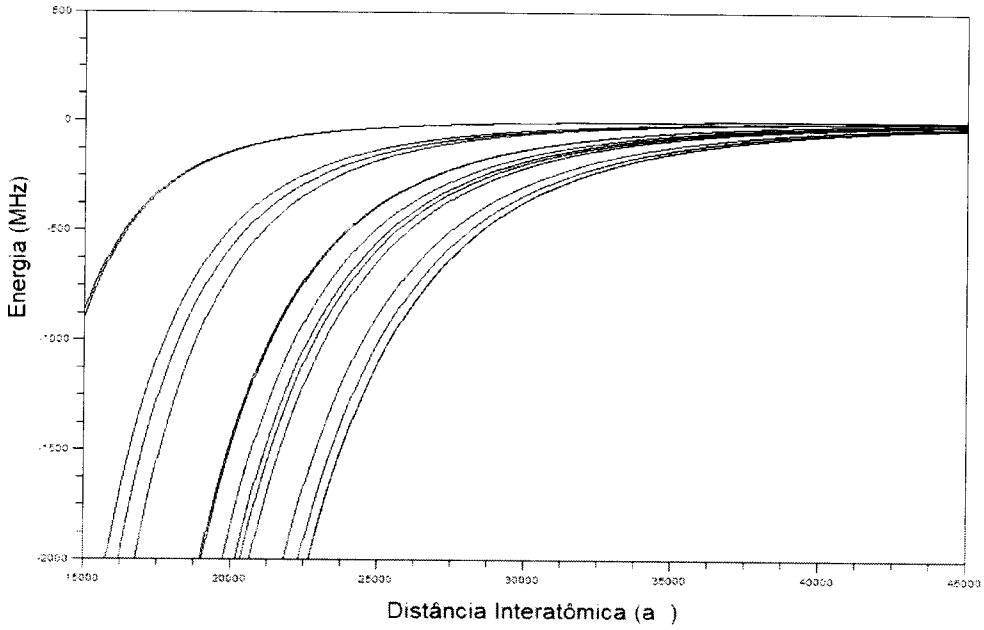

Figura 4.11 - Potenciais 41D + 41D, calculados conforme Singer et al. [14]

Apesar de que para haver supressão não é exclusivamente necessário acoplarmos o par a um potencial repulsivo [13]. Acreditamos que a forte supressão vista na figura 4.12 possa ser uma evidência de que de fato há potenciais repulsivos ou menos atrativos para a interação 41D + 41D (Figura 4.11).

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES

Neste trabalho, estudamos algumas colisões entre átomos de Rydberg em uma armadilha magneto-óptica. As colisões de átomos de Rydberg frios tem sido objeto de grande estudo na última década, já que fornecem informações sobre as interações entre esse átomos excitados [5]. Experimentos com átomos excitados em armadilhas tem mostrado que há processos de transferência de populações, inclusive com mudança do número quântico principal, e atualmente há duas propostas principais para essas transferências: *i)As transfererências ocorrem como resultado de um processo de muitos corpos*; *ii)As transfererências ocorrem como resultado de uma colisão de dois corpos*. Essas transferências são possíveis pelo fato da diferença entre a energia dos átomos de Rydberg para

estados vizinhos decresce rapidamente com o número quântico principal. Iniciamos nossos estudos com algumas propriedades dos átomos de Rydberg, inclusive calculando as funções de onda numericamente, o que nos permitiu calcular mapas Stark, acoplamentos e coeficientes de Einstein para ^{85}Rb.

Prosseguimos mostrando que à 300K, o número de fótons com a energia equivalente às separações entre os estados não é desprezível, e que essa radiação de corpo negro induz uma dinâmica inevitável em nossos experimentos, espalhando a excitação para estados vizinhos formando um efeito "cascata" - que conseqüentemente não pode ser desprezado ao analisarmos as transferências de populações.

Do experimento de densidade para as colisões nS + nS, concluímos que as medidas não são dependentes linearmente da densidade - o que seria esperado se as transferências fossem um conseqüência apenas da radiação de corpo negro. Com uma simples modelo de taxas, concluímos que nossos resultados podem ser explicados através de colisões de dois corpos, e que a taxa de colisão varia rapidamente com o tempo. Para tempos curtos ($<10\mu s$), as colisões são a maior fonte de transferência, e para tempos maiores, a radiação de corpo negro, que

está sempre presente, deve ser a maior contribuinte. Por fim, notamos que algumas interações propostas na literatura para os pares nS + nS, que prevêem potenciais repulsivos, não estão de acordo com nossa observações.

Prosseguimos demonstrando a supressão de transferência de excitação na colisão nD + nD, confirmando nossas expectativas de que os processos binários são o principal fator na mudança de estados. Mais uma vez, acreditamos que algumas previsões para interações entre átomos em estados excitados podem estar equivocadas, no caso, o resultado de que todos os potenciais 41D são atrativos, já que a supressão total se mostrou factível.

Acreditamos que nosso trabalho contribui com uma relevante peça na compreensão das interações de átomos de Rydberg - a confirmação de que as interações de átomos de Rydberg são tão sensíveis a fatores externos quanto os próprios átomos. Concluímos também que para obter-se uma descrição realista dos potenciais é preciso incluir todos os fatores externos, como o acoplamento entre estados causado por campos elétricos e magnéticos espúrios, ou outras interações de mais alta ordem. Mais especificamente, acreditamos que os cálculos de potenciais via teoria de perturbação de segunda ordem

para estados degenerados (sem considerar interações finas) é inadequada para descrever sistemas interagentes.

Essas conclusões se mostram coerentes com um trabalho recente [34], reafirmando nossa confiança em nossos resultados. Assim, num futuro próximo, esperamos que o estudo das interações de átomos de Rydberg receba grande atenção, já que algumas propostas utilizando átomos excitados como a super química ou computação quântica exigem um profundo e preciso conhecimento dessas interações, e como mostramos, ainda há algumas imprecisões a serem resolvidas. Acreditamos que os estudos de supressão podem ser estendidos com o uso de microondas ao invés de RF, desta vez acoplando estados mais afastados e conseqüentemente, obtendo-se maior precisão nos resultados - e esse pode ser um futuro interesse de nosso grupo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] - T.F. Gallagher, *Rydberg Atoms* (Cambridge University Press - 1994)
[2] - J.J. Balmer, Annalen der Physik und Chemie NF 25 p80-87 - 1885
[3] - H. Metcalf, Nature 284, p127 - 1980
[4] - A. Delgarno, *Rydberg States of Atoms and Molecules* (Cambridge University Press - 1994)
[5] - A.L. de Oliveira, *Estudos em Átomos de Rydberg Frios* (Tese de Doutorado, UFSCar - 2001)
[6] - A.L. de Oiveira et al., Measurement of Rydberg-state lifetimes using cold trapped atoms, PRA 65 031401 - 2002
[7] - C.H. Greene et al., Creation of Polar and Nonpolar Ultra-Long-Range Rydberg Molecules, PRL 85 p2458 - 2000
[8] - M.P. Robinson, PRL 85 p4466 - 2000
[9] - Jaksch D et al., Fast quantum gates for neutral atoms, PRL 85 (10), p2208 - 2000
[10] - P. Goy et al., PRA 27 p2065 - 1983
[11] - T.F. Gallagher et al., PRA 39 p4545 - 1989 e P.Pillet et al., PRL 60 p21 - 1988
[12] - A.L. de Oliveira et al., Rydberg Cold Collisions Dominated by Ultralong Range Potential PRL 90 143002 - 2003
[13] - Wenhui Li et al., Dipole-Dipole Excitation and Ionization in an Ultracold Gas of Rydberg Atoms, PRL 94, 173001 - 2005
[14] - K. Singer et al., Long-range interactions between alkali Rydberg atom pairs correlated to the *ns-ns*, *np-np* and *nd-nd* asymptotes, J. Phys. B 38 S295-S307 - 2005
[15] - J. Angström, *Optiska Undersokningar*, apresentado à Academia de Ciências de Estocolmo em 1853.
[16] - W.E. Cooke et al., PRA 32 p 2725 - 1985
[17] - C. Cohen-Tannoudji, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons - 1977)
[18] - S.A. Bhatti et al., PRA 24 p161 - 1981
[19] - J.M. Blatt, J. Coumput. Phys. 1 p382 - 1967
[20] - H.J. Metcalf & P. van der Straten, *Laser Cooling and Trapping* (Springer-Verlag New York - 1999)
[21] - M.L. Zimmerman et al., Stark Structure of the Rydberg States of alkali-metal atoms, PRA 20 (6) p2251 - 1979
[22] - A. Gallagher et al., Exoergic collisions of cold Sodium, PRL 63 p957 - 1989

[23] - L. Landau, Phys. Z. Sowj. 2 46 - 1932
[24] - C. Zener ,Proc. R. Soc. A 137 696 - 1932
[25] - s. Geltman et al., Model Study of the Landau-Zener approximation, AJP 73 (11) p1050 - 2005
[26] - R. Loudon, *The Quantum Theory of Light* (Clarendon Press - 1973)
[27] - W.P. Spencer et al., Temperature dependence of blackbody-radiation-induced transfer among highly excited states of Sodium, PRA 25 (1) p380 - 1982
[28] - T. Hansch et al., Cooling of gases by laser radiation, Opt. Commun. 13 p68 - 1975
[29] - D.J. Wineland et al., Radiation-Pressure Cooling of Bound Resonant Absorbers, PRL 40 (25) p1639 - 1978
[30] - J. Prodan et al., Stopping Atoms with Laser Light, PRL 54 (10) p992 - 1985
[31] - S. Chu et al., Experimental Observation of Optically Trapped Atoms, PRL 57 (3) p314 - 1986
[32] - L.G. Marcassa et al., Optical Suppression of Photoassociative Ionization in a Magneto-Optical Trap, PRL 73 (14) p1911 - 1994
[33] - V.A. do Nascimento, *Dinâmica de Colisões entre Átomos de Rydberg Frios* (Tese de Doutorado, IFSC - 2006)
[34] - A. Schwettmann et al., Cold Cs Rydberg-gas interactions, PRA 74 020701 - 2006