
**LASERS SEMICONDUTORES
EM CAVIDADE ESTENDIDA
APLICADOS À ESPECTROSCOPIA
DE ALTA RESOLUÇÃO**

Guilherme de Andrade Garcia

LASERS SEMICONDUCTORES EM CAVIDADE ESTENDIDA APLICADOS À ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO

Guilherme de Andrade Garcia

Orientador: Prof. Dr. Artemio Scalabrin

Tese apresentada ao Instituto de Física *Gleb Wataghin*
para obtenção do título de Doutor em Física.

Área: Eletrônica Quântica - Lasers

*Este exemplar corresponde à redação
final da Tese de Doutorado defendida
pelo aluno Guilherme de Andrade
Garcia e aprovada pela Comissão Julgadora.*

Campinas, 23 de Janeiro de 1998

Artemio Scalabrin

Campinas, UNICAMP, 1997.



UNICAMP

PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DE
GUILHERME DE ANDRADE GARCIA

DATA : 19 / 12 / 97

BANCA EXAMINADORA:

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Artêmio Scalabrin'.

- Prof. Dr. Artêmio Scalabrin (Orientador do Candidato)

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Vanderlei Salvador Bagnato'.

- Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Armando Mirage'.

- Prof. Dr. Armando Mirage

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Fernando Jorge da Paixão Filho'.

- Prof. Dr. Fernando Jorge da Paixão Filho

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Daniel Pereira'.

- Prof. Dr. Daniel Pereira

Banca Examinadora

- Prof. Dr. Artemio Scalabrin (Orientador) - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Daniel Pereira - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Fernando Jorge da Paixão Filho - IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Armando Mirage - IPEN/CNEN
- Prof. Dr. Vanderlei Bagnato - IFQSC/USP
- Prof. Dr. Sérgio Celaschi (Suplente) - CPqD/TELEBRAS
- Prof. Dr. Flávio Caldas Cruz (Suplente) - IFGW/UNICAMP

*A meu pai e minha mãe
Sempre presentes em todo este árduo caminho.*

Agradecimentos

- Ao meu orientador, Prof. Artemio Scalabrin, pela paciência demonstrada com meus erros e arroubos de entusiasmo, e também pelo equilíbrio sempre presente em todas as situações.

- Ao Prof. Daniel Pereira, meu primeiro professor de teoria de lasers, e participante interessado em todas as discussões.

- Ao Prof. Nicolò Beverini, pelas valiosas sugestões durante sua permanência em nosso laboratório, e pela agradabilíssima companhia em Altai.

- Ao Dr. Armando Mirage, pela proveitosa colaboração científica em torno de nossos interessantíssimos interesses comuns : lasers, titânio e as 'hollow cathode lamps'.

- Ao Prof. Fernando Paixão, pelas inúmeras discussões sobre Física Atômica (e política universitária e científica !).

- Ao Polaquini, mestre na arte da mecânica fina, pelo profissionalismo, companheirismo e principalmente amizade durante nossa longa convivência.

- Aos técnicos Joãozinho, Maurício e Zé pela amizade e prestatividade em nosso trabalho conjunto.

- Às secretárias Myioko, Regina, e todas as outras que me suportaram todo este tempo.

- Ao Germano, por me desvendar as belezas do Alto Vale do Itajaí.

- Ao João Vitor, pela amizade e por me atrair a um campo tão interessante e vasto como a espectroscopia atômica.

- Ao Claudemir Coral novamente, pela ciência e arte da solda de termistores em meus inúmeros suportes de laser.

- Ao Ary, pela cessão da capa e companhia nas sessões de degustação dos 'cafézinhos'.

- Aos meus inúmeros colegas e amigos físicos, que tornaram o convívio em torno da APGF uma atividade social tão agradável.

- Ao Fre, Ana Clara e Brunão, sobrinhos irresistíveis e adorados.

- Para voce, Rô, por me devolver a alegria de viver em um momento importante.

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro do Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq), Capes - RH Metrologia e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

Resumo

Montamos um Laser Semicondutor em Cavidade Estendida (LSCE) para contornar algumas limitações de diodos laser isolados como pequeno intervalo de sintonia, grande largura de linha e regiões espectrais inacessíveis. Usamos a configuração Littman-Metcalf devido a algumas vantagens importantes, uma das quais é a alta seletividade espectral devido ao uso de uma grade de difração com incidência rasante e dupla passagem.

Esta configuração permitiu sintonia contínua de 10 GHz e descontínua de ± 5 nm, fornecendo potência útil de 3 mW em um feixe elíptico estável usando um diodo laser comercial sem coberturas refletoras ou anti-refletoras especiais. Usando controle de temperatura ativo e uma fonte de corrente comercial de boa qualidade estimamos uma largura de linha de 2 MHz.

Este protótipo foi empregado como um espectrômetro laser no estudo da estrutura hiperfina e desvios isotópicos de um conjunto de linhas espectrais intensas do titânio próximas a 845 nm ($\Delta J = -1$; $a\ ^5F_i \rightarrow z\ ^5D_j^{odd}$). Através de uma Lâmpada de Cátodo Oco ("Hollow Cathode Lamp"), com um catodo de titânio metálico não enriquecido e uma atmosfera de argônio, produzimos uma amostra gasosa de átomos refratários altamente populada nos níveis metaestáveis inferiores. A escala de frequências foi calibrada pelos picos de transmissão de um interferômetro Fabry-Perot confocal com 'Free-Spectral Range' de 75 MHz. Usando técnicas de espectroscopia sub-doppler resolvemos a estrutura hiperfina e isotópica deste interessante átomo na região de 845 nm, obtendo desvios isotópicos e constantes hiperfinas com grande precisão, e permitindo a separação dos desvios isotópicos específicos e de campo.

Abstract

We use an Extended Cavity Semiconductor Laser (ECSL) to overcome some drawbacks of solitary diode lasers as limited tuning range, large linewidth and inaccessible spectral regions. The Litman-Metcalf configuration was used because of its several advantages, e.g., a very small passband due to using a grating in double passage grazing incidence.

This laser configuration allowed 10 GHz continuous and ± 5 nm discontinuous tuning range, with 3 mW output power in a stable elliptical beam, using a commercial diode laser with no special coatings. With a good commercial power supply and active temperature control we estimated a 2 MHz linewidth.

Employing this ECSL as a laser spectrometer we investigated by saturated absorption sub-dopler techniques a strong set of $\Delta J = -1$ ($a\ ^5F_i \rightarrow z\ ^5D_j^{odd}$) lines of neutral titanium in the vicinity of 845 nm. Using a home made hollow cathode lamp with a non-enriched titanium cathode and argon buffer gas we produced a gaseous sample with highly populated lower metastable levels. The frequency scale was calibrated by the transmission peaks of a Fabry-Perot confocal interferometer with 75 MHz free spectral range. This apparatus enabled us to extract precise isotope shifts and hyperfine splitting constants from the even and odd isotopes, allowing separation of the field and specific mass shifts contributions.

Ítaca

Se partires um dia rumo a Ítaca,
faz votos de que o caminho seja longo,
repleto de aventuras, repleto de saber.

Nem Lestrigões nem os Ciclopes
nem o colérico Posídon te intimidem ;
eles no teu caminho jamais encontrarás
se altivo for teu pensamento, se sutil
emoção teu corpo e teu espírito tocar.

Nem Lestrigões nem os Ciclopes
nem o bravio Posídon hás de ver,
se tu mesmo não os levars dentro da alma,
se tua alma não os puser diante de ti.

Faz votos de que o caminho seja longo.

Numerosas serão as manhãs de verão
nas quais, com que prazer, com que alegria,
tu hás de entrar pela primeira vez um porto
para correr as lojas dos fenícios

e belas mercancias adquirir :
madrepérolas, corais, âmbar, ébanos,
e perfumes sensuais de toda espécie,
quanto houver de aromas deleitosos.

A muitas cidades do Egito peregrina
para aprender, para aprender dos doutos.

Tem todo o tempo Ítaca na mente.

Estás predestinado a ali chegar.

Mas não apresses a viagem nunca.

Melhor muitos anos levars de jornada

e fundeares na ilha velho enfim
rico de quanto ganhaste no caminho,
sem esperar riquezas que Ítaca te desse.

Uma bela viagem deu-te Ítaca.

Sem ela não te ponhas a caminho.

Mais do que isso não lhe cumpre dar-te.

Ítaca não te iludiu, se a achas pobre.

Tu te tornaste sábio, um homem de experiência
e agora sabes o que significam Ítacas.

Konstantinos Kaváfis

Índice

1	Introdução	9
1.1	Introdução	9
1.2	Titânio	10
1.3	Espectroscopia do Titânio	12
1.4	Organização da tese	14
2	Diodos Laser Semicondutores	16
2.1	Lasers Semicondutores em Cavidade Estendida	16
2.2	Largura de Linha	19
2.3	Grade de Difração	21
2.4	Cálculo da sintonia para LSCE Littman	24
2.5	Projeto Mecânico	28
2.6	Caracterização do LSCE	29
3	Aplicações	31
3.1	Feixe Atômico	31
3.1.1	Padrão de Frequência Ótica - Cálcio	31
3.1.2	Caracterização do Feixe Atômico	34
3.1.3	Conclusões	37
3.2	Lâmpada de Catodo Oco	38
3.3	Estrutura Hiperfina - EHF	41

3.3.1	Centro de Gravidade da Estrutura Hiperfina	43
3.4	Desvios Isotópicos	45
3.4.1	Gráficos de King	49
3.4.2	Separação de desvios isotópicos de campo e de massa	50
3.4.3	Análise da Variância	51
4	Resultados	54
4.1	Introdução	54
4.2	Arranjo Experimental	55
4.2.1	Estimativa de Erros	59
4.3	Argônio - Linha 8424,65 Angstroms	60
4.4	Titânio - Linha 8435,65 Angstroms	62
4.4.1	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	63
4.4.2	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49	67
4.4.3	Separação de Desvios de Massa Específicos <i>DME</i> e de Campo <i>DC</i>	71
4.5	Titânio - Linha 8434,96 Angstroms	75
4.5.1	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	76
4.5.2	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49	81
4.5.3	Separação de Desvios de Massa Específicos <i>DME</i> e de Campo <i>DC</i>	84
4.6	Titânio - Linha 8426,50 Angstroms	86
4.6.1	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	88
4.6.2	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49	92
4.6.3	Separação de Desvios de Massa Específicos <i>DME</i> e de Campo <i>DC</i>	95
4.7	Titânio - Linha 8412,36 Angstroms	98
4.7.1	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	101
4.7.2	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49	102
4.7.3	Separação de Desvios de Massa Específicos <i>DME</i> e de Campo <i>DC</i>	103
4.8	Análise da Estrutura Isotópica	105
4.8.1	Gráficos de King Óticos	106

4.8.2 Limites do Método de Separação Muônica 108

5 Conclusão 112

Lista de Figuras

2-1	Laser Semicondutor em Cavidade Extendida : configuração Littman. . .	17
2-2	Características de perda, eficiência em 1ª ordem e saída para incidência rasante na grade de difração.	23
2-3	Geometria da Configuração Littman.	24
3-1	Diagrama de níveis atômicos do Cálcio	32
3-2	Diagrama de níveis atômicos do Magnésio.	33
3-3	Sistema do feixe atômico.	35
3-4	Linha de absorção do Cálcio em 612,2 nm	36
3-5	Lâmpada de Catodo Oco- vista lateral e frontal. C - catodo, A - anodo. .	38
3-6	Diagrama de níveis hiperfinos para o ^{47}Ti da transição $J = 5 \rightarrow 4$, linha 8435,65 Angstroms.	42
4-1	Níveis de energia das configurações estudadas e de interesse do titânio 48.	55
4-2	Espectrômetro Laser usando Laser Semicondutor em Cavidade Estendida (LSCE); BS - 'Beam Splitter ', LCO - Lâmpada de Catodo Oco, E - espelhos, CP - 'chopper'.	56
4-3	Gráfico de intensidade linear da linha 8435,65 Angstroms, $J = 4 \rightarrow 3$. . .	58
4-4	Espectro de absorção saturada do Argônio - Linha 8424,65 Angstroms - $4s[3/2] \rightarrow 4p[5/2]$	60
4-5	Espectro de Polarização do Argônio - Linha 8424,65 Angstroms.	61

4-6	Curva de ajuste dos picos de transmissão do FP 75 MHz e respectivo resíduo, para a linha 8435,65 Å	63
4-7	Gráfico de ajuste de curvas lorentzianas ao espectro de absorção saturada da linha 8435,65 Angstroms	64
4-8	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 4 \rightarrow 3$, linha 8435,65 Angstroms.	66
4-9	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 4 \rightarrow 3$, linha 8435,65 Angstroms.	69
4-10	Gráfico de King Muônico para o par padrão 48-50, linha 8435,65 Angstroms.	75
4-11	Ajuste de frequência aos picos de transmissão do FP 75 MHz - linha 8434,96 Angstroms.	77
4-12	Espectro de absorção saturada da linha 8434,96 Angstroms.	78
4-13	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 5 \rightarrow 4$, linha 8434,96 Angstroms.	79
4-14	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 5 \rightarrow 4$, linha 8434,96 Angstroms.	82
4-15	Gráfico de King usando desvios isotópicos muônicos modificados para a linha 8434,96 Angstroms.	86
4-16	Curva de ajuste dos picos de transmissão FP 75 MHz	88
4-17	Espectro de absorção saturada da linha 8426,50 Angstroms	89
4-18	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 3 \rightarrow 2$, linha 8426,50 Angstroms.	91
4-19	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 3 \rightarrow 2$, linha 8426,50 Angstroms.	93
4-20	Espectro da linha 8426,50 Angstroms, com os 'assignments' das diversas linhas da estrutura hiperfina (X = crossover).	96
4-21	Gráfico de King usando desvios isotópicos óticos e muônicos- linha 8426,50 Angstroms.	98

4-22	Curva de ajuste dos picos de transmissão do FP 75 MHz e respectivo resíduo, para a linha 8412,36 Å	99
4-23	Espectro de absorção saturada do titânio - linha 8412,36 Angstroms . . .	100
4-24	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 2 \rightarrow 1$, linha 8412,36 Angstroms.	102
4-25	Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 2 \rightarrow 1$, linha 8412,36 Angstroms.	103
4-26	Gráfico de King usando desvios isotópicos óticos e muônicos - linha 8412,36 Angstroms.	105
4-27	Gráfico de King Ótico das linhas 8435,65 e 8434,96 Angstroms.	107
4-28	Gráfico de King Ótico das linhas 8435,65 e 8426,50 Angstroms	107
4-29	Gráfico de King Ótico das linhas 8434,96 e 8426,50 Angstroms	111

Lista de Tabelas

1.1	Dados sobre isótopos naturais do Titânio. O valor da unidade de massa atômica é $UMA = 1,66054019 \text{ E-24 g}$. Cross-Section é dada em barns. . .	11
3.1	Desvios quadráticos médios entre pares isotópicos do titânio.	49
4.1	Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8435,65 Angstroms do Titânio. . . .	62
4.2	Parâmetros do ajuste do eixo de frequências por um polinômio de 5º grau. . .	63
4.3	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	67
4.4	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49, valores em MHz.	70
4.5	Constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico F_i - linha 8435,65 Angstroms.	73
4.6	Separação de desvios específicos e de campo - linha 8435,65 Angstroms, valores em MHz.	73
4.7	Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8434,96 Angstroms.	76
4.8	Parâmetros do ajuste polinomial do eixo de frequências.	76
4.9	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	80
4.10	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49	83
4.11	Constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico F_i para a linha 8434,96 Angstroms.	84
4.12	Separação de desvios - linha 8434,96 Angstroms.	85
4.13	Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8426,50 Angstroms. Valores para X_c e W dados em MHz.	87

4.14	Parâmetros do ajuste polinomial do eixo de frequências.	87
4.15	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47	90
4.16	Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49	94
4.17	Desvio específico k_E e fator eletrônico F_i : 8426,50 Angstroms.	96
4.18	Separação de desvios isotópicos - linha 8426,50 Angstroms.	97
4.19	Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8412,36 Angstroms	99
4.20	Parâmetros do ajuste do eixo de frequências por um polinômio de 5 grau.	101
4.21	Constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico F_i para a linha 8412,60 Angstroms.	104
4.22	Separação de desvios - linha 8412,60 Angstroms	104
4.23	Desvios Isotópicos do Titânio.	105
4.24	Parâmetros obtidos dos ajustes para gráficos de King óticos.	106
4.25	Constantes do desvio de massa específico k_E e de fator eletrônico do desvio de campo F_i	109

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

A invenção do laser na década de 60 forneceu à humanidade uma ferramenta científica e tecnológica de potencial sem precedentes. Suas características de radiação coerente e estreita largura espectral possibilitaram a investigação de propriedades espectroscópicas atômicas e moleculares com resolução inimaginável anteriormente. Em situações particulares como o estudo de desvios isotópicos e estrutura hiperfina, os detalhes espectroscópicos trazem informações sobre propriedades eletrônicas como níveis de energia e correlações eletrônicas, e nucleares como assimetrias de forma e volume e momentos da distribuição de carga nuclear. Neste caso podemos dizer que estamos fazendo ‘física nuclear’ de baixo custo !

Lasers tradicionalmente usados no meio científico empregam como meio ativo descargas em gases (argônio, CO_2 e $HeNe$), moléculas orgânicas (corantes) ou cristais dopados ($Ti : Al_2O_3$ ou $Nd : YAG$). Estes equipamentos são volumosos e caros e requerem uma infraestrutura custosa de refrigeração e potência elétrica.

Lasers baseados em junções semicondutoras já tinham sido demonstrados em 1962, mas sua disponibilidade científica e comercial era muito restrita. Com o desenvolvimento da tecnologia de semicondutores e aplicações comerciais massivas como redes de trans-

missão por fibras óticas e toca-discos laser na década de 80, a pesquisa e aperfeiçoamento técnico de diodos laser teve um grande impulso. Um subproduto deste fenômeno foi a disponibilização para a comunidade científica de uma fonte barata e versátil de radiação ótica coerente. Lasers semicondutores possuem algumas características únicas como grande sintonizabilidade, alta eficiência de conversão eletro-ótica e excelente capacidade de modulação. Seu tamanho compacto, pequeno consumo de potência, facilidade de uso, confiabilidade e características técnicas evoluindo constantemente o tornam dispositivo ideal para experimentos de espectroscopia atômica e resfriamento de átomos. Sua disponibilidade está se estendendo para a faixa vermelha (670 nm a 630 nm) e azul (420 nm) do espectro, com a recente demonstração de dispositivos usando compostos II-VI de SeZn e compostos II-V de GaN [1]. Também recentemente foram demonstrados dispositivos operando de 2 μm a 4,5 μm , baseados em compostos semicondutores de InAsSb operando a temperatura ambiente [2].

Contrabalançando suas qualidades técnicas, existem desvantagens que devem ser circundadas para sua plena utilização : sensibilidade à temperatura, é facilmente danificado por descargas eletrostáticas, grande largura de linha, feixe elíptico não-gaussiano astigmático, envelhecimento e degradação da faceta. Utilizado e manuseado corretamente, no entanto, um laser semiconductor é uma ferramenta científica poderosa.

1.2 Titânio

O Titânio é o nono elemento mais abundante na crosta terrestre, possuindo importantes aplicações metalúrgicas e médicas [3]. Seu nome deriva do grego *Titan*, os gigantes, filhos de *Uranus* e *Gaea* (ou *Terra* na mitologia grega), que procuraram governar o Olimpo e foram vencidos e suplantados pela família de Zeus.

Este é um elemento de transição apresentando camada d incompleta, pertencendo ao período do ferro. É o elemento da tabela periódica a apresentar o primeiro espectro realmente complexo [4,5]. A configuração de suas camadas eletrônicas externas ($3d^2 4s^2$

) possibilita o aparecimento de uma série de níveis metaestáveis baixos, devido principalmente à pequena diferença de energia entre os termos pares (d^4), (d^3s) e (d^2s^2) [4].

Podemos ver na Tabela 1.1 vários dados relativos aos seus cinco isótopos estáveis (46 – 50), sendo que oito isótopos adicionais são instáveis (41 – 45, 51 – 53). Entre os cinco isótopos estáveis somente os de número atômico 47 e 49 possuem spin nuclear e consequentemente apresentam estrutura hiperfina. A resolução dos picos da estrutura hiperfina dos isótopos ímpares é uma tarefa difícil, pois estes estão distribuídos entre um grande número de componentes que ficam mascarados pela grande intensidade do isótopo central 48.

Os isótopos ^{50}Ti e ^{49}Ti estão sendo investigados através de técnicas de espectroscopia e de separação isotópica laser como um possível componente estrutural para reatores de regeneração rápida (“fast breeder”) e reatores de fusão nuclear, devido à baixa seção de choque na região de neutrons rápidos como visto na Tabela 1.1 [3,6]. Esta característica reduziria os níveis de radiação induzida, com maior longevidade e confiabilidade dos elementos estruturais e produziria menor quantidade de resíduos radiativos em um reator comercial [6,7], já que amostras de titânio metálico natural tornam-se muito radiativas sob bombardeamento de deuterons.

O titânio é também muito estudado pela comunidade astronômica [8–10], por ser um elemento abundante em estrelas que fornece informações importantes a respeito da composição, temperatura, pressão e intensidade de campos magnéticos em atmosferas estelares.

	^{46}Ti	^{47}Ti	^{48}Ti	^{49}Ti	^{50}Ti
Abundância	7,93 %	7,28 %	73,94 %	5,51 %	5,34 %
Protons	22	22	22	22	22
Neutrons	24	25	26	27	28
Spin Nuclear	0	5/2	0	7/2	0
Massa [UMA]	45,952629	46,951764	47,947947	48,947871	49,944792
Cross Section	0,6	1,7	7,9	2,2	0,18

Tabela 1.1: Dados sobre isótopos naturais do Titânio. O valor da unidade de massa atômica é $\text{UMA} = 1,66054019 \text{ E-24 g}$. Cross-Section é dada em barns.

1.3 Espectroscopia do Titânio

A estrutura fina deste interessante átomo foi estudada experimental e teóricamente em 1927 por Russel [11] na faixa 2117 - 9787 Angstroms, em sua clássica análise do Ti I e Ti II. Vários trabalhos posteriores ampliaram a faixa espectral e os termos estudados, culminando com o trabalho de Forsberg [12] em 1991. Neste admirável e completo estudo do espectro e sistema de termos do titânio neutro Ti I, a faixa espectral foi estendida do ultravioleta próximo em 1900 Å no limite de ionização, ao infravermelho distante em 55.000 Å usando técnicas de espectroscopia por transformada de Fourier.

Channapa et al [13] estudaram em 1965 a estrutura hiperfina do multipletto $a^3F_{2,3,5}$ usando técnicas de ressonância magnética em um feixe atômico, em um trabalho pioneiro que forneceu excelente base para estudos posteriores.

Duas transições individuais do titânio ($a^5F_5 \rightarrow z^3D_3$; $a^5F_5 \rightarrow y^5F_5$) foram estudadas por meios convencionais já em 1969 por Bruch et al [14], onde foi levantada a hipótese de que o desvio de campo isotópico poderia ser desprezado e o desvio específico obtido diretamente.

Após um período de relativa estagnação, nesta última década o estudo da estrutura hiperfina e isotópica do titânio usando técnicas de espectroscopia laser em feixes atômicos e lâmpadas de catodo oco obteve um grande impulso.

No trabalho preliminar de Maruyama [6] o objetivo principal era medir parâmetros do processo de separação isotópica visando estudar a viabilidade de obtenção de amostras enriquecidas com ^{50}Ti . A precisão dos desvios isotópicos medidos era limitada pela largura de linha do laser de corante pulsado, situando-se na faixa de 10 %.

Em 1990 Aydin et al [15] mediram a estrutura hiperfina de 11 níveis metaestáveis do ^{47}Ti usando técnicas de ressonância magnética em um feixe atômico e detecção ressonante por fluorescência laser. Com estes dados experimentais aplicados a um complexo método de parametrização foi inferido o momento de quadrupolo nuclear Q do ^{47}Ti .

Esta situação insatisfatória sobre a estrutura isotópica do titânio foi detetada por Gianfrani et al [16] em 1991. Usando uma lâmpada de catodo oco [17], otimizada para

espectroscopia de absorção saturada e espectroscopia de polarização [18], foi produzida uma atmosfera de átomos neutros e ionizados altamente populada nos níveis metaestáveis inferiores. Um laser de corante permitiu estudar transições no visível e, dobrando a frequência com um cristal não linear, no ultravioleta para o Ti I e Ti II. A análise dos desvios isotópicos resultantes sugeria a existência de uma contribuição de desvio de campo ao desvio total.

Em 1992 Azaroual et al [19], do “Laboratoire Aimé-Cotton-France”, usando um feixe atômico e lasers de corante, obtiveram espectros de alta qualidade de várias transições do multiplete $a\ ^3F_i \rightarrow z\ ^5D_j$. Usando resultados sobre desvios isotópicos muônicos, foram capazes de separar as contribuições de desvios específicos e de campo demonstrando claramente a influência pequena mas mensurável deste último. Estas medidas foram refeitas em 1994 [20] com grande aumento na razão sinal/ruído, permitindo resolver a estrutura hiperfina e inferir o desvio isotópico dos isótopos ímpares. A separação dos desvios de campo mostrou um interessante efeito de agrupamento (‘staggering’), em que os isótopos ímpares situam-se marcadamente mais próximos dos isótopos vizinhos pares mais pesados. Posteriormente, em 1996 [21], este grupo estudou transições partindo do nível metaestável $a\ ^5F_i$, fracamente populado no feixe atômico, ao nível ímpar superior $y\ ^3F_j$.

Outro grupo ativo nesta linha de pesquisa reside no “Flerov Laboratory of Nuclear Reactions - Russia”, onde em 1994 foram investigadas transições entre os níveis $a\ ^3P_i \rightarrow y\ ^3D_j$ usando um feixe atômico e técnicas de evaporação de elementos refratários por laser pulsado [22]. Os desvios isotópicos pares e ímpares obtidos foram usados em uma análise combinada, para fornecer diferenças de raio quadrático médio $\delta < r^2 >$ a partir das diferenças rms $\delta < r^2 >^{1/2}$ [23]. Em trabalho posterior estudaram uma possível dependência das diversas contribuições ao desvio isotópico com o momento magnético orbital J [24].

Outra linha de investigação foi aberta por Cruz et al [25] em 1994, usando técnicas de espectroscopia optogalvânica sub-doppler em lâmpadas de catodo oco [27] e lasers de

corante, para investigar a transição $a\ ^3P_0 \rightarrow y\ ^3D_1$. Esta técnica é particularmente adequada para a detecção de átomos refratários evaporados ('sputtered') em descargas 'glow' empregando gases nobres como argônio. Com este aparato foram determinados desvios isotópicos e números de onda da transição relativamente ao iodo I_2 . Posteriormente foram estudados processos colisionais, efeito Zeeman e efeito Hanle não-linear [26] demonstrando a versatilidade desta técnica.

Resultados de altíssima qualidade foram obtidos em 1996 por Furmann et al [28], aplicando a um feixe atômico algumas engenhosas soluções experimentais. Seu método de evaporar elementos refratários por bombardeamento de elétrons, além da grande simplicidade e economia, produz por colisão elétron/átomo níveis metaestáveis altamente populados ($> 18.000\ cm^{-1}$). Deste modo foram investigadas transições entre os níveis $a\ ^3H \rightarrow ^{1,3}H$, $b\ ^1G_4 \rightarrow ^{1,3}H$, $a\ ^3P_{0,1} \rightarrow ^3S_1$, permitindo resolver a estrutura hiperfina e extrair desvios isotópicos pares e ímpares. Através de uma análise envolvendo desvios isotópicos muônicos foram extraídos valores corrigidos de $\delta < r^2 >^{48,A}$, o fator eletrônico F_i do desvio de campo e o 'screening factor' γ das transições envolvidas.

1.4 Organização da tese

Na introdução situamos a posição especial de lasers semicondutores em relação às principais fontes de radiação sintonizável disponíveis atualmente, suas vantagens e desvantagens. A seguir é feita uma breve revisão bibliográfica sobre espectroscopia laser do titânio e áreas correlatas como espectroscopia de raios-x muônicos.

O segundo capítulo é dedicado a Lasers Semicondutores em Cavidade Estendida (LSCE). Nele discutimos as soluções usadas para redução da largura de linha e controle da sintonia contínua e descontínua do LSCE. É apresentada uma teoria simplificada que nos permite discutir parâmetros importantes como largura de linha, potência ótica, características e desempenho da grade de difração, sensibilidade a ruído técnico e limites de estabilidade. Calculamos o intervalo de sintonia contínuo proporcionado pelo uso

conjunto dos PZT's que controlam a posição do espelho. Discutimos de maneira breve o projeto mecânico da cavidade e os dados relativos à caracterização do LSCE.

O capítulo 3 é composto de várias seções independentes. Na primeira delas descrevemos o feixe atômico desenvolvido na etapa inicial do meu trabalho de doutorado, apontando suas características técnicas e dados de espectroscopia sub-doppler do cálcio. A seguir temos uma seção tratando de lâmpadas de catodo oco, com uma discussão do princípio de funcionamento e de suas características técnicas de operação. As duas seções seguintes trazem introduções teóricas à estrutura hiperfina e a desvios isotópicos atômicos, necessários para interpretação dos resultados experimentais obtidos.

O quarto capítulo é dedicado à apresentação e discussão dos resultados de espectroscopia sub-doppler. Descrevemos o arranjo experimental e fazemos uma análise dos vários fatores de erro envolvidos e sua precisão relativa. Uma breve seção trata da espectroscopia doppler e sub-doppler de uma linha intensa do argônio, usada para fins de alinhamento e calibração do espectrômetro laser. Nas 4 seções seguintes são tratadas individualmente as linhas do titânio investigadas. É apresentado o espectro de absorção saturada e dados de ajuste da escala de frequência e de curvas lorentzianas às linhas do titânio observadas. Na sequência é feita uma análise da estrutura hiperfina dos isótopos ímpares para obtenção do centro de gravidade da transição e das constantes hiperfinas do nível superior. Na subseção seguinte procedemos à separação das diversas contribuições ao desvio isotópico total, e apresentamos gráficos de King usando dados de desvios isotópicos muônicos. A última seção faz uma análise global da estrutura isotópica do multiplete estudado.

Finalmente o quinto capítulo resume os resultados e apresenta sugestões para futuras atividades baseadas nas conclusões obtidas.

Capítulo 2

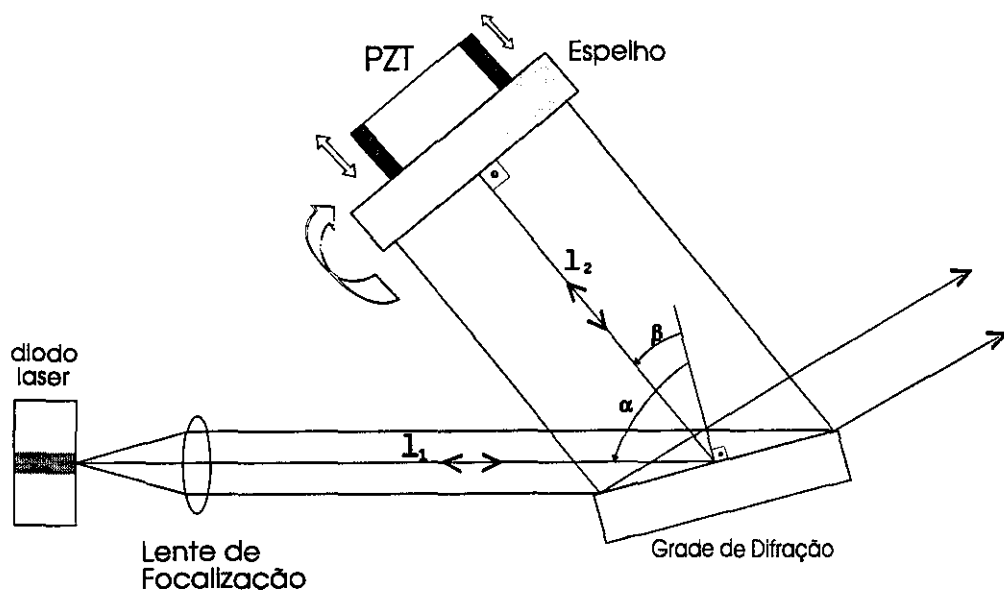
Diodos Laser Semicondutores

2.1 Lasers Semicondutores em Cavidade Estendida

Um diodo laser isolado apresenta limitações de desempenho como faixa estreita de sintonia, grande largura espectral (dezenas de MHz) e regiões espectrais inacessíveis. Estas restrições podem ser superadas pela inclusão de diodos laser em cavidade estendidas, usando elementos óticos como grades de difração, espelhos e etalons [29–31]. Isto possibilita uma largura espectral muito mais estreita e uma faixa de sintonia ampliada sem apresentar saltos de modos (‘mode hopping’). A configuração geralmente escolhida para montagens em cavidade estendida é a Littrow [30], que no entanto apresenta desvantagens como menor seletividade da grade de difração e a mobilidade do feixe de saída.

Um esquema alternativo demonstrado por Harvey [29] utilizou lasers semicondutores na configuração Littman-Metcalf [32,33], que apresenta diversas vantagens sobre a configuração Littrow. Esta nova configuração permite o uso de lasers encapsulados comerciais, sem requisitos especiais sobre as camadas refletoras ou anti-refletoras depositadas sobre as facetas terminais, que tornam muito mais barato o desenvolvimento de protótipos.

Nesta configuração a radiação emitida pelo diodo laser incide em ângulo rasante α sobre a grade de difração como pode ser visto na Fig. 2-1. Esta incidência rasante do feixe laser colimado preenche completamente e usa o maior número possível de linhas da



Figura~2-1: Laser Semicondutor em Cavidade Extendida : configuração Littman.

grade de difração, fornecendo maior dispersão e consequente melhor seleção dos modos axiais da cavidade. Adicionalmente, na configuração Littman a grade é usada em duas passagens sucessivas, duplicando intrinsecamente a resolução espectral.

O feixe de saída do conjunto laser-cavidade externa é fornecido pela reflexão especular na rede de difração (ordem zero). O feixe difratado de primeira ordem é interceptado pelo espelho e reenviado para a grade, de onde emergem dois outros feixes. O feixe de primeira ordem desta segunda difração é reenviado ao diodo laser e fornece o esquema básico de realimentação ótica. A segunda reflexão de ordem zero (especular) é perdida e deve ser absorvida para não provocar realimentação ótica em outros componentes ou talvez provocar acidentes.

O feixe de saída colimado possui boa estabilidade direcional, pois a direção de propagação do feixe depende apenas da posição relativa entre o diodo laser e a grade de difração. Como estes componentes estão rigidamente montados sobre uma base, e após o alinhamento completado não são mais tocados, a estabilidade do feixe de saída depende do isolamento acústico e mecânico da estrutura como um todo.

A sintonia do LSCE é realizada através da rotação e translação simultâneas do espelho de realimentação através de elementos piezoelétricos (PZT). Pela rotação do espelho variamos o ângulo β e mudamos o comprimento de onda central da radiação realimentada na cavidade, como pode ser visto através da equação mestre da grade de difração:

$$\frac{m\lambda}{d} = \text{sen}\alpha + \text{sen}\beta \quad (2.1)$$

onde m é a ordem de difração, d o espaçamento das linhas da grade, λ o comprimento de onda e α e β são os ângulos mostrados na Fig. 2-1.

Mudando o comprimento da cavidade pela translação do espelho fazemos com que se mantenha inalterada a relação de fase entre o modo predominante da cavidade e a curva de dispersão da grade. A equação de fase é dada por

$$(l_1 + l_2) = q \frac{\lambda}{2} \quad (2.2)$$

onde $(l_1 + l_2)$ é o comprimento total da cavidade e q um número inteiro.

A banda passante da cavidade Littman, devido à dupla passagem do feixe pela grade, proporciona uma alta dispersão espectral dada por [29]

$$\Delta\nu_g = \left(\frac{d}{m \lambda \pi} \frac{c}{(\Phi_{//} / 2)} \right) \cos \alpha \quad (2.3)$$

onde $\Phi_{//}$ é o diâmetro do feixe laser colimado no plano da junção semicondutora, c a velocidade da luz, λ o comprimento de onda, m a ordem de difração. Usando os valores $\Phi_{//} \cong 2 \text{ mm}$, $d^{-1} = 1800 \text{ l/mm}$, $\lambda = 850 \text{ nm}$, $m = 1$ e $\alpha = 80 \text{ graus}$, temos $\Delta\lambda_G = 0,15$ que corresponde a $\Delta\nu_g = 6 \text{ GHz}$.

O 'Free Spectral Range' da cavidade semicondutora é dado por [34]

$$\delta\nu = \frac{c}{2nl_0} \frac{1}{\left(1 + \frac{\nu}{n} \frac{dn}{d\nu}\right)} \quad (2.4)$$

onde l_0 é o comprimento do diodo laser ($l_0 \simeq 350 \mu m$), $n \simeq 3,5$ o índice de refração , $dn/d\nu$ a dispersão do meio ativo e $(\nu/n)(dn/d\nu) \simeq 1,5$. Substituindo os valores na Equação 2.4 obtemos o valor típico de uma cavidade semicondutora $\delta\nu \simeq 50 GHz$ ($\sim 1,5 Angstrom$).

O FSR da cavidade Littman é dado por

$$\Delta\nu_L = \frac{c}{2(l_1 + l_2)} \quad (2.5)$$

onde l_1 e l_2 são indicados na Fig. 2-1. Para $(l_1 + l_2) = 12 cm$, temos $\Delta\nu_L = 1,25 GHz$.

Dos dados acima vemos que, apesar da alta seletividade da configuração Littman, ainda é possível a existência de aproximadamente 4 modos dentro da banda passante da grade para a atual configuração. Se o ajuste da fase do modo mais próximo ao máximo de transmissão não estiver correta, poderão ocorrer saltos de modos, propagação simultânea de dois modos ou mesmo uma situação caótica onde o laser perde totalmente a coerência [34,35]. Para um ângulo de incidência mais rasante ($\alpha = 85 graus$) proporcionado por uma lente de focalização com distância focal menor e uma cavidade curta, poderemos ter menor número de modos dentro da banda passante da grade com um consequente aumento da estabilidade.

2.2 Largura de Linha

A largura de linha para um laser semiconductor monomodo é dada pela fórmula modificada de Schawlow-Townes [34]

$$\delta\nu = \frac{V_g^2 \eta_{sp} (h\nu)}{8\pi P_0} \alpha_m (\alpha_m + \alpha_s) (1 + \alpha^2) \quad (2.6)$$

$$\alpha_m = \frac{1}{2L} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (2.7)$$

onde α_m representa as perdas externas da cavidade (proporcionais à refletividade R_1, R_2 dos espelhos e ao comprimento da cavidade L), α_s representa as perdas internas da

cavidade por espalhamento e absorção, η_{sp} é o fator devido à emissão espontânea, V_g é a velocidade de grupo, $h\nu$ é a energia do fóton e P_0 a potência ótica.

O fator α é conhecido como fator de alargamento 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 à densidade de portadores N

$$\alpha \triangleq \left(\frac{\partial \Delta n'}{\partial N} \right) / \left(\frac{\partial n''}{\partial N} \right) \quad (2.8)$$

Este é um dos parâmetros básicos de um laser semiconductor, sendo uma medida da razão entre a profundidade de modulação em frequência em relação à modulação em amplitude. Várias propriedades importantes são governadas por este fator, como mecanismos de guiamento ótico, características de 'injection-locking' e a largura de linha estática e em modulação rápida.

Para uma dada refletividade R_1, R_2 de um laser Fabry-Perot, a perda da cavidade α_m é inversamente proporcional ao comprimento L da cavidade. Examinando a Eq. 2.6 vemos que a largura de linha será então proporcional a L^{-2} para $\alpha_m \geq \alpha_s$, e se aproxima assintoticamente de L^{-1} para $\alpha_m \ll \alpha_s$ (ou se o comprimento da cavidade estendida L_c for muito maior que o comprimento do laser L_d). Vemos então que é vantajoso dispor de lasers *MQW* ('Multi-Quantum Well'), onde as perdas internas α_s e os fatores de alargamento de linha α e de emissão espontânea η_{sp} são reduzidos devido ao confinamento quântico. O fator de alargamento de linha α é reduzido de um fator 2, contribuindo quadráticamente para a redução da largura de linha. As perdas internas α_s são reduzidas devido ao reduzido fator de confinamento do modo ótico ($\Gamma\alpha_i$) e à melhor qualidade das camadas epitaxiais que compõem a camada ativa e confinante. O fator de emissão espontânea η_{sp} é reduzido devido à menor densidade de portadores necessária para obter inversão de população na camada ativa.

A redução da largura de linha do LSCE se dá principalmente pelo grande aumento no comprimento da cavidade, que aumenta o tempo de vida dos fótons e reduz a influência relativa de flutuações no índice de refração do meio ativo produzido por eventos de

emissão espontânea [29, 30].

2.3 Grade de Difração

Um fator extremamente importante em um LSCE é o controle do nível e qualidade da realimentação ótica. A qualidade é assegurada pela escolha de lentes colimadoras limitadas por difração, essenciais devido à alta abertura numérica ($AN \geq 0,5$) requeridas para uso com diodos laser, e um ajuste preciso da posição e foco desta lente para minimizar aberrações óticas.

O nível de realimentação necessário é determinado basicamente pela alteração ou não da refletividade natural das facetas do diodo laser pela presença de camadas antirefletoras (AR). Devido à dupla passagem pela grade o nível de realimentação pode ser definido como o produto da eficiência de acoplamento do conjunto laser/lente pela raiz quadrada da eficiência da grade em primeira ordem $\eta_u \sqrt{\eta_g}$.

Lasers sem camada AR requerem alto nível de retorno ótico, que tipicamente deve ter valor superior ao apresentado pela faceta [34, 36] para operarem no regime estável de realimentação forte. Para a refletividade natural $R \sim 30\%$ o valor de realimentação será $\sqrt{0,3} \simeq 60\%$. Neste caso teremos pequena potência de saída pois esta é inversamente proporcional ao nível de realimentação, desde que sejam descontadas as perdas por espalhamento e absorção na grade.

Se a refletividade da camada AR é pequena ($R_{AR} \sim 1\%$) como em lasers de potência comerciais, ou muito pequena ($R_{AR} < 0,1\%$) como em lasers especiais e protótipos, o nível de realimentação pode ser estabilizado na faixa de 5 % que implica uma eficiência da grade $\eta_g \sim 20\%$. Abaixo deste valor o nível de realimentação decai acentuadamente mas a potência de saída não se altera pois está na região de saturação.

Para obtermos um alto fator de magnificação ($M = \cos\beta/\cos\alpha$), o feixe deve ser difratado próximo à direção normal da grade (ângulo β pequeno) e portanto teremos $d \sim \lambda$. Esta característica permite construir protótipos mais compactos, pois permite

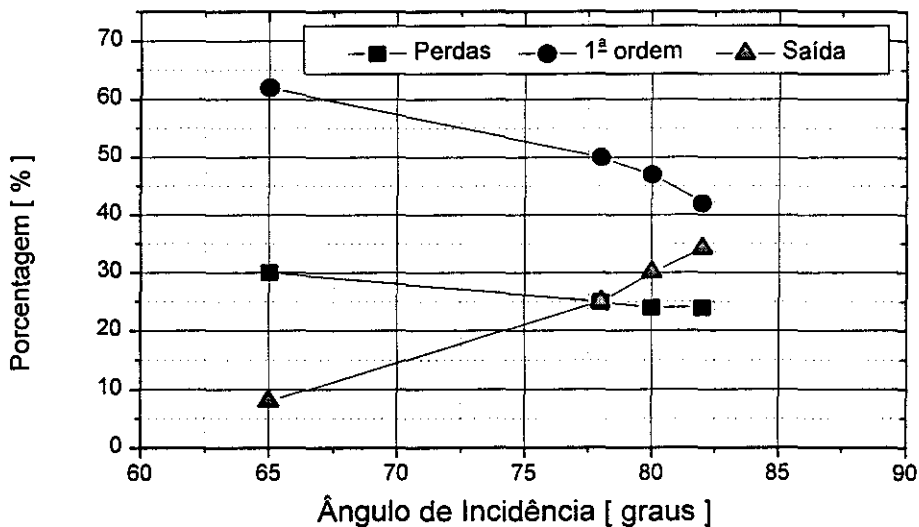
que o espelho fique mais próximo da grade. Para os parâmetros típicos da cavidade ($\theta_{//} = 6^\circ$; $\alpha = 85$ graus, $\lambda = 850$ nm, $\beta = 32^\circ$) produzindo uma ampliação do feixe da ordem de 10 vezes. No entanto, se nosso interesse é obter uma banda passante menor devemos usar uma grade com maior número de linhas (como pode ser visto examinando a Eq. 2.3, em nosso caso $d \geq \lambda/2$ que implica $d^{-1} \leq 2350$ l/mm).

As perdas da cavidade estão associadas à escolha da grade de difração, sendo que o requisito principal a ser obedecido é o de fornecer a realimentação ótica necessária para operação estável do laser. Este parâmetro está ligado à eficiência de difração em primeira ordem da grade, e pode ser minimizado pela escolha de uma grade tendo somente uma ordem de difração para incidência rasante. Esta exigência é satisfeita se escolhemos $\lambda/2 < d < \lambda$.

O espalhamento é influenciado pela limpeza e homogeneidade da grade favorecendo o uso de grades holográficas, que além disso são baratas e podem ser fabricadas com alta densidade de linhas [l/mm] . A absorção é fortemente dependente da deposição de filmes metálicos sobre a superfície da grade. A prata possui alta refletividade sobre a maior faixa espectral ($R > 98$ % para $\lambda > 0,6$ μ m), mas assim como o alumínio necessita de camadas protetoras dielétricas. O ouro é uma ótima solução intermediária, pois é muito estável e apresenta refletividade $R > 95$ % para $\lambda > 0,6$ μ m e não necessita de proteção. Além disso devemos considerar que a refletividade desses metais aumenta para ângulos de incidência rasantes.

A eficiência de difração de grades holográficas está ligada não só à modulação do perfil definido como h/d , onde h é a altura e d o espaçamento do sulco, mas também à polarização e ao ângulo de incidência. Grades com alta modulação ($h/d \gtrsim 0,22$) apresentam também alta eficiência em primeira ordem ($\eta_g > 70$ %) para polarização no plano S (vetor do campo elétrico perpendicular aos sulcos). Grades com baixa eficiência ($\eta_g < 40$ %) apresentam ($h/d \lesssim 0,12$) para polarização S e ainda menor para polarização P (vetor do campo elétrico paralelo aos sulcos).

A teoria eletromagnética desenvolvida para estudar a eficiência de grades [37] apre-

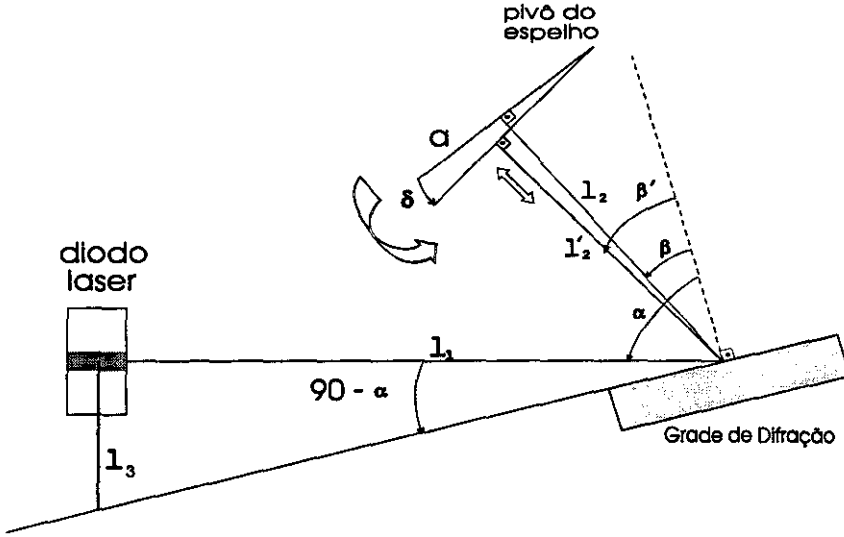


Figura~2-2: Características de perda, eficiência em 1ª ordem e saída para incidência rasante na grade de difração.

senta excelente concordância com dados de grades experimentais, mas este tratamento falha para ângulos de incidência rasante. No entanto o comportamento geral pode ser observado na Fig. 2-2, que contém os dados sobre perdas, eficiência de difração em primeira ordem e de potência de saída, medidos com a grade usada na montagem do LSCE. O comportamento geral observado é que as perdas diminuem ligeiramente (30 % para 25 %) com o aumento do ângulo de incidência de 65 para 85 graus. A eficiência em primeira ordem decresce acentuadamente e a potência de saída é multiplicada por um fator 4, indicando as variáveis necessárias para um ajuste fino do comportamento da cavidade estendida. Vemos aqui que um fator limitante é a perda de 30 %, que afeta negativamente a potência de saída, indicando que seria vantajosa a deposição de filmes metálicos para reduzir este valor a um nível mais razoável de 10 %.

2.4 Cálculo da sintonia para LSCE Littman

Para obter equações que modelam o processo de sintonia do LSCE na configuração Littman, analisamos as equações da grade e da condição de fase da cavidade.



Figura~2-3: Geometria da Configuração Littman.

Derivando 2.1 obtemos

$$\frac{\delta\lambda}{\delta\beta} = d \cos \beta \quad (2.9)$$

Substituindo a derivada da relação $\nu = c/\lambda$ na equação acima

$$\delta\lambda = -\frac{\lambda^2}{c} \delta\nu \quad (2.10)$$

Finalmente a variação da frequência em função do ângulo de sintonia β é dada por

$$\delta\nu = -\left(\frac{c}{\lambda^2} d \cos \beta\right) \delta\beta \quad (2.11)$$

A derivada da equação de fase nos fornece outra relação, considerando que l_1 e q são

constantes na Eq. 2.2 :

$$\delta l_2 = \left(\frac{q}{2}\right) \delta \lambda \quad (2.12)$$

A sintonia da cavidade é realizada por dois elementos piezoelétricos atuando simultaneamente em rotação e translação. O elemento PZT tubular controla a translação do espelho empregando o coeficiente d_{31} (deslocamento axial / tensão transversal), sendo que a tensão elétrica com polaridade adequada é aplicada entre as superfícies metalizadas interna e externa.

O outro elemento consiste em uma pilha ('stack') de 4 discos PZT empregando o coeficiente d_{33} (deslocamento longitudinal / tensão longitudinal). Este atuador age sobre um dos pontos de apoio do suporte do espelho, produzindo a componente de rotação e também um deslocamento transversal. O material constituinte dos elementos PZT tem a sigla comercial EC-98 ('*Lead Magnesium Niobate*' - EDO Western [38]) e suportam um campo elétrico máximo $(V/e)_{\max} < 2 \text{ kV/mm}$, onde V é a tensão elétrica aplicada e e a espessura.

O deslocamento produzido pela tensão aplicada é dado por

$$\delta l = d_{3i} l \left(\frac{V}{e}\right) \quad (2.13)$$

onde δl é o deslocamento, l é o comprimento, e a espessura e d_{3i} é o coeficiente piezoelétrico empregado.

Os coeficientes numéricos para tubos d_{31} e para discos d_{33} são respectivamente [38]

$$d_{31} = -312 \times 10^{-12} \pm 10\% \left[\frac{\text{metro}}{\text{volt}} \right] \quad (2.14)$$

$$d_{33} = +730 \times 10^{-12} \pm 10\% \left[\frac{\text{metro}}{\text{volt}} \right] \quad (2.15)$$

Como o tubo PZT possui um coeficiente d_{31} negativo, ocorre contração pela aplicação da tensão V_t com polaridade positiva. Se usamos l_t para o comprimento e e_t para a

espessura do tubo o deslocamento será dado por

$$\delta l_t = d_{31} l_t \left(\frac{V_t}{e_t} \right) \quad (2.16)$$

Para o disco PZT que possui um coeficiente positivo ocorre expansão com a aplicação da tensão positiva V_d sobre os N elementos. Como a espessura é igual ao comprimento temos

$$\delta l_d = N d_{33} V_d \quad (2.17)$$

A correspondente variação no comprimento da cavidade devida ao tubo δl_{2t} será obtida se lembrarmos que l_2 aumenta se o tubo PZT se retrai $\delta l_{2t} = - \delta l_t$.

Outro fator é a expansão devida ao stack PZT(δl_{2s}). Se chamamos a à distância entre o pivô de rotação do espelho e o ponto de apoio do parafuso micrométrico sobre o stack PZT , e b à distância entre o pivô e o ponto onde o centro do feixe colimado incide no espelho, teremos

$$\delta l_{2s} = - \left(\frac{b}{a} \right) \delta l_d \quad (2.18)$$

A variação total de l_2 será então

$$\delta l_2 = \delta l_{2s} + \delta l_{2t} = - \left(\frac{b}{a} \right) N d_{33} V_d - l_t d_{31} \left(\frac{V_t}{e_t} \right) \quad (2.19)$$

A variação do ângulo $\delta\beta$ pela rotação do espelho em torno do pivô será

$$\delta\beta = \frac{1}{a} \delta l_d = \left(\frac{N}{a} \right) d_{33} V_d \quad (2.20)$$

Substituindo δl_2 e $\delta\beta$ nas Eqs. 2.9 e 2.12 obtemos

$$\frac{q}{2} d \cos \beta \left(\frac{N}{a} \right) d_{33} V_d = - \left(\frac{b}{a} \right) N d_{33} V_d - l_t d_{31} \left(\frac{V_t}{e_t} \right) \quad (2.21)$$

Reagrupando os termos em V_d e V_t chegamos a

$$V_t = \frac{b}{a} \frac{d_{33}}{d_{31}} \frac{e}{l_t} \left(1 + \frac{q}{2} \frac{N}{b} d \cos \beta \right) V_d \quad (2.22)$$

Substituindo valores típicos na equação acima ($N = 4$; $d_{33}/d_{31} = -2,3$; $e = 1,6 \text{ mm}$; $a = 41 \text{ mm}$; $b \simeq 25 \text{ mm}$; $l_t = 25,4 \text{ mm}$; $q \simeq 2,8 \times 10^5$; $\beta \simeq 33^\circ$ para $\lambda = 850 \text{ nm}$) obtemos

$$V_t = 1,22 V_d \quad (2.23)$$

Portanto para os parâmetros da montagem apresentados devemos ter a tensão aplicada ao tubo maior que a tensão aplicada nos discos PZT. A solução experimental mais simples foi implementada através de um divisor resistivo, onde colocamos uma resistência fixa de $1 \text{ M}\Omega$ em série com um potenciômetro de $470 \text{ k}\Omega$, deste modo limitando a dissipação de potência e evitando um possível curto circuito com a saída de alta tensão. Varreduras muito rápidas podem provocar instabilidade pelo tempo de carga e descarga da capacitância dos discos PZT, com constantes de tempo da ordem de 10 ms . Em nosso caso o tempo de aquisição de um espectro de alta resolução é da ordem de vários segundos, e esta limitação não causa problemas.

Um modo alternativo poderia usar dois amplificadores de alta tensão alimentados pelo mesmo gerador de rampa, mas com ganhos de tensão obedecendo a relação da Eq. 2.22. Isto permitiria estudar por exemplo o efeito de uma tensão de 'offset' aplicada ao tubo PZT, afetando somente a condição de fase dada pela Eq. 2.2. Várias referências da literatura [34–36] citam a dessintonia entre os máximos de transmissão da curva de ganho do laser e da cavidade estendida como um fator determinante da estabilidade e da largura de linha do LSCE.

2.5 Projeto Mecânico

O projeto mecânico foi realizado tendo em vista manter boa rigidez estrutural e pequenas amplitudes de vibração residuais. Os suportes mecânicos e microposicionadores foram solidamente fixados a uma base rígida de alumínio, usinada e retificada de modo a manter o alinhamento planar e angular. O amortecimento das vibrações foi realizado pelo uso de uma cobertura de espuma sobre o conjunto, obtendo bons resultados. Alguns componentes foram anodizados para minimizar reflexões espúrias.

Os componentes utilizados na montagem são descritos abaixo :

- Laser : encapsulamento padrão de 9 mm e fabricante Mitsubishi , emitindo em 845 nm e potência ótica nominal de 15 mW, sem nenhum recobrimento anti-refletor ou tratamento especial.

- Suporte do Laser : construído com as menores dimensões possíveis dentro dos requisitos do projeto, de modo a apresentar pequena massa e inércia térmicas. Foi revestido com banho de ouro para minimizar perdas por radiação. As perdas por convecção são controladas por meio de restrição a correntes de ar, inserindo o suporte dentro de um invólucro externo. Através de um termistor soldado à lateral do conjunto é realizada a monitoração e controle da temperatura do suporte. Todo o conjunto é montado sobre um termoelétrico Peltier, fixado por parafusos isolados termicamente, que atua como um refrigerador de estado sólido e permite variar a temperatura dentro de uma faixa de $\pm 20^{\circ}\text{C}$. Este conjunto pode ser usado em qualquer experiência onde seja necessária a estabilização e sintonia precisas da temperatura do laser.

- Lente de Focalização : uma objetiva Melles-Griot GLC 002, de abertura numérica $AN = 0,50$ e distância focal $f = 8\text{ mm}$ com cobertura anti-refletora otimizada para a região de 830 nm. Foi montada em um suporte com ajuste manual de altura e lateral e ajuste micrométrico da distância focal para colimação.

- Grade de Difração : holográfica e com comprimento de onda nominal do "blaze" em 500 nm. Possui 1800 linhas/mm e eficiência de difração de 43 % operando na configuração Littman em primeira ordem e incidência rasante de 82 graus.

- Suportes da Grade : em bloco usinado de alumínio permite ajuste angular manual da grade.

- Suporte do Espelho : é uma adaptação de um suporte cinemático comercial New Focus. Foram inseridos um elemento PZT tubular para translação e um 'stack' de quatro discos PZT para rotação do suporte do espelho. Através do ajuste simultâneo de uma rampa de tensão aplicada aos dois PZT's podemos obter sintonia contínua em alguns GHz.

O controle ativo da temperatura do LSCE é realizado por um circuito eletrônico incorporando as ações PID (Proporcional, Integral, Diferencial). A temperatura do conjunto é medida pelo termistor acoplado ao bloco do laser e comparada à temperatura ajustada por um potenciômetro. O sinal de erro resultante é tratado eletronicamente e irá controlar a corrente que circula pelo elemento termoelétrico Peltier, que por sua vez mudará a temperatura do laser assim fechando o laço de realimentação.

2.6 Caracterização do LSCE

O conjunto apresentou boas características de operação, resumidas abaixo :

- Sintonia mecânica : através do controle do ângulo do espelho pelo parafuso micrométrico foi obtido um intervalo de sintonia descontínua de $\pm 5 \text{ nm}$, medida através de um Wavemeter [39, 40].

- Sintonia elétrica : variando-se simultaneamente a tensão aplicada sobre os PZT's de rotação e translação, usando as condições obtidas na seção anterior, obtivemos sintonia contínua de 10 GHz observado através de um interferômetro Fabry-Perot de 2 GHz . Este valor é limitado somente pela máxima excursão fornecida pelo amplificador de alta tensão ($< 1000 \text{ V}_{DC}$). O sistema apresenta uma dependência residual do comprimento de onda com a corrente da ordem de 30 MHz/mA , aproximadamente 100 vezes menor que o fator 3 GHz/mA de um laser semiconductor isolado.

- Largura de linha : a medida é limitada pela finesse do IFP, pois a largura de

linha medida 8 *MHz* situa-se no limite teórico do instrumento que tem uma finesse de 250. Tentativas de medida da largura de linha pelo método heteródino (batimento de dois LSCE em um fotodiodo rápido), não foram bem sucedidas devido à excessiva sensibilidade a vibração dos lasers.

- Potência de saída: medimos 4 mW no feixe de saída com o laser operando com corrente de 50 mA. A eficiência de difração em 1ª ordem é de 45 % e as perdas na grade de difração são da ordem de 25 %, uma perda alta que pode ser reduzida depositando sobre a grade um filme metálico (ouro) [37,41]. A potência realimentada no laser semiconductor pode ser estimada supondo-se que a eficiência de difração é constante nas duas passagens pela grade e que as perdas no espelho e na lente de focalização são pequenas. Então $(0,45)^2 = 0,2$ e temos que $\simeq 20$ % da potência ótica retorna ao laser, o que caracteriza um regime de realimentação forte [34].

- Estabilidade mecânica : o conjunto apresenta muita sensibilidade à vibração, como normal em lasers de cavidade externa. Com a instalação de um conjunto de mesas óticas amortecidas este problema foi reduzido, mas permaneceu o ruído sonoro ambiental produzido pelo sistema de ventilação e ar condicionado. Uma possível solução a ser implementada é a montagem da cavidade dentro de uma caixa com isolamento acústico e mecânico.

- Estabilidade térmica : o LSCE foi operado normalmente sem controle ativo de temperatura, somente com corrente constante através do termoeletrico Peltier. Atribuímos isto à extrema seletividade da grade de difração e realimentação óptica alta. Os modos da cavidade estão fortemente acoplados à cavidade externa e dependem relativamente pouco da curva de ganho do meio ativo semiconductor. Posteriormente adicionamos controle ativo de temperatura com um Controlador Proporcional-Integral, que proporciona estabilidade relativa a longo prazo de (± 10 ppm), o que melhorou consideravelmente a reprodutibilidade espectral do LSCE.

Capítulo 3

Aplicações

3.1 Feixe Atômico

3.1.1 Padrão de Frequência Ótica - Cálcio

O isótopo mais abundante do Cálcio (^{40}Ca) é um elemento propício para estudos de desaceleração laser e bombeamento ótico [43–46]. A transição de dipolo elétrico ($4s^2$) $^1S_0 - (4s4p)$ 1P_1 em 422,6 nm é própria para desaceleração devido à grande largura espectral ($FWHM = 35\text{ MHz}$) e por formar um sistema de dois níveis. O spin nuclear do ^{40}Ca é nulo ($I = 0$) e seus níveis não possuem estrutura hiperfina. Além disso o nível fundamental 1S_0 não é degenerado ($J = 0$) e a totalidade dos átomos contribui para o sinal de absorção. Transições $\Delta m_j = 0$ apresentam dependência residual em segunda ordem a campos elétricos ($30\text{ MHz}/[V/cm]^2$) e campos magnéticos ($1\text{ Hz}/[\text{gauss}]^2$).

A linha de intercombinação em 657 nm, transição de dipolo magnético ($4s^2$) $^1S_0 - (4s4p)$ 3P_1 com $\Delta m_j = 0$ e largura de linha $\Delta\nu \cong 400\text{ Hz}$, é excelente para espectroscopia de alta resolução. Esta linha foi proposta como um padrão de frequência ótico para a realização do metro pelo Comité International des Poids et Mesures - CIPM [46], devido ao seu alto fator de qualidade ($Q = \nu/\Delta\nu \cong 10^{12}$) e a reduzida sensibilidade a campos magnéticos já citada. O atrativo de padrões de frequência primários óticos baseia-se em

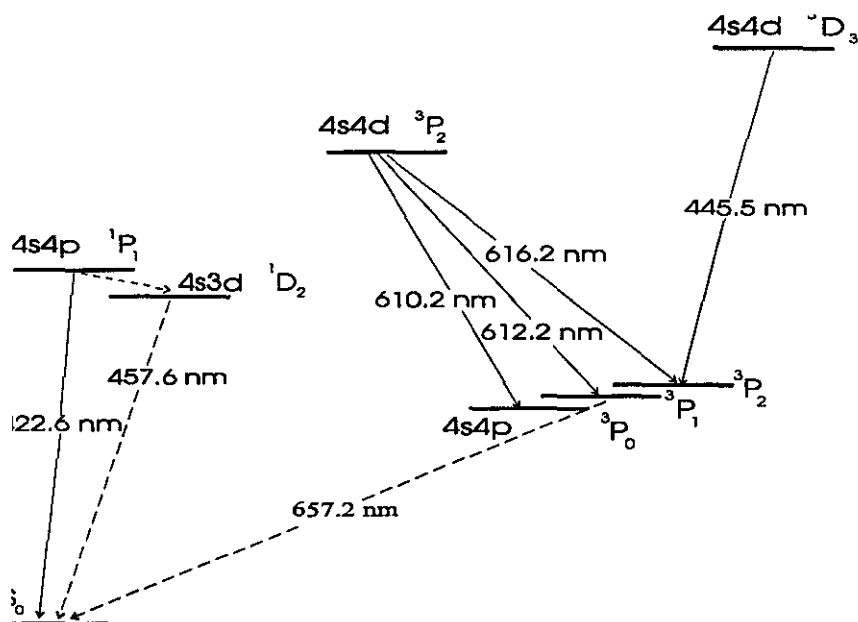


Figura 3-1: Diagrama de níveis atômicos do Cálcio

que transições com frequências mais elevadas possuem menor incerteza fracional, sendo que a realização do metro com padrões de radiação visível permite o uso de comparações interferométricas facilmente implementáveis. Também as transições de dipolo magnético entre os níveis de estrutura fina do tripleto metaestável ($4s4p$) 3P_i são adequados para um padrão de frequência submilimétrico, como proposto por Strumia [43].

Um fator muito interessante nestas transições é a possibilidade do uso exclusivo de lasers semicondutores, na transição de interrogação em 657 nm usando diodos GaInP, e na transição de desaceleração em 422 nm dobrando a frequência de lasers AlGaAs em 845 nm usando um cristal não linear de $KNbO_3$. Isto abre a possibilidade de construção de sistemas compactos, de baixo custo, transportáveis e de operação contínua. Estes instrumentos seriam úteis como padrões de transferência de comprimento e frequência ótica, para uso industrial e comparações inter-laboratórios, substituindo os atuais sistemas baseados em lasers de He/Ne estabilizados em uma componente hiperfina do Iodo I_2 .

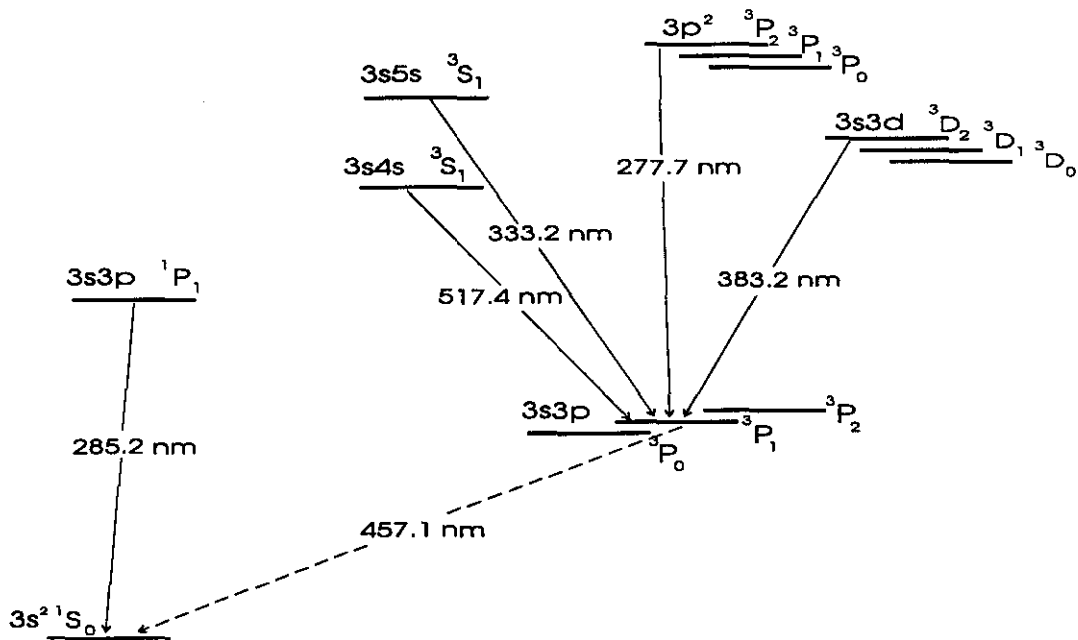


Figura ~3-2: Diagrama de níveis atômicos do Magnésio.

Os primeiros trabalhos para implementar este padrão foram feitos em feixes atômicos por diversos grupos na Itália [45, 47] e Alemanha [44], mas estes esforços foram limitados pela largura de linha residual imposta no método de Ramsey pelo tempo de interação do laser com o feixe atômico (alguns kHz). O grupo de pesquisa em que desenvolvi meu doutorado no Brasil também está trabalhando nesta direção [48], já tendo sido obtida a desaceleração do feixe atômico utilizando somente lasers semicondutores.

Recentemente grupos nos EUA [36] e na Alemanha [44], reportaram a obtenção de "melados óticos tridimensionais" de cálcio ("calcium optical molasses") em uma armadilha magneto-óptica. Neste sistema o desvio Doppler de primeira ordem é eliminado pelo aprisionamento [18, 47] e o de segunda ordem é minimizado pelo resfriamento, além da já citada reduzida sensibilidade a campos magnéticos e elétricos espúrios.

3.1.2 Caracterização do Feixe Atômico

No início do meu trabalho de doutorado participei na montagem do sistema de feixe atômico que opera no laboratório. Este sistema é versátil e permite operar com uma grande variedade de elementos químicos, entre eles cálcio e magnésio. A configuração de saída do feixe foi projetada de forma a podermos operar com átomos no estado fundamental ou, por meio de uma descarga longitudinal ('hot cathode discharge'), com uma mistura de átomos nos estados fundamental e excitados. Através de uma janela ótica posicionada convenientemente podemos observar a região de descarga, permitindo a obtenção de espectros de emissão em diferentes regimes de operação [45, 47, 48].

O sistema consiste de duas câmaras de vácuo, a da fonte de átomos/descarga e a de propagação do feixe atômico, separadas por um colimador de diâmetro 2 mm. Cada câmara é evacuada por uma bomba turbomolecular, permitindo atingir pressão final de 2×10^{-8} torr, que aumenta para 2×10^{-7} torr quando o forno está no regime de temperatura de trabalho em torno de 1000 Kelvin. A primeira câmara contém o forno, o sistema de descarga, flanges para conexões elétricas, flange passante para termopares e janelas óticas para observação da descarga. A segunda câmara consiste em um tubo de Pyrex de comprimento 1 m e diâmetro 5 cm. Janelas de Pyrex soldadas nos lados e na extremidade final permitem acesso ótico ao feixe atômico para realizar espectroscopia de alta resolução e resfriamento a laser.

A fonte de átomos é um forno cilíndrico de aço inox onde se coloca o elemento químico a ser estudado, aquecido por um enrolamento resistivo coaxial. O conjunto é isolado termicamente por outro cilindro externo de parede dupla para minimizar perdas térmicas. Esta estrutura está rigidamente montada em uma flange traseira removível. A descarga longitudinal pode ser opcionalmente montada no topo da fonte de átomos. Para evitar condensação e obturação do canal de saída do feixe outra resistência coaxial mantém o bocal em uma temperatura mais elevada que a do forno. A temperatura é controlada por um circuito consistindo de um termopar tipo K, um módulo de potência tiristorizado e um controlador PID, permitindo atingir estabilidade de 1 K.

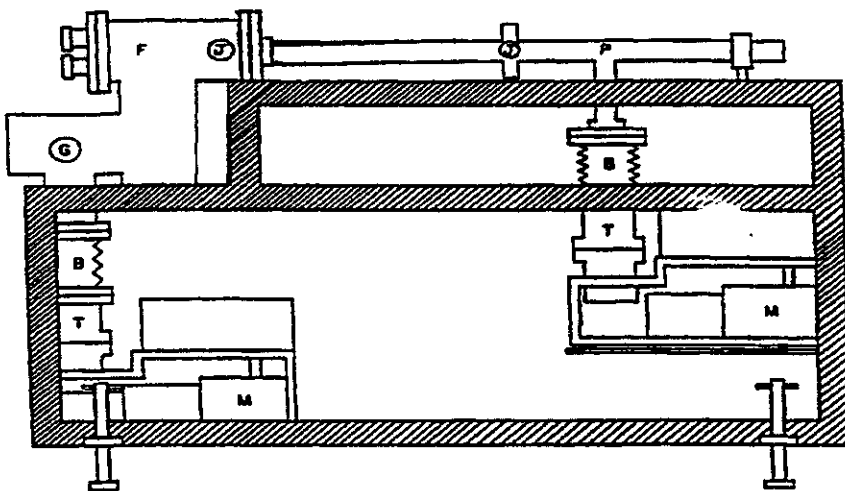


Figura 3-3: Sistema do feixe atômico.

A eficiência de produção de átomos nos níveis metaestáveis $(4s4p) \ ^3P_i$ foi inferida pela intensidade de absorção no centro da transição $(4s4p) \ ^3P_0 - (4s5s) \ ^3S_1$ em 610,2 nm. O feixe de um laser de corante CR 699-21, operando com Rhodamine 590 e bombeado por um laser de argônio Innova 200, foi enviado perpendicularmente ao feixe atômico 20 cm após o colimador. O gráfico resultante desta experiência de bombeio ótico do cálcio pode ser visto na Fig. 3-4.

Supomos para este cálculo que a população em 3S_1 é muito menor que em 3P_0 , que a largura de linha é Gaussiana com largura $\Delta\nu_G$ e que a largura de linha do laser é muito menor que $\Delta\nu_G$.

Para uma linha com alargamento Doppler $\Delta\nu_D$ a absorção pode ser expressa em termos do coeficiente de absorção κ_o no centro da linha [76, 77]

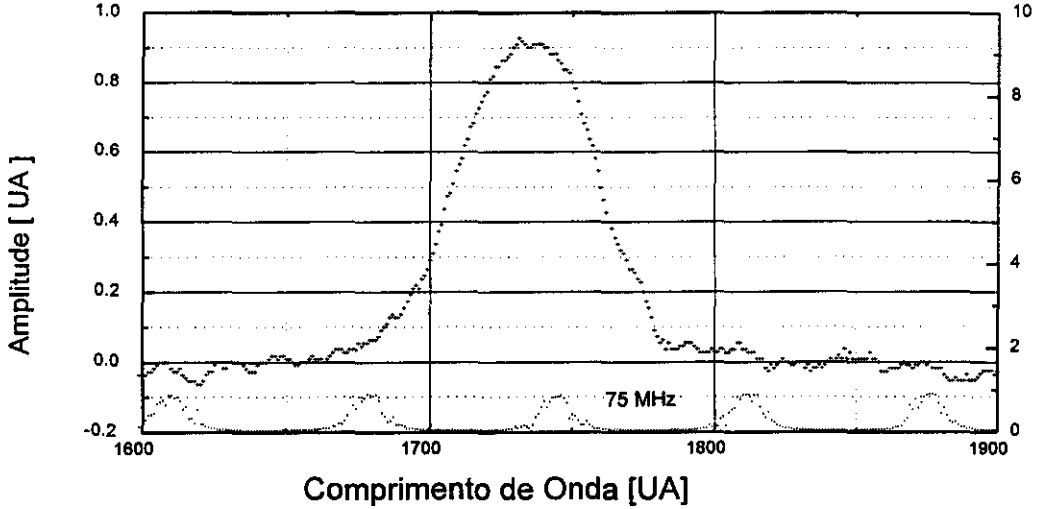
$$\kappa_o = \frac{2}{\Delta\nu_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\lambda_o^2}{8\pi} \left(\frac{g_2}{g_1} \right) N A \quad (3.1)$$

onde λ_o é o comprimento de onda, g_1 e g_2 são os pesos estatísticos dos estados inferior e superior, N a população do nível $(4s4p) \ ^3P_0$ e A o coeficiente de emissão espontânea.

Temos

$$I_\nu = I_o \exp(-\kappa_\nu x) \quad (3.2)$$

onde I_o é o coeficiente de absorção na frequência ν , x a espessura do meio absorvedor e I_0 e I_λ são as intensidades do laser incidente e transmitido.



Figura~3-4: Linha de absorção do Cálcio em 612,2 nm

Usando $x = 1 \text{ cm}$, $A = 94 \text{ MHz}$, $\Delta\nu_D = 104 \text{ MHz}$ e $I_0/I_\lambda = 0,94$ com uma corrente elétrica de 200 mA entre anodo e catodo, obtemos

$$N(^3P_0) = 1,7 \times 10^8 \text{ átomos/cm}^3 \quad (3.3)$$

Considerando as populações relativas do tripleto como sendo $1 : 3 : 5$ ($^3P_0 : ^3P_1 : ^3P_2$) é possível determinar a porcentagem de átomos no nível 3P_1 e no tripleto metaestável. A densidade de átomos a uma distância $d = 31 \text{ cm}$ após a descarga é dada por [76]

$$N = \frac{1}{4\pi} N_f \frac{A_c}{d^2} \quad (3.4)$$

onde N_f é a densidade de átomos no forno igual a $1,24 \times 10^{15} \text{ átomos/cm}^3$ na temperatura

de operação de 970 K, A_c é a área do colimador e d a distância entre o forno e a região de interação.

A densidade atômica total é de $3,3 \times 10^9$ átomos/cm³ e a densidade de átomos no tripleto é (40 ± 10) %. Este resultado concorda com as medidas realizadas por Giusfredi [74], operando em um sistema semelhante ao montado em nosso laboratório.

3.1.3 Conclusões

Foi implementado um sistema de feixe atômico para estudos espectroscópicos, otimizado para uso com os elementos cálcio e magnésio no estado fundamental ou estados excitados produzidos em uma descarga. Caracterizamos diversos parâmetros do feixe atômico e sistema de descarga como mecanismos e eficiência de produção de átomos nos níveis metaestáveis de interesse. Desenvolvemos também a instrumentação eletrônica necessária para a produção da descarga, instrumentação ótica para aquisição dos espectros de fluorescência do feixe atômico e de emissão da região da descarga, e instrumentação mecânica para operação confiável do forno e da descarga. Foi desenvolvida uma fonte de alta corrente/baixa tensão/baixo ruído, para a bobina magnética usada nas experiências de desaceleração do feixe atômico.

3.2 Lâmpada de Catodo Oco

Descargas em gases nobres são um meio barato e eficiente de produzir espécies instáveis e/ou excitadas para estudos de espectroscopia. Pode parecer que esta não seja uma ferramenta adequada para investigações espectroscópicas de alta precisão, devido às inúmeras perturbações inerentes aos processos que ocorrem em uma descarga (como colisões com partículas neutras/ionizadas e campos elétricos), mas evidências experimentais apontam o contrário. No caso do magnésio [53,54] uma comparação de dados para a mesma transição feita em uma lâmpada de catodo oco e em um feixe atômico indicou que os valores obtidos estavam livres de efeitos ambientais dentro dos limites de incerteza experimental, sendo que as principais fontes de erro eram campos magnéticos residuais e a medida de frequência do laser.

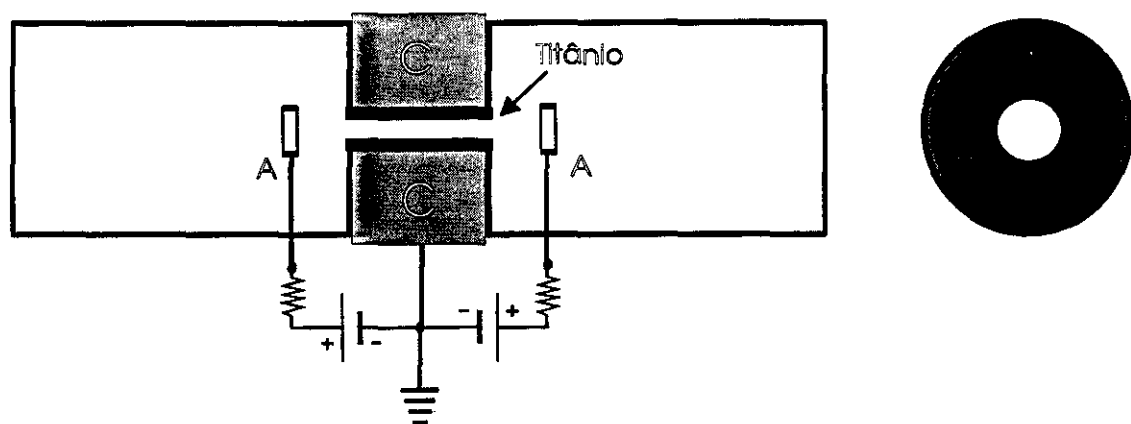


Figura 3-5: Lâmpada de Catodo Oco- vista lateral e frontal. C - catodo, A - anodo.

As dimensões típicas desta LCO são 20 cm de comprimento e 5 cm de diâmetro [27]. O catodo C é composto por um corpo de aço perfurado onde é inserido um cilindro oco do material a ser estudado (em nosso caso titânio), com 20 mm de comprimento e diâmetro interno de 3 mm. A superfície de aço exposta é recoberta com material isolante (mica), forçando a descarga a se realizar entre os anodos A (feitos de tântalo) e a superfície interna do cilindro de titânio. A estrutura externa é composta por dois cilindros de

Pyrex, soldados em uma extremidade a uma janela ótica e na outra extremidade colados ao corpo de aço. A lâmpada é evacuada e preenchida com um gás nobre (argônio, 1 torr). O corpo de aço do catodo possui conexões para refrigeração com água gelada, permitindo operar a lâmpada em altas correntes (até 300 mA) e melhorando a estabilidade da descarga.

LCO são um tipo particular de ‘glow discharge’, em que é maximizada a região de ‘glow’ negativo e minimizada a coluna positiva. Isto é conseguido usando um catodo cilíndrico, onde a região de ‘glow’ negativo se concentra ao longo do eixo de simetria envolvendo o máximo volume possível da descarga. A coluna positiva fica confinada à região entre os anodos em anel e a primeira superfície catódica. Nesta configuração a descarga pode operar com correntes da ordem de ampéres, no regime ‘glow’ em um gás relativamente frio [17].

Uma característica que se revelou muito interessante em LCO é o intenso campo elétrico que se desenvolve na ‘cathode dark region’. Este campo elétrico acelera enormemente ions contra a superfície do catodo, provocando uma eficiente ação de ‘sputtering’ quando a lâmpada é operada em corrente mais altas (>100 mA). Os átomos são ejetados da superfície do catodo com alta energia cinética inicial (1 a 5 eV [52]), mas ao se difundirem entram rapidamente em equilíbrio térmico com o gás. Uma utilização imediata deste efeito é feita no estudo de elementos refratários como titânio, ferro, tungstênio, etc..., que necessitam de altíssimas temperaturas para serem evaporados (ou então esquemas alternativos como ‘electron-beams’ e lasers pulsados [20,21,24,28]).

Uma LCO operando com baixa pressão de um gás nobre em regime de descarga ‘glow’ apresenta outra propriedade espectroscópica muito útil : a excitação atômica resulta diretamente da temperatura eletrônica, que não está ligada à temperatura do gás. Os elétrons acelerados pelo campo elétrico tem uma distribuição energética que corresponde a uma elevada temperatura eletrônica (podendo alcançar 5×10^4 Kelvin em baixas pressões [17]). A descarga é sustentada somente através da energia cinética dos elétrons, gerada pelo campo elétrico. Deste modo a descarga pode ser refrigerada e a largura

Doppler das linhas diminui, permitindo operar também em correntes mais altas.

A região de ‘negative glow’ é caracterizada por intensa luminosidade e os processos colisionais que ocorrem nela são numerosos e complexos. Após o grande aumento no número de elétrons na ‘cathode dark region’ causada por processos de ionização, a energia média dos elétrons torna-se pequena. A eficiência de ionização decresce acentuadamente, ao passo que processos de colisão inelástica a baixa energia fornecem um mecanismo eficiente de excitação atômica. O fator de Boltzmann $e^{-(E/kT)}$ é alto permitindo obter populações significativas mesmo para níveis atômicos metaestáveis altamente situados.

O titânio tem uma baixa taxa de ‘sputtering’ [50, 51] por gases nobres ionizados ($\sim 0,1$ átomo/ion) para energias iônicas da ordem de 100 eV, um valor típico para a LCO que utilizamos. Este é um dos menores valores entre todos os metais investigados, variando muito pouco em relação ao gás nobre utilizado. Esta foi uma das razões para escolhermos operar a lâmpada em alta corrente (até 300 mA), seguindo também uma sugestão do Prof. Nicolò Beverini [17]. Um motivo adicional para operarmos em altas correntes é o trabalho de Warner et al [52], onde foi detetado que o principal agente de ‘sputtering’ passa a ser íons metálicos, com uma eficiência ordens de grandeza superior ao mecanismo anterior mesmo levando em conta a menor presença destes íons em relação aos do gás nobre.

3.3 Estrutura Hiperfina - EHF

A origem das correções de energia da estrutura hiperfina surge do acoplamento entre o elétron e o campo eletromagnético produzido pelo núcleo, representado pelos potenciais escalar e vetorial. Este acoplamento levanta a degenerescência dos níveis da estrutura fina, como pode ser visto na Figura 3-6.

Um núcleo com momento angular nuclear I apresenta momentos de multipolo elétricos e magnéticos até ordem $k \leq 2 I$. Praticamente limitamos as análises de estrutura hiperfina aos termos de dipolo magnético A e quadrupolo elétrico B , pois momentos de multipolo nucleares de ordem superior a 2 fornecem contribuições extremamente pequenas à EHF e podem ser descartados.

O Hamiltoniano para a parte magnética da interação é dado pela expressão $A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$, onde podemos ver que estes momentos atuam sobre variáveis orbitais e de spin.

Para a parte elétrica o Hamiltoniano é muito mais complexo, como pode ser visto em [4,5,67], sendo que estes multipolos elétricos atuam somente sobre variáveis orbitais do elétron e o gradiente do campo. Adicionalmente temos o termo de 'contato' que surge do tamanho finito do núcleo e da distribuição do campo magnético em seu interior.

A fórmula de Casimir [4,5,67] fornece a energia de perturbação em primeira ordem dos níveis de energia devido a estas contribuições

$$\Delta W_{hf} = \frac{K}{2} A + \left[\frac{3 K (K + 1) - 4 I (I + 1) J (J + 1)}{8 I (2 I - 1) J (2 J - 1)} \right] B \quad (3.5)$$

$$K = F (F + 1) - I (I + 1) - J (J + 1) \quad (3.6)$$

onde A é a constante de dipolo magnético, B a constante de quadrupolo elétrico da estrutura hiperfina, I é o momento angular nuclear, J é o momento angular orbital e $F = I + J$ é o momento angular total.

Podemos estimar os coeficientes A e B do ^{49}Ti a partir dos coeficientes medidos para o ^{47}Ti , por meio de uma hipótese simples verificada pelos dados medidos por

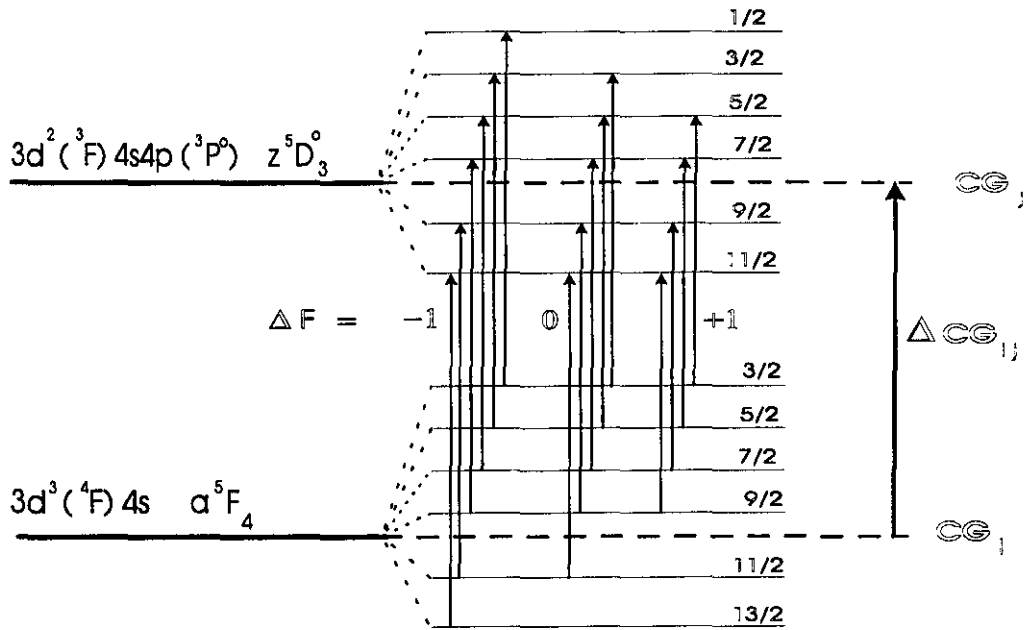


Figura 3-6: Diagrama de níveis hiperfinos para o ^{47}Ti da transição $J = 5 \rightarrow 4$, linha 8435,65 Angstroms.

Channapa e Pendlebury em 1965 [13]. Neste trabalho foram medidos os coeficientes da estrutura hiperfina do multipletto $\alpha^3F_{2,3,4}$, de mais baixa energia, para os isótopos 47 e 49 simultaneamente. Aydin et al [15] introduziram heurísticamente uma relação entre estes coeficientes comparando os dados para vários níveis hiperfinos, obtendo as equações 3.7 e 3.8. O erro introduzido pelo uso destas relações para os coeficientes é inferior a 100 KHz, sendo portanto plenamente justificado seu uso considerando a precisão das medidas realizadas neste trabalho.

$$\frac{A(^{47}\text{Ti})}{A(^{49}\text{Ti})} = (1,0000 \pm 0,0003) \quad (3.7)$$

$$\frac{B(^{47}\text{Ti})}{B(^{49}\text{Ti})} = (1,2200 \pm 0,0003) \quad (3.8)$$

A intensidade teórica da transição será dada [4] pelas equações 3.9, 3.10 e 3.11, para

transições $\Delta J = \pm 1$ (onde o número entre parenteses indica ΔF)

$$I(+1) = \frac{B(J+F+I+1)(J+F+I)(J+F-I)(J+F-I-1)}{F} \quad (3.9)$$

$$I(0) = \frac{B(J+F+I+1)(J+F-I)(J-F+I)(1+F+I-J)(2F+1)}{F(F+1)} \quad (3.10)$$

$$I(-1) = \frac{B(J-F+I)(J-F+I-1)(J-F-I-1)(J-F-I-2)}{(F+1)} \quad (3.11)$$

Estas fórmulas foram originalmente derivadas para transições da estrutura fina, mas podem ser imediatamente adaptadas para cálculos de estrutura hiperfina fazendo-se as substituições $L \rightarrow J$, $S \rightarrow I$ e $J \rightarrow F$ [4, 5]. Existe outro conjunto de fórmulas para $\Delta J = 0$ que não serão reproduzidas, pois o multipletto estudado neste trabalho possui somente transições $\Delta J = -1$ na faixa espectral acessível em torno de 845 nm. Este conjunto de equações pode ser normalizada em relação à transição mais intensa, fornecendo intensidades relativas que podem ser diretamente relacionadas às intensidades observadas.

3.3.1 Centro de Gravidade da Estrutura Hiperfina

Para calcularmos o desvio isotópico de uma transição que apresenta estrutura hiperfina, devemos encontrar seu centro de gravidade C_g . Existem diversos procedimentos citados na literatura incluindo integração numérica [22] e interpolação entre os picos da estrutura hiperfina. Escolhemos o segundo método pois os picos mais intensos da EHF estão bem resolvidos em nossas medidas, ao passo que muitos dos picos menos intensos estão submersos ou distorcidos pelo pedestal colisional presente em espectros de absorção saturada de Lâmpadas de Catodo Oco [17].

Montamos um sistema de equações envolvendo o centro de gravidade C_g e os coeficientes A_s e B_s do nível superior. Este sistema será geralmente superdeterminado pois podemos identificar mais transições hiperfinas do que as 3 variáveis envolvidas. Neste processo conhecemos as constantes A_i e B_i do nível inferior a^5F_i medidas por Aydin [15], e calculamos as constantes $a_{s,i}$ e $b_{s,i}$ dos níveis inferior i e superior s que dependem dos números quânticos I , J e F . A frequência f_{si} da transição hiperfina é identificada pela comparação entre as intensidades teóricas e observadas, através das relações de intensidade 3.9, 3.10 e 3.11.

$$\xi(C_g, A_s, B_s) = \sum_{i=1}^n [C_g + (a_s A_s + b_s B_s) - (a_i A_i + b_i B_i) - f_{si}]^2 \quad (3.12)$$

$$a_{s,i} = \frac{K}{2} = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (3.13)$$

$$b_{s,i} = \left[\frac{3K(K+1) - 4I(I+1)J(J+1)}{8I(2I-1)J(2J-1)} \right] \quad (3.14)$$

Minimizamos a função $\xi(C_g, A_s, B_s)$ em relação às 3 variáveis independentes através de um ajuste de mínimos quadrados, obtendo seus valores e também uma estimativa dos erros envolvidos no processo.

3.4 Desvios Isotópicos

A massa nuclear é uma importante propriedade física, que varia de acordo com o número de nucleons (prótons e neutrons) presentes no átomo, dentro dos limites de estabilidade nuclear. Esta variação de massa produz efeitos mensuráveis sobre linhas espectrais como o desvio isotópico e a estrutura hiperfina, devidos à superposição espacial entre as funções de onda eletrônicas e a forma/volume finitos do núcleo.

O Titânio possui 5 isótopos estáveis (46-50) presentes em amostras de minério natural, e oito instáveis (41-45, 51-53) obtidos a partir de produtos de fissão nuclear em reatores de pesquisa [3]. Estes isótopos estáveis situam-se em uma região de grande estabilidade nuclear, $Z \geq 20$ e $N \leq 28$, entre dois números mágicos de prótons e neutrons. Suas propriedades químicas são idênticas, razão pela qual somente podemos obter amostras isotópicas enriquecidas com determinado isótopo usando métodos físicos como espectroscopia de massa, ultra-centrifugação ou por separação laser.

Para átomos leves ($Z < 25$), o desvio isotópico é causado principalmente pelas correções de massa normal e específica. Para átomos pesados a correção de massa é pequena, pois a massa reduzida varia muito pouco entre isótopos. No entanto, o desvio de campo DC devido à variação do volume e da forma do núcleo torna-se dominante com o aumento do número de prótons Z .

Em transições que apresentam estrutura hiperfina (EHF) necessitamos encontrar o centro de gravidade da transição, que corresponderia ao desvio isotópico do átomo sem spin nuclear I . Este procedimento está descrito na seção que trata da EHF do titânio.

O hamiltoniano que fornece o desvio isotópico em função da energia (termo) dos elétrons, quando generalizada para o caso multi-elétron fornece

$$DM_{\infty,M} = T_{\infty} - T_M = \frac{\langle \sum_i \mathbf{p}_i^2 \rangle}{2(M+m)} + \frac{\langle \sum_{i>j} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j \rangle}{(M+m)} \quad (3.15)$$

onde M é a massa do isótopo e m a massa do elétron.

O desvio isotópico é definido como a diferença de frequência entre a mesma linha de

diferentes isótopos. Pode ser considerado com boa precisão como a soma de desvios de campo e de massa (separável ainda em desvio normal e desvio específico)

$$DI = DMN + DME + DC \quad (3.16)$$

Podemos ainda definir o Desvio Residual, composto do desvio isotópico total subtraído do desvio de massa normal, onde temos somente contribuições do desvio específico e de campo

$$DR = DI - DMN = DME + DC \quad (3.17)$$

- Desvio de Massa Normal (DMN) : o núcleo atômico não é infinitamente pesado e não permanece fixo em relação ao movimento dos elétrons. Levamos este efeito em consideração usando a massa reduzida do sistema para calcular o desvio introduzido na energia dos níveis. Esta correção é facilmente calculável [42,66] e fornece :

$$DMN_{M_2, M_1} = \nu m_e \frac{(M_2 - M_1)}{M_2 M_1} \quad (3.18)$$

onde ν é a frequência da transição, m_e é a massa do elétron e $M_2 > M_1$ são as massas dos isótopos (os valores numéricos são dados na Tabela 1.1).

- Desvio de Massa Específico (DME) : esta contribuição surge de correlações no movimento dos elétrons envolvendo o operador de $DME \quad \frac{1}{M} \sum_{i>j=1}^N \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j$, onde $\mathbf{p}_{ij}$ é o momento linear dos elétrons, M é a massa nuclear e N o número de elétrons. Este parâmetro é de difícil avaliação pois depende de detalhes sutis das funções de onda eletrônicas [66,68]. O DME depende fortemente da configuração eletrônica e relativamente pouco dos valores do momento angular orbital J e de spin S dentro da mesma configuração. O DME é grande especialmente nas transições óticas que envolvem saltos de elétrons $3d$, como apontado por Bauche [68], sendo este o caso das transições estudadas em nosso trabalho ($3d^3 4s \rightarrow 3d^2 4s4p$). No entanto possui a mesma dependência

funcional de massa que o DMN, sendo dado por

$$DME_{M_2, M_1} = k_E \frac{(M_2 - M_1)}{M_2 M_1} \quad (3.19)$$

onde a constante de desvio específico k_E independe dos pares isotópicos e embute a dependência com o momento angular J [68, 82].

Devido a esta mesma dependência funcional com a massa, a razão entre o DMN e o DME para os dois pares de isótopos obedecerá a relação

$$\alpha_E = \frac{DMN_{50,48}}{DMN_{48,46}} = \frac{DME_{50,48}}{DME_{48,46}} = \frac{M_{46}}{M_{50}} \frac{(M_{50} - M_{48})}{M_{50} M_{46}} = 0,92077 \quad (3.20)$$

onde foram usados os valores numéricos da Tabela 1.1.

- Desvio de Campo (DC) : dentro do volume do núcleo o potencial eletrostático desvia-se do potencial coulombiano clássico, dependendo da distribuição espacial e angular da densidade de carga nuclear isotópica. Consequentemente os níveis atômicos de energia de elétrons que penetram no núcleo serão afetados. O DC entre dois níveis depende do valor da função de onda eletrônica no núcleo $\Delta\Psi_e^2(0)$, que varia muito pouco dentro do volume nuclear devido às dimensões relativas entre o núcleo e a nuvem eletrônica. Para átomos leves o raio nuclear é menor, a densidade eletrônica no centro é também menor devido à atração elétrica mais fraca dos poucos Z prótons e portanto o DC é proporcional à variação do volume nuclear dentro de uma aproximação muito boa. Em átomos pesados esta situação se inverte e o DC aumenta rapidamente, sendo que devemos considerar também várias correções relativísticas. O DC é representado geralmente [28, 80, 82] como o produto entre dois fatores

$$DC_{M_2, M_1} = F_i \lambda_{M_2, M_1} \quad (3.21)$$

onde F_i é chamado de fator eletrônico e λ_{M_2, M_1} de fator nuclear. O fator eletrônico F_i leva em conta o valor da função de onda eletrônica no núcleo $\Psi_e(0)$, e o fator λ_{M_2, M_1} a

variação dos diversos momentos nucleares que afetam a distribuição de carga nuclear.

Por sua vez o fator nuclear é proporcional à mudança do raio quadrático médio de carga do núcleo

$$\lambda_{M_2, M_1} = \delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1} + \frac{C_2}{C_1} \delta \langle r^4 \rangle_{M_2, M_1} + \frac{C_3}{C_1} \delta \langle r^6 \rangle_{M_2, M_1} + \dots \quad (3.22)$$

$$= K_F \delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1} \quad (3.23)$$

onde os C_i são conhecidos como coeficientes de Seltzer [28, 82].

A constante de proporcionalidade K_F definida como na equação abaixo será constante para um dado par de isótopos, e para um elemento leve como o Titânio terá um valor muito próximo de 1 ($K_F = 0,995 \pm 0,004$) [28].

$$K_F = 1 + \frac{C_2}{C_1} \frac{\delta \langle r^4 \rangle_{M_2, M_1}}{\delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1}} + \frac{C_3}{C_1} \frac{\delta \langle r^6 \rangle_{M_2, M_1}}{\delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1}} + \dots \quad (3.24)$$

Wohlfahrt et al [23] mediram as energias e desvios isotópicos de raios-X muônicos associados à transição $2 p_{3/2} - 1 s_{1/2}$ para os núcleos atômicos $^{46-50}Ti$ com camada nuclear $1 f_{7/2}$ incompleta, e analisou os resultados em termos dos momentos de Barret $\langle r^k e^{-ar} \rangle$ da distribuição de carga nuclear. Combinando estes dados com seções de choque para espalhamento elástico de elétrons para os mesmos núcleos obtidas independentemente, Wohlfahrt também deduziu valores ditos ‘independentes de modelo’ [23, 80, 82] para os raios de carga rms nuclear $\langle r^2 \rangle_{M_1}^{1/2}$ dos isótopos e suas diferenças rms $\delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1}^{1/2}$.

Com os dados rms $\delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1}^{1/2}$ obtidos em [23] e transformados para $\delta \langle r^2 \rangle_{M_2, M_1}$ por Furman et al [28], fornecidos na tabela 3.1, obtemos a seguinte relação entre a diferença do raio quadrático médio entre os pares de isótopos (48, 46) e (48, 50) :

$$\beta_C = \frac{\delta \langle r^2 \rangle_{50,48}}{\delta \langle r^2 \rangle_{48,46}} = \frac{0,161 (8)}{0,109 (4)} = 1,48 (9) \quad (3.25)$$

$\delta < r^2 >_{48,46}$	$\delta < r^2 >_{48,47}$	$\delta < r^2 >_{48,49}$	$\delta < r^2 >_{48,50}$	
-0,109 (4)	-0,020 (9)	+0,137 (15)	+0,161 (8)	$[fm^2]$

Tabela 3.1: Desvios quadráticos médios entre pares isotópicos do titânio.

3.4.1 Gráficos de King

O desvio de massa DM_{M_2, M_1} entre dois isótopos de massas M_2 e M_1 é dado por

$$DM_{M_2, M_1} = K_{M_2, M_1} \frac{(M_2 - M_1)}{(M_2 + m)(M_1 + m)} \quad (3.26)$$

Se os desvios isotópicos DI_{M_2, M_1} em uma linha espectral λ_a são multiplicados por um fator normalizante dado por

$$\mu_{M_2, M_1} = \frac{(M_S - M_T)(M_2 + m)(M_1 + m)}{(M_2 - M_1)(M_S + m)(M_T + m)} \quad (3.27)$$

então os desvios modificados serão iguais para todos os pares de isótopos, considerando o par $[M_S, M_T]$ como padrão. Supondo que foram medidos os desvios isotópicos nas linhas λ_a e λ_b , os desvios modificados serão dados por

$$\begin{aligned} \mu_{M_2, M_1} DI_{M_2, M_1}^a &= DME_{S, T}^a + \mu_{M_2, M_1} DC_{M_2, M_1}^a \\ \mu_{M_2, M_1} DI_{M_2, M_1}^b &= DME_{S, T}^b + \mu_{M_2, M_1} DC_{M_2, M_1}^b \end{aligned}$$

Colocando os desvios da linha λ_a em função de λ_b , método conhecido como gráfico de King [66], teremos uma reta que passará através dos pontos $DME_{S, T}^a$ e $DME_{S, T}^b$ e terá uma inclinação dada por $DC_{M_2, M_1}^a / DC_{M_2, M_1}^b$. Podemos determinar a inclinação da curva mas não os desvios específicos, pois não existe nenhuma linha ótica do titânio onde estes fatores tenham sido medidos inequivocamente.

Esta dificuldade pode ser resolvida se usarmos desvios isotópicos de raios-X muônicos [23, 66, 82] dados na Tabela 3.1. Este procedimento remove a ambiguidade na deter-

minação do desvio específico e de campo. A equação resultante é vista abaixo

$$\mu_{M_2, M_1} DI_{M_2, M_1} = DME_{S, T} + \mu_{M_2, M_1} F_i \delta < r^2 >_{M_2, M_1} \quad (3.28)$$

onde $\mu_{M_2, M_1} \delta < r^2 >_{M_2, M_1}$ é o desvio muônico modificado.

3.4.2 Separação de desvios isotópicos de campo e de massa

Considerando o nível relativo de precisão de nossas medidas, é justificado empreender a separação dos desvios específicos e de campo usando as equações 3.17, 3.20 e 3.25 como delineado por Azaroual [19–21]. Para cada linha medida montamos um sistema de equações envolvendo os DI de menor incerteza dos pares de isótopos (48, 46) e (48, 50). Para maior clareza usamos as seguintes abreviações : $DME_{50,48} = a_1$; $DME_{48,46} = b_1$; $DC_{50,48} = a_2$; $DC_{48,46} = b_2$; $\delta < r^2 >_{(48,46)} = \delta_{46}$; $\delta < r^2 >_{(50,48)} = \delta_{50}$. Neste processo também obtemos as importantes quantidades que são a constante de desvio específico k_E e o fator eletrônico do desvio de campo F_i .

$$DME_{50,48} + DC_{50,48} = a_1 + a_2 = R_{50} \quad (3.29)$$

$$DME_{48,46} + DC_{48,46} = b_1 + b_2 = R_{46} \quad (3.30)$$

$$\frac{DME_{50,48}}{DME_{48,46}} = \alpha_E \quad (3.31)$$

$$\frac{DC_{50,48}}{DC_{48,46}} = \beta_C \quad (3.32)$$

Resolvendo este sistema de equações e usando as definições de k_E e F_i , obtemos as quantidades

$$DME_{48,46} = \frac{\beta_C R_{46} - R_{50}}{\beta_C - \alpha_E} \quad (3.33)$$

$$DME_{50,48} = \alpha_E DME_{48,46} \quad (3.34)$$

$$DC_{48,46} = \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{\beta_C - \alpha_E} \quad (3.35)$$

$$DC_{50,48} = \beta_C DC_{48,46} = \beta_C \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{\beta_C - \alpha_E} \quad (3.36)$$

$$k_E = \left(\frac{M_{48} M_{46}}{M_{48} - M_{46}} \right) DME_{48,46} \quad (3.37)$$

$$F_i = \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46}} \quad (3.38)$$

3.4.3 Análise da Variância

Devido à complexa interrelação entre as diversas quantidades calculadas, a análise da propagação de erros torna-se difícil e temos que fazer uso da fórmula geral para cálculo de variâncias. A variância é definida como o quadrado do desvio padrão $V(\sigma_i) = (\sigma_i)^2$. Então se tenho uma função de diversas variáveis independentes $f(X, Y, \dots)$, cada qual com seu desvio padrão σ_i , a variância total será dada por

$$V(\delta) = (\sigma_i)^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial X} \right)^2 \sigma_X^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial Y} \right)^2 \sigma_Y^2 + \dots \quad (3.39)$$

Nesta análise tenho quatro variáveis independentes (α_E , β_C , R_{46} , R_{50}), mas como a variância de α_E é muito pequena podemos considerá-la como uma constante (as massas isotópicas são conhecidas com grande precisão como pode ser visto na Tabela 1.1).

Fazendo os cálculos acima para a primeira variável dependente ($b_1 = DME_{48,46}$) temos

$$\frac{\partial b_1}{\partial R_{50}} = \frac{1}{(\alpha_E - \beta_C)} \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial b_1}{\partial R_{46}} = \frac{\beta_C}{(\beta_C - \alpha_E)} \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial b_1}{\partial \beta_C} = \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{(\beta_C - \alpha_E)^2} \quad (3.42)$$

Portanto o desvio padrão estimado para o desvio específico $DME_{48,46} = b_1$ será

$$\sigma_{b_1} = \sqrt{\frac{\sigma_{R_{50}}^2 + \beta_C^2 \sigma_{R_{46}}^2}{(\beta_C - \alpha_E)^2} + \left[\frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{(\beta_C - \alpha_E)^2} \right]^2 \sigma_{\beta_C}^2} \quad (3.43)$$

Para o desvio de massa específico do par (50, 48), dado por $DME_{50,48} = a_1$, temos

$$\sigma_{a_1} = \alpha_E \sigma_{b_1} \quad (3.44)$$

Fazendo o cálculo para a terceira variável dependente ($b_2 = DC_{48,46}$), temos

$$\frac{\partial b_2}{\partial R_{50}} = \frac{1}{(\beta_C - \alpha_E)} \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial b_2}{\partial R_{46}} = \frac{\alpha_E}{(\alpha_E - \beta_C)} \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial b_2}{\partial \beta_C} = \frac{\alpha_E R_{46} - R_{50}}{(\beta_C - \alpha_E)^2} \quad (3.47)$$

Portanto o desvio padrão σ_{b_2} do desvio de campo $DC_{48,46}$ será

$$\sigma_{b_2} = \sqrt{\frac{\sigma_{R_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{R_{46}}^2}{(\beta_C - \alpha_E)^2} + \frac{(\alpha_E R_{46} - R_{50})^2}{(\beta_C - \alpha_E)^4} \sigma_{\beta_C}^2} \quad (3.48)$$

Repetindo o procedimento para a quarta variável dependente ($DC_{50,48} = a_2 = \beta_C b_2$) temos

$$\frac{\partial a_2}{\partial R_{50}} = \frac{\beta_C}{(\beta_C - \alpha_E)} \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial a_2}{\partial R_{46}} = \frac{\alpha_E \beta_C}{(\alpha_E - \beta_C)} \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial a_2}{\partial \beta_C} = \alpha_E \frac{(\alpha_E R_{46} - R_{50})}{(\beta_C - \alpha_E)^2} \quad (3.51)$$

O desvio padrão para o desvio de campo $DC_{50,48}$ será então

$$\sigma_{a_2} = \sqrt{\frac{(\sigma_{R_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{R_{46}}^2)}{(\beta_C - \alpha_E)^2} \beta_C^2 + \frac{(\alpha_E R_{46} - R_{50})^2}{(\beta_C - \alpha_E)^4} \alpha_E^2 \sigma_{\beta_C}^2} \quad (3.52)$$

A constante do desvio de massa específico k_E , dada pela equação 3.37, é o produto de um fator de massas conhecido com grande precisão e do desvio de massa específico

$DME_{48,46}$. Portanto a precisão relativa de k_E será a mesma, dada por

$$\sigma_{k_E} = \left(\frac{M_{48}M_{46}}{M_{48} - M_{46}} \right) \sigma_{b_1} \quad (3.53)$$

A obtenção do fator eletrônico do desvio de campo F_i dado pela equação 3.38 é obtida substituindo as derivadas parciais obtidas abaixo na equação 3.39. Temos então

$$\frac{\partial F_i}{\partial R_{50}} = \frac{1}{(\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46})} \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial R_{46}} = \frac{-\alpha_E}{(\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46})} \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \delta_{50}} = \frac{\alpha_E R_{46} - R_{50}}{(\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46})^2} \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \delta_{46}} = \alpha_E \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{(\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46})^2} \quad (3.57)$$

O desvio padrão σ_{F_i} após agrupar os termos será então dado por

$$\sigma_{F_i} = \sqrt{\frac{\sigma_{R_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{R_{46}}^2}{(\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46})^2} + \frac{(R_{50} - \alpha_E R_{46})^2 (\sigma_{\delta_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{\delta_{46}}^2)^2}{(R_{50} - \alpha_E R_{46})^4}} \quad (3.58)$$

Capítulo 4

Resultados

4.1 Introdução

Escolhemos para investigação um conjunto de linhas espectrais intensas pertencente à configuração $3d^3 ({}^4F) 4s \rightarrow 3d^2 ({}^3F) 4s4p ({}^3P_0) z {}^5D_j^{odd}$ do titânio, com $\Delta J = -1$. Os níveis de energia do titânio 48 podem ser vistos na Fig. 4-1, onde também são mostrados o nível fundamental e outro nível impar $3d^3 ({}^4F) 4p x {}^5D_j^{odd}$ de energia mais alta. Este conjunto de linhas foi escolhido pelos seguintes motivos [12,57,83] :

- o comprimento de onda ressonante das transições recai dentro da faixa de sintonia do LSCE de 840 nm a 850nm. Esta janela espectral ainda não foi explorada devido à falta de fontes laser estáveis e altamente coerentes.

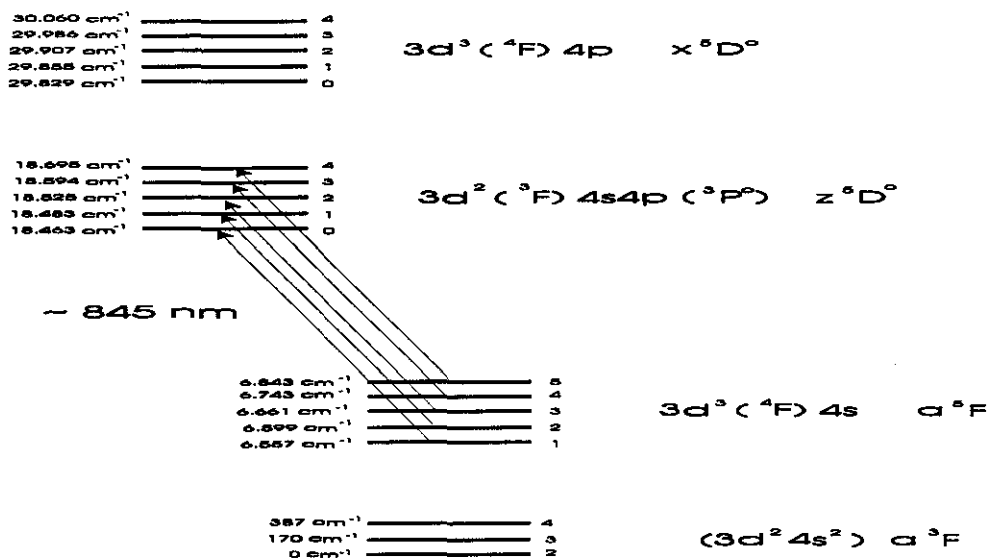
- o multiplete metaestável $a {}^5F_i$ está situado $\simeq 6500 \text{ cm}^{-1}$ acima do nível fundamental $a {}^3F_2$ e portanto intensamente populado em uma descarga "glow", como na lâmpada de catodo oco utilizada em nosso experimento [17,25,26,53,54].

- as constantes hiperfinas do multiplete metaestável inferior $a {}^5F_i$ foram medidas para o isótopo 47 por Aydin et al [15], facilitando enormemente a análise da estrutura hiperfina. Para analisar esta estrutura no isótopo 49 podemos usar a hipótese avançada também por Aydin e dada pelas equações 3.7 e 3.8, introduzindo uma constante de proporcionalidade para os parâmetros A e B dos dois isótopos, procedimento justificável

considerando as incertezas experimentais envolvidas em nossas medidas.

- as linhas são permitidas pelas regras de seleção de transições dipolo elétrico, possuindo valores altos de força de oscilador (“oscillator strenght”) [83].

- existem transições no azul (420 nm a 430 nm) que partem do nível $3d^3 ({}^4F) 4s a {}^5F_i$ em direção ao nível ímpar $3d^3 ({}^4F) 4p x {}^5D_j^{odd}$, passíveis de serem investigadas com radiação de lasers semicondutores de potência dobrada em frequência através de um cristal não linear de $KNbO_3$ colocado em uma cavidade externa ressonante [62–65]. Estas transições possuem muitas características desejáveis para investigação e poderiam ser estudadas fácilmente, pois esta linha de pesquisa em duplicação de frequência está sendo perseguida ativamente pelo nosso laboratório.



Figura~4-1: Níveis de energia das configurações estudadas e de interesse do titânio 48.

4.2 Arranjo Experimental

Estudamos a estrutura hiperfina e desvios isotópicos do titânio natural usando um espectrômetro laser, como pode ser visto na Fig. 4-2. A montagem para espectroscopia de

absorção saturada e de polarização usou como referência as descrições de Demtroder [18]. O feixe colimado produzido pelo LSCE é dividido por divisores de feixe ('beam-splitters BS') e enviado a diversos aparelhos para monitoração e análise.

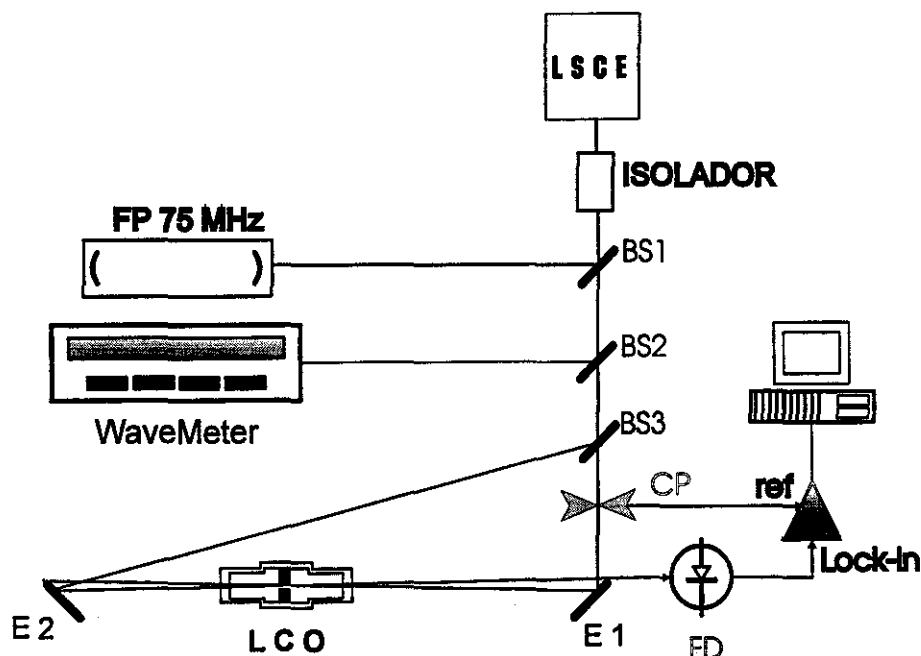


Figura 4-2: Espectrômetro Laser usando Laser Semicondutor em Cavidade Estendida (LSCE); BS - 'Beam Splitter', LCO - Lâmpada de Cátodo Oco, E - espelhos, CP - 'chopper'.

Através de BS1 enviamos uma parte do sinal para o interferômetro Fabry-Perot confocal de 75 MHz com lentes menisco de raio 1 m, que será nossa referência relativa de frequência. A distância entre os espelhos foi medida com um paquímetro de precisão, fornecendo como resultado um comprimento $l = (1000,43 \pm 0,15) \text{ mm}$. O 'Free Spectral Range' é calculado, sem correções para o índice do ar, como $FSR = (74.916 \pm 15) \text{ kHz}$. Esta precisão relativa de 1 parte em 5.000 implica em desvio menor que 1 MHz para uma varredura de 5 GHz. A finesse deste interferômetro foi medida fornecendo $F = 30$ e uma largura a meia altura do pico de transmissão $FWHM = 2,5 \text{ MHz}$.

Outra parte do feixe é enviada por meio de BS2 para o Wavemeter LM-10 ("Folded

Travelling Michelson Interferometer”), baseado no projeto de Hall et al [39,40] e fornecido pelo NIST. Este aparelho compara interferometricamente o comprimento de onda do laser HeNe de referência com o do laser a ser medido. Os dois feixes laser são superpostos espacialmente mas percorrendo sentidos opostos, e as franjas de interferência provocadas pela variação dos braços do interferômetro são contadas simultaneamente. A razão entre estas contagens fornece o comprimento de onda do laser a ser medido com precisão relativa de $\simeq 10^{-7}$.

O feixe é focalizado no centro da LCO por meio de duas lentes com distância focal de 1 metro, reduzindo o feixe a um diâmetro $2w = 350 \mu m$ na cintura (onde w é o raio onde a intensidade reduz-se a $1/e$). Este fato aliado à baixa potência nos feixes ($1 mW$ no feixe de bombeio e $100 \mu W$ no feixe de prova) não deve introduzir alargamento por potência apreciável.

A largura Doppler $\delta\nu_D$ do vapor de titânio produzido na descarga foi medido na linha de 8435,65 Angstroms e corrente de 100 mA, usando como referência de frequência o interferômetro de 2 GHz, fornecendo

$$\delta\nu_D \simeq 950 MHz \quad (4.1)$$

A temperatura equivalente inferida a partir desta largura Doppler para o ^{47}Ti é de aproximadamente 650 a 700 Kelvin.

A absorção foi medida nas mesmas condições, para um caminho ótico $L \simeq 2 cm$, fornecendo o valor

$$\alpha L \simeq 2,5 \%$$

A largura Doppler residual devida ao ângulo finito de cruzamento dos feixes de bombeio e de prova é estimada como sendo

$$\delta\nu_r = \alpha \delta\nu_D = \left(\frac{5 mm}{500 mm} \right) (950 MHz) \simeq 10 MHz \quad (4.2)$$

A lâmpada de catodo oco foi operada a uma corrente até 300 mA e refrigerada com água corrente. Usamos um "chopper" SRS 530, um lock-in digital SRS 830, um preamplificador de corrente SRS 570 e fotodetetores de silício Melles-Griot de 100 mm².

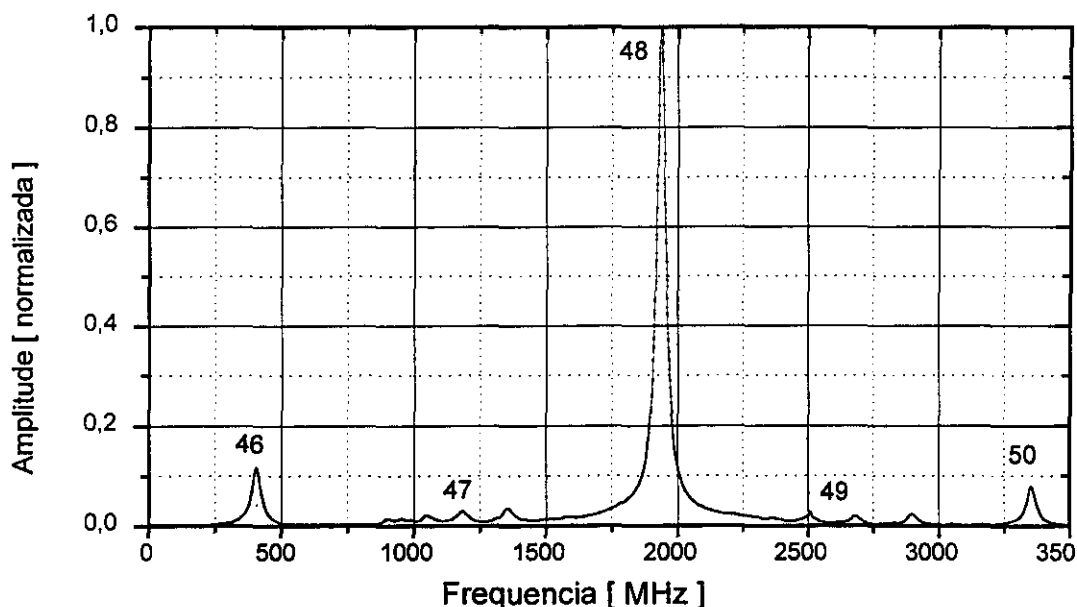


Figura 4-3: Gráfico de intensidade linear da linha 8435,65 Angstroms, $J = 4 \rightarrow 3$.

No gráfico mostrado na Fig. 4-3 podemos apreciar a excelente razão sinal/ruído do espectro de absorção saturada, onde a lâmpada foi operada com pressão de argônio 1 torr e corrente 300 mA . A largura de linha residual $\Delta f = 40 \text{ MHz}$ não pode ser creditada completamente ao ângulo de cruzamento dos feixes contrapropagantes (Eq. 4.2). Além disso ainda existe um alargamento residual, observado nitidamente nos pedestais dos isótopos isolados 46, 48 e 50, devido a colisões que alteram a fase das transições. Devido a esta característica foi necessária a inclusão de uma curva extra, para compensar este pedestal e fornecer um melhor ajuste matemático. Esta curva deveria ser uma gaussiana ou melhor ainda um perfil de Voigt [18,42], mas devido a limitações do software utilizado (Origin 4.1) tivemos que impor ajuste por uma lorentziana.

Também foi necessário o desenvolvimento de instrumentação eletrônica para operação dos protótipos, como amplificadores de alta tensão (1 kV / 20 mA / 1 kHz) para

uso com os elementos piezoelétricos de sintonia, e controladores de temperatura usando elementos termoeletrônicos Peltier para estabilização da temperatura dos diodos laser. O sistema de aquisição de dados espectroscópicos consiste de uma placa conversora AD rápida de 8 canais, para a qual foi desenvolvida um software dedicado para aquisição e tratamento dos dados.

4.2.1 Estimativa de Erros

O erro associado às medidas pode ser estimado levando-se em conta sua origem :

- Interferômetro Fabry-Perot usado como marcador de frequência. A incerteza do processo de medida introduz erro de 1 MHz para uma varredura de 5 GHz.

- Ajuste polinomial dos picos de transmissão para fornecer o eixo de frequências. O desvio padrão associado à localização dos picos de transmissão e ao ajuste por um polinômio de 5º grau é da ordem de 1,7 MHz (1 sigma).

- Localização do máximo das linhas de absorção saturada. Para as componentes intensas como os isótopos 46, 48 e 50 o processo de ajuste por mínimos quadrados fornece erro de 0,1 MHz, e para as componentes hiperfinas mais fracas erro de 1 MHz.

Vemos que o fator dominante na incerteza das medidas é o segundo item. Atribuímos isto à instabilidade na frequência do LSCE devido principalmente a ruído técnico como vibração mecânica e sonora, realimentação ótica ou ruído da fonte de corrente do laser. Se estabilizássemos o LSCE em uma cavidade Fabry-Perot de referência e esta variação fosse diminuída, poderíamos alcançar precisão de 1 MHz ou menor.

O erro quadrático médio resultante é da ordem de 2 MHz. Podemos observar que as incertezas relacionadas às componentes hiperfinas são 10 vezes maiores que as relacionadas aos isótopos principais, devido à menor razão sinal/ruído e consequente incerteza no processo de ajuste.

O procedimento usado para associar as transições observadas com as respectivas componentes hiperfinas é delineado nas seções referentes às linhas.

4.3 Argônio - Linha 8424,65 Angstroms

Foram realizadas experiências preliminares com espectroscopia de absorção e absorção saturada em uma lâmpada de catodo oco de titânio [25–27], selada com atmosfera de argônio a uma pressão de 1 torr. Foi investigada para fins de calibração uma linha intensa do argônio em 8424,65 Angstroms operando a lâmpada com corrente de 2 mA, mostrada na Fig. 4-4. A curva contínua mostra o espectro doppler (absorção máxima de 67 %), e no centro podemos observar o ‘Lamb-dip’ devido ao feixe contrapropagante. A curva pontilhada é o espectro de absorção saturada, mostrando um estreito perfil central sobressaindo de um largo pedestal colisional. Para uma largura doppler do argônio de 700 MHz a temperatura ambiente, estimamos uma largura subdoppler de 250 a 300 MHz.

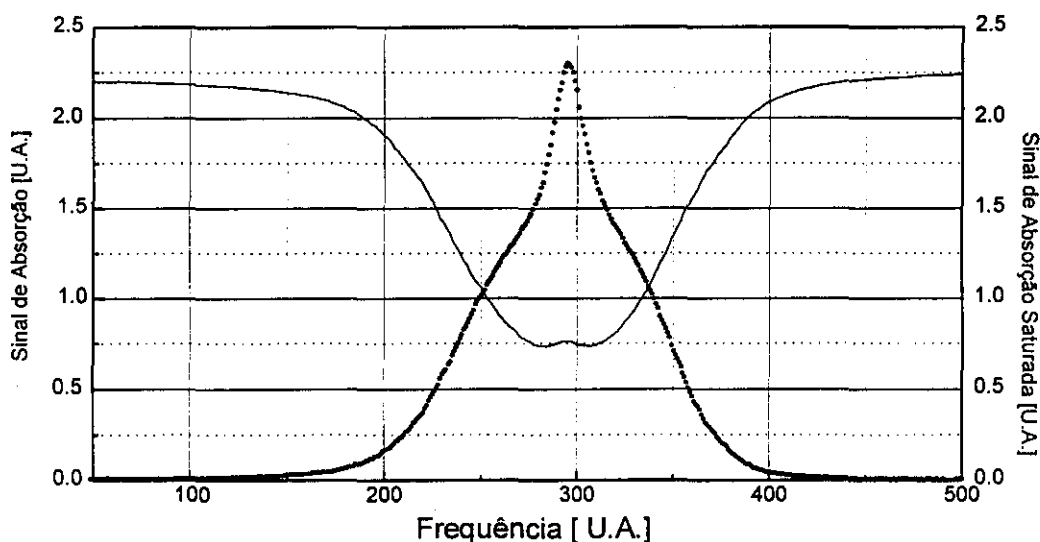
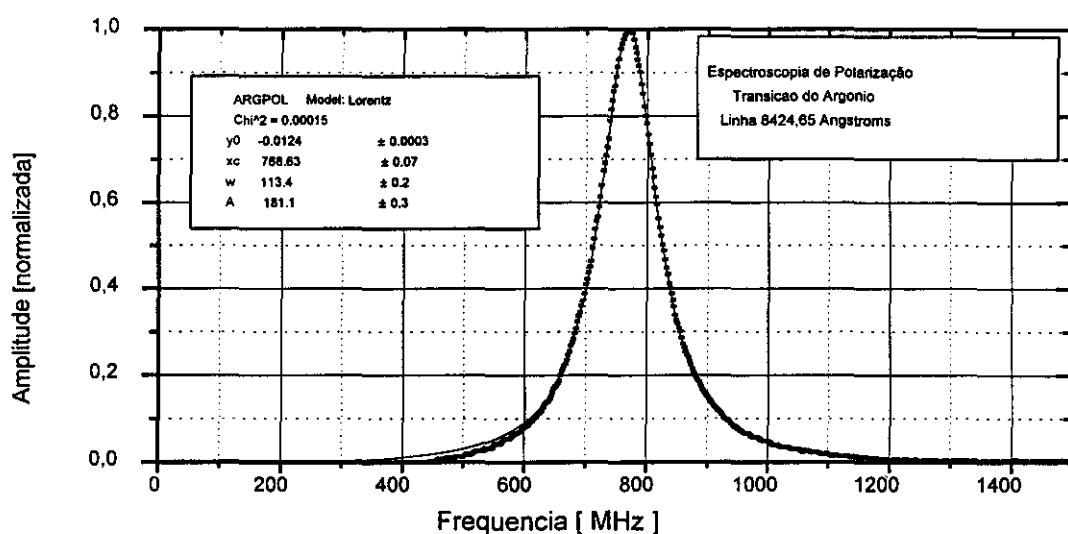


Figura 4-4: Espectro de absorção saturada do Argônio - Linha 8424,65 Angstroms - $4s[3/2] \rightarrow 4p[5/2]$.

Foi realizada também espectroscopia de polarização [18], devido a algumas vantagens importantes como maior razão sinal/ruído e relativa insensibilidade a efeitos colisionais. Outra propriedade interessante deste esquema é a obtenção de um perfil dispersivo, que poderia ser usado para travamento do laser à linha do argônio sem necessidade de

modulação externa.

Observando a Figura 4-5 vemos que o pedestal colisional foi totalmente suprimido, confirmado pelo ajuste muito bom conseguido com uma lorentziana. A assimetria no perfil é devida a um alinhamento ligeiramente incorreto do ângulo entre os polarizadores, como previsto teóricamente [18]. A largura de linha medida $\Delta\nu = 113 \text{ MHz}$, calibrada pelos picos de transmissão de um interferômetro Fabry-Perot confocal de 75 MHz, é menos da metade da largura de linha medida anteriormente. Podemos atribuir isto à mudança de pressão da lâmpada entre uma medida e outra, um melhor alinhamento do espectrômetro laser, à refrigeração da LCO e à eliminação do pedestal colisional.



Figura~4-5: Espectro de Polarização do Argônio - Linha 8424,65 Angstroms.

No entanto, quando tentamos estudar linhas do titânio com espectroscopia de polarização não obtivemos bons resultados, observando apenas um pequeno sinal superposto a um grande 'background' que não pôde ser eliminado. Entre as várias causas possíveis podemos citar birrefringência excessiva das janelas ópticas empregadas na LCO ou o fator de extinção dos polarizadores de calcita empregados ($\sim 2 \times 10^{-5}$) que não era suficiente. A partir desta constatação procedemos ao estudo do Titânio empregando apenas técnicas de absorção saturada, como está descrito nas seções seguintes.

4.4 Titânio - Linha 8435,65 Angstroms

Esta linha do titânio é uma transição $\Delta J = -1$ ($J = 4 \rightarrow 3$), sendo a segunda linha mais intensa do multiplete $a^5F_i \rightarrow z^5D_j$ com uma intensidade assinalada como 2100 [12]. Curiosamente esta linha apresenta maior comprimento de onda em relação à linha ($J = 5 \rightarrow 4$) em 8434,96 Angstroms.

O espectro de absorção saturada desta linha pode ser visto na Fig. 4-7. Na Tabela 4.1 são mostrados os parâmetros das curvas lorentzianas ajustadas a este espectro(onde X_c é a frequência central da transição, W é a largura a meia altura e A a amplitude).

	X_c	W	A	Isótopo		X_c	W	A	Isótopo
1	2000,7	42	62,6	48	16	2773,3	37	0,52	49
2	2022	408	27,9	pedestal	17	1042,7	37	1,26	49
3	3535,3	43	7,03	46	18	1258,2	37	0,82	49
4	583,5	46	5,36	50	19	1436,9	37	0,58	49
5	2588,5	48	2,13	47	20	1575,2	37	0,45	49
6	2755,5	38	1,07	47	21	1630	37	0,26	49
7	2892,7	43	1,09	47	22	1671	37	0,23	49
8	2989,5	37	0,58	47	23	1542	37	0,26	49
9	3037,3	38	0,61	47	24	1121,7	37	0,20	49
10	2957,0	39	0,40	47	25	1726	37	0,06	47/49
11	2433,6	37	0,09	47	26	782,2	42	0,25	49
12	2362,1	40	0,20	49	27	1414,5	37	0,18	49
13	2630,0	38	0,21	49	28	1083,4	37	0,16	49
14	2676,2	38	0,16	49	29	1467	37	0,13	49
15	2867,6	37	0,26	49					

Tabela 4.1: Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8435,65 Angstroms do Titânio.

O eixo de frequências foi calibrado através de um ajuste de mínimos quadrados por um polinômio de 5º grau aplicado aos picos de transmissão do Fabry-Perot com FSR de 75 MHz : $f = A + B_1 * X + B_2 * X^2 + B_3 * X^3 + B_4 * X^4 + B_5 * X^5$ [MHz]

Os parâmetros do ajuste podem ser vistos na Tabela 4.2. O Desvio Médio Padrão $DMP = 1,55$ MHz indica uma estabilidade razoável do sistema de calibração de frequência, mas este continua sendo a maior fonte de erro do processo. O gráfico polinomial juntamente com o resíduo do processo de ajuste são mostrados na Fig. 4-6.

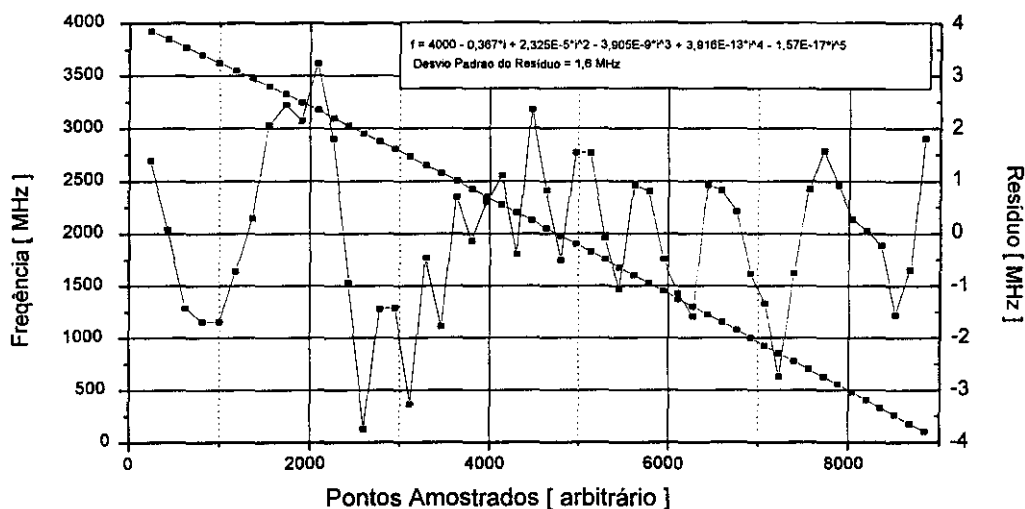


Figura 4-6: Curva de ajuste dos picos de transmissão do FP 75 MHz e respectivo resíduo, para a linha 8435,65 Å

Parameter	Value	Error	t-Value	Prob> t
A	+4011,2	1,7	2354,6	<0.0001
B1	-0,3672	0,0033	-110,9	<0.0001
B2	-2,3E-5	2,02E-6	-11,5	<0.0001
B3	+3,90E-9	5,2E-10	7,6	<0.0001
B4	-3,92E-13	5,8E-14	-6,8	<0.0001
B5	+1,57E-17	2,3E-18	6,6	<0.0001

Tabela 4.2: Parâmetros do ajuste do eixo de frequências por um polinômio de 5º grau.

4.4.1 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47

O isótopo 47 possui spin nuclear $I = 5/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS ou Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

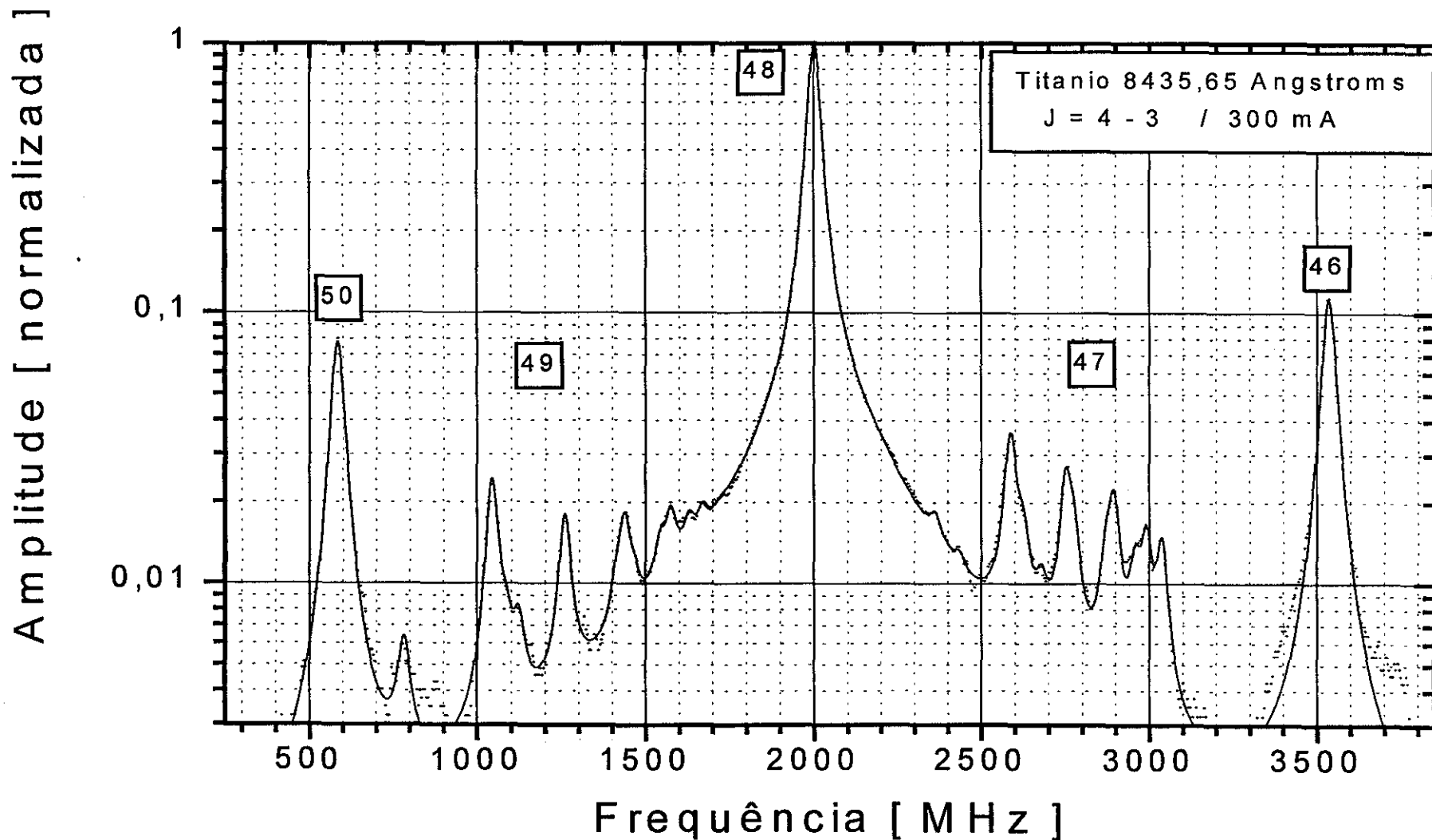


Figura 4-7 : Gráfico de Ajuste de curvas lorentzianas ao espectro de absorção saturada do ^{47}Ti - linha 8435,65 Angstroms.

O nível inferior $a\ ^5F_4$ possui $J = 4$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 4 - \frac{5}{2} \right| = \frac{3}{2} \qquad F_u = \left| 4 + \frac{5}{2} \right| = \frac{13}{2}$$

O nível se desdobra em 6 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}$$

O nível superior $z\ ^5D_3$ possui $J = 3$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 3 - \frac{5}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 3 + \frac{5}{2} \right| = \frac{11}{2}$$

O nível se desdobra em 6 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

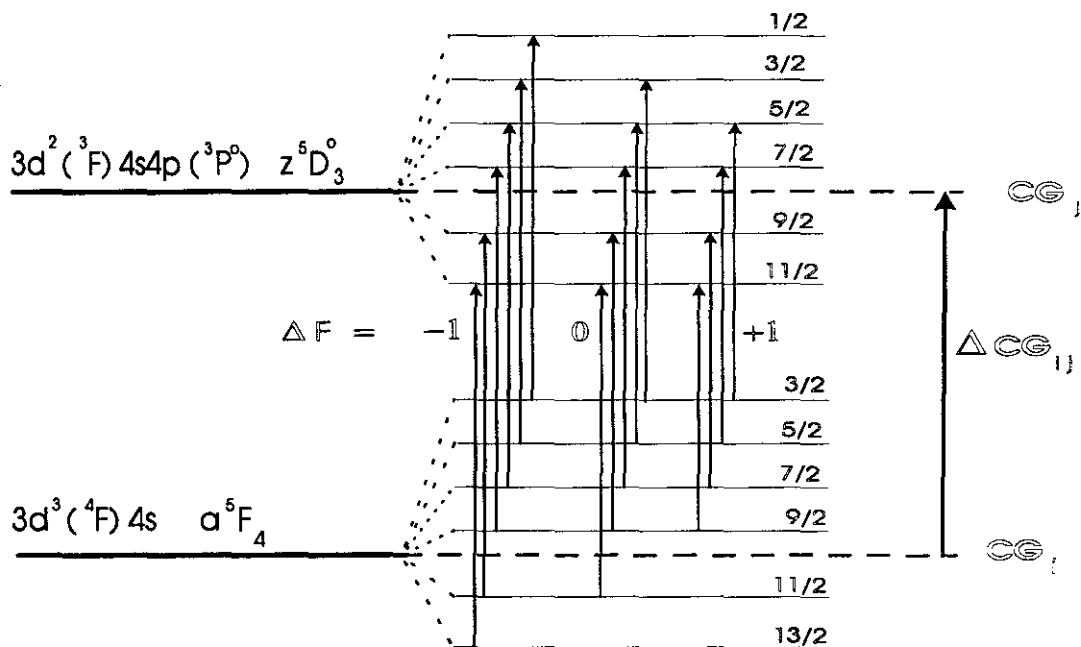
$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}$$

As transições entre esses subníveis hiperfinos são permitidas por regras de dipolo elétrico, onde o momento F pode variar como $\Delta F = 0, \pm 1$. Teremos então 15 transições permitidas para o isótopo 47, rotuladas ($a.....o$) e colocadas abaixo na Tabela 4.3. Em cada linha é discriminada sucessivamente a linha ($a.....o$), os momentos magnéticos totais F_i e F_j dos níveis inferior e superior, as energias de perturbação ΔW_i e ΔW_j dadas pela fórmula de Casimir (Eq. 3.5), a intensidade teórica da linha (equações 3.9, 3.10, 3.11), e as frequências medidas (*Exper.*) e calculadas (*Calc.*) para os intervalos da estrutura hiperfina.

Atribuindo transições específicas através de uma comparação entre intensidades teóricas e observadas, chegamos ao seguinte sistema de equações superdeterminado:

$$C_g + [7,5A_j + 0,25B_j] - [10A_i + 0,25B_i] = 2588,5 \quad (4.3)$$

$$C_g + [2A_j - 0,3B_j] - [3,5A_i - \frac{19}{80}B_i] = 2755,5 \quad (4.4)$$



Figura~4-8: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 4 \rightarrow 3$, linha 8435,65 Angstroms.

$$C_g + [-2,5A_j - 0,3B_j] - [-2A_i - \frac{83}{280}B_i] = 2892,7 \quad (4.5)$$

$$C_g + [-6A_j - 0,02B_j] - [-6,5A_i - \frac{29}{280}B_i] = 2989,5 \quad (4.6)$$

$$C_g + [-8,5A_j + 0,33B_j] - [-10A_i + \frac{11}{56}B_i] = 3037,3 \quad (4.7)$$

As constantes hiperfinas A_i e B_i do nível inferior α^5F_4 foram medidas pelo método de LMIRF [15] e seus valores numéricos são

$$A_i = -70,61 \text{ MHz} \quad B_i = -17,4 \text{ MHz}$$

A solução do sistema de equações superdeterminado 4.3-4.7 fornece os valores para o centro de gravidade C_g do isótopo 47 e as constantes hiperfinas A_j e B_j do nível superior

	F_i	F_j	ΔW_i	ΔW_j	<i>Int.</i>	<i>Exper.</i>	<i>Calc.</i>
a	3/2	1/2	$-12,5 A_i + \frac{55}{112} B_i$	$-10 A_j + 0,6 B_j$	18,4	-	3051,3
b	5/2	3/2	$-10 A_i + \frac{11}{56} B_i$	$-8,5 A_j + 0,33 B_j$	27,6	-	3044,2
c	7/2	5/2	$-6,5 A_i - \frac{29}{280} B_i$	$-6 A_j - 0,02 B_j$	40,1	2989,5	2989,8
d	9/2	7/2	$-2 A_i - \frac{83}{280} B_i$	$-2,5 A_j - 0,3 B_j$	56,1	2892,7	2892,0
e	11/2	9/2	$+3,5 A_i - \frac{19}{80} B_i$	$+2 A_j - 0,3 B_j$	76,0	2755,5	2756,1
f	13/2	11/2	$+10 A_i + \frac{1}{4} B_i$	$+7,5 A_j + \frac{1}{4} B_j$	100	2588,5	2588,4
g	3/2	3/2	$-12,5 A_i + \frac{55}{112} B_i$	$-8,5 A_j + 0,33 B_j$	9,2	-	2872,8
h	5/2	5/2	$-10 A_i + \frac{11}{56} B_i$	$-6 A_j - 0,02 B_j$	14,0	-	2747,9
i	7/2	7/2	$-6,5 A_i - \frac{29}{280} B_i$	$-2,5 A_j - 0,3 B_j$	16,0	-	2577,6
j	9/2	9/2	$-2 A_i - \frac{83}{280} B_i$	$+2 A_j - 0,3 B_j$	14,8	-	2366,7
k	11/2	11/2	$+3,5 A_i - \frac{19}{80} B_i$	$+7,5 A_j + \frac{1}{4} B_j$	9,7	-	2120,9
l	3/2	5/2	$-12,5 A_i + \frac{55}{112} B_i$	$-6 A_j - 0,02 B_j$	1,0	-	2576,5
m	5/2	7/2	$-10 A_i + \frac{11}{56} B_i$	$-2,5 A_j - 0,3 B_j$	1,3	-	2335,7
n	7/2	9/2	$-6,5 A_i - \frac{29}{280} B_i$	$+2 A_j - 0,3 B_j$	1,0	-	2052,3
o	9/2	11/2	$-2 A_i - \frac{83}{280} B_i$	$+7,5 A_j + \frac{1}{4} B_j$	0,5	-	1731,6

Tabela 4.3: Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47

$z \text{ } ^5D_3$ como sendo

$$A_j = -116,5 \text{ MHz}$$

$$B_j = +6,6 \text{ MHz}$$

$$C_g = 2749,3 (6) \text{ MHz}$$

Podemos observar na coluna *Calc.* da Tabela 4.3 a frequência das transições hiperfinas calculadas com os dados de C_g , A_j e B_j . Levando em conta a largura de linha homogênea de 40 MHz dos picos de absorção saturada, vemos que existe uma série de linhas misturadas ('blendeds'): a-b, d-g, e-h, f-i-l e j-m. Estas linhas misturadas podem distorcer o processo de ajuste por mínimos quadrados, ligadas ao fato de várias linhas não terem sido identificadas ainda mas podendo ser linhas de 'cross-over'.

4.4.2 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49

O isótopo 49 possui spin nuclear $I = 7/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento angular orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

O nível inferior $a\ ^5F_4$ possui $J = 4$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 4 - \frac{7}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 4 + \frac{7}{2} \right| = \frac{15}{2}$$

O nível se desdobra em 8 subníveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}, \frac{15}{2}$$

O nível superior $z\ ^5D_3$ possui $J = 3$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 3 - \frac{7}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 3 + \frac{7}{2} \right| = \frac{13}{2}$$

O nível se desdobra em 7 outros subníveis com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}$$

As transições entre esses subníveis hiperfinos são permitidas por regras de dipolo elétrico, onde o momento F pode variar como $\Delta F = 0, \pm 1$. Teremos então 20 transições permitidas para a EHF do isótopo 49, rotuladas ($A.....T$) e colocadas abaixo na Tabela 4.4. Em cada linha é discriminada sucessivamente a linha ($A.....T$), os momentos magnéticos totais F_i e F_j dos níveis inferior e superior, as energias de perturbação ΔW_i e ΔW_j dadas pela fórmula de Casimir (Eq. 3.5), a intensidade teórica da linha I (equações 3.9, 3.10, 3.11), e as frequências medidas (*Exper.*) e calculadas (*Calc.*) para os intervalos da estrutura hiperfina.

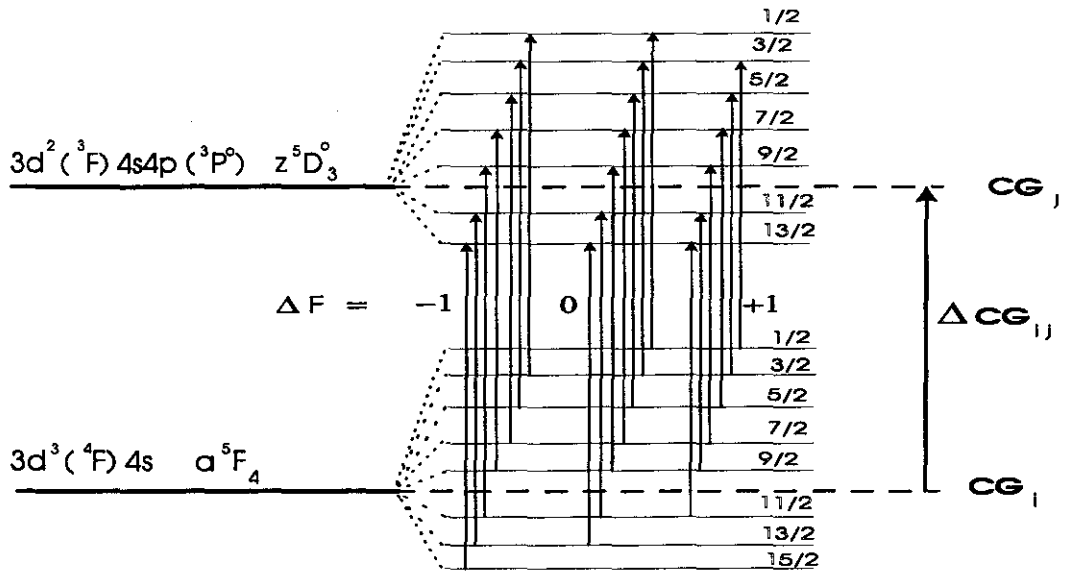


Figura 4-9: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 4 \rightarrow 3$, linha 8435,65 Angstroms.

Atribuindo transições específicas através de uma comparação entre intensidades teóricas e observadas, chegamos ao seguinte sistema de equações superdeterminadas:

$$C_g + [10,5A_j - 0,25B_j] - [14A_i + 0,25B_i] = 1042,7 \quad (4.8)$$

$$C_g + [4A_j - \frac{3}{14}B_j] - [6,5A_i - \frac{17}{112}B_i] = 1258,2 \quad (4.9)$$

$$C_g + [-1,5A_j - \frac{41}{140}B_j] - [0A_i - \frac{15}{56}B_i] = 1436,9 \quad (4.10)$$

$$C_g + [-6A_j - \frac{1}{7}B_j] - [-5,5A_i - \frac{17}{86}B_i] = 1575,2 \quad (4.11)$$

$$C_g + [-9,5A_j + \frac{3}{28}B_j] - [-10A_i - \frac{5}{196}B_i] = 1671,0 \quad (4.12)$$

Para o isótopo 49 as constantes hiperfinas A_i e B_i do nível inferior a^5F_4 e A_j e B_j do nível superior z^5D_3 são estimadas através da hipótese formulada por Aydin [15] e seus valores numéricos dados por

	F_i	F_j	ΔW_i	ΔW_j	I (%)	$Exp.$	$Calc.$
A	3/2	1/2	$-16 A_i + \frac{27}{74} B_i$	$-13,5 A_j + \frac{15}{28} B_j$	6,7	-	1721
B	5/2	3/2	$-13,5 A_i + \frac{16}{89} B_i$	$-12 A_j + \frac{5}{14} B_j$	14,7	-	1719
C	7/2	5/2	$-10 A_i - \frac{5}{196} B_i$	$-9,5 A_j + \frac{3}{28} B_j$	25,3	1671,0	1670
D	9/2	7/2	$-5,5 A_i - \frac{17}{86} B_i$	$-6 A_j - \frac{1}{7} B_j$	38,7	1575,2	1576
E	11/2	9/2	$+0 A_i - \frac{15}{56} B_i$	$-1,5 A_j - \frac{41}{140} B_j$	55,4	1436,9	1438
F	13/2	11/2	$+6,5 A_i - \frac{17}{112} B_i$	$+4 A_j - \frac{3}{14} B_j$	75,7	1258,2	1259
G	15/2	13/2	$+14 A_i + \frac{1}{4} B_i$	$+10,5 A_j + \frac{1}{4} B_j$	100,0	1042,7	1040
H	1/2	1/2	$-17,5 A_i + \frac{55}{112} B_i$	$-13,5 A_j + \frac{15}{28} B_j$	9,4	-	1617
I	3/2	3/2	$-16 A_i + \frac{27}{74} B_i$	$-12 A_j + \frac{5}{14} B_j$	14,3	-	1545
J	5/2	5/2	$-13,5 A_i + \frac{16}{89} B_i$	$-9,5 A_j + \frac{3}{28} B_j$	18,9	-	1426
K	7/2	7/2	$-10 A_i - \frac{5}{196} B_i$	$-6 A_j - \frac{1}{7} B_j$	21,8	-	1261
L	9/2	9/2	$-5,5 A_i - \frac{17}{86} B_i$	$-1,5 A_j - \frac{41}{140} B_j$	22,0	-	1057
M	11/2	11/2	$+0 A_i - \frac{15}{56} B_i$	$+4 A_j - \frac{3}{14} B_j$	18,9	-	798
N	13/2	13/2	$+6,5 A_i - \frac{17}{112} B_i$	$+10,5 A_j + \frac{1}{4} B_j$	11,8	-	505
O	1/2	3/2	$-17,5 A_i + \frac{55}{112} B_i$	$-12 A_j + \frac{5}{14} B_j$	3,1	-	1441
P	3/2	5/2	$-16 A_i + \frac{27}{74} B_i$	$-9,5 A_j + \frac{3}{28} B_j$	4,0	-	1252
Q	5/2	7/2	$-13,5 A_i + \frac{16}{89} B_i$	$-6 A_j - \frac{1}{7} B_j$	3,8	-	1017
R	7/2	9/2	$-10 A_i - \frac{5}{196} B_i$	$-1,5 A_j - \frac{41}{140} B_j$	3,0	-	736
S	9/2	11/2	$-5,5 A_i - \frac{17}{86} B_i$	$+4 A_j - \frac{3}{14} B_j$	1,8	-	411
T	11/2	13/2	$+0 A_i - \frac{15}{56} B_i$	$+10,5 A_j + \frac{1}{4} B_j$	0,7	-	45

Tabela 4.4: Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49, valores em MHz.

$$A_i[49] = A_i[47] = -70,61 \text{ MHz} \quad (4.13)$$

$$B_i[49] = \frac{1}{1,22} B_i[47] = -14,3 \text{ MHz} \quad (4.14)$$

$$A_j[49] = A_j[47] = -116,4 \text{ MHz} \quad (4.15)$$

$$B_j[49] = \frac{1}{1,22} B_j[47] = +5,4 \text{ MHz} \quad (4.16)$$

A substituição de $A_j[49]$ e $B_j[49]$ no sistema de equações superdeterminado 4.8-4.12 fornece os valores para o centro de gravidade C_g do isótopo 49

$$C_g = 1269 (6) \text{ MHz} \quad (4.17)$$

Como para o isótopo anterior, também aqui observamos várias linhas misturadas dentro de sua largura homogênea de 40 MHz : A-B-o (linha o do isótopo 47), E-J, F-K-P e G-L-Q. Um possível refinamento do método de ajuste por mínimos quadrados aplicável aqui seria incluir estas linhas mas ponderadas pela intensidade teórica individual.

4.4.3 Separação de Desvios de Massa Específicos DME e de Campo DC

Seguindo o procedimento delineado na Seção 3.4.2 podemos separar as várias contribuições ao desvio isotópico total. Neste processo também obtemos as importantes quantidades que são a constante de desvio específico k_E e o fator eletrônico do desvio de campo F_i para a linha 8435,65 Å. Esta seção será necessariamente longa e detalhada pois pretendo mostrar todos os passos e fórmulas pertinentes agrupados, para que nas outras seções me restrinja apenas a mostrar os dados já calculados e me referir a esta para os detalhes.

Os símbolos δ_{46} e δ_{50} indicam os desvios médios quadráticos mostrados na Tabela 3.1:

$$\begin{aligned}\delta_{46} &= \delta \langle r^2 \rangle_{48,46} = -0,109 \text{ (4) } fm^2 \\ \delta_{50} &= \delta \langle r^2 \rangle_{50,48} = 0,161 \text{ (8) } fm^2\end{aligned}$$

R_{46} e R_{50} indicam o desvio residual DR obtido pela subtração do desvio de massa normal DMN do desvio isotópico total DI , dados na Tabela 4.6. Seus valores são $R_{46} = -1711 \text{ (3) } MHz$; $R_{50} = -1580 \text{ (3) } MHz$. As constantes $\alpha_E = 0,9208$ e $\beta_C = 1,48 \text{ (9) }$ são definidas na Seção 3.4.2.

O primeiro passo é obter os desvios de campo e específicos para os pares isotópicos principais (48,46) e (50,48) através dos dados experimentais R_{46} e R_{50} e das constantes do modelo α_E e β_C :

$$DME_{48,46} = \frac{\beta_C R_{46} - R_{50}}{\beta_C - \alpha_E} = -1704 \text{ (10) } [MHz]$$

$$DME_{50,48} = \alpha_E DME_{48,46} = -1569 \text{ (9) } [MHz]$$

$$DC_{48,46} = \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{\beta_C - \alpha_E} = -8 \text{ (8) } [MHz]$$

$$DC_{50,48} = \beta_C \delta\nu_C(48,46) = -11 \text{ (11) } [MHz]$$

O desvio padrão estimado para o desvio específico $DME_{48,46} = b_1$ será

$$\sigma_{b_1} = \sqrt{\frac{\sigma_{R_{50}}^2 + \beta_C^2 \sigma_{R_{46}}^2}{(\beta_C - \alpha_E)^2} + \frac{(R_{50} - \alpha_E R_{46})^2}{(\beta_C - \alpha_E)^4} \sigma_{\beta_C}^2} \simeq 10 \text{ } [MHz]$$

O erro para o desvio de massa específico de $DME_{50,48} = a_1$

$$\sigma_{a_1} = \alpha_E \sigma_{b_1} = 0,9208 \times 10 \simeq 9 \text{ } [MHz]$$

O desvio padrão do desvio de campo $DC_{48,46} = b_2$

$$\sigma_{b_2} = \sqrt{\frac{\sigma_{R_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{R_{46}}^2}{(\beta_C - \alpha_E)^2} + \frac{(\alpha_E R_{46} - R_{50})^2}{(\beta_C - \alpha_E)^4} \sigma_{\beta_C}^2} \simeq 8 \text{ } [MHz]$$

O desvio padrão para o desvio de campo $DC_{50,48} = a_2$

$$\sigma_{a_2} = \sqrt{\frac{(\sigma_{R_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{R_{46}}^2)}{(\beta_C - \alpha_E)^2} \beta_C^2 + \frac{(\alpha_E R_{46} - R_{50})^2}{(\beta_C - \alpha_E)^4} \alpha_E^2 \sigma_{\beta_C}^2} \simeq 11 \text{ } [MHz]$$

A seguir calculamos as constantes k_E e F_i e seus respectivos erros :

$$k_E = \frac{M_{48} M_{46}}{M_{48} + M_{46}} \frac{\beta_C R_{46} - R_{50}}{\beta_C - \alpha_E} = 1.882 \text{ } [GHz]$$

$$\sigma_{k_E} = \frac{M_{48} M_{46}}{M_{48} - M_{46}} \sigma_{b_1} = 1104,3 \times 10 = 11 \text{ } [GHz]$$

$$F_i = \frac{R_{50} - \alpha_E R_{46}}{\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46}} = +67 \left[\frac{MHz}{fm^2} \right]$$

$$\sigma_{F_i} = \sqrt{\frac{(\sigma_{R_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{R_{46}}^2)}{(\delta_{50} - \alpha_E \delta_{46})^2} + \frac{(R_{50} - \alpha_E R_{46})^2 (\sigma_{\delta_{50}}^2 + \alpha_E^2 \sigma_{\delta_{46}}^2)^2}{(R_{50} - \alpha_E R_{46})^4}} = 65 \left[\frac{MHz}{fm^2} \right]$$

A partir da constante k_E podemos calcular os desvios específicos entre dois isótopos de massas M_2 e M_1 através da Equação 3.19, como abaixo

$$DME_{47,46} = k_E \frac{M_{47} - M_{46}}{M_{47}M_{46}} = -871 \text{ (6)} \quad [MHz]$$

$$DME_{48,47} = k_E \frac{M_{48} - M_{47}}{M_{48}M_{47}} = -833 \text{ (6)} \quad [MHz]$$

$$DME_{49,48} = k_E \frac{M_{49} - M_{48}}{M_{49}M_{48}} = -802 \text{ (6)} \quad [MHz]$$

$$DME_{50,49} = k_E \frac{M_{50} - M_{49}}{M_{50}M_{49}} = -767 \text{ (6)} \quad [MHz]$$

Os desvios de campo são calculados através da diferença entre os desvios residuais e dos desvios específicos calculados acima. Este passo é extremamente sensível a erros de arredondamento, e devemos usar sempre uma casa decimal de precisão após a vírgula em todos os cálculos, apesar dos resultados serem mostrados já arredondados.

$$DC_{47,46} = DR_{47,46} - DME_{47,46} = -876(6) - [-871(6)] = -5 \text{ (8)} \quad [MHz]$$

$$DC_{48,47} = DR_{48,47} - DME_{48,47} = -835(6) - [-833(6)] = -2 \text{ (8)} \quad [MHz]$$

$$DC_{49,48} = DR_{49,48} - DME_{49,48} = -814(6) - [-802(6)] = -13 \text{ (8)} \quad [MHz]$$

$$DC_{50,49} = DR_{50,49} - DME_{50,49} = -765(6) - [-767(6)] = +2 \text{ (8)} \quad [MHz]$$

Na Tabela 4.5 são resumidos os dados relativos às constantes k_E e F_i e seus respectivos erros, e na Tabela 4.6 os dados relativos à separação das diversas contribuições ao desvio

isotópico com seus respectivos desvios padrão.

Constante	k_E	σ_{k_E}	F_i	σ_{F_i}
Valor	1.882 GHz	11 GHz	+67 $\frac{MHz}{fm^2}$	65 $\frac{MHz}{fm^2}$

Tabela 4.5: Constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico F_i - linha 8435,65 Angstroms.

Par Isotópico	DI	DMN	DR	DME	DC
47 - 46	-786(6)	90,3(0,1)	-876(6)	-871(6)	-5(8)
48 - 47	-749(6)	86,3(0,1)	-835(6)	-833(6)	-2(8)
49 - 48	-731(6)	83,1(0,1)	-814(6)	-802(6)	-13(8)
50 - 49	-686(6)	79,5(0,1)	-765(6)	-767(6)	+2(8)
48 - 46	-1535(3)	176,6(0,1)	-1711(3)	-1704(10)	-8(8)
50 - 48	-1417(3)	162,6(0,1)	-1580(3)	-1569(9)	-11(11)

Tabela 4.6: Separação de desvios específicos e de campo - linha 8435,65 Angstroms, valores em MHz.

Uma melhor visualização dos desvios isotópicos de campo é obtida combinando os dados em um Gráfico de King, como explanado na Seção 3.4.1. Multiplicamos os desvios óticos residuais DR da linha 8435,65 Angstroms (Tabela 4.6) e os desvios muônicos (Tabela 3.1) pelo fator modificativo μ_{M_2,M_1} (equação 3.27), escolhendo arbitrariamente os isótopos 48-50 como par padrão.

A linha pontilhada representa a reta obtida por um ajuste de mínimos quadráticos levando em conta todos os desvios isotópicos modificados colocados no gráfico e suas respectivas barras de erro. As linhas quebradas estabelecem os limites de confiança inferior e superior, que são um parâmetro estatístico importante para julgar a qualidade dos dados e ajustes obtidos. Também foi colocada neste gráfico a reta obtida usando o fator eletrônico F_i e o desvio específico $DME_{S,T}$ para o par 48-50 (linha cheia), usando a equação simplificada $\mu DI = DME_{S,T} + F_i$ ($\mu \delta < r^2 >$) onde $\mu \delta < r^2 >$ representa a abscissa e μDI a ordenada.

Podemos ver que os desvios modificados dos isótopos ímpares situam-se sistematicamente acima da reta obtida com o uso dos dados muônicos. Esta característica pode indicar um erro sistemático no processo de encontrar o centro de gravidade destes isótopos. Outra possibilidade é a presença do efeito de ‘far configuration mixing’ [24,67,68], um efeito forte em titânio devido aos seus níveis metaestáveis agrupados em baixa energia.

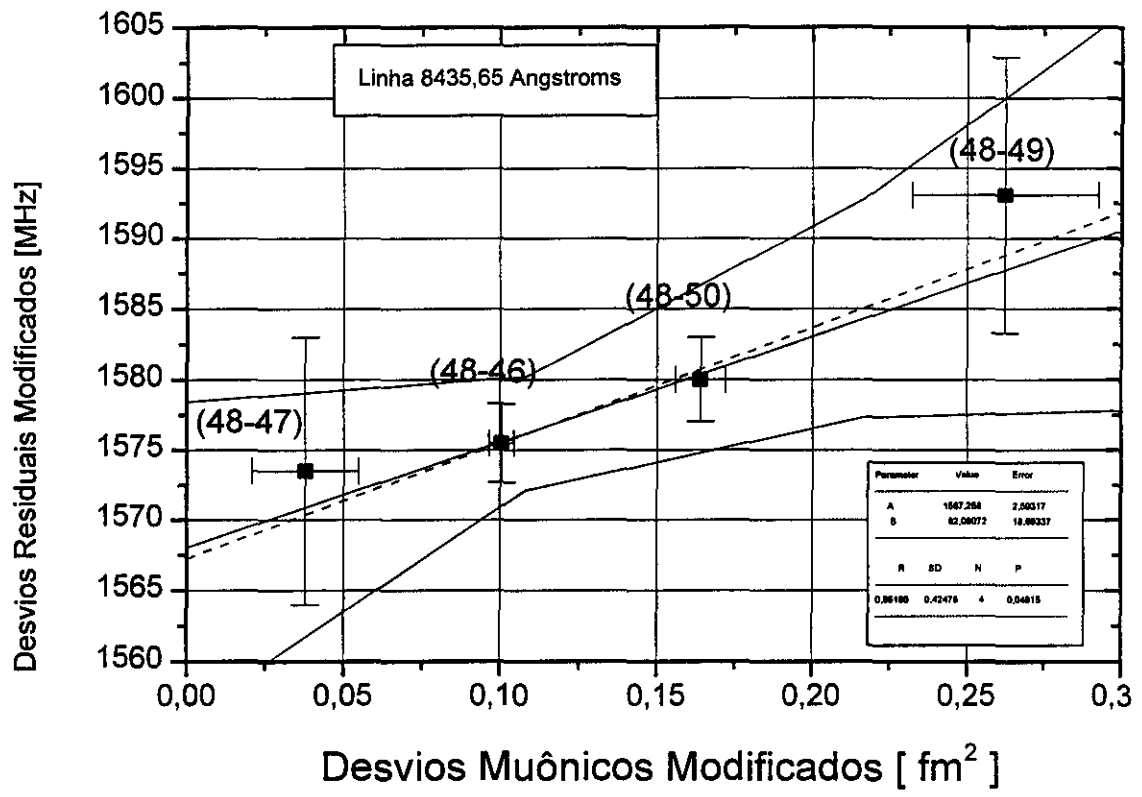


Figura 4-10: Gráfico de King Muônico para o par padrão 48-50, linha 8435,65 Angstroms.

4.5 Titânio - Linha 8434,96 Angstroms

Esta é uma transição $\Delta J = -1$ ($J = 5 \rightarrow 4$), sendo a linha mais intensa do multipletto $a^5F_i \rightarrow z^5D_j$ com uma intensidade assinalada como 3100 [12].

O espectro de absorção saturada desta linha pode ser visto na Fig. 4-12, e na Tabela 4.7 são mostrados os parâmetros das curvas lorentzianas ajustadas a este espectro (onde X_c é a frequência central da transição, W é a largura a meia altura e A a amplitude).

	X_c	W	A	Isótopo		X_c	W	A	Isótopo
1	2144,6	43	63,65	48	10	3156,0	43	0,40	47
2	2148	444	41,24	pedestal	11	3015,4	43	0,22	47
3	3677,7	43	7,03	46	12	1212,4	43	1,11	49
4	725,8	44	5,08	50	13	1375,1	40	0,61	49
5	2754,4	43	1,63	47	14	1516,5	43	0,58	49
6	2873,2	43	1,07	47	15	1631,3	43	0,45	49
7	2984,6	43	0,89	47	16	1773,8	43	0,42	49
8	3073,7	43	0,75	47	17	1713,9	43	0,29	49
9	3132,5	43	0,55	47					

Tabela 4.7: Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8434,96 Angstroms.

O eixo de frequências foi calibrado através de um ajuste de mínimos quadrados por um polinômio de 5º grau aplicado aos picos de transmissão do Fabry-Perot com FSR de 75 MHz, onde os coeficientes são dados na Tabela 4.8 :

$$f = A + B_1 * X + B_2 * X^2 + B_3 * X^3 + B_4 * X^4 + B_5 * X^5 [MHz]$$

Os parâmetros do ajuste podem ser vistos na Tabela 4.8. O gráfico polinomial juntamente com o resíduo do processo de ajuste são mostrados na Fig. 4-11. O Desvio Médio Padrão $DP = 1,7 MHz$ indica um bom ajuste, mas qualquer melhoria neste parâmetro afetaria diretamente a confiabilidade da medida pois este é a maior fonte de erro do processo. Uma região da curva de ajuste apresenta um desvio pronunciado em relação ao conjunto do gráfico de 5 MHz no máximo de desvio, sendo uma questão significativa se os picos situados nesta área não sejam sujeitos a um erro muito maior que outros picos.

Parameter	Value	Error	t-Value	Prob> t
A	+4008,8	1,906	2354,6	<0.0001
B1	0,3669	0,004	-110,9	<0.0001
B2	1,50E-5	2,63E-6	-11,5	<0.0001
B3	-3,52E-9	7,24E-10	7,6	<0.0001
B4	4,63E-13	8,8E-14	-6,8	<0.0001
B5	-2,23E-17	3,8E-18	6,6	<0.0001

Tabela 4.8: Parâmetros do ajuste polinomial do eixo de frequências.

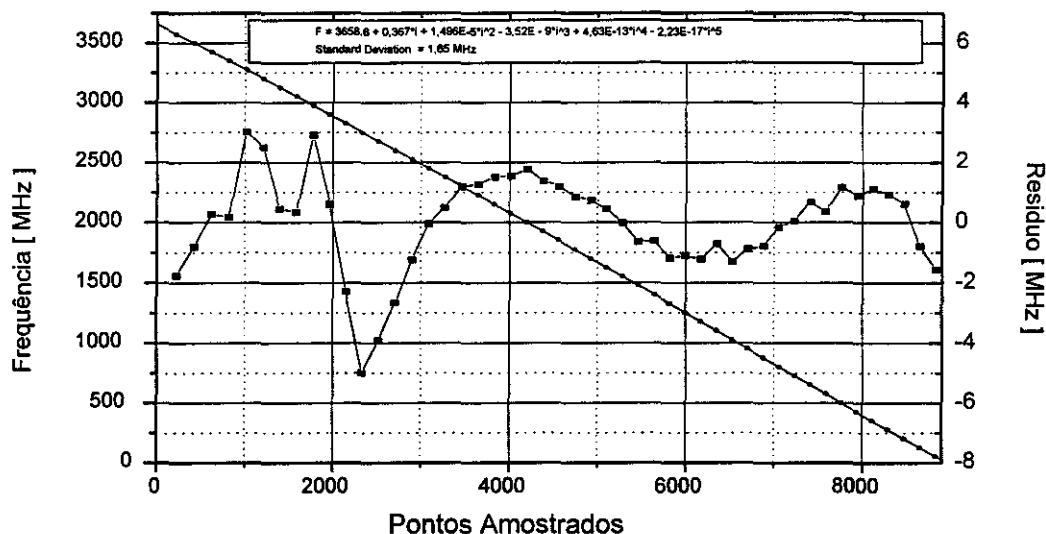


Figura 4-11: Ajuste de frequência aos picos de transmissão do FP 75 MHz - linha 8434,96 Angstroms.

4.5.1 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47

O isótopo 47 possui spin nuclear $I = 5/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento angular orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

O nível inferior a^5F_5 possui $J = 5$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 5 - \frac{5}{2} \right| = \frac{5}{2} \quad F_u = \left| 5 + \frac{5}{2} \right| = \frac{15}{2}$$

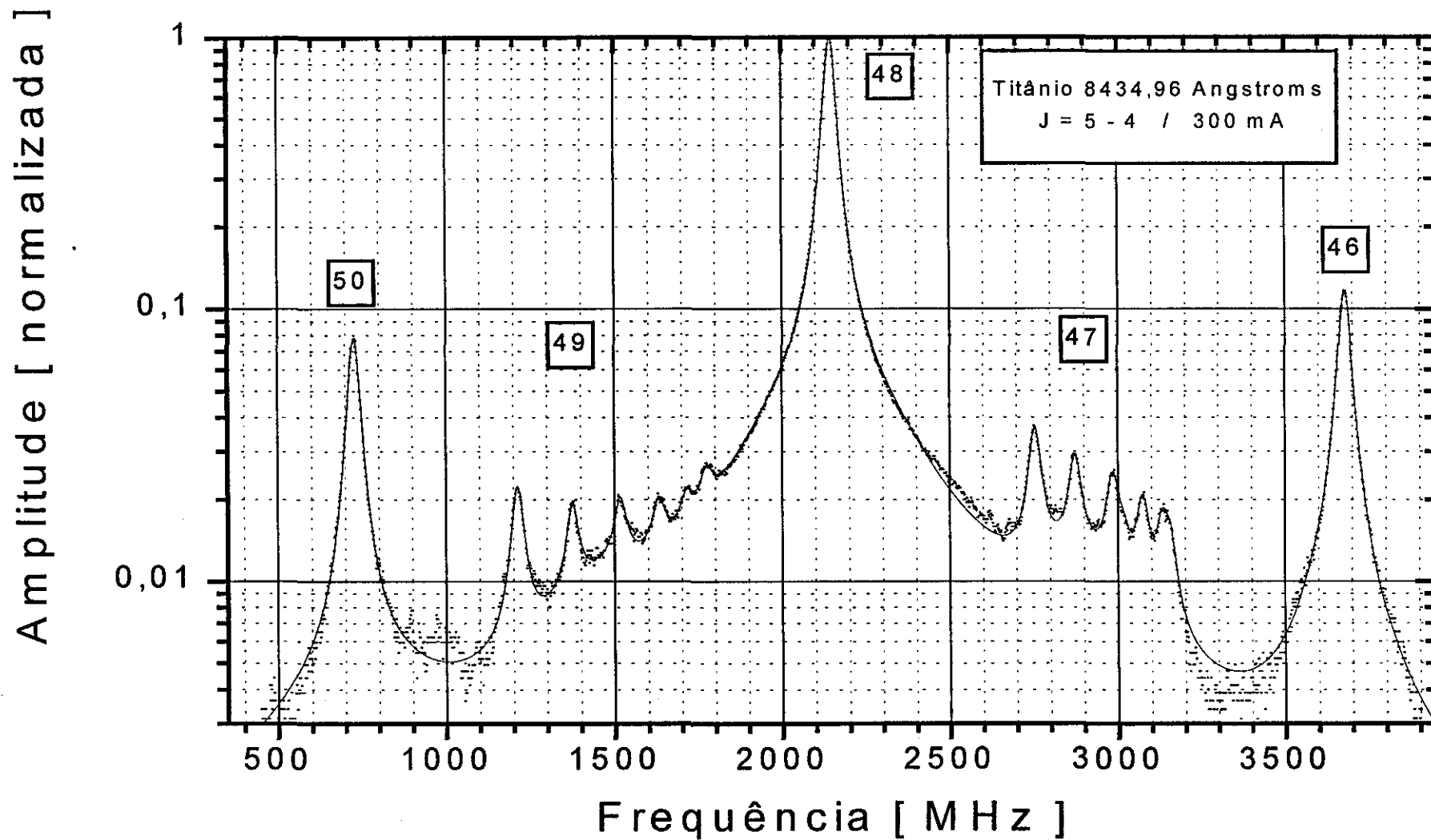


Figura 4-12 : Gráfico de ajuste de curvas lorentzianas ao espectro de absorção saturada do ^{47}Ti - linha 8434,96 Angstroms.

O nível se desdobra em 6 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}, \frac{15}{2}$$

O nível superior z^5D_4 possui $J = 4$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 4 - \frac{5}{2} \right| = \frac{3}{2} \qquad F_u = \left| 4 + \frac{5}{2} \right| = \frac{13}{2}$$

O nível se desdobra em 6 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}$$

As transições entre esses subníveis hiperfinos são permitidas por regras de dipolo elétrico, onde o momento F pode variar como $\Delta F = 0, \pm 1$. Teremos então 15 transições permitidas para o isótopo 47, rotuladas (*a.....o*) e colocadas abaixo na Tabela 4.9. Em cada linha é discriminada sucessivamente a linha (*a.....o*), os momentos angulares totais F_i e F_j dos níveis inferior e superior, as energias de perturbação ΔW_i e ΔW_j dadas pela fórmula de Casimir (Eq. 3.5), a intensidade teórica da linha (equações 3.9, 3.10, 3.11), e as frequências medidas (*Exper.*) e calculadas (*Calc.*) para os intervalos da estrutura hiperfina.

Atribuindo transições específicas através de uma comparação entre intensidades teóricas e observadas, chegamos ao seguinte sistema de equações superdeterminadas:

$$C_g + [10A_j + 0,25B_j] - [12,5A_i + 0,25B_i] = 2754,4 \quad (4.18)$$

$$C_g + [3,5A_j - \frac{19}{80}B_j] - [5A_i - 0,2B_i] = 2873,2 \quad (4.19)$$

$$C_g + [-2A_j - \frac{83}{280}B_j] - [-1,5A_i - \frac{43}{150}B_i] = 2984,6 \quad (4.20)$$

$$C_g + [-6,5A_j - \frac{29}{280}B_j] - [-7A_i - 0,14B_i] = 3073,7 \quad (4.21)$$

$$C_g + [-10A_j + \frac{11}{56}B_j] - [-11,5A_i + 0,13B_i] = 3132,5 \quad (4.22)$$

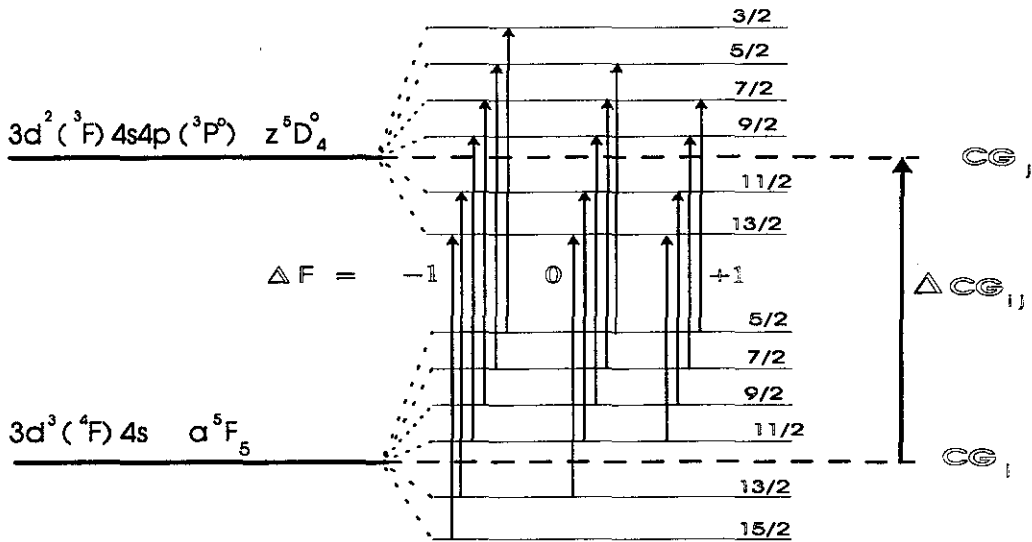


Figura 4-13: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 5 \rightarrow 4$, linha 8434,96 Angstroms.

As constantes hiperfinas A_i e B_i do nível inferior α^5F_5 foram medidas pelo método de LMIRF [15] e seus valores numéricos são

$$A_i = -74,85 \text{ MHz} \quad B_i = -28,7 \text{ MHz}$$

A solução do sistema de equações superdeterminado acima fornece os valores para o centro de gravidade C_g do isótopo 47 e as constantes hiperfinas A_j e B_j do nível superior z^5D_4 como sendo

$$A_j = -109,05 \text{ MHz}$$

$$B_j = +27,8 \text{ MHz}$$

$$C_g = 2894,5 \text{ MHz}$$

Neste isótopo observamos poucas superposições de linhas : a-b, e-g, f-h. Esta superposição não é muito acentuada no par a-b separados por 30 MHz, mas introduziu uma

	F_i	F_j	ΔW_i	ΔW_j	$Int.(\%)$	$Exp.$	$Calc.$
a	5/2	3/2	$-15 A_i + \frac{13}{30} B_i$	$-12,5 A_j + \frac{55}{112} B_j$	30,6	3156,0	3161,0
b	7/2	5/2	$-11,5 A_i + \frac{13}{100} B_i$	$-10 A_j + \frac{11}{56} B_j$	39,3	3132,5	3133,4
c	9/2	7/2	$-7 A_i - \frac{7}{50} B_i$	$-6,5 A_j - \frac{29}{280} B_j$	50,6	3073,7	3072,5
d	11/2	9/2	$-1,5 A_i - \frac{43}{150} B_i$	$-2 A_j - \frac{83}{280} B_j$	64,3	2984,6	2983,9
e	13/2	11/2	$+5 A_i - 0,2 B_i$	$+3,5 A_j - \frac{19}{80} B_j$	80,8	2873,2	2874,7
f	15/2	13/2	$+12,5 A_i + \frac{1}{4} B_i$	$+10 A_j + \frac{1}{4} B_j$	100,0	2754,4	2753,8
g	5/2	5/2	$-15 A_i + \frac{13}{30} B_i$	$-10 A_j + \frac{11}{56} B_j$	6,5		2880,0
h	7/2	7/2	$-11,5 A_i + \frac{13}{100} B_i$	$-6,5 A_j - \frac{29}{280} B_j$	10,2		2743,4
i	9/2	9/2	$-7 A_i - \frac{7}{50} B_i$	$-2 A_j - \frac{83}{280} B_j$	11,5		2576,4
j	11/2	11/2	$-1,5 A_i - \frac{43}{150} B_i$	$+3,5 A_j - \frac{19}{80} B_j$	10,4		2385,7
k	13/2	13/2	$+5 A_i - 0,2 B_i$	$+10 A_j + \frac{1}{4} B_j$	6,7		2179,5
l	5/2	7/2	$-15 A_i + \frac{13}{30} B_i$	$-6,5 A_j - \frac{29}{280} B_j$	0,4		2490,1
m	7/2	9/2	$-11,5 A_i + \frac{13}{100} B_i$	$-2 A_j - \frac{83}{280} B_j$	0,6		2247,3
n	9/2	11/2	$-7 A_i - \frac{7}{50} B_i$	$+3,5 A_j - \frac{19}{80} B_j$	0,5		1978,3
o	11/2	13/2	$-1,5 A_i - \frac{43}{150} B_i$	$+10 A_j + \frac{1}{4} B_j$	0,2		1690,5

Tabela 4.9: Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47

componente importante no erro do ajuste. Vemos também que não existe superposição entre o espectro do isótopo 47 e o do 49.

4.5.2 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49

O isótopo 49 possui spin nuclear $I = 7/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento magnético orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

O nível inferior a^5F_5 possui $J = 5$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 5 - \frac{7}{2} \right| = \frac{3}{2} \qquad F_u = \left| 5 + \frac{7}{2} \right| = \frac{17}{2}$$

O nível se desdobra em 8 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}, \frac{15}{2}, \frac{17}{2}$$

O nível superior z^5D_4 possui $J = 4$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 4 - \frac{7}{2} \right| = \frac{1}{2} \quad F_u = \left| 4 + \frac{7}{2} \right| = \frac{15}{2}$$

O nível se desdobra em 8 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}, \frac{15}{2}$$

As transições entre esses subníveis hiperfinos são permitidas por regras de dipolo elétrico, onde o momento F pode variar como $\Delta F = 0, \pm 1$. Teremos então 21 transições permitidas para o isótopo 49, rotuladas ($A.....U$) e colocadas abaixo na Tabela 4.10. Em cada linha é discriminada sucessivamente a linha ($A.....U$), os momentos angulares totais F_i e F_j dos níveis inferior e superior, as energias de perturbação ΔW_i e ΔW_j dadas pela fórmula de Casimir (Eq. 3.5), a intensidade teórica da linha (equações 3.9, 3.10, 3.11), e as frequências medidas (*Exper.*) e calculadas (*Calc.*) para os intervalos da estrutura hiperfina.

Atribuindo transições específicas através de uma comparação entre intensidades teóricas e observadas, chegamos ao seguinte sistema de equações superdeterminadas:

$$C_g + [14A_j + 0,25B_j] - [17,5A_i + 0,25B_i] = 1212,4 \quad (4.23)$$

$$C_g + [6,5A_j - \frac{17}{112}B_j] - [9A_i - \frac{4}{35}B_i] = 1375,1 \quad (4.24)$$

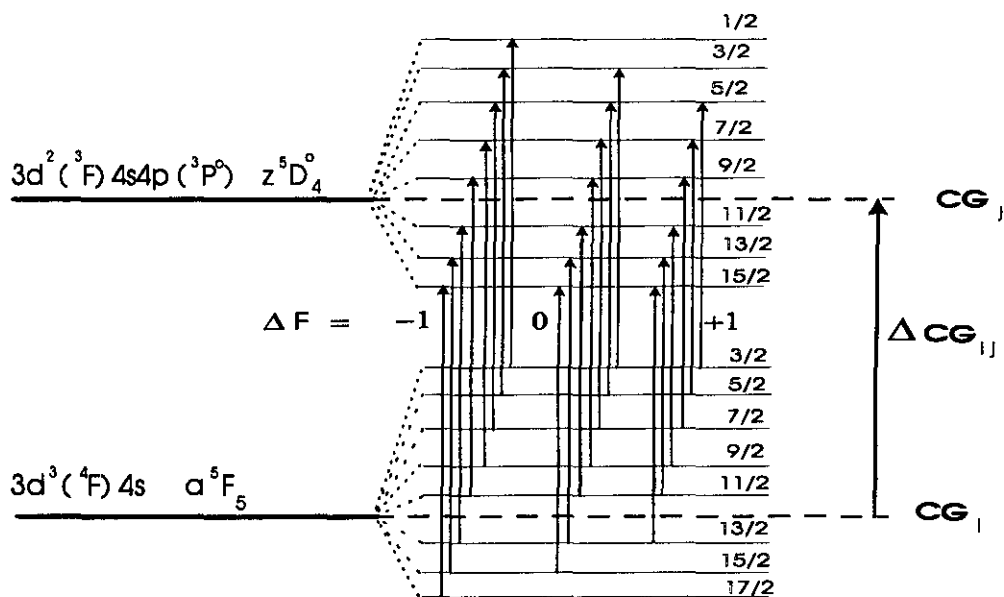
$$C_g + [0A_j - \frac{15}{256}B_j] - [1,5A_i - \frac{103}{420}B_i] = 1516,5 \quad (4.25)$$

$$C_g + [-5,5A_j - \frac{155}{784}B_j] - [-5A_i - \frac{3}{14}B_i] = 1631,3 \quad (4.26)$$

$$C_g + [-10A_j - \frac{5}{196}B_j] - [-10,5A_i - \frac{1}{12}B_i] = 1713,9 \quad (4.27)$$

$$C_g + [-13,5A_j + \frac{141}{784}B_j] - [-15A_i + \frac{2}{21}B_i] = 1773,8 \quad (4.28)$$

As constantes hiperfinas A_i e B_i do nível inferior a^5F_5 e A_j e B_j do nível superior z^5D_4 são estimadas através da hipótese adiantada por Aydin [15] e seus valores numéricos



Figura~4-14: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 5 \rightarrow 4$, linha 8434,96 Angstroms.

são dados por

$$A_i[49] = A_i[47] = -74,85 \text{ MHz} \quad (4.29)$$

$$B_i[49] = \frac{1}{1,22} B_i[47] = -23,5 \text{ MHz} \quad (4.30)$$

$$A_j[49] = A_j[47] = -109,05 \text{ MHz} \quad (4.31)$$

$$B_j[49] = \frac{1}{1,22} B_j[47] = +22,75 \text{ MHz} \quad (4.32)$$

A solução do sistema de equações superdeterminado acima fornece os valores para o centro de gravidade C_g do isótopo 49

$$C_g = 1416,4 \text{ (5) MHz} \quad (4.33)$$

Comparando os valores preditos para as transições da estrutura hiperfina, vistos na coluna *Calc.* da Tabela 4.10, verificamos a ocorrência de um trio (A-B-C) e vários pares

	F_i	F_j	ΔW_i	ΔW_j	$Int(\%)$	$Exp.$	$Calc.$
A	3/2	1/2	$-21 A_i + \frac{13}{30} B_i$	$-17,5 A_j + \frac{55}{112} B_j$	13,6		1774,2
B	5/2	3/2	$-18,5 A_i + \frac{39}{140} B_i$	$-16 A_j + \frac{143}{392} B_j$	19,6		1791,3
C	7/2	5/2	$-15 A_i + \frac{2}{21} B_i$	$-13,5 A_j + \frac{141}{784} B_j$	27,5	1773,8	1772,1
D	9/2	7/2	$-10,5 A_i - \frac{1}{12} B_i$	$-10 A_j - \frac{5}{196} B_j$	37,4	1713,9	1718,4
E	11/2	9/2	$-5 A_i - \frac{3}{14} B_i$	$-5,5 A_j - \frac{155}{784} B_j$	49,5	1631,3	1632,4
F	13/2	11/2	$+1,5 A_i - \frac{103}{420} B_i$	$0 A_j - \frac{15}{56} B_j$	63,3	1516,5	1516,8
G	15/2	13/2	$+9 A_i - \frac{4}{35} B_i$	$+6,5 A_j - \frac{17}{112} B_j$	80,6	1375,1	1375,1
H	17/2	15/2	$+17,5 A_i + \frac{1}{4} B_i$	$+14 A_j + \frac{1}{4} B_j$	100,0	1212,4	1211,2
I	3/2	3/2	$-21 A_i + \frac{13}{30} B_i$	$-16 A_j + \frac{143}{392} B_j$	7,6		1607,8
J	5/2	5/2	$-18,5 A_i + \frac{39}{140} B_i$	$-13,5 A_j + \frac{141}{784} B_j$	12,2		1514,4
K	7/2	7/2	$-15 A_i + \frac{2}{21} B_i$	$-10 A_j - \frac{5}{196} B_j$	15,3		1385,8
L	9/2	9/2	$-10,5 A_i - \frac{1}{12} B_i$	$-5,5 A_j - \frac{155}{784} B_j$	16,8		1223,8
M	11/2	11/2	$-5 A_i - \frac{3}{14} B_i$	$0 A_j - \frac{15}{56} B_j$	16,3		1031,0
N	13/2	13/2	$+1,5 A_i - \frac{103}{420} B_i$	$+6,5 A_j - \frac{17}{112} B_j$	13,6		810,7
O	15/2	15/2	$+9 A_i - \frac{4}{35} B_i$	$+14 A_j + \frac{1}{4} B_j$	8,3		566,4
P	3/2	5/2	$-21 A_i + \frac{13}{30} B_i$	$-13,5 A_j + \frac{141}{784} B_j$	1,0		1330,9
Q	5/2	7/2	$-18,5 A_i + \frac{39}{140} B_i$	$-10 A_j - \frac{5}{196} B_j$	1,6		1128,1
R	7/2	9/2	$-15 A_i + \frac{2}{21} B_i$	$-5,5 A_j - \frac{155}{784} B_j$	1,6		891,1
S	9/2	11/2	$-10,5 A_i - \frac{1}{12} B_i$	$0 A_j - \frac{15}{56} B_j$	1,4		622,4
T	11/2	13/2	$-5 A_i - \frac{3}{14} B_i$	$+6,5 A_j - \frac{17}{112} B_j$	0,9		325,0
U	13/2	15/2	$+1,5 A_i - \frac{103}{420} B_i$	$+14 A_j + \frac{1}{4} B_j$	0,3		2,0

Tabela 4.10: Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49

(E-I , F-J, G-K, H-L) de transições 'blended', cuja distância entre os picos é menor que a largura homogênea de 40 MHz. Várias transições 'cross-over' previstas também ocorrem dentro da largura homogênea de transições observadas.

4.5.3 Separação de Desvios de Massa Específicos DME e de Campo DC

A separação dos desvios específicos e de campo é feito seguindo o procedimento delineado na Seção 3.4.2, também obtendo as constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico do desvio de campo F_i para a linha 8434,96 Å. Remetemos o leitor para a Seção 4.4.3 onde este cálculo foi feito detalhadamente. Os valores obtidos estão tabelados abaixo, onde na Tabela 4.11 são resumidos os dados relativos às constantes k_E e F_i e seus respectivos

erros, e na Tabela 4.12 os dados relativos à separação das diversas contribuições ao desvio isotópico com seus respectivos desvios padrão.

Constante	k_E	σ_{k_E}	F_i	σ_{F_i}
Valor	1.874 GHz	11 GHz	+112 $\frac{MHz}{fm^2}$	65 $\frac{MHz}{fm^2}$

Tabela 4.11: Constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico F_i para a linha 8434,96 Angstroms.

Par Isotópico	DI	DMN	DR	DME	DC
47 - 46	-783 (6)	90,3 (0,1)	-874 (6)	-868 (6)	-6 (8)
48 - 47	-750 (6)	86,3 (0,1)	-836 (6)	-829 (6)	-7 (8)
49 - 48	-728 (6)	83,1 (0,1)	-811 (6)	-799 (6)	-13 (8)
50 - 49	-691 (6)	79,5 (0,1)	-770 (6)	-764 (6)	-6 (8)
48 - 46	-1533 (3)	176,6 (0,1)	-1710 (3)	-1697 (10)	-13 (8)
50 - 48	-1419 (3)	162,6 (0,1)	-1581 (3)	-1563 (9)	-19 (11)

Tabela 4.12: Separação de desvios - linha 8434,96 Angstroms.

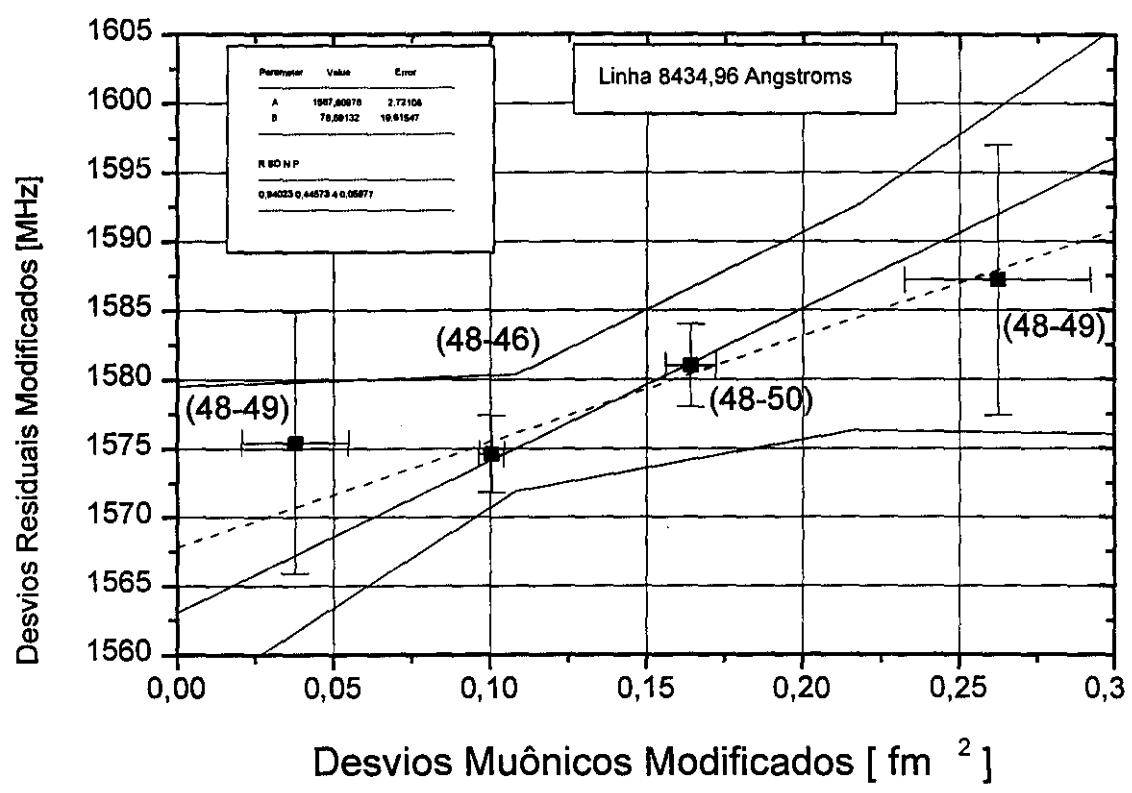
Uma melhor visualização dos desvios isotópicos de campo é obtida combinando os dados em um Gráfico de King, como explanado na Seção 3.4.1. Multiplicamos os desvios óticos residuais DR da linha 8434,96 Angstroms (Tabela 4.12) e os desvios muônicos (Tabela 3.1) pelo fator modificativo μ_{M_2, M_1} (equação 3.27), escolhendo arbitrariamente os isótopos 48-50 como par padrão.

A linha pontilhada representa a reta obtida por um ajuste de mínimos quadráticos levando em conta todos os desvios isotópicos modificados colocados no gráfico e suas respectivas barras de erro. As linhas quebradas estabelecem os limites de confiança inferior e superior, que são um parâmetro estatístico importante para julgar a qualidade dos dados e ajustes obtidos. Também foi colocada neste gráfico a reta obtida usando o fator eletrônico F_i e o desvio específico $DME_{S,T}$ para o par 48-50 (linha cheia), usando a equação simplificada abaixo

$$\mu DI = DME_{S,T} + F_i \quad (\mu \delta < r^2 >)$$

onde $\mu \delta < r^2 >$ representa a abscissa e μDI a ordenada.

Aqui podemos ver que os desvios modificados dos isótopos ímpares têm uma distribuição da reta obtida com o uso dos dados muônicos. Esta característica pode indicar que os erros introduzidos no processo de encontrar o centro de gravidade destes isótopos pode não ser sómente sistemático mas envolvendo um grande componente aleatório. Outra possibilidade é a presença do efeito de ‘far configuration mixing’ [24,67,68] já citado anteriormente, que é um efeito forte em titânio devido aos seus níveis metaestáveis agrupados em baixa energia.



Figura~4-15: Gráfico de King usando desvios isotópicos muônicos modificados para a linha 8434,96 Angstroms.

4.6 Titânio - Linha 8426,50 Angstroms

Esta é a transição $\Delta J = -1$ ($J = 3 \rightarrow 2$), sendo a terceira linha mais intensa do multipletto $a^5F_i \rightarrow z^5D_j$ com uma intensidade assinalada como 1500 [12].

O gráfico de absorção saturada é mostrado na Fig. 4-17, obtido em condições similares às dos anteriores (corrente de 300 mA, tempo de aquisição 5 segundos). É notável a excelente razão sinal/ruído, sendo que existe pouca superposição entre os picos da estrutura hiperfina dos dois isótopos ímpares. Foi possível ajustar uma série de 25 lorentzianas por mínimos quadrados, e os parâmetros resultantes são resumidos na Tabela 4.13 (onde X_c é a frequência central da transição, W é a largura a meia altura e A a amplitude).

	X_c	W	A	Isótopo		X_c	W	A	Isótopo
1	2001,6	41	63,0	48	13	3031,7	40	0,42	47
2		345	16,1	pedestal	14	2848,0	37	0,32	47
3	3534,2	36	6,3	46	15	1080,2	44	1,40	49
4	584,7	37	4,4	50	16	1343,0	38	0,71	49
5	2612,9	41	1,97	47	17	1468,2	38	0,65	49
6	2960,0	48	1,46	47	18	1542,5	38	0,59	49
7	2815,7	38	1,10	47	19	1004,8	38	0,32	49
8	2413,2	38	0,21	47	20	1161,9	38	0,39	49
9	2534,8	37	0,47	47	21	1264,8	38	0,34	49
10	2671,1	38	0,54	47	22	1402,0	38	0,39	49
11	2740,8	42	0,59	47	23	1693,3	38	0,26	49
12	2888,9	38	0,52	47	24	1606,4	38	0,18	49
					25	856,6	38	0,19	49

Tabela 4.13: Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8426,50 Angstroms. Valores para X_c e W dados em MHz.

O eixo de frequências foi calibrado através de um ajuste de mínimos quadrados por um polinômio de 5º grau aplicado aos picos de transmissão do Fabry-Perot com FSR de 75 MHz :

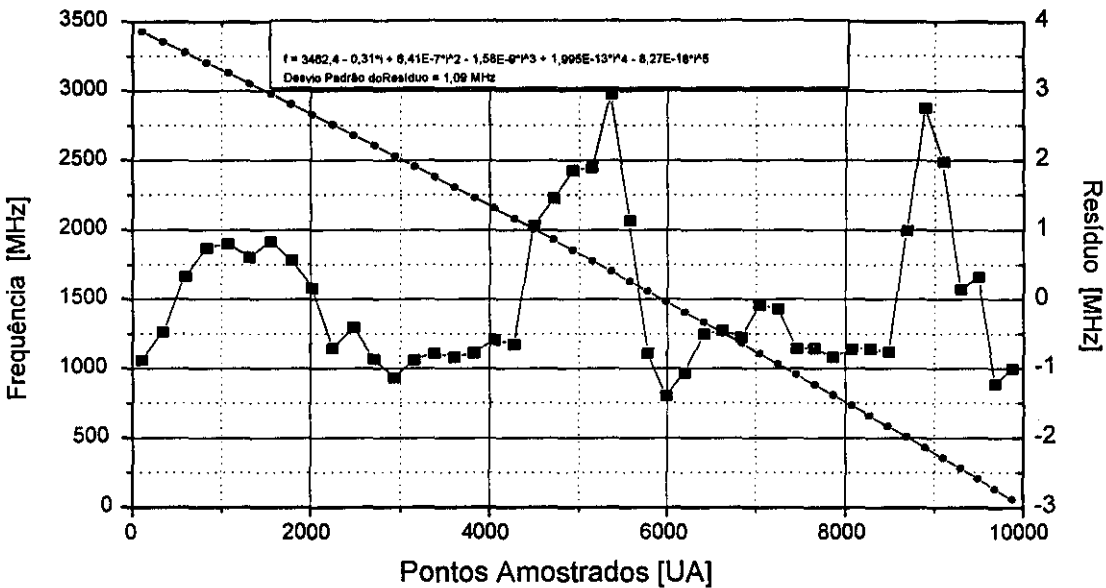
$$f = A + B_1 * X + B_2 * X^2 + B_3 * X^3 + B_4 * X^4 + B_5 * X^5 [MHz]$$

Os parâmetros do ajuste podem ser vistos na Tabela 4.14. O gráfico polinomial juntamente com o resíduo do processo de ajuste são mostrados na Fig. 4-16. O Desvio

Padrão $DP = 1,1\text{ MHz}$ indica uma estabilidade melhor do conjunto laser/interferometro em relação às medidas anteriores. Podemos observar duas regiões da varredura onde os desvios alcançaram valor de $+3\text{ MHz}$, indicando talvez instabilidades mecânicas durante a varredura ou perturbações localizadas no tempo como vibração mecânica da mesa.

Parameter	Value	Error	t-Value	Prob> t
A	+3462,4	1,1	3289,5	<0.0001
B1	-0,31	0,002	-146,2	<0.0001
B2	6,4E-7	1,3E-6	0,49	0,627
B3	-1,58E-9	3,3E-10	-4,8	<0.0001
B4	1,995E-13	3,6E-14	5,5	<0.0001
B5	-8,3E-18	1,4E-18	-5,7	<0.0001

Tabela 4.14: Parâmetros do ajuste polinomial do eixo de frequências.



Figura~4-16: Curva de ajuste dos picos de transmissão FP 75 MHz

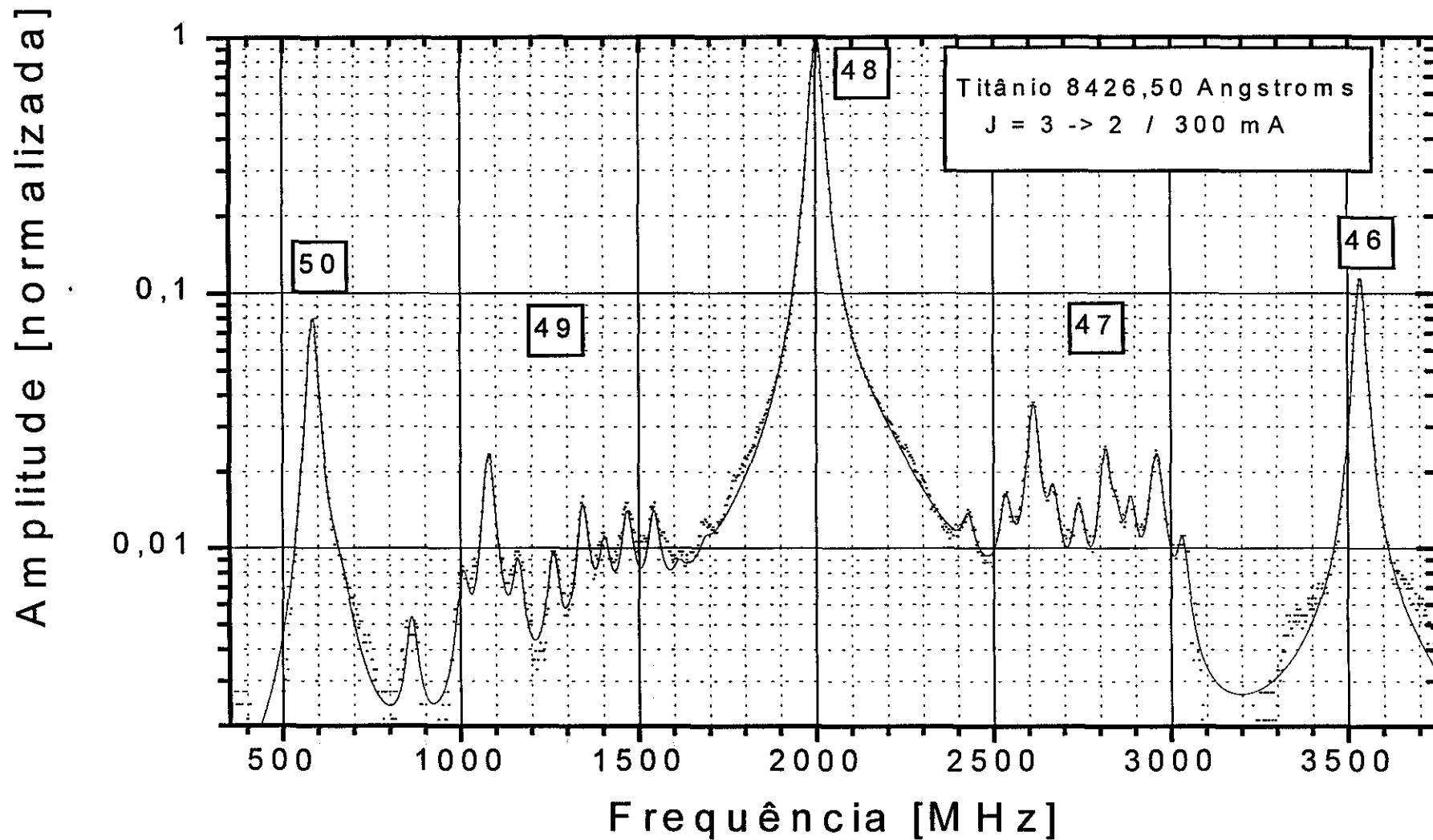


Figura 4-17 : Gráfico de ajuste de curvas lorentzianas ao espectro de absorção saturada do ^{47}Ti - linha 8426,50 Angstroms.

4.6.1 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47

O isótopo 47 possui spin nuclear $I = 5/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento angular orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

O nível inferior $a \ ^5F_3$ possui $J = 3$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 3 - \frac{5}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 3 + \frac{5}{2} \right| = \frac{11}{2}$$

O nível se desdobra em 6 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}$$

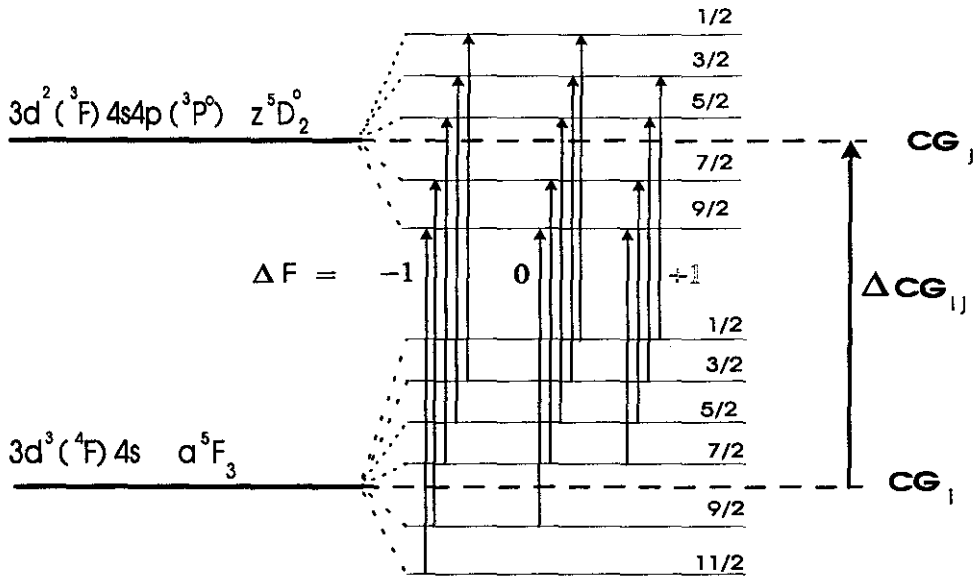
O nível superior $z \ ^5D_2$ possui $J = 2$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 2 - \frac{5}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 2 + \frac{5}{2} \right| = \frac{9}{2}$$

O nível se desdobra em 5 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$$

As transições entre esses subníveis hiperfinos são permitidas por regras de dipolo elétrico, onde o momento F pode variar como $\Delta F = 0, \pm 1$. Teremos então 14 transições permitidas para o isótopo 47, rotuladas ($a.....n$) e colocadas abaixo na Tabela 4.15. Em cada linha é discriminada sucessivamente a linha ($a.....n$), os momentos magnéticos totais F_i e F_j dos níveis inferior e superior, as energias de perturbação ΔW_i e ΔW_j dadas pela fórmula de Casimir (Eq. 3.5), a intensidade teórica da linha (equações 3.9, 3.10, 3.11), e as frequências medidas (*Exper.*) e calculadas (*Calc.*) para os intervalos da estrutura hiperfina.



Figura~4-18: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 3 \rightarrow 2$, linha 8426,50 Angstroms.

Atribuindo transições específicas através de uma comparação entre intensidades teóricas e observadas, chegamos ao seguinte sistema de equações superdeterminadas:

$$C_g + [5A_j + 0,25B_j] - [7,5A_i + 0,25B_i] = 2612,9 \quad (4.34)$$

$$C_g + [0,5A_j - \frac{17}{40}B_j] - [2A_i - 0,3B_i] = 2815,7 \quad (4.35)$$

$$C_g + [3A_j - 0,25B_j] - [-2,5A_i - 0,3B_i] = 2960,0 \quad (4.36)$$

$$C_g + [-3A_j - 0,25B_j] - [-8,5A_i - 0,33B_i] = 2740,8 \quad (4.37)$$

$$C_g + [-0,5A_j - \frac{17}{40}B_j] - [-2,5A_i - 0,3B_i] = 2534,8 \quad (4.38)$$

As constantes hiperfinas A_i e B_i do nível inferior a^5F_3 foram medidas pelo método de LMIRF [15] e seus valores numéricos são

$$A_i = -62,85 \text{ MHz} \quad B_i = -9,3 \text{ MHz}$$

A solução do sistema de equações superdeterminado acima fornece os valores para o

	F_i	F_j	ΔW_i	ΔW_j	I (%)	<i>Exp.</i>	<i>Calc.</i>
a	3/2	1/2	$-8,5 A_i + 0,33B_i$	$-7 A_j + 0,7B_j$	10,4	-	3074,7
b	5/2	3/2	$-6 A_i - 0,02B_i$	$-5,5 A_j + 0,25B_j$	24,0	-	3046,9
c	7/2	5/2	$-2,5 A_i - 0,3B_i$	$-3 A_j - 0,25B_j$	42,9	2960,0	2960,3
d	9/2	7/2	$+2 A_i - 0,3B_i$	$+0,5 A_j - \frac{17}{40}B_j$	67,9	2815,7	2815,6
e	11/2	9/2	$+7,5 A_i + 0,25 B_i$	$+5 A_j + 0,25B_j$	100,0	2612,9	2613,0
f	1/2	1/2	$-10 A_i + 0,6B_i$	$+7,5 A_j + \frac{1}{4}B_j$	13,0	-	2983,0
g	3/2	3/2	$-8,5 A_i + 0,33B_i$	$-5,5 A_j + 0,25B_j$	19,0	2888,9	2893,0
h	5/2	5/2	$-8,5 A_i + 0,33B_i$	$-3 A_j - 0,25B_j$	23,1	2740,8	2743,0
i	7/2	7/2	$-2,5 A_i - 0,3B_i$	$+0,5 A_j - \frac{17}{40}B_j$	22,6	2534,8	2532,7
j	9/2	9/2	$+2 A_i - 0,3B_i$	$+5 A_j + 0,25B_j$	15,4	-	2262,2
k	1/2	3/2	$-10 A_i + 0,6B_i$	$-5,5 A_j + 0,25B_j$	3,7	-	2801,2
l	3/2	5/2	$-8,5 A_i + 0,33B_i$	$-3 A_j - 0,25B_j$	4,0	-	2589,1
m	5/2	7/2	$-8,5 A_i + 0,33B_i$	$+0,5 A_j - \frac{17}{40}B_j$	2,9	-	2315,4
n	7/2	9/2	$-2,5 A_i - 0,3B_i$	$+5 A_j + 0,25B_j$	1,2	-	1979,4

Tabela 4.15: Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47 .

centro de gravidade C_g do isótopo 47 e as constantes hiperfinas A_j e B_j do nível superior z^5D_2 como sendo

$$A_j = -122,37 \text{ MHz} \quad B_j = -4,0 \text{ MHz}$$

$$C_g = 2752,1 \quad (6) \quad [\text{MHz}]$$

Observamos que os pares ($a-b$, $c-f$, $d-k$, $e-l$) estão misturados (‘blended’) dentro de suas respectivas larguras homogêneas. As linhas são mais separadas do que nos espectros anteriores, e as principais misturas ocorrem com componentes de muito menor intensidade ($f-k-l$) facilitando o processo de identificação. Ocorrem também muitos componentes de ‘cross-over’, alguns com grande intensidade : $k \times g$, $l \times h$, $m \times i$. Um possível ‘cross-over’ $n \times i$ ocorreria muito próximo da linha j em 2250 MHz. Este ‘assignment’ das linhas pode ser visto na Figura 4-20 no final desta seção.

4.6.2 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49

O isótopo 49 possui spin nuclear $I = 7/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento angular orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

O nível inferior a^5F_3 possui $J = 3$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 3 - \frac{7}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 3 + \frac{7}{2} \right| = \frac{13}{2}$$

O nível se desdobra em 7 sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}$$

O nível superior z^5D_2 possui $J = 2$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 2 - \frac{7}{2} \right| = \frac{3}{2} \qquad F_u = \left| 2 + \frac{7}{2} \right| = \frac{11}{2}$$

O nível se desdobra em 5 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}$$

As transições entre esses subníveis hiperfinos são permitidas por regras de dipolo elétrico, onde o momento F pode variar como $\Delta F = 0, \pm 1$. Teremos então 15 transições permitidas para o isótopo 49, rotuladas ($A....O$) e colocadas abaixo na Tabela 4.16. Em cada linha é discriminada sucessivamente a linha ($A....O$), os momentos magnéticos totais F_i e F_j dos níveis inferior e superior, as energias de perturbação ΔW_i e ΔW_j dadas pela fórmula de Casimir (Eq. 3.5), a intensidade teórica da linha (equações 3.9, 3.10, 3.11), e as frequências medidas (*Exper.*) e calculadas (*Calc.*) para os intervalos da estrutura hiperfina.

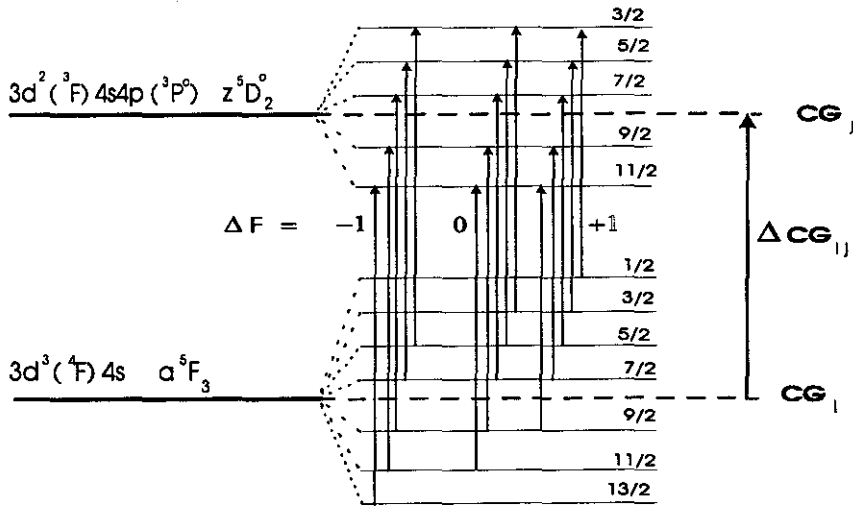


Figura 4-19: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 3 \rightarrow 2$, linha 8426,50 Angstroms.

Atribuindo transições específicas através de uma comparação entre intensidades teóricas e observadas, chegamos ao seguinte sistema de equações superdeterminadas :

$$C_g + [7A_j + 0,25B_j] - [10,5A_i + 0,25B_i] = 1080 \quad (4.39)$$

$$C_g + [1,5A_j - \frac{19}{56}B_j] - [4A_i - \frac{3}{14}B_i] = 1343 \quad (4.40)$$

$$C_g + [-3A_j - \frac{2}{7}B_j] - [-1,5A_i - \frac{41}{140}B_i] = 1543 \quad (4.41)$$

$$C_g + [-6,5A_j - \frac{5}{56}B_j] - [-6A_i - \frac{1}{7}B_i] = 1693 \quad (4.42)$$

$$C_g + [-3A_j - \frac{2}{7}B_j] - [-6A_i - \frac{1}{7}B_i] = 1265 \quad (4.43)$$

As constantes hiperfinas A_i e B_i do nível inferior α^5F_3 e A_j e B_j do nível superior z^5D_2 são estimadas através da hipótese adiantada por Aydin [15] e seus valores numéricos são dados por :

$$A_i[49] = A_i[47] = -62,85 \text{ MHz} \quad (4.44)$$

$$B_i[49] = \frac{1}{1,22}B_i[47] = -7,6 \text{ MHz} \quad (4.45)$$

	F_i	F_j	ΔW_i	ΔW_j	I (%)	<i>Exp.</i>	<i>Calc.</i>
A	5/2	3/2	$-9,5 A_i + \frac{3}{28} B_i$	$-9 A_j + \frac{15}{28} B_j$	8,6	—	1780
B	7/2	5/2	$-6 A_i - \frac{1}{7} B_i$	$-6,5 A_j + \frac{5}{56} B_j$	22,5	1693	1693
C	9/2	7/2	$-1,5 A_i - \frac{41}{140} B_i$	$-3 A_j - \frac{2}{7} B_j$	41,9	1543	1547
D	11/2	9/2	$+4 A_i - \frac{3}{14} B_i$	$+1,5 A_j - \frac{19}{56} B_j$	67,5	1343	1343
E	13/2	11/2	$+10,5 A_i + \frac{1}{4} B_i$	$+7 A_j + \frac{1}{4} B_j$	100,0	1080	1080
F	3/2	3/2	$-12 A_i + \frac{5}{14} B_i$	$-9 A_j + \frac{15}{28} B_j$	17,1	1606	1623
G	5/2	5/2	$-9,5 A_i + \frac{3}{28} B_i$	$-6,5 A_j + \frac{5}{56} B_j$	26,1	1468	1474
H	7/2	7/2	$-6 A_i - \frac{1}{7} B_i$	$-3 A_j - \frac{2}{7} B_j$	30,2	1265	1265
I	9/2	9/2	$-1,5 A_i - \frac{41}{140} B_i$	$+1,5 A_j - \frac{19}{56} B_j$	27,7	1005	997
J	11/2	11/2	$+4 A_i - \frac{3}{14} B_i$	$+7 A_j + \frac{1}{4} B_j$	18,2	—	668
K	1/2	3/2	$-13,5 A_i + \frac{15}{28} B_i$	$-9 A_j + \frac{15}{28} B_j$	14,3	—	1530
L	3/2	5/2	$-12 A_i + \frac{5}{14} B_i$	$-6,5 A_j + \frac{5}{56} B_j$	11,4	—	1320
M	5/2	7/2	$-9,5 A_i + \frac{3}{28} B_i$	$-3 A_j - \frac{2}{7} B_j$	8,2	—	1047
N	7/2	9/2	$-6 A_i - \frac{1}{7} B_i$	$+1,5 A_j - \frac{19}{56} B_j$	4,8	—	715
O	9/2	11/2	$-1,5 A_i - \frac{41}{140} B_i$	$+7 A_j + \frac{1}{4} B_j$	1,8	—	321

Tabela 4.16: Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49 .

$$A_j[49] = A_j[47] = -122,37 \text{ MHz} \quad (4.46)$$

$$B_j[49] = \frac{1}{1,22} B_j[47] = -3,3 \text{ MHz} \quad (4.47)$$

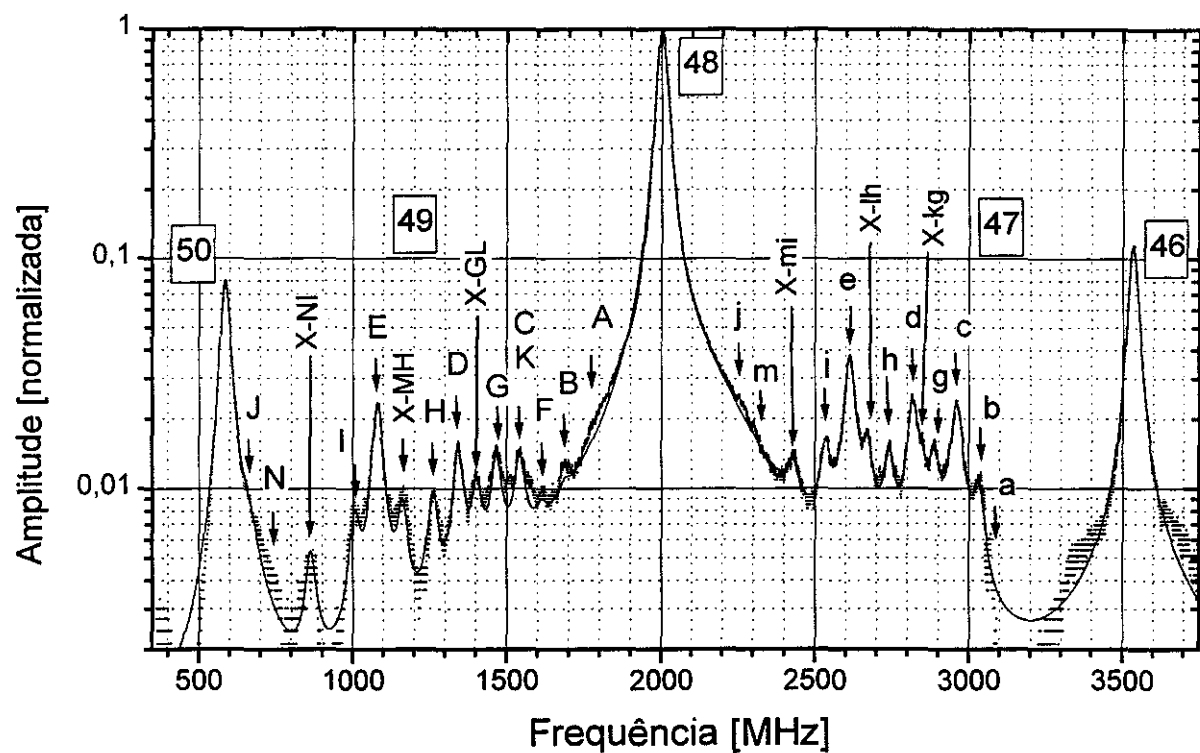
A solução do sistema de equações superdeterminado acima fornece os valores para o centro de gravidade C_g do isótopo 49

$$C_g = 1276 \quad (6) \quad [\text{MHz}] \quad (4.48)$$

Vemos pelas frequências calculadas (coluna *Calc.* das Tabelas 4.16 e 4.15) através dos parâmetros ajustados acima que não existe superposição entre as faixas espectrais dos isótopos 47 e 49, e repete-se o padrão de separação nítida entre as linhas. Também aqui ocorrem misturas entre componentes fortes e fracos (*D-L* , *E-M*) e um par de componentes médios (*C-K*). Dois componentes fracos (*J-N*) estão também misturados e situados ao pé do pedestal do isótopo 50. Pudemos também identificar um bom número de componentes ‘cross-over’ relativamente intensos entre as linhas ($G \times L$, $M \times H$, $N \times I$).

Na Figura 4-20 abaixo, podemos ver o resultado final do ‘assignment’ das diversas

linhas da estrutura hiperfina para os isótopos ^{47}Ti (minúsculas) e ^{49}Ti (maiúsculas). Praticamente todas as linhas intensas foram identificadas, e o lugar correspondente às linhas mais fracas mostra distorções no espectro.



Figura~4-20: Espectro da linha 8426,50 Angstroms, com os ‘assignments’ das diversas linhas da estrutura hiperfina (X = crossover).

4.6.3 Separação de Desvios de Massa Específicos *DME* e de Campo *DC*

A separação dos desvios específicos e de campo é feita seguindo o procedimento delineado na Seção 3.4.2, também obtendo as constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico do desvio de campo F_i para a linha 8426,50 Å. Remetemos o leitor para a Seção 4.4.3 onde este cálculo foi feito detalhadamente. Os valores obtidos estão tabelados abaixo, onde na Tabela 4.17 são resumidos os dados relativos às constantes k_E e F_i e seus respectivos

erros, e na Tabela 4.18 os dados relativos à separação das diversas contribuições ao desvio isotópico com seus respectivos desvios padrão.

Constante	k_E	σ_{k_E}	F_i	σ_{F_i}
Valor	1.876 GHz	11 GHz	+90 $\frac{MHz}{fm^2}$	65 $\frac{MHz}{fm^2}$

Tabela 4.17: Desvio específico k_E e fator eletrônico F_i : 8426,50 Angstroms.

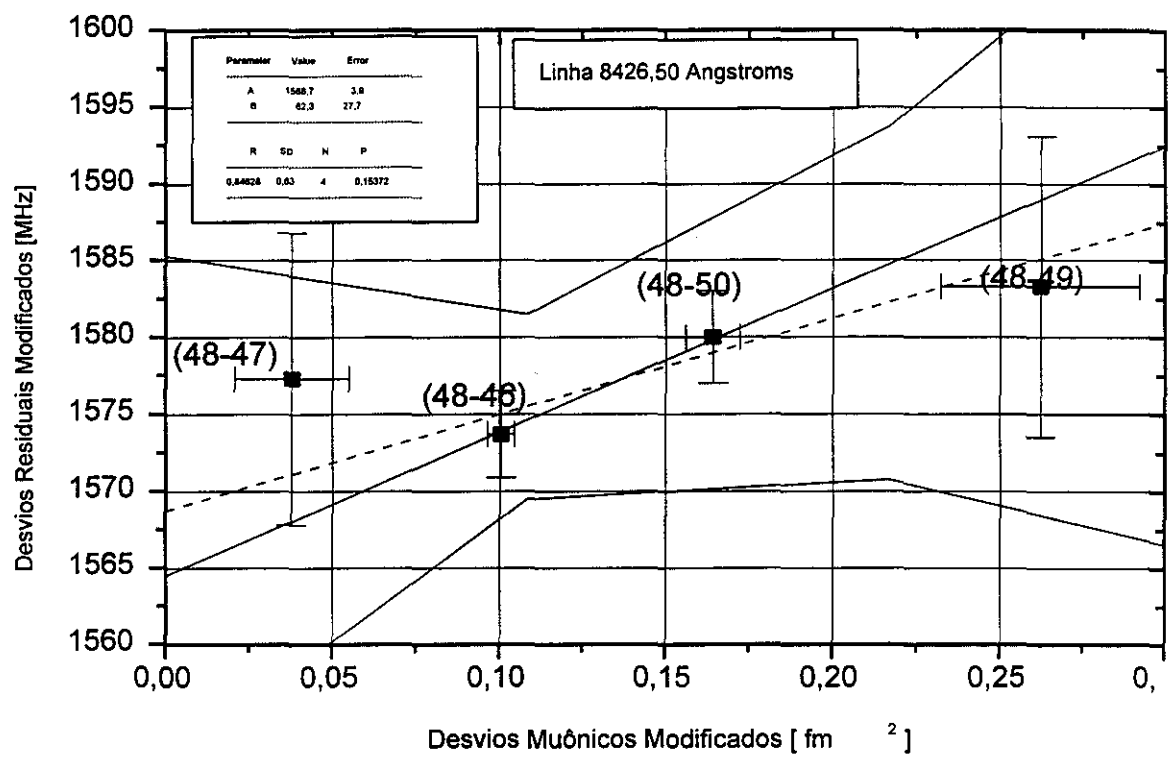
Par Isotópico	DI	DMN	DR	DME	DC
47 - 46	-782 (6)	90,4 (0,1)	-873 (6)	-869 (6)	-4 (8)
48 - 47	-751 (6)	86,4 (0,1)	-837 (6)	-830 (6)	-7 (8)
49 - 48	-726 (6)	83,2 (0,1)	-809 (6)	-799 (6)	-10 (8)
50 - 49	-691 (6)	79,6 (0,1)	-771 (6)	-765 (6)	-6 (8)
48 - 46	-1533 (3)	176,7 (0,1)	-1709 (3)	-1699 (10)	-15 (11)
50 - 48	-1417 (3)	162,7 (0,1)	-1580 (3)	-1565 (9)	-10 (8)

Tabela 4.18: Separação de desvios isotópicos - linha 8426,50 Angstroms.

Uma melhor visualização dos desvios isotópicos de campo é obtida combinando os dados em um Gráfico de King, como explanado na Seção 3.4.1. Multiplicamos os desvios óticos residuais DR da linha 8426,50 Angstroms (Tabela 4.18) e os desvios muônicos (Tabela 3.1) pelo fator modificativo μ_{M_2, M_1} (equação 3.27), escolhendo arbitrariamente os isótopos 48-50 como par padrão.

A linha pontilhada representa a reta obtida por um ajuste de mínimos quadráticos levando em conta todos os desvios isotópicos modificados colocados no gráfico e suas respectivas barras de erro. As linhas quebradas estabelecem os limites de confiança inferior e superior, que são um parâmetro estatístico importante para julgar a qualidade dos dados e ajustes obtidos. Também foi colocada neste gráfico a reta obtida usando o fator eletrônico F_i e o desvio específico $DME_{S,T}$ para o par 48-50 (linha cheia), usando a equação simplificada abaixo $\mu DI = DME_{S,T} + F_i$ ($\mu \delta < r^2 >$), onde $\mu \delta < r^2 >$ representa a abscissa e μDI a ordenada.

Os desvios modificados dos isótopos ímpares estão situados simetricamente acima e abaixo da reta obtida com o uso dos dados muônicos. Esta característica pode indicar um erro sistemático no processo de encontrar o centro de gravidade destes isótopos ou ainda que as barras de erro assinaladas não são realistas devendo ser aumentadas especialmente no caso do par 48-47 . Outra possibilidade é a presença do efeito de ‘far configuration mixing’ [24,67,68], que é um efeito forte em titânio devido aos seus níveis metaestáveis agrupados em baixa energia.



Figura~4-21: Gráfico de King usando desvios isotópicos óticos e muônicos- linha 8426,50 Angstroms.

4.7 Titânio - Linha 8412,36 Angstroms

Esta é uma transição $\Delta J = -1$ ($J = 2 \rightarrow 1$), sendo a quarta linha mais intensa do grupo de transições $a \ ^5F_i \rightarrow z \ ^5D_j$ com uma intensidade assinalada como 960 [12]. Devido a problemas de instabilidade na lâmpada de catodo oco usada na ocasião, a razão sinal/ruído do sinal obtido desta linha era muito pequena. As componentes hiperfinas, visualizadas facilmente nas linhas anteriores, não se mostraram reproduzíveis e portanto não permitiram um processo de ajuste de curvas confiável. Na Tabela 4.19 são mostrados os parâmetros obtidos (onde X_c é a frequência central da transição, W é a largura a meia altura e A a amplitude). Os isótopos 47 e 49 foram ajustados por uma lorentziana com largura da curva doppler, mas mesmo assim as incertezas envolvidas revelaram-se muito grandes e não são levadas em consideração nas análises de estrutura hiperfina..

	X_c	W	A	Isótopo
1	1638,2	37	56,1	48
2		240	13,5	pedestal
3	3167,7	42	7,2	46
4	221,3	37	4,2	50
5	2362,5	520	14,6	47
6	938,3	887	15,6	49

Tabela 4.19: Ajuste de curvas lorentzianas à linha 8412,36 Angstroms

O eixo de frequências foi calibrado através de um ajuste de mínimos quadrados por um polinômio de 5º grau aplicado aos picos de transmissão do Fabry-Perot com FSR de 75 MHz : $f = A + B_1 * X + B_2 * X^2 + B_3 * X^3 + B_4 * X^4 + B_5 * X^5$ [MHz]

Os parâmetros do ajuste podem ser vistos na Tabela 4.20. O gráfico polinomial juntamente com o resíduo do processo de ajuste são mostrados na Fig. 4-22. O Desvio Médio Padrão $DP = 0,25$ MHz mostra uma estabilidade muito melhor que as obtidas com as outras linhas ($DP \simeq 1,7$ MHz), indicando que existe muito espaço para melhorar a qualidade das medidas ou equivalentemente a estabilidade do laser. A linearidade de varredura é mostrada pelo baixo valor dos coeficientes B_i de ordem mais alta mostrados na Tabela 4.20.

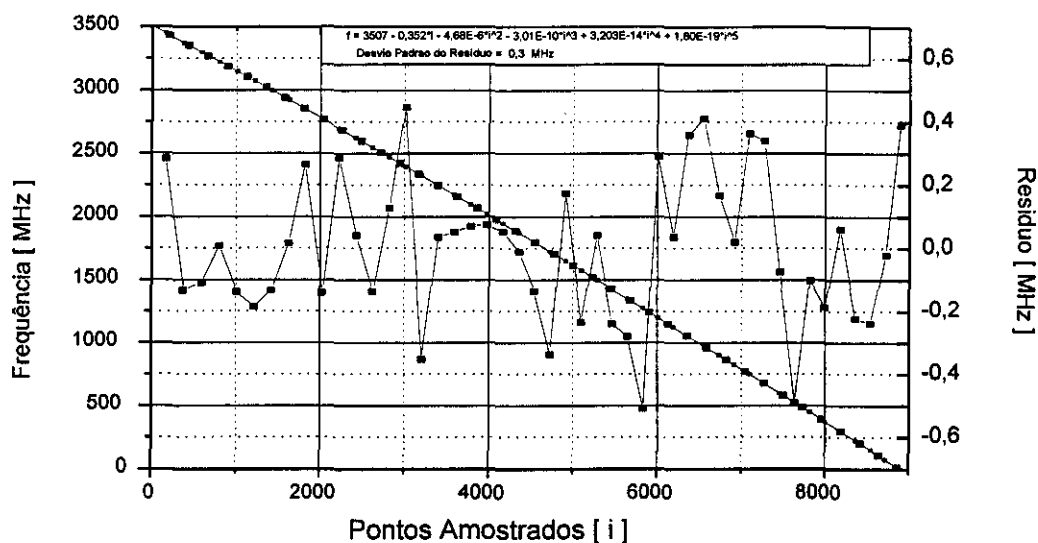


Figura 4-22: Curva de ajuste dos picos de transmissão do FP 75 MHz e respectivo resíduo, para a linha 8412,36 Å

Parameter	Value	Error	t-Value	Prob> t
A	3506,97	0,26	13288,4	<0.0001
B1	-0,3521	0,0006	-622,2	<0.0001
B2	-4,68E-6	3,76E-7	-12,5	<0.0001
B3	-3,01E-10	1,04E-10	-2,9	0,006
B4	3,20E-14	1,25E-14	2,6	0,014
B5	1,80E-19	5,47E-19	0,33	0,744

Tabela 4.20: Parâmetros do ajuste do eixo de frequências por um polinômio de 5 grau.

4.7.1 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 47

O isótopo 47 possui spin nuclear $I = 5/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento angular orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

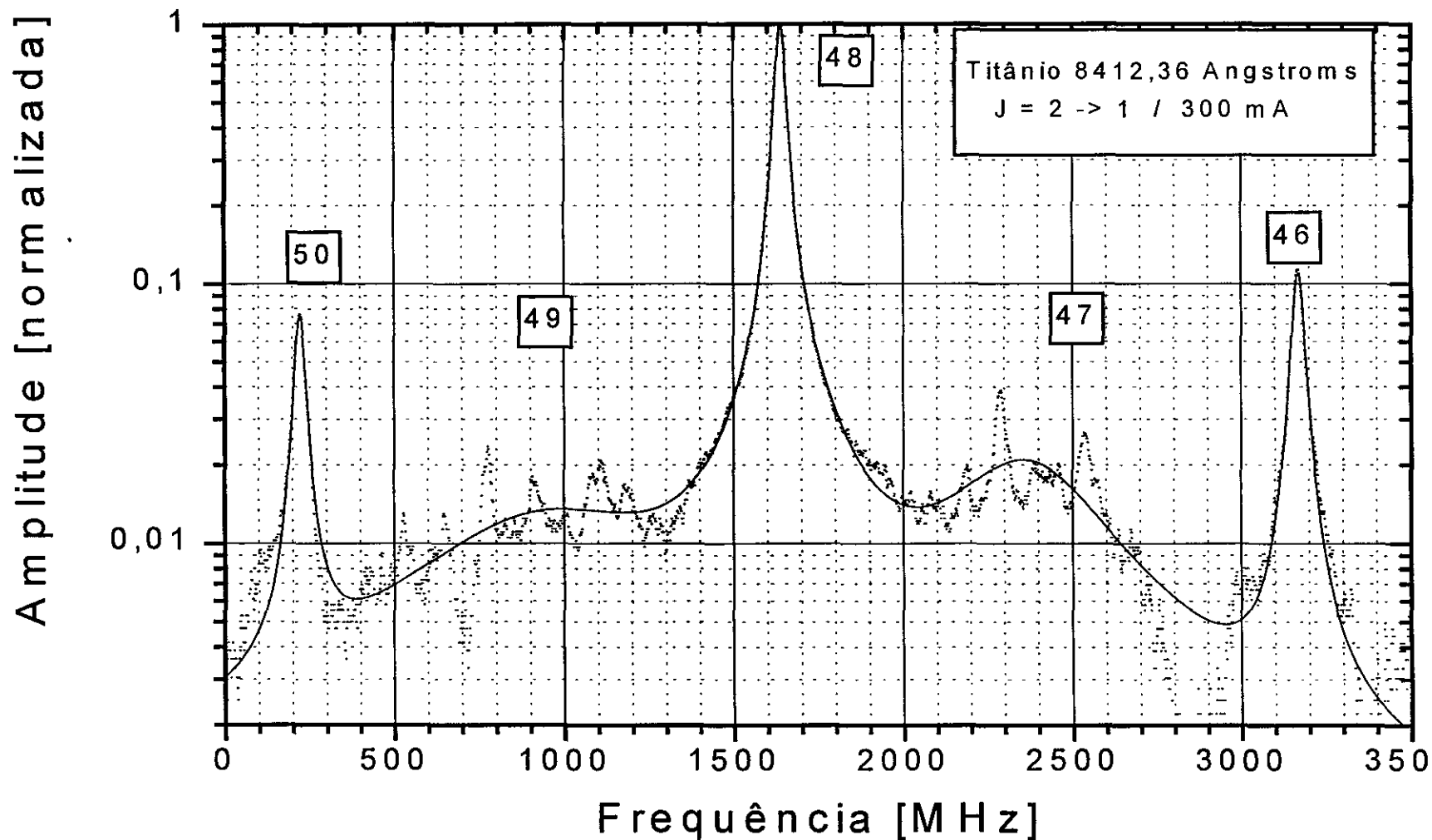


Figura 4-23 : Gráfico de ajuste de curvas lorentzianas ao espectro de absorção saturada do ^{47}Ti - linha 8412,36 Angstroms.

O nível inferior a^5F_2 possui $J = 2$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 2 - \frac{5}{2} \right| = \frac{1}{2} \qquad F_u = \left| 2 + \frac{5}{2} \right| = \frac{9}{2}$$

O nível se desdobra em 5 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$$

O nível superior z^5D_1 possui $J = 1$ e sua composição com $I = 5/2$ fornece :

$$F_l = \left| 1 - \frac{5}{2} \right| = \frac{3}{2} \qquad F_u = \left| 1 + \frac{5}{2} \right| = \frac{7}{2}$$

O nível se desdobra em 3 outros sub-níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$$

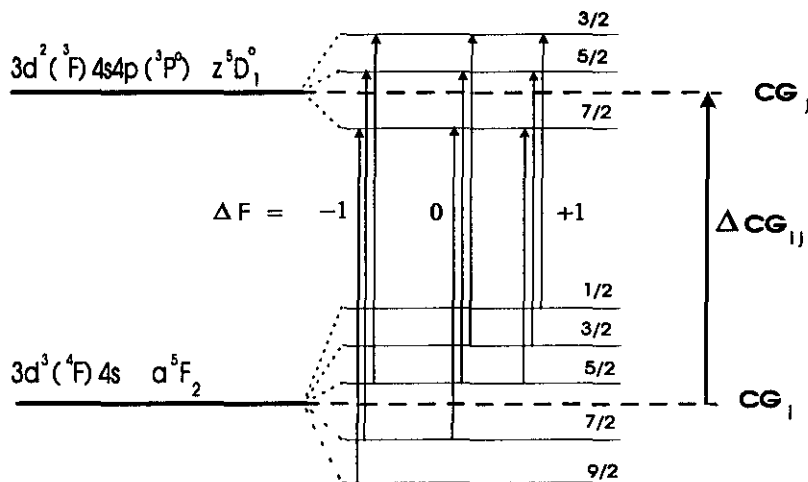


Figura 4-24: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 47 da transição $J = 2 \rightarrow 1$, linha 8412,36 Angstroms.

4.7.2 Análise da Estrutura Hiperfina do Isótopo 49

O isótopo 49 possui spin nuclear $I = 7/2$ e apresenta estrutura hiperfina devido ao acoplamento com o momento angular orbital J do elétron. Pelas regras de composição de momento angular por acoplamento LS or Russel-Saunders, o novo momento angular total é chamado $F = I + J$.

O nível inferior a^5F_2 possui $J = 2$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 2 - \frac{7}{2} \right| = \frac{3}{2} \qquad F_u = \left| 2 + \frac{7}{2} \right| = \frac{11}{2}$$

O nível se desdobra em 5 níveis hiperfinos com momento total

$$F = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}$$

O nível superior z^5D_1 possui $J = 1$ e sua composição com $I = 7/2$ fornece :

$$F_l = \left| 1 - \frac{7}{2} \right| = \frac{5}{2} \qquad F_u = \left| 1 + \frac{7}{2} \right| = \frac{9}{2}$$

O nível se desdobra em 3 outros níveis com momento total

$$F = \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$$

4.7.3 Separação de Desvios de Massa Específicos DME e de Campo DC

A separação dos desvios específicos e de campo é feita seguindo o procedimento delineado na Seção 3.4.2, também obtendo as constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico do desvio de campo F_i para a linha 8412,60 Å. Remetemos o leitor para a Seção 4.4.3 onde este cálculo foi feito detalhadamente. Os valores obtidos estão tabelados abaixo : na Tabela 4.21 são resumidos os dados relativos às constantes k_E e F_i e seus respectivos

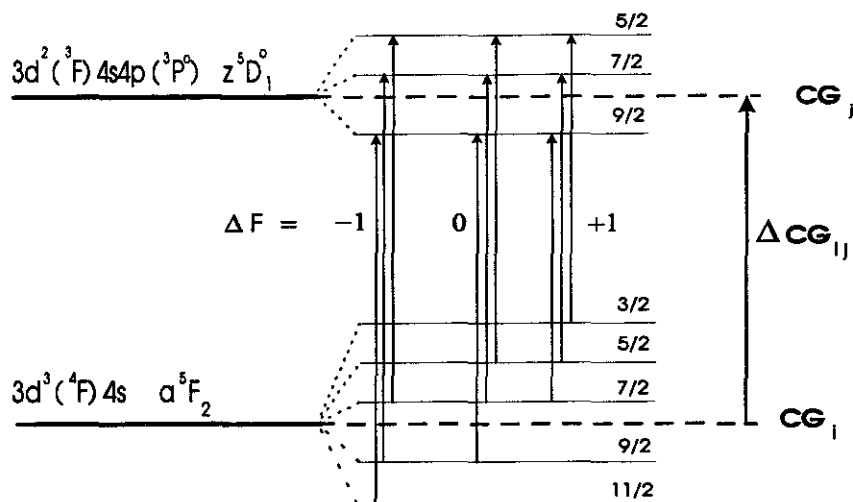


Figura 4-25: Diagrama de níveis hiperfinos para o isótopo 49 da transição $J = 2 \rightarrow 1$, linha 8412,36 Angstroms.

Constante	k_E	σ_{k_E}	F_i	σ_{F_i}
Valor	1.867 GHz	11 GHz	+135 $\frac{MHz}{fm^2}$	85 $\frac{MHz}{fm^2}$

Tabela 4.21: Constantes de desvio específico k_E e o fator eletrônico F_i para a linha 8412,60 Angstroms.

erros, e na Tabela 4.22 os dados relativos à separação das diversas contribuições ao desvio isotópico pares com seus respectivos desvios padrão.

Par Isotópico	DI	DMN	DR	DME	DC
48 - 46	-1530 (3)	177,0 (0,1)	-1707 (3)	-1691 (10)	-23 (11)
50 - 48	-1417 (3)	163,0 (0,1)	-1580 (3)	-1557 (9)	-15 (8)

Tabela 4.22: Separação de desvios - linha 8412,60 Angstroms

Visualizamos os desvios isotópicos de campo combinando os dados em um Gráfico de King, como explanado na Seção 3.4.1. Multiplicamos os desvios óticos residuais DR da linha 8412,36 Angstroms (Tabela 4.22) e os desvios muônicos (Tabela 3.1) pelo fator

modificativo μ_{M_2, M_1} (equação 3.27), escolhendo arbitrariamente os isótopos 48-50 como par padrão.

A linha contínua representa a reta obtida por um ajuste de mínimos quadráticos levando em conta os desvios isotópicos modificados colocados no gráfico e suas respectivas barras de erro. Também foi colocada neste gráfico a reta obtida usando o fator eletrônico F_i e o desvio específico $DME_{S,T}$ para o par 48-50 (linha cheia), onde podemos notar que as duas retas se superpõem. Usamos a equação simplificada abaixo

$$\mu DI = DME_{S,T} + F_i \quad (\mu \delta < r^2 >)$$

onde $\mu \delta < r^2 >$ representa a abscissa e μDI a ordenada. Como nesta linha só foi possível a medida precisa dos desvios isotópicos pares, muitas das inferências feitas nas linhas anteriores tornam-se impossíveis.

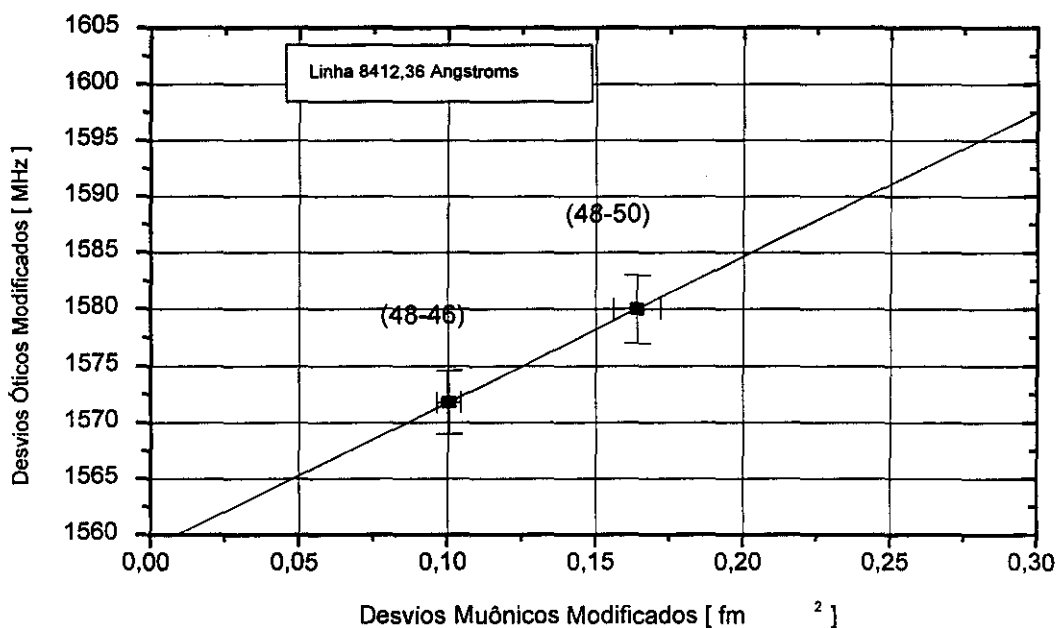


Figura 4-26: Gráfico de King usando desvios isotópicos óticos e muônicos - linha 8412,36 Angstroms.

4.8 Análise da Estrutura Isotópica

Nesta seção faremos uma análise mais geral dos desvios isotópicos obtidos no estudo da estrutura hiperfina e isotópica do titânio. Na Tabela 4.23 estão resumidos os desvios isotópicos de todas as linhas estudadas neste trabalho. Não podemos observar um padrão definido de variação dos resultados em função do comprimento de onda ou do número quântico J (apesar da interessante inversão entre as linhas 8435,65 Å e 8434,96 Å que poderia mostrar alguma dependência com os fatores citados). As barras de erro se superpõem impedindo qualquer inferência mais acurada.

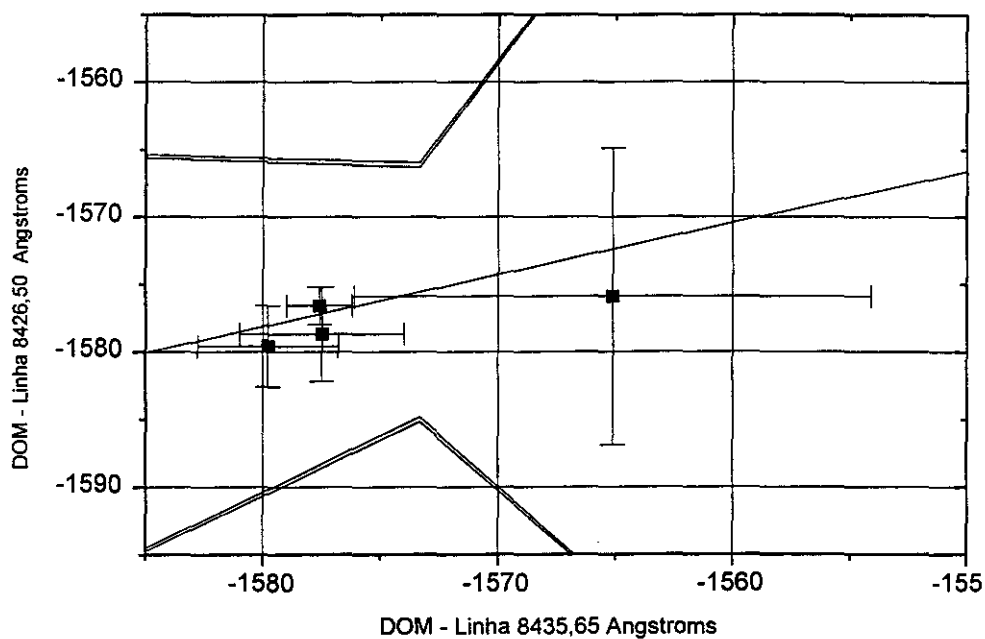
Par Isotópico	8435,65 Å	8434,96 Å	8426,50 Å	8412,60 Å
48 - 46	-1535 (3)	-1533 (3)	-1533 (3)	-1530 (3)
50 - 48	-1417 (3)	-1419 (3)	-1417 (3)	-1417 (3)
48 - 47	-749 (5)	-750 (5)	-750 (5)	—
50 - 49	-686 (5)	-691 (5)	-691 (5)	—

Tabela 4.23: Desvios Isotópicos do Titânio.

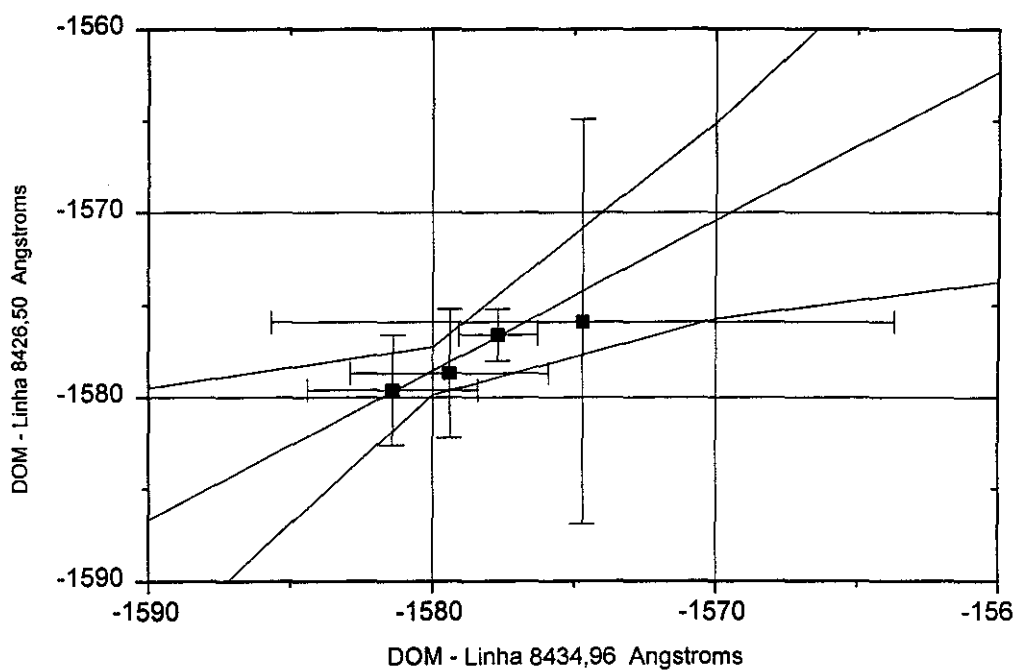
4.8.1 Gráficos de King Óticos

Apresentamos na seção dedicada a cada linha ótica estudada os cálculos relativos ao processo de separação usando desvios isotópicos muônicos e o respectivo gráfico de King. Aqui apresentamos os gráficos de King usando apenas desvios isotópicos óticos a fim de realçar as diferenças entre os dois processos e a alta qualidade dos desvios isotópicos muônicos [23].

Nas Figuras 4-27, 4-28 e 4-29 abaixo mostramos os gráficos de King óticos obtidos para o par padrão 48-50 (o mesmo utilizado nos gráficos de King muônicos das seções anteriores). Colocamos os desvios óticos modificados de uma linha em função da outra linha ótica, devidamente normalizados pela Equação 3.27. As barras de erro são também multiplicadas pelo mesmo fator, daí as diferentes escalas destas barras nos gráficos. As linhas quebradas inferior e superior delimitam a região de confiança estatística.



Figura~4-28: Gráfico de King Ótico das linhas 8435,65 e 8426,50 Angstroms



Figura~4-29: Gráfico de King Ótico das linhas 8434,96 e 8426,50 Angstroms

4.8.2 Limites do Método de Separação Muônica

A obtenção das fórmulas analíticas na *Seção* 3.4.3 para os desvios padrões dos erros envolvidos no cálculo do desvio específico $DME_{48,46}$ e desvio de campo $DC_{48,46}$, onde fica explicitada a contribuição das diversas fontes de erro, permite uma estimativa dos limites impostos por este método. Como podemos ver pelas equações 3.43 e 3.48 as dependências são praticamente idênticas nas variáveis (α_E , β_C , R_{46} , R_{50}). Considerando as componentes de erro experimental como iguais ($\sigma_{R_{50}} = \sigma_{R_{46}} = \sigma_{\text{exp}}$), e usando os dados experimentais para os desvios isotópicos residuais R_{46} e R_{50} obtidos no capítulo 4, obtemos a seguinte equação

$$\sigma_{b_1} = \sigma_{b_2} = \sqrt{(3,5 \times \sigma_{\text{exp}})^2 + (15 \times 0,09)^2} \quad (4.49)$$

Podemos supor razoavelmente que quando as duas contribuições tiverem mesma magnitude teremos chegado a uma resolução ótima, abaixo da qual um aumento de precisão seria contraproducente considerando a precisão das constantes α_E e β_C . Igualando as duas componentes obtemos

$$\sigma_{\text{exp}} = \frac{15 \times 0,09}{3,5} \simeq 0,5 \text{ MHz} \quad (4.50)$$

Substituindo este valor de σ_{exp} na expressão para $\sigma_{b_1} = \sigma_{b_2}$ obtemos um valor limite para a precisão experimental

$$\sigma_{b_1} = \sigma_{b_2} \simeq 2 \text{ MHz} \quad (4.51)$$

Podemos repetir a análise acima para as constantes do desvio de massa específico k_E e do fator eletrônico do desvio de campo F_i . Para k_E dado pela equação 3.37 vemos que é o produto de um fator de massa conhecido com grande precisão e do desvio de massa específico $DME_{48,46}$, e portanto a precisão relativa de k_E será a mesma deste.

O fator eletrônico do desvio de campo F_i é dado pela equação 3.38 e seu desvio

padrão pela equação 3.58. Usando as mesmas hipóteses sobre as componentes de erro experimental ($\sigma_{R_{50}} = \sigma_{R_{46}} = \sigma_{\text{exp}}$), e os dados experimentais para os desvios isotópicos residuais R_{46} e R_{50} juntamente com os erros para as diferenças de raio médio quadrático $\sigma_{\delta_{50}}$ e $\sigma_{\delta_{46}}$, obtemos a equação abaixo

$$\sigma_{F_i} = \sqrt{(5,2 \times \sigma_{\text{exp}})^2 + [0,126 \times (R_{50} - \alpha_E R_{46})]} \quad (4.52)$$

Para as linhas investigadas neste trabalho o fator entre parenteses assume um valor máximo de 8,2 . Igualando as duas componentes para encontrarmos o ponto ótimo, temos

$$\sigma_{\text{exp}} = (0,126 \times 8,2) / 5,2 \simeq 0,2 \text{ MHz}$$

Substituindo este valor na expressão para σ_{F_i} obtemos uma estimativa da máxima precisão a ser obtida

$$\sigma_{F_i} \simeq 1,5 \text{ MHz}$$

Vemos que a precisão de nossas medidas poderia melhorar uma ordem de grandeza antes de alcançarmos o limite imposto pelo uso de dados de desvios isotópicos muônicos no processo de separação de desvios de campo. A mínima incerteza obtida seria da ordem de 2 MHz para os desvios de campo, mas o cálculo da constante F_i demandaria maior precisão experimental. Alcançar esta precisão implicaria mudanças radicais na concepção do experimento, especialmente no controle da largura de linha e estabilidade do laser e no processo de calibração da varredura de frequência. Poderiam ser usados métodos heteródinos de espectroscopia, talvez conjugados com o uso de um feixe atômico para diminuir os efeitos colisionais [18, 76].

		8435,65 Å	8434,96 Å	8426,50 Å	8412,36 Å
k_E	[GHz]	1882 (11)	1874 (11)	1876 (11)	1867 (11)
F_i	[MHz/fm ²]	67 (65)	112 (65)	90 (65)	135 (85)

Tabela 4.25: Constantes do desvio de massa específico k_E e de fator eletrônico do desvio de campo F_i .

Capítulo 5

Conclusão

A realização desta tese de Doutorado propiciou o desenvolvimento de vários dispositivos para pesquisa em Física Atômica, bem como o domínio de técnicas de espectroscopia de alta resolução utilizando lasers semicondutores em configurações estendidas.

Os principais objetivos alcançados foram os seguintes :

- Laser Semicondutor em Cavity Externa : desenvolvemos um protótipo de LSCE na configuração Littman onde foram estudados problemas de estabilidade mecânica e térmica, intervalos de sintonia contínua e descontínua, regiões de estabilidade em função de temperatura e corrente, estimativas de largura de linha. Em futuro próximo será concluída a montagem de uma cavidade LSCE Littman compacta, onde aplicamos todas as lições adquiridas neste processo de desenvolvimento tecnológico.

- Espectroscopia Sub-Doppler : foram realizados estudos espectroscópicos de alta resolução do argônio e do titânio na região de 845 nm. A grande versatilidade proporcionada pelo uso de diodos laser em cavidades estendidas permitiu o uso de diversas técnicas de espectroscopia de absorção saturada e espectroscopia de polarização. As características das transições escolhidas possibilitaram a aquisição de espectros de absorção saturada do titânio com alta razão sinal/ruído, estimada como sendo da ordem de 500 vezes. Observamos a estrutura hiperfina dos isótopos ímpares 47 e 49 e extraímos desvios isotópicos com alta precisão, abrindo uma nova janela espectral para o estudo deste interessante elemen-

to. Ajustando os dados da estrutura hiperfina à fórmula de Casimir (Eq. 3.5), extraímos as constantes de dipolo magnético e quadrupolo elétrico do nível superior. Usando dados de desvios isotópicos de raios-X muônicos pudemos separar as várias contribuições ao desvio isotópico óptico total, obtendo as constantes do desvio de massa específico e do fator eletrônico do desvio de campo. Também estimamos os limites deste método, sugerindo uma precisão otimizada a ser alcançada em futuros experimentos. Demonstramos que a combinação de LSCE e LCO é uma ferramenta poderosa, barata e flexível para o estudo de elementos refratários como o titânio. Sugerimos que algumas pequenas modificações, como o uso de um catodo oco de diâmetro maior, menor pressão de argônio ou ainda refrigerar a LCO com nitrogênio líquido, devem permitir a obtenção de um meio menos perturbado e conseqüentemente maior resolução espectral. A versatilidade e relativo baixo custo de um LSCE abre a possibilidade do uso de diversos protótipos laser em um mesmo experimento, permitindo que técnicas heteródinas/ batimento de frequências possam ser usadas para resolver a principal limitação dos métodos atuais que é a calibração do eixo de frequências.

- Feixe Atômico : foi implementado um sistema de feixe atômico para estudos espectroscópicos, otimizado para uso com os elementos cálcio e magnésio no estado fundamental ou estados excitados produzidos em uma descarga. Caracterizamos diversos parâmetros do feixe atômico e sistema de descarga como mecanismos e eficiência de produção de átomos nos níveis metaestáveis de interesse. Desenvolvemos também a instrumentação eletrônica necessária para a produção da descarga, instrumentação ótica para aquisição dos espectros de fluorescência do feixe atômico e de emissão da região da descarga, e instrumentação mecânica para operação confiável do forno e da descarga. Foi desenvolvida uma fonte de alta corrente e baixo ripple, para a bobina magnética usada nas experiências de desaceleração do feixe atômico.

- Duplicação de frequência : desenvolvemos vários itens relacionados à instrumentação de diodos laser para o sistema de duplicação de frequência, como suportes de laser com refrigeração termoelétrica e controle de temperatura ativo, sistemas de focalização

com lentes colimadoras esféricas, fontes de alta tensão para elementos piezoelétricos e controlador Proporcional-Integral para travamento da cavidade no pico da transmissão.

Bibliografia

- [1] A. Nurmikko, R. Gunshor, *Physics and Device Science in II-VI Semiconductor Visible Light Emitters*, in Solid State Physics, Academic Press, 49, 205 (1995).
- [2] M. Murtz, J. Wells, L. Hollberg, T. Zibrova, N. Mackie, *Extended cavity grating tuned operation of mid-infrared InAsSb diode lasers*, to be published in Appl. Phys. B, 1997.
- [3] CRC Handbook, 70th Edition, 1990.
- [4] H. White, *Introduction to Atomic Spectra*, McGraw Hill, 1934.
- [5] H. Kuhn, *Atomic Spectra*, Longman, 2nd Ed., 1971.
- [6] Y. Maruyama et al, *Laser isotope separation of titanium by two step photoionization*, Appl. Phys. B, 44, 163 (1987).
- [7] S. Kelzenberg, E. Ehrlich, *Radiological aspects of titanium alloys as structural materials for a fusion reactor*, J. Nuclear Materials, 226 (3), 319 (1995).
- [8] S. Salih, J. Lawler, *Radiative lifetimes of Ti I*, Astronomy and Astrophysics, 239, 407 (1990).
- [9] N. Grevesse et al, *Revision of the absolute scale of the Oxford Ti I oscillator strenghts and the solar titanium abundance*, Astron. Astrophys., 208, 157 (1989).
- [10] M. Mendez, B. Barbuy, *Oscillator strenghts and damping constants from the solar spectrum at $\lambda\lambda$ 830-870 nm*, Astr. Astrophys. Suppl., 80, 229 (1989).

- [11] H. N. Russel, *Astrophys. J.*, 66, 347 (1927).
- [12] P. Forsberg, *The spectrum and term system of neutral titanium - Ti I*, *Phys.Scripta*, 44, 446 (1991).
- [13] K. Channapa, M. Pendlebury, *Hyperfine structure measurements in some low-lying multiplets of ^{47}Ti , ^{49}Ti , ^{59}Co and ^{105}Pd* , *Proc. Phys. Soc.*, 86, 1145 (1965).
- [14] R. Bruch et al, *J. de Physique (Paris)*, 30 (supp. 1), 51 (1969).
- [15] R. Aydin et al, *Sternheimer free determination of ^{47}Ti nuclear quadrupole moment from hyperfine structure measurements*, *Z. Phys. D*, 15, 281 (1990).
- [16] L. Gianfrani et al., *Visible and ultraviolet high resolution spectroscopy of Ti I and Ti II* , *Opt. Comm.*, 83, 5-6, 300 (1991).
- [17] B. Barbieri, N. Beverini, *Optogalvanic Spectroscopy*, *Rev. Mod. Physics*, 62, 3 (1990).
- [18] W. Demtroder, *Laser Spectroscopy*, Springer-Verlag, 2nd ed., 1996.
- [19] E. Azaroual, P. Luc, R. Vetter, *Isotope shift measurements in titanium I*, *Z. Phys D*, 31, 145 (1992).
- [20] P. Luc, R. Vetter, C. Bauche-Arnoult, J. Bauche, *Isotope shift and hyperfine structure measurements in titanium I*, *Z. Phys. D*, 31, 145 (1994).
- [21] P. Luc, R. Vetter, *Optical isotope shifts in titanium I : new measurements*, *Z. Phys. D*, 37, 255 (1996).
- [22] A. Anastassov et al , *Optical Isotope shifts and changes in nuclear charge radii of stable Ti I isotopes*, *Z. Physik D*, 30, 275 (1994).
- [23] H. Wohlfahrt et al, *Nuclear charge distribution in $1f_{7/2}$ - shell nuclei from muonic x-ray measurements*, *Phys. Rev. C*, 23 (1), 533 (1981).

- [24] Y. Gangrsky, K. Marinova, S. Zemlyaonoi, *J dependences of the isotope shifts in Ti $3d^2 4s^2 a^3P$ and $3d^3 4p y^3D^o$ terms*, J. Phys. B, 28, 957 (1995).
- [25] F. Cruz, A. Mirage, A. Scalabrin, D. Pereira, *Wavenumber and isotopic shifts of the $^3P_0 - ^3D_1^o$ transition of titanium*, Opt. Comm., 106, 59 (1994).
- [26] F. Cruz, A. Mirage, A. Scalabrin, D. Pereira, *Optogalvanic sub-doppler spectroscopy in titanium*, J. Phys. B, 27, 5851 (1994).
- [27] A. Mirage et al, *Determination of saturated parameter of eletronic transition in a uranium-neon hollow cathode discharge by optogalvanic spectroscopy*, Nuovo Cimento D, 14, 605 (1992).
- [28] B. Furmann et al, *Isotope shifts in titanium atoms*, Z. Phys. D, 37, 289 (1996).
- [29] K. Harvey, C. Myatt, *External cavity diode laser using a grazing incidence diffraction grating*, Optics Letters, 16, 12 (1991).
- [30] M. Fleming, A. Mooradian, *Spectral characteristics of external cavity controlled semiconductor lasers*, J. Quantum Electronics, 17 (11), 44 (1981).
- [31] B. Dahmani, L. Hollberg, R. Drullinger, *Frequency stabilization of semiconductor lasers by resonant optical feedback*, Opt. Lett., 12, 876 (1987).
- [32] M. Littmann, *Single mode operation of grazing incidence pulsed dye laser*, Opt. Lett, 3, 138 (1978).
- [33] K. Liu, M. Littmann, *Novel geometry for single mode scanning of tunable lasers*, Optics Letters, 6, 3 (1981).
- [34] K. Petermann, *Laser Diode Modulation and Noise*, Kluwer Academic Press, 1988.
- [35] M. Ohtsu, *Highly Coherent Semiconductor Lasers*, Artech House, 1992.

- [36] R. Fox, A. Zibrov, L. Hollberg, *Semiconductor Diode Lasers*, in *Methods in Experimental Physics*, Academic Press, 1995.
- [37] E. Loewen et al, *Grating efficiency theory as it applies to blazed and holographic gratings*, Appl. Opt., 16 (10), 2714 (1977).
- [38] EDO Western Datasheet, *Piezoelectric Properties*, <
<http://www.edocorp.com/indust/ceramics/> >
- [39] J. Hall, S. Lee, *Interferometric real time display of CW dye laser wavelenght with sub-doppler accuracy*, Appl. Phys. Lett., 29 (6), 367 (1976).
- [40] S. Lee, J. Hall, *A travelling Michelson interferometer with phase locked fringe interpolation*, Opt. Lett., 3, 141 (1978).
- [41] C. Wieman, L. Hollberg, *Using diode lasers for atomic physics*, Rev. Sci. Instruments, 62, 1 (1991).
- [42] A. Corney, *Atomic and Laser Spectroscopy*, Oxford U. P., 1988.
- [43] F. Strumia, *A proposal for a new absolute frequency standard using a Mg or Ca atomic beam*, Metrologia, 8, 85 (1972).
- [44] J. Helmcke et al, *Optical frequency standards*, IEEE Trans. Instr. Measur. 38 (2), 254 (1989).
- [45] N. Beverini, E. Maccioni, D. Pereira, F. Strumia, *Laser cooling in calcium and magnesium atomic beams*, in *Frequency Standards and Metrology*, ed. A. de Marchi, Springer Verlag, 282 (1988).
- [46] T. J. Quinn, Metrologia, 30, 5 (1994).
- [47] N. Beverini et al, *Production of low velocity Ca and Mg atomic beams by laser light pressure*, Proceedings of Quantum Electronics and Plasma Physics, ed. G. Righini, 205 (1988).

- [48] J. Gomide, G. Garcia, F. Cruz, D. Pereira, A. Scalabrin, *Construction of an atomic beam system and efficient production of metastable states*, Brazilian Journal of Physics, 27 (2), 266 (1997).
- [49] H. Behrens, G. Guthohrlein, *High resolution optogalvanic spectroscopy as a useful tool in the determination of atomic hyperfine parameters and isotope shifts*, J. de Physique, 44, C7-11, 1983.
- [50] N. Laegreid, G. Wehner, *Sputtering yields of metals for Ar^+ and Ne^+ ions with energies from 50 to 600 eV*, J. Appl. Physics, 32 (3), 365 (1961).
- [51] D. Rosenberg, G. Wehner, *Sputtering yields for low energy He^+ , Kr^+ and Xe^+ ion bombardment*, J. Appl. Physics, 33 (5), 1842 (1962).
- [52] B. Warner, K. Perrson, G. Collins, *Metal-vapour production by sputtering in a hollow cathode discharge : theory and experiment*, J. Appl. Physics, 50 (9), 5694 (1979).
- [53] M. Inguscio, *Laser spectroscopy of atomic discharges*, eds. W Demtroder, M. Inguscio, in Applied Laser Spectroscopy, Nato Series B241, Plenum Press, 1990.
- [54] M. Inguscio, *High resolution intermodulated and double resonance atomic spectroscopy in a hollow cathode*, J. Physique, 44, C7-11, 217 (1983).
- [55] J. Camparo, *The diode laser in atomic physics*, Contemp. Phys., 26, 443 (1985).
- [56] J. Lawler et al., *A hollow cathode lamp for doppler free spectroscopy*, J. Appl. Physics, 52, 7 (1981).
- [57] J. Sugar, C. Corliss, *Atomic energy levels of Potassium through Nickel - Ti I*, J. Phys. Chem. Ref. Data, 14, suppl. 2, 147 (1985).
- [58] J. Sugar, C. Corliss, *Atomic energy levels of Potassium through Nickel - Ca I*, J. Phys. Chem. Ref. Data, 14, suppl. 2, 51 (1985).

- [59] T. Hansch, B. Couillaud, *Laser frequency stabilization by polarization spectroscopy from a reflecting reference cavity*, Opt. Comm., 35, 3 (1980).
- [60] L. Ricci et al. , *A compact grating stabilized diode laser system for atomic physics*, Opt. Comm., 117, 541 (1995).
- [61] K. MacAdam et al., *A narrow band tunable diode laser system with grating feedback and a saturated spectrometer for Cs and Rb*, Am. J. Physics, 60, 1098 (1992).
- [62] J. Baumert et al., *High efficiency second-harmonic generation in KNbO₃ crystals*, Opt. Comm., 48, 215 (1983).
- [63] J. Baumert et al, *High efficiency intracavity frequency doubling of a styryl-9 dye laser with KNbO₃ crystals*, Appl. Opt., 24 (9), 1299 (1985).
- [64] A. Hemmerich et al., *Second harmonic generation and optical stabilization of a diode laser in an external cavity ring resonator*, Opt. Letters, 15, 372 (1994).
- [65] C. Zimmerman et al, *All solid state laser source for tunable blue and ultraviolet radiation*, Appl. Phys. Lett., 66 (18), 2318 (1995).
- [66] W. King, *Isotope Shifts in Atomic Spectra*, Plenum Press, 1984.
- [67] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche, *Etat actuel de la théorie de la structure hyperfine atomique*, Ann. Phys., 3, 341 (1968).
- [68] J. Bauche, A. Crubelier, *Évaluation theorique des déplacements isotopiques spécifiques dans la série 3d* , J. Physique, 31, 429 (1970).
- [69] D. Blackwell et al, *Precision measurements of relative oscillator strenghts for Ti I-II*, Mont. Not. R. Astr. Soc., 201, 611 (1982).
- [70] R. Lowe, P. Hannaford, *Radiative lifetimes in Ti I*, Z. Phys. D, 21, 205 (1991).
- [71] R. Garstang, *Radiative hyperfine transitions*, Astrophys. J., 442, 628 (1995).

- [72] K. Lippman, M. Pettini, *Interstellar titanium in the galactic halo*, *Astrophys. J.* 442, 628 (1995).
- [73] C. Wieman, T. Hansch, *Doppler-free laser polarization spectroscopy*, *Phys. Rev. Lett.*, 36 (20), 1170 (1976).
- [74] G. Giusfredi et al, *Atomic beam measurement of the lifetime of the 3P_1 metastable states of Mg and Ca*, *Z. Physik A*, 274, 279 (1975).
- [75] Z. Ou et al, *85% efficiency for CW frequency doubling from 1.08 μm to 0.54 μm* , *Opt. Lett.*, 17, 9, p640, 1992.
- [76] N. Ramsey, *Molecular Beams*, Oxford Press, 2nd Ed., 1985.
- [77] J. Tenenbaum et al, *Time dependence of copper-atom concentration in ground and metastable states in a pulsed CuCl laser*, *J. Appl. Phys.*, 49, 2662 (1978)).
- [78] G. Agrawal, N. Dutta, *Semiconductor Lasers*, 2nd Ed., Van Nostrand Reinhold, 1993.
- [79] C. Weisbuch, B. Vinter, *Quantum Semiconductor Structures*, Academic press, 1991.
- [80] P. Aufmuth, K. Heilig, A. Steudel, *Changes in mean square nuclear charge radii from optical isotope shifts*, *Atom. Data Nucl. Data Tables*, 37, 455 (1987).
- [81] Y. Suematsu, A. Adams, *Handbook of Semiconductor Lasers and Photonic Integrated Circuits*, Chapman-Hall, 1994.
- [82] G. Fricke et al, *Nuclear ground state charge radii from electromagnetic interactions*, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 60, 177 (1995).
- [83] ADS NIST Atomic Spectroscopic Database, < <http://physics.nist.gov/> >
- [84] Q. Nguyen, R. Dibble, *High resolution oxygen absorption spectrum obtained with an external cavity continuously tunable diode laser*, *Opt. Lett.*, 19 (24), 2134 (1994).