

Universidade Federal do Ceará  
Centro de Ciências  
Departamento de Física

UM ESTUDO SOBRE AS  
ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS  
COM FEIXES AUXILIARES

**Ascânio Dias Araújo**

Orientador: Prof. Dr. Ilde Guedes da Silva

Tese apresentada ao Departamento  
de Física da Universidade Federal  
do Ceará, como parte dos requisitos  
para obtenção do título de Mestre  
em Ciências

- DEZEMBRO DE 1996 -

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

A687e Araújo, Ascânio Dias.

Um estudo sobre as armadilhas magneto-ópticas com feixes auxiliares / Ascânio Dias Araújo. – 1996.  
92 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1996.

Orientação: Prof. Dr. Ilde Guedes da Silva.

1. Magnetismo. 2. Átomos. I. Título.

CDD 530

---



# UM ESTUDO SOBRE AS ARMADILHAS MAGNETO- ÓPTICAS COM FEIXES AUXILIARES

**Ascânio Dias Araújo**

Tese apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Comissão Julgadora

Prof. Dr. Ildé Guedes da Silva (UFC)  
-Orientador-

Profa. Dra. Mária Tereza de Araújo  
(UFAL)

Prof. Dr. Paulo de Tarso C. Freire  
(UFC)

Aprovada em 17 de dezembro de 1996.

Aos meus pais

## AGRADECIMENTOS

Ao Professor Ilde Guedes pela orientação e amizade dispensadas ao longo deste trabalho.

À Coordenação do Curso de Pós-Graduação, na pessoa do Professor Josué Mendes Filho, e à Chefia do Departamento de Física-UFC, representada pelo Professor José Carlos Parente.

A todos os professores do Departamento de Física-UFC que, de forma direta ou indireta, contribuíram para minha formação.

A Jarlem minha companheira e amiga pela cumplicidade e paciência em todos os momentos.

A todos os meus amigos da Pós Graduação em especial Marcio André, José Filho, Ozório, Alexandre Magno, Marcio Feijão e André Auto pelas brincadeiras e discussões.

Ao grande Profeta Helder pelos ensinamentos do dia a dia.

Ao Raimundo Nogueira , Humberto, Carlos e Pato pelas ajudas computacionais durante a execução do programa.

Aos funcionários do Departamento de Física-UFC pela atenção com que sempre me atenderam.

A CAPES pelo suporte financeiro.

## RESUMO

Recentemente, Flemming *et al* [Opt. Lett. **24**, 2529 (1995)] demonstraram um aumento da ordem de duas vezes no número de átomos aprisionados, usando uma versão alternativa da armadilha magneto-óptica convencional denominada de armadilha de duas cores ou armadilha com feixes auxiliares. Neste trabalho, apresentamos uma descrição teórica sobre o aumento no processo de captura de átomos de sódio (Na) na armadilha magneto-óptica convencional, além da armadilha com feixes auxiliares. Mostramos através de um modelo teórico simples que descreve o processo de captura no regime de gás ideal, que podemos descrever as principais características destas configurações de armadilhas magneto-ópticas.

# ABSTRACT

Recently, Flemming *et al* [Opt. Lett. **24**, 2529 (1995)] have reported an approximately 2-fold improvement in the number of trapped atoms by using a two-color magneto-optical trap. In this work, we present a theoretical discussion on the enhancement of the capture process of sodium atoms in the conventional magneto-optical trap besides two color configuration. Here we show by using a simple theoretical model to describe the capture process in the ideal-gas mode, that we are able of describing the main features of these magneto-optical trap configurations.

# ÍNDICE

Dedicatória .....	i
Agradecimentos .....	ii
Resumo .....	iii
Abstract .....	iv
Capítulo I - Introdução .....	1
1.1 - Introdução .....	2
Referências.....	6
Capítulo II - A Armadilha Magneto-Óptica Convencional .....	7
2.1 - Introdução .....	8
2.2 - Princípio de funcionamento da armadilha magneto-óptica .....	8
2.3 - Cálculo do número de átomos aprisionados na armadilha magneto-óptica .....	13
2.4 - O Modelo 3-D .....	21
Referências .....	26
Capítulo III - A Armadilha Magneto-Óptica com Feixes Auxiliares .....	27
3.1 - Introdução .....	28



3.2 - O átomo de sódio (Na) .....	28
3.1 - Simulação da AMO convencional .....	31
3.3.1 - Cálculo do raio da nuvem de átomos aprisionados .....	31
3.3.2 - Cálculo do número de átomos aprisionados .....	35
3.4 - Tentativas para o aumento do número de átomos na AMO .....	38
Referências .....	51
Capítulo IV - Conclusões e Perspectivas.....	52
4.1 - Conclusões .....	53
4.2 - Perspectivas .....	56
Apêndices .....	57
Apêndice A .....	58
Apêndice B .....	63
Apêndice C .....	68

# ***CAPÍTULO I***

## 1.1 - Introdução

Hoje em dia, a procura por amostras de vapores atômicos com altas densidades e temperaturas muito baixas é um dos campos de intensa pesquisa e vasta aplicação de técnicas como desaceleração de feixes atômicos por laser e aprisionamento magneto-óptico. Usando a armadilha magneto-óptica (AMO), primeiramente desenvolvida por E. Raab *et al* em 1987 [1], podemos obter como já reportado na literatura, densidades maiores que  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$  [2] e temperaturas mais baixas que aquela determinada pelo limite Doppler [3]. Entretanto, mesmo com tais desempenhos, ainda se faz necessário para estudar problemas como colisões entre átomos aprisionados [4], aumentar a taxa de captura, aumentando assim o número e a densidade de átomos aprisionados até o limite imposto pela força de confinamento da radiação.

Para este propósito, pelo menos três métodos já foram testados, a saber: (i) método de *frequency chirping*; (ii) método de *bandwidth broadening* e (iii) método do aumento do diâmetro dos feixes lasers.

Os primeiros dois métodos foram propostos por Lindquist *et al* em 1992 [5]. Eles demonstraram com todo o rigor que, nenhum dos métodos era eficiente na tentativa de se aumentar a taxa de captura. O terceiro método foi proposto por Gibble *et al* também em 1992 [6]. De acordo com os dados apresentados na Ref. [6], o número (N) de átomos de césio (Cs) aprisionados na estrutura tipo nuvem era da ordem de  $N \sim 3,6 \times 10^{10}$ . Este valor é cerca de duzentas vezes maior que o valor obtido usando a AMO convencional reportada na Ref. [5]. A explicação para o resultado obtido por Gibble *et al* é baseada no fato que, ao aumentarmos o diâmetro dos feixes de aprisionamento a região de desaceleração também aumenta.

Dessa forma, átomos mais rápidos podem ser eficientemente desacelerados e aprisionados. Entretanto, devemos observar que para mantermos o mesmo parâmetro de saturação para a transição atômica envolvida, precisamos aumentar a intensidade dos lasers. Logo, este fato impõe uma restrição experimental sobre os possíveis valores dos diâmetros dos lasers a serem utilizados.

Em 1994, Sinclair *et al* [7] demonstraram um novo método para aumentar o número de átomos de rubídio (Rb) em uma AMO. Este método utiliza um segundo conjunto de lasers de aprisionamento superposto ao conjunto original que compõe a AMO. Entretanto, os valores de dessintonia deste conjunto auxiliar são tomados de forma que possamos aumentar o efeito Doppler e assim resfriar átomos cada vez mais rápidos até um certo limite. Bloqueando a parte central dos feixes auxiliares, de forma a reduzir a taxa de perdas por colisões entre átomos aprisionados, os autores demonstraram um aumento da ordem de cinco vezes maior no número de átomos aprisionados.

Algum tempo depois, Flemming *et al* em 1995 [8] demonstraram um aumento na taxa de carregamento de uma AMO para átomos de sódio (Na), operando com lasers de múltiplas frequências. Na verdade, o trabalho de Flemming *et al* é bastante similar ao de Sinclair *et al*, com a diferença básica que no trabalho de Flemming *et al* não existe região de superposição, ou seja, os dois conjuntos de lasers (auxiliar e original) estão sempre espacialmente separados não havendo intersecção entre eles. Variando a frequência dos lasers auxiliares, para aumentar o deslocamento Doppler, os autores observaram um gráfico extremamente interessante do número de átomos em função destas frequências. Para uma dessintonia do laser auxiliar em torno de -25 MHz eles observaram um aumento da ordem de duas vezes em relação a AMO convencional,

enquanto que para valores da ordem de -75 MHz o aumento observado foi de aproximadamente dez vezes.

Baseado em todos estes trabalhos, nosso intuito é mostrar através de um modelo tridimensional (3D) para o cálculo da taxa de carregamento da AMO, operando no regime de gás ideal, as principais características (vantagens e desvantagens) das configurações de armadilhas usadas por Gibble *et al* e Flemming *et al*.

O modelo utilizado neste trabalho para o cálculo da taxa de captura, em função de vários parâmetros da AMO, é uma generalização 3D do modelo de captura unidimensional (1D) apresentado por Lindquist *et al* na Ref.[5]. Neste modelo, consideramos as características 3D do campo magnético quadrupolar bem como as corretas expressões para os perfis de intensidade dos feixes da AMO. Com o uso deste modelo, podemos considerar a simulação de átomos que entram na região de captura em direções diferentes aos eixos cartesianos. Assim todos os resultados apresentados foram obtidos após uma média sobre vários átomos com diferentes valores iniciais de posição e velocidade. Como iremos ver, este procedimento faz com que obtenhamos valores teóricos bem próximos aos valores experimentais, sem o uso de qualquer constante de normalização como efetuado na Ref.[5].

A razão entre o número obtido na AMO com feixes auxiliares e na AMO convencional define o fator de ganho  $\eta$ . Para  $\eta > 1$  ( $\eta < 1$ ) temos um aumento (decréscimo) na taxa de captura e conseqüentemente no número de átomos aprisionados.

Este trabalho encontra-se organizado da seguinte forma: (i) no Capítulo II descrevemos as principais características da AMO como seu princípio de funcionamento, as forças de desaceleração e aprisionamento, o cálculo do número de átomos aprisionados e por fim o

modelo teórico desenvolvido para calcular a velocidade de captura; (ii) no Capítulo III apresentamos uma breve discussão sobre o átomo de sódio (Na) e os níveis de energia considerados, mostramos como nosso modelo descreve dentro de suas limitações alguns dos resultados obtidos para a AMO convencional e apresentamos as simulações referentes às técnicas para aumentar o número de átomos aprisionados na AMO; e (iii) no Capítulo IV apresentamos as conclusões finais e discutimos algumas possíveis extensões deste trabalho.

## REFERÊNCIAS

- [1] - E. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu e D. Pritchard, Phys. Rev. Lett. **59**, 2631 (1987).
- [2] - W. Ketterle, K. Davis, M. Joffe, A. Martin e D. Pritchard Phys. Rev. Lett. **70**, 2253 (1993).
- [3] - M. Kaservich e S. Chu, Phys. Rev. Lett. **69**, 1741 (1992).
- [4] - D. Sesko, T. Walker e C. Weiman, J. Opt. Soc. Am. B **8**, 946 (1991).
- [5] - K. Lindquist, M. Stephens e C. Weiman, Phys. Rev. A **46**, 4082 (1992).
- [6] - K. Gibble, S. Kasapi e S. Chu, Opt. Lett. **17**, 526 (1992).
- [7] - A. G. Sinclair, E. Riis e M. Snadden, J. Opt. Soc. Am. B **11**, 2333 (1994).
- [8] - J. Flemming, L. Marcassa, R. Horowicz, S. C. Zilio e V. S. Bagnato, Opt. Lett. **24**, 2529 (1996).

## ***CAPÍTULO II***



## 2.1 - Introdução

Neste capítulo, descreveremos o princípio de funcionamento da armadilha magneto-óptica e derivaremos as forças responsáveis pelo aprisionamento dos átomos. Discutiremos também como podemos, a partir de um modelo simples de captura de átomos, determinar o número de átomos aprisionados e sua variação com os parâmetros usuais da armadilha magneto-óptica.

## 2.2 - Princípio de funcionamento da armadilha magneto-óptica

O princípio básico de funcionamento da armadilha magneto-óptica pode ser ilustrado supondo-se um átomo hipotético de dois níveis, cujo estado fundamental possui spin  $S=0$  ( $m_s=0$ ) e o estado excitado spin  $S=1$  ( $m_s=0, \pm 1$ ). Vamos considerar ainda este átomo imerso em um campo magnético  $B_z(z)=bz$ , que varia linearmente com a posição de maneira que o efeito Zeeman provoca uma modificação das energias,  $\Delta E = \mu m_s B_z(z) = \mu m_s bz$ , dos subníveis do estado excitado, como mostrado na Fig.2.1.

Consideremos agora o átomo interagindo com dois campos de radiação contrapropagantes de polarizações circulares ortogonais e deslocados para o vermelho da frequência de ressonância, tal que o feixe de polarização  $\sigma^+$  se propaga na direção  $+\hat{z}$  e o de polarização  $\sigma^-$  na direção  $-\hat{z}$ . Se o átomo estiver em  $z = 0$ , a força média exercida pelos dois feixes é nula e o átomo permanece neste ponto. Se o átomo se desloca no sentido  $z > 0$  ele estará em maior ressonância com o laser  $\sigma^-$ , pois a frequência deste é próxima da frequência da transição  $\Delta m = -1$  e

assim sofre uma força na direção  $-\hat{z}$ , tendendo a voltar para a posição  $z=0$ .

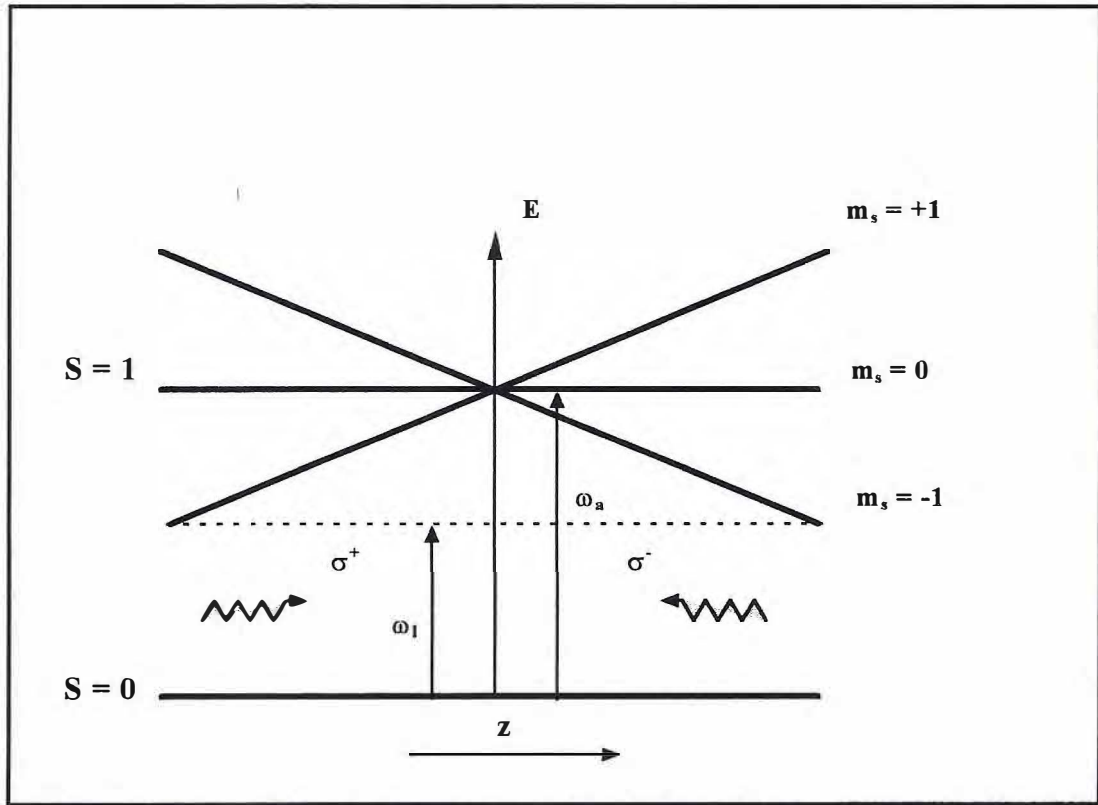


Fig.2.1- Diagrama de níveis de energia de um átomo hipotético de dois níveis interagindo com um campo magnético  $B_z(z) = g_z z$

Para o átomo deslocando-se no sentido  $z < 0$  ele estará em maior ressonância com o laser  $\sigma^+$ , cuja frequência é próxima da frequência da transição  $\Delta m = +1$ , sofrendo uma força na direção  $+\hat{z}$ , que o faz voltar à posição  $z = 0$ . Logo o ponto  $z = 0$  é um ponto de equilíbrio estável.

O esquema mostrado na Fig. 2.1 é facilmente estendido para três dimensões. Para isto basta colocarmos os feixes contrapropagantes de polarizações circulares ortogonais também nas direções  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  e um campo magnético quadrupolar esferoidal como mostrado na Fig.2.2. Devemos observar que devido ao fato que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ , as polarizações dos lasers no plano  $xy$ , aparecem invertidas com relação as polarizações no eixo  $z$ .

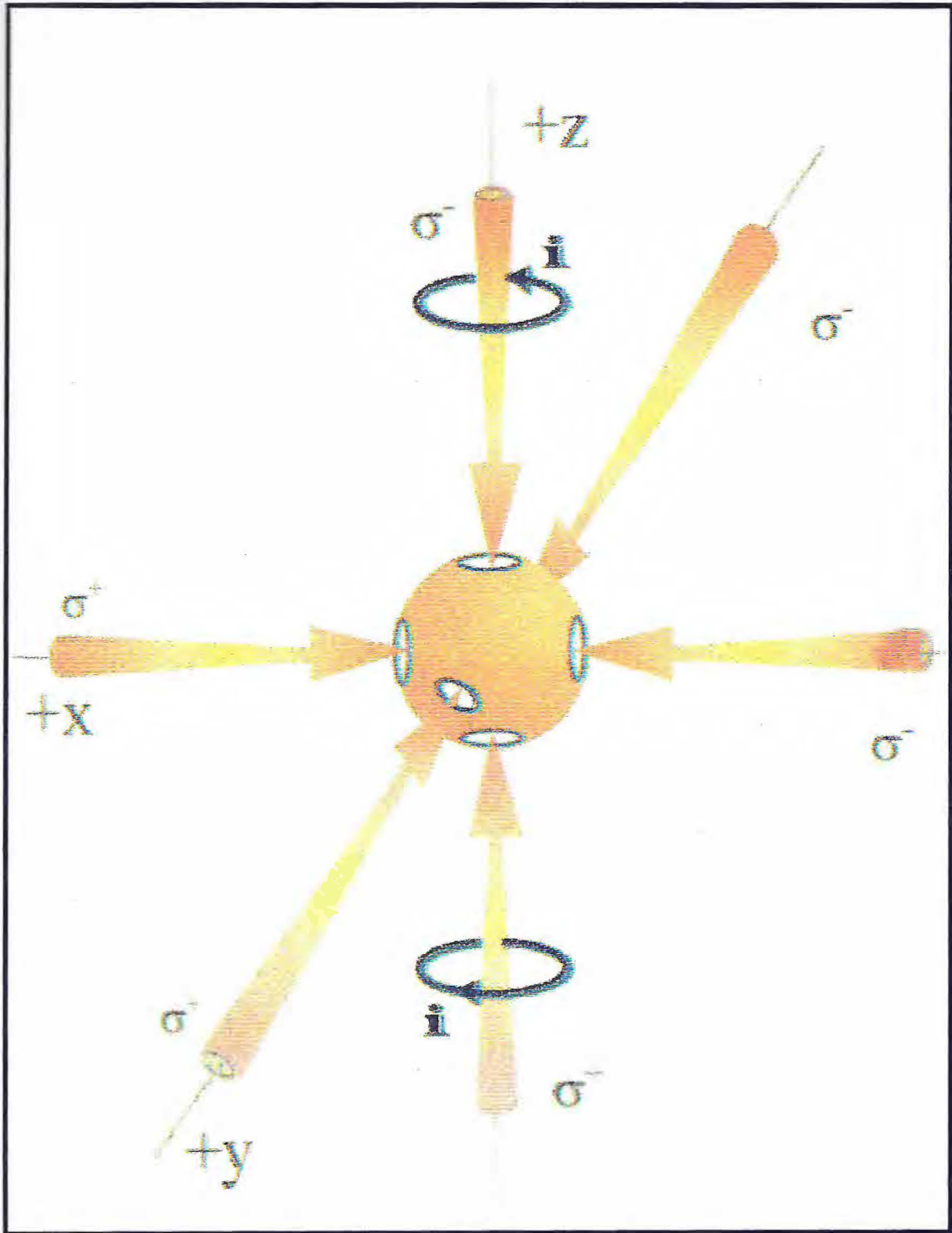


Fig.2.2 - Armadilha magneto-óptica em três dimensões.

Pelo exposto acima, o comportamento de um átomo nesta armadilha pode ser descrito, como discutido por Raab *et al.*[1], por uma equação de movimento da forma

$$\vec{F} = -k\vec{r} - \frac{\alpha d\vec{r}}{dt} \quad (2.1)$$

onde  $-k\vec{r}$  é a força tipo restauradora devido ao deslocamento Zeeman dos níveis atômicos e ao uso de polarizações apropriadas dos lasers e  $-\alpha d\vec{r}/dt$  é a força de amortecimento causada pelo fato que os feixes de laser estão deslocados para o vermelho da frequência de ressonância (resfriamento por efeito Doppler).

Na verdade, os átomos na armadilha estão sujeitos a uma força que é uma função bastante complicada da posição e velocidade. Entretanto, quando os átomos são capturados, possuem velocidades baixas e estão confinados próximos ao centro da armadilha, onde o campo magnético é mínimo. Neste caso, a Eq.(2.1) que é aproximada, descreve bem o comportamento dos átomos na armadilha magneto-óptica.

Assim, para pequenas oscilações em torno da origem temos

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} + \frac{\tilde{\alpha}d\vec{r}}{dt} + \omega_0^2\vec{r} = 0 \quad (2.2)$$

que é a equação de movimento para o oscilador harmônico amortecido, onde  $\tilde{\alpha} = \alpha/m$  é a constante de amortecimento,  $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$  é a frequência de oscilação e  $m$  é a massa do átomo. Para os valores usuais utilizados em laboratórios, o movimento dos átomos é superamortecido pois  $\tilde{\alpha} > \omega_0$ .

Como o movimento é superamortecido, poderíamos ser levados a pensar que a única solução estacionária da Eq.(2.2) é  $\vec{r} = 0$ , o que levaria ao aprisionamento dos átomos numa região de volume desprezível ( $v \ll \lambda_{dB}^3$ , onde  $\lambda_{dB}$  é o comprimento de onda de de Broglie associado ao átomo), ocasionando a possibilidade da observação da condensação de Bose-Einstein. Entretanto, após absorver um fóton do campo de radiação ( $\sigma^+$  ou  $\sigma^-$ ), o átomo o reemite espontaneamente. Esta reemissão introduz uma aleatoriedade em seu movimento causando uma dispersão em torno de  $\vec{r} = 0$ , de forma que  $\langle \vec{r} \rangle = 0$  e  $\langle \vec{r}^2 \rangle \neq 0$ . Devido a isto, a amostra de átomos aprisionados sempre terá uma temperatura de equilíbrio finita diferente de zero, e em consequência, pelo teorema da equipartição de energia, uma distribuição espacial finita. Na verdade observa-se experimentalmente a formação de uma nuvem de átomos aprisionados caracterizada por um raio médio. Para baixas densidades a distribuição de átomos aprisionados é dada pela solução de estado estacionário da equação de Fokker-Planck [2] para o oscilador harmônico amortecido

$$N(\vec{r}) = \left[ \frac{k}{2\pi k_B T} \right]^{3/2} \exp\left( \frac{-\alpha r^2}{2k_B T} \right) \quad (2.3)$$

que é uma distribuição gaussiana centrada em  $\vec{r} = 0$ , como para um gás ideal, com

$$\langle \vec{r} \rangle = 0 \quad (2.4)$$

$$\langle \vec{r}^2 \rangle = \frac{k_B T}{k}$$

este último resultado assegura o fato que  $\langle \bar{r}^2 \rangle$  está relacionado com a temperatura de equilíbrio, que é dada por

$$k_B T = \frac{D}{\alpha} \quad (2.5)$$

onde D é o coeficiente de difusão ligado à emissão espontânea.

A discussão que levou à dedução da Eq.(2.3), é válida para uma amostra de átomos aprisionados de baixa densidade. Quando se aumenta a densidade de átomos na armadilha, começa a surgir entre eles uma força repulsiva devido à re-absorção de fótons, denominada de força de confinamento da radiação[3]. Isto faz com que a nuvem de átomos expanda-se espacialmente limitando assim a densidade e modificando a distribuição que deixa de ser do tipo gaussiana. Neste trabalho não levaremos em conta nas simulações apresentadas, o efeito da força de confinamento da radiação.

### 2.3 - Cálculo do número de átomos aprisionados na armadilha magneto-óptica

O número de átomos confinados na armadilha magneto-óptica é determinado pelo balanço entre a taxa de captura L destes átomos e a taxa de perdas devido a processos de colisões, levando a uma equação do tipo

$$\frac{dN}{dt} = L - \frac{1}{\tau} N - \beta \int n^2(\bar{r}, t) d^3\bar{r} \quad (2.6)$$

onde

- $\tau^{-1}$  refere-se às perdas devido a colisões entre os átomos aprisionados e os átomos do gás de fundo,
- $\beta$  representa as perdas por colisões entre os átomos confinados,
- $n^2(\vec{r}, t)$  é a distribuição de densidade de átomos aprisionados.

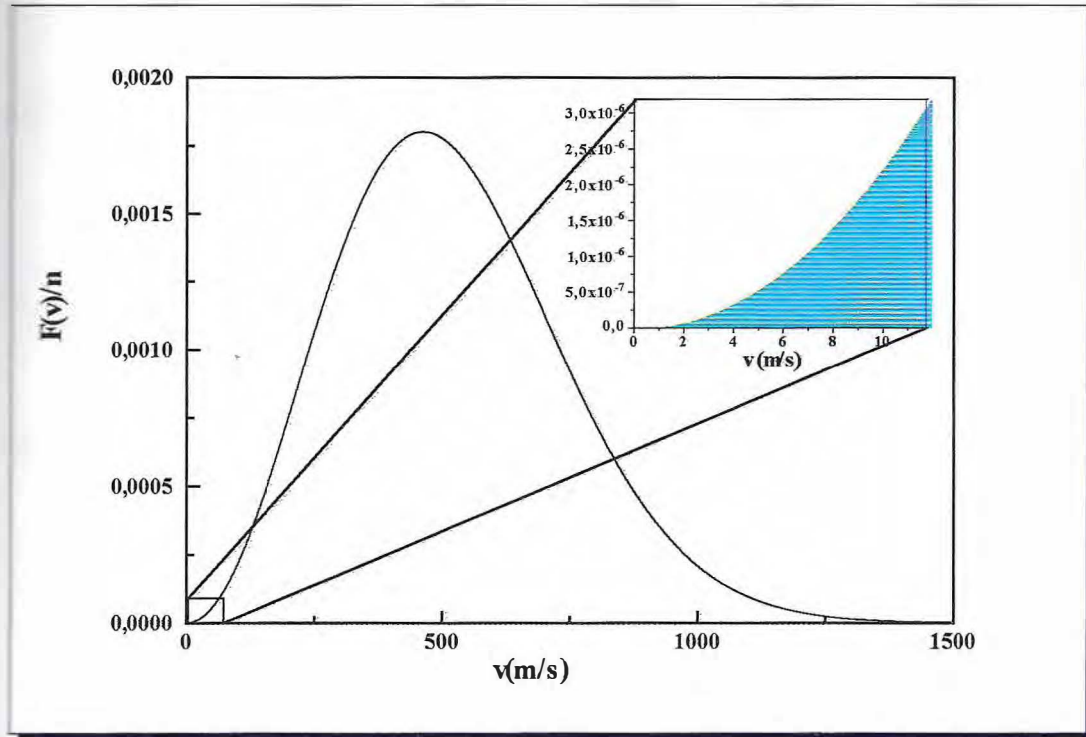
O último termo do lado direito da Eq.(2.6) só é relevante nos regimes de altas densidades. Assim, no regime de baixas densidades (gás ideal) temos como solução estacionária ( $t \rightarrow \infty$ ) da Eq.(2.6)

$$N(\infty) = L \tau \quad (2.7)$$

A taxa de captura  $L$  depende do método usado para carregar a armadilha. O método mais simples é formar a armadilha diretamente do vapor de átomos, por exemplo, átomos de sódio (Na), contido numa célula a uma pressão menor que  $10^{-8}$  Torr. Um modelo aproximado para a captura supõe que os átomos que entram na região de aprisionamento (definidos pela dimensão espacial do feixe de laser) com velocidades menores que uma velocidade limite denominada de velocidade de captura  $v_c$ , podem ser desacelerados e aprisionados. Como os átomos na célula seguem a distribuição de Maxwell-Boltzmann,  $v_c$  determina a fatia desta distribuição capaz de ser eficientemente capturada, como mostrado na Fig.2.3.

Utilizando a teoria cinética dos gases [4], podemos calcular o fluxo de átomos que entram na superfície da região de aprisionamento assumindo a hipótese de gás ideal. Seja

$$\Phi(\vec{v}) d\vec{v}^3 = f(\vec{v}) v \cos \theta d^3 \vec{v} \quad (2.8)$$



*Figura 2.3 - Distribuição de Maxwell-Boltzmann para um gás ideal com  $v_{th} = 520,54 \text{ m/s}$ . No quadro em destaque, mostramos a fatia dos átomos com  $v_c \leq 11,78 \text{ m/s}$  que podem ser aprisionados.*

onde

- $\Phi(\vec{v})d^3\vec{v}$  é o número de átomos, com velocidade entre  $(\vec{v}, \vec{v} + d\vec{v})$  que entram na região da armadilha,
- $f(\vec{v})$  é a distribuição de Maxwell- Boltzmann de velocidades,
- $v \cos \theta$  é a componente de velocidade em relação à normal a superfície.

Para encontrarmos o número total de átomos devemos somar a Eq.(2.8) sobre todas as possíveis velocidades  $\vec{v}$  menores que a velocidade de captura  $v_c$ . Portanto,

$$\Phi = \pi \int_0^{v_c} f(v) v^3 dv \quad (2.9)$$



Podemos reescrever a Eq.(2.9) em função de velocidade média dada neste caso por

$$\bar{v} = \frac{4\pi}{n} \int_0^{v_c} f(v)v^3 dv \quad (2.10)$$

onde  $n$  é a densidade de átomos do vapor. Assim,

$$\Phi = \frac{1}{4} n \bar{v} \quad (2.11)$$

A taxa de captura  $L$  é definida pelo produto do número total de átomos  $\Phi$  que atravessam a superfície da região de aprisionamento pela área  $A$  desta superfície, ou seja

$$L = A\Phi \quad (2.12)$$

onde  $A = 4\pi r^2$  e  $r$  é a dimensão espacial do feixe de aprisionamento. No caso da armadilha magneto-óptica onde se utilizam feixes de laser com perfis gaussiano de intensidade,  $r$  corresponde a cintura ( $w$ ) do feixe [5].

Resolvendo-se a Eq.(2.10), e substituindo a solução na Eq.(2.12), temos

$$L = 0.2nA \frac{v_c^4}{v_{th}^3} \quad (2.13)$$

onde  $v_{th} = (8k_B T / \pi m)^{1/2}$  é a velocidade média dos átomos. Assim para encontrarmos  $N$ , resta-nos calcular  $v_c$  e  $\tau$ . Discutiremos primeiro como determinar  $\tau$ .

A taxa de perda  $\tau^{-1}$  relaciona-se com os processos de colisões entre os átomos aprisionados e os átomos de gás de fundo que, além dos átomos da própria espécie em estudo, podem também ser hélio (He) e nitrogênio (N<sub>2</sub>). Considerando em específico o aprisionamento de átomos de sódio (Na), podemos escrever

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{Na}} \quad (2.14)$$

onde  $\tau_i^{-1}$  e  $\tau_{Na}^{-1}$  referem-se as perdas devido as colisões entre átomos de Na capturados com átomos de He ou N<sub>2</sub> e átomos de Na de gás de fundo, respectivamente. No caso em que a pressão da célula na qual está contido o vapor de Na e as outras espécies He e N<sub>2</sub>, for menor que 10<sup>-8</sup> Torr, as perdas por colisões são devido basicamente ao termo  $\tau_{Na}^{-1}$  que é dominante em relação ao termo  $\tau_i^{-1}$ . Sabendo que

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{Na}} = n v_{th} \sigma \quad (2.15)$$

onde  $\sigma = 10^{-12} \text{ cm}^2$  é a seção de choque para colisões entre átomos de sódio (Na) capturados e do vapor, temos que

$$N = 0.2 \frac{A}{\sigma} \left( \frac{v_c}{v_{th}} \right)^4 \quad (2.16)$$

que é independente da densidade de sódio (Na) do gás de fundo.

Para calcularmos  $v_c$ , podemos a princípio integrar numericamente a Eq.(2.2) sujeita ao vínculo que após o tempo de integração definido por  $t_i = 2w/v_i$ , onde  $v_i$  é a velocidade inicial do átomo, o átomo encontra-se no interior da nuvem formada, região definida pelo raio de corte  $r_c$ , com velocidade menor ou igual a velocidade Doppler, que para o Na é  $v_D = 1178 \text{ cm/s}$ . Entretanto, a Eq.(2.2) é obtida considerando-se átomos com baixas velocidades ( $v \ll v_D$ ) e localizados muito próximos ao centro da nuvem. Desta forma, iríamos simular a captura dos átomos que já estão aprisionados. Assim, devemos integrar numericamente não a Eq.(2.2), mas sim, a expressão da força de pressão de radiação que descreve a interação átomo-laser[6]. Como os feixes utilizados na armadilha magneto-óptica possuem perfis de intensidades gaussianos não focalizados, a componente da força de pressão de radiação a ser levada em conta é a força espontânea dada por

$$\vec{F} = \frac{\hbar\Gamma\Omega^2}{\left[4\left(\Delta - \vec{k}_\lambda \cdot \vec{v}\right)^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2\right]} \vec{k}_\lambda \quad (2.17)$$

que está associada à transferência de momentum do fóton para o átomo e a emissão espontânea. Esta força é do tipo Lorentziana centrada em  $\Delta = \vec{k}_\lambda \cdot \vec{v}$ , com largura a meia altura (FWHM) dada por  $(\Gamma^2 + 2\Omega^2)^{1/2}$  correspondendo ao alargamento natural  $\Gamma$ , devido à emissão espontânea e por potência  $\Omega^2$ , ligado à emissão estimulada. Assim em uma dimensão podemos escrever para um átomo de dois níveis

$$m \frac{dv_x}{dt} = F_+(x) - F_-(x) \quad (2.18)$$

com  $F_{\pm}(x)$  dado por

$$F_{\pm}(x) = \frac{\hbar k_{\lambda} \Gamma \Omega^2}{\left\{ 4 \left[ \Delta \mp (k_{\lambda} v_x + \gamma g_x x) \right]^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2 \right\}} \quad (2.19)$$

onde

- $\gamma g_x x$  foi incluído de forma a considerarmos o deslocamento Zeeman nos níveis de energia, sendo  $\gamma$  a constante Zeeman que vale 1.4MHz/G para os átomos alcalinos e  $g_x$  é o gradiente de campo magnético expresso em G/cm,
- $k_{\lambda} = 2\pi/\lambda$  é o módulo do vetor de onda do campo de radiação,
- $\Gamma = 10\text{MHz}$  é a largura de linha da transição atômica,
- $\Omega = \mu E / \hbar$  é a frequência de Rabi da transição, que está relacionada a intensidade do campo de radiação,
- $\Delta = \omega - \omega_0$  é dessintonia entre a frequência do laser ( $\omega$ ) e frequência da transição atômica ( $\omega_0$ ).

A Eq.(2.18) foi estabelecida considerando que a interação do átomo com os lasers  $\sigma^+$  e  $\sigma^-$ , fosse descrita como simplesmente a soma de dois sistemas de dois níveis, um relacionado à transição  $m_s = 0 \rightarrow m_s = +1$  e outro à transição  $m_s = 0 \rightarrow m_s = -1$ , respectivamente. Na verdade, os átomos alcalinos em geral apresentam uma estrutura de níveis bem mais complexa do que o modelo apresentado. Entretanto, podemos considerar

em muito boa aproximação, o uso do modelo de dois níveis para descrever a dinâmica da armadilha magneto-óptica. Mas se quisermos efetuar um cálculo mais realista, onde além dos níveis hiperfinos todos os subníveis Zeeman sejam incluídos, devemos recorrer à uma extensão da Eq.(2.18), efetuando uma soma sobre todos os subníveis, respeitando as regras de seleção para a transição de um fóton. A esta extensão denominamos de teoria de multiníveis [7]. No presente trabalho, calcularemos a velocidade de captura considerando apenas o modelo de dois níveis.

Alguns trabalhos anteriores [7,8], calcularam o número de átomos aprisionados utilizando o modelo descrito anteriormente apenas em uma dimensão (1-D). Embora os resultados obtidos tenham mostrado que o comportamento do número de átomos aprisionados em função de vários parâmetros da armadilha é bem descrito pelo modelo 1-D, todos estes resultados são obtidos mediante o uso de fatores de normalização não muito bem especificados. Neste trabalho, ao invés do modelo 1-D, utilizaremos um modelo tridimensional (3-D) para calcularmos a velocidade de captura dos átomos em função de alguns parâmetros da armadilha. As diferenças básicas entre os modelos 3-D e 1-D residem no fato que, no modelo 3-D levamos em conta o caráter 3-D do campo magnético quadrupolar esferoidal e as expressões corretas para os perfis gaussiano de intensidade dos feixes. Além destes dois fatores, podemos mencionar outros como o fato que a maioria dos átomos entram na região de captura descrevendo trajetórias diferentes. No modelo 1-D considera-se apenas o movimento atômico em um dos eixos de coordenadas. Também, como temos na armadilha a presença de forças não conservativas, o potencial efetivo que está relacionado a velocidade de captura  $v_c$ , é definido pelo teorema do trabalho-energia que diz que a variação da

energia cinética do átomo é igual ao trabalho  $\tau$  realizado pelas forças conservativas, ou não. Assim, podemos escrever

$$|\Delta E_c| = |E_{cf} - E_{ci}| = \frac{1}{2}mv_c^2 = |\tau| = V_{eff} \quad (2.20)$$

onde a energia cinética final é aproximadamente zero, pois a temperatura no centro da armadilha é da ordem de centenas de microkelvins ( $\mu\text{K}$ ) e o potencial efetivo da ordem de 0,5 K. Como o trabalho depende da trajetória do átomo, justifica-se novamente o uso do modelo 3-D, para o cálculo mais exato da velocidade de captura. Na próxima seção apresentaremos o modelo 3-D utilizado neste trabalho.

#### 2.4- O modelo 3-D

Levando em conta a correta expressão para a frequência de Rabi, podemos reescrever a Eq.(2.19) na forma

$$F_{\pm}(x) = \frac{\hbar k_{\lambda} \Gamma \Omega_{\pm}^2(y, z)}{\left\{ 4 \left[ \Delta \mp (k_{\lambda} v_x + \gamma g_x x) \right]^2 + \Gamma^2 + 2 \sum_{n=-}^{+} \Omega_n^2 \right\}} \quad (2.21)$$

onde  $\Omega_{\pm}^2(y, z)$  corresponde a frequência de Rabi escrita de forma a considerar a dependência em  $y$  e  $z$  do feixe gaussiano propagando-se em  $\pm \hat{x}$ , sendo expressa por

$$\Omega_{\pm}^2 = \Omega_0^2 \exp\left[-(y^2 + z^2)/w^2\right] \quad (2.22)$$

com  $\Omega_0^2$  sendo o valor máximo da frequência de Rabi e  $w$  é a cintura do feixe. O termo

$$\sum_{n=-}^{+} \Omega_n^2 = \Omega_n^2(x, y) + \Omega_n^2(y, z) + \Omega_n^2(x, z) \quad (2.23)$$

substitui o termo usualmente empregado  $\Omega^2(\vec{r})$  que é relacionado à intensidade total, dada pela soma dos seis lasers da armadilha. Esta modificação nos permite não superestimar o alargamento por potência devido aos seis lasers [8].

Equações similares à Eq.(2.21) podem ser escritas para as componentes  $y$  e  $z$ . Assim, de uma forma geral, devemos resolver numericamente um conjunto de três equações diferenciais não-lineares acopladas sujeitas a duas condições iniciais, que são a posição e a velocidade do átomo. Ao invés de descrevermos as condições iniciais em termos de dois conjuntos de coordenadas cartesianas retangulares, iremos descrevê-las de uma forma mais conveniente em termos de dois conjuntos de coordenadas polares esféricas, como mostrado na Fig.(2.4).

Da Fig.(2.4) podemos escrever (veja Apêndice B)

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{sen}\theta \cos\phi \\ y &= r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned} \quad (2.24)$$

e

$$\begin{aligned} v_x &= v[(\operatorname{sen}\delta \operatorname{sen}\phi \cos\theta + \cos\delta \operatorname{sen}\theta) \cos \\ &\quad - \operatorname{sen}\delta \cos\phi \operatorname{sen}\phi] \\ &= v \cos\alpha \end{aligned}$$

$$v_y = v[(\text{sen}\delta\text{sen}\varphi \cos\theta + \cos\delta \text{sen}\theta) \text{sen}\phi + \text{sen}\delta \cos\varphi \cos\phi] \quad (2.25)$$

$$= v \cos\beta$$

$$v_z = v[\text{sen}\delta \text{sen}\varphi \text{sen}\theta - \cos\delta \cos\theta]$$

$$= v \cos\gamma$$

onde os cossenos diretores satisfazem a relação

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1 \quad (2.26)$$

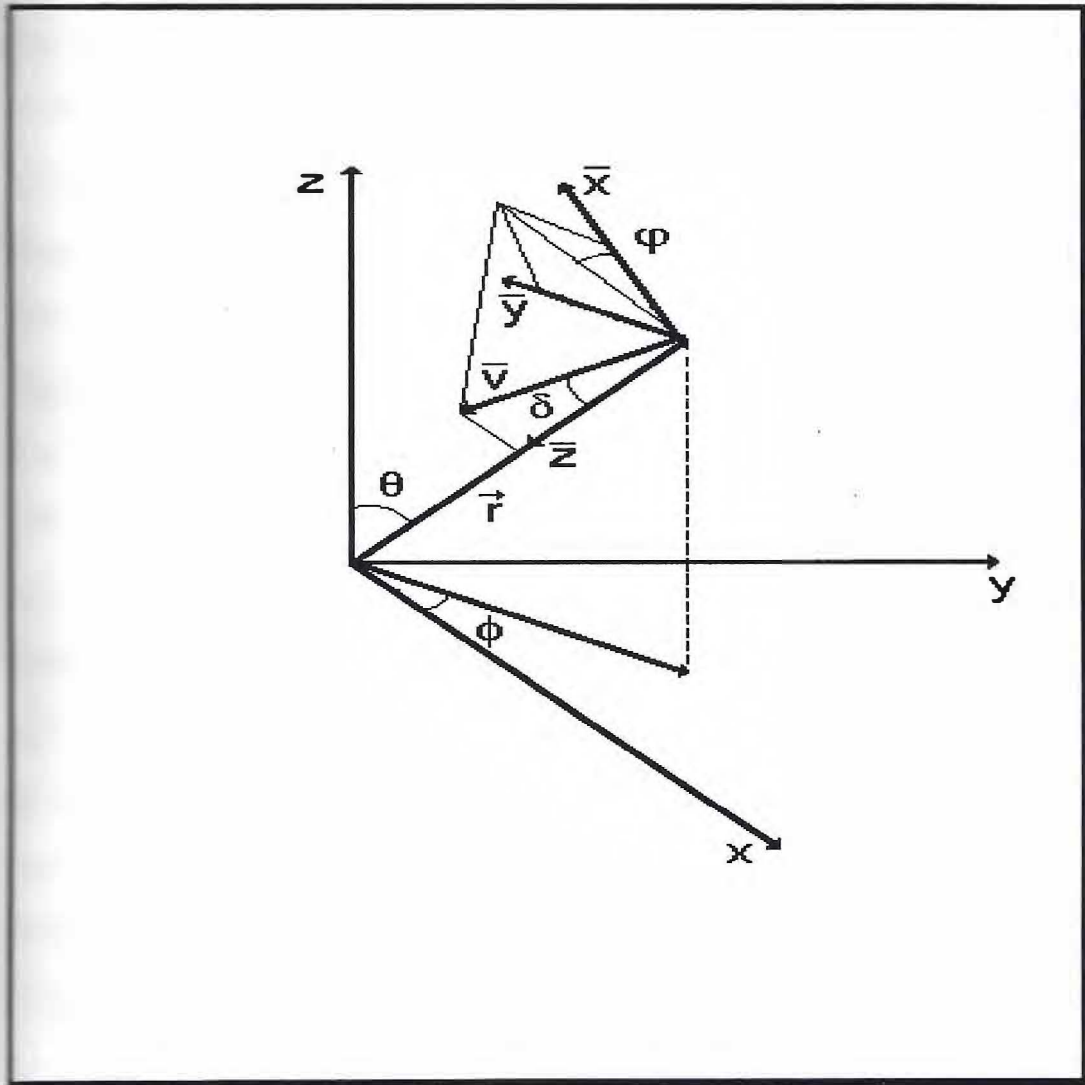


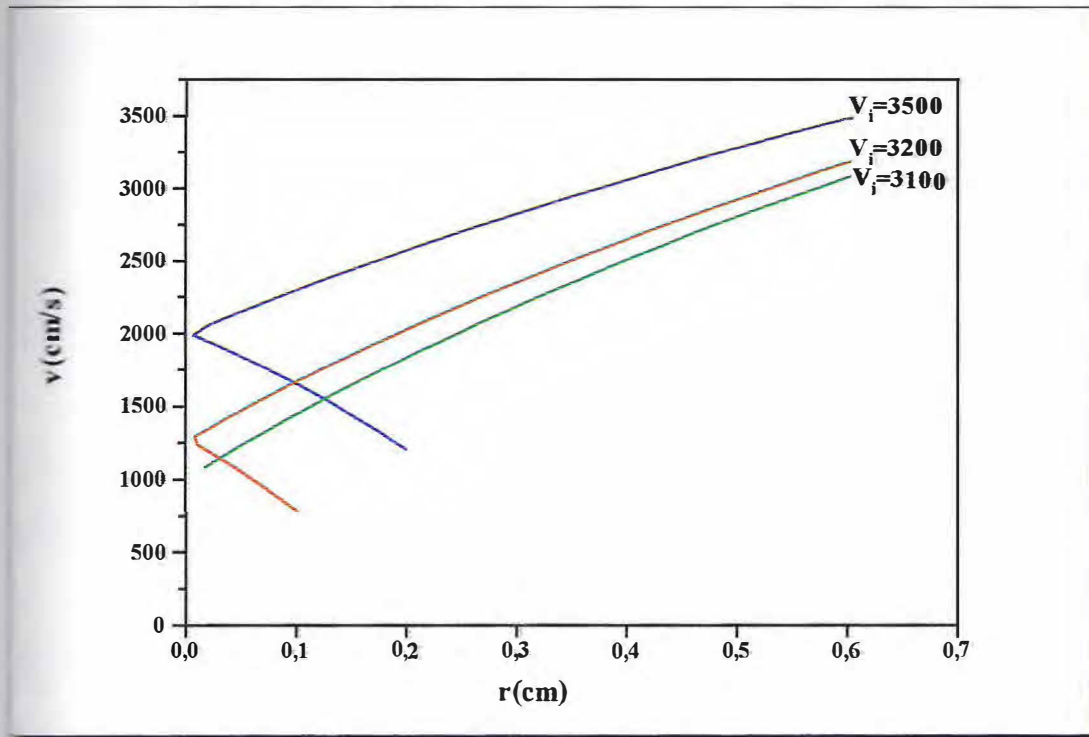
Fig.2.4 - Sistemas de coordenadas para armadilha e para o átomo.



Como já mencionamos anteriormente, para determinarmos  $v_c$  em função dos parâmetros experimentais utilizados na armadilha magneto-óptica, devemos integrar as equações de movimento e impormos os vínculos que após o tempo de integração o átomo tenha velocidade menor que a velocidade Doppler e que esteja localizado no interior da nuvem de átomos aprisionados, (veja Apêndice C).

Na Fig.(2.5) mostramos três possíveis trajetórias no espaço de fase descrita por um átomo de sódio (Na) para três valores de velocidades iniciais.

Nesta simulação consideramos a armadilha tipo I, que discutiremos no próximo capítulo, onde o raio da nuvem observada é da ordem de  $r_c \sim 0,02$  cm [9]. Observamos então que para  $v_i = 3100$  cm/s o átomo foi eficientemente desacelerado e aprisionado; para  $v_i = 3200$  cm/s o átomo foi eficientemente desacelerado mas não aprisionado; enquanto que para  $v_i = 3500$  cm/s o átomo não foi desacelerado ao ponto de satisfazer o vínculo da velocidade e nem foi aprisionado. Assim, é a partir da análise dos resultados obtidos verificando a trajetória no espaço de fase, que calculamos a velocidade de captura  $v_c$  e pela Eq.(2.16) determinamos o número de átomos aprisionados na armadilha magneto-óptica. Por exemplo, no caso acima discutido onde  $v_c = 3100$  cm/s encontramos para  $v_{\text{th}} = 52,54 \times 10^3$  cm/s ( $T=300$ K),  $N = 1,1 \times 10^7$ . Este valor é muito próximo ao encontrado por Milori na Ref.[9] que foi  $N = 8,9 \times 10^6$ . É claro que ao considerarmos mais átomos este número deve modificar-se um pouco. Entretanto, devemos chamar a atenção que os resultados coincidirão em ordem de grandeza.



**Figura 2.5 - Trajetória no espaço de fase de um átomo para três valores de velocidade inicial distintos. As coordenadas do átomo e os valores dos parâmetros da armadilha magneto-óptica foram respectivamente  $|\vec{r}| = 0,6\text{cm}$ ,  $\Omega = 23,46\text{MHz}$ ,  $\Delta = 10\text{MHz}$ ,  $g_x = g_y = g_z/2 = 10\text{G/cm}$ ,  $\theta = 90$ ,  $\phi = 45$ ,  $\varphi = 0$  e  $\delta = 180$ .**

## REFERÊNCIAS

- [1] - E. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu e D. Prichard, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2631 (1987).
- [2] - W. L. Louissell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, New York, John Wiley & Sons, 1973.
- [3] - D. Sesko, T. Walker e C. Wieman, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 946 (1991).
- [4] - F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Singapore, McGraw-Hill Book Co., 1975.
- [5] - A. Yariv, *Quantum Eletronics*, New York, John Wiley & Sons, 1975.
- [6] - R. Cook, *Phys. Rev. A* **20**, 224 (1979).
- [7] - K. Lindquist, M. Stephens e C. Weiman, *Phys. Rev. A* **46**, 4082 (1992).
- [8] - N. Sagna, G. Dudley e P. Thomann, *J. Phys. B* **28**, 3213 (1995).
- [9] - P. Farrell, W. McGillivray e M. Standage, *Phys. Rev. A.* **37**, 4240 (1988).
- [10] - D. M. B. P. Milori, M. T. Araújo, I. Guedes, S. C. Zílio e V. S. Bagnato, aceito para publicação no *Braz. J. Phys*, outubro de 1996.

## ***CAPÍTULO III***

### 3.1 - Introdução

Neste capítulo demonstraremos como o modelo teórico descrito no Capítulo II, descreve de forma satisfatória os resultados experimentais obtidos em armadilhas magneto-ópticas convencional e com feixes auxiliares.

Para isto entretanto, discutiremos inicialmente vários aspectos importantes relacionados ao procedimento de simulação. Primeiro, apresentaremos uma breve discussão sobre o átomo de sódio (Na), incluindo uma descrição da estrutura interna do mesmo, evidenciando quais os níveis de energia a serem considerados no modelo de dois níveis. Posteriormente, mostraremos os resultados da simulação da armadilha magneto-óptica convencional em função de parâmetros como: gradiente de campo magnético, intensidade dos lasers, dessintonia e outros, comparando os mesmos com resultados experimentais constatando a eficiência do modelo empregado.

### 3.2 - O átomo de sódio (Na)

A princípio qualquer átomo pertencente a tabela periódica pode ser aprisionado pela AMO. Entretanto, dificuldades tanto do ponto de vista estrutural quanto experimental fez com que os primeiros trabalhos em desaceleração de feixes atômicos e aprisionamento de átomos neutros, usando a técnica da AMO, fossem realizados em átomos alcalinos.

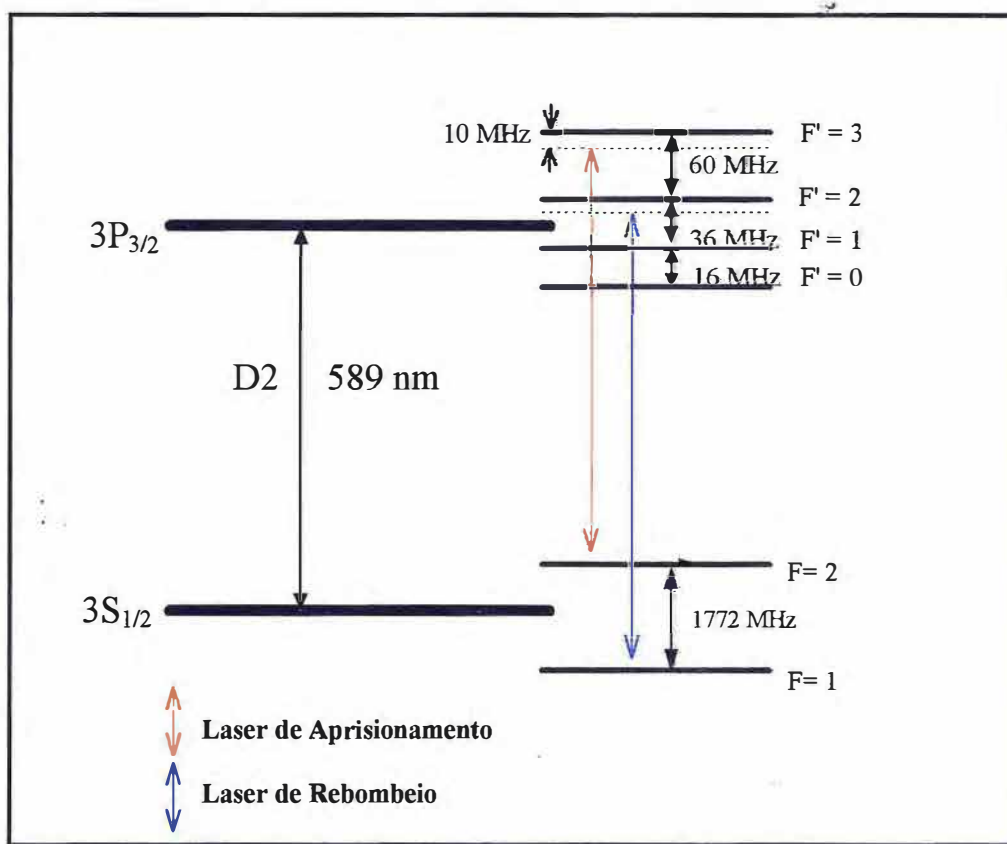
Os átomos deste grupo, com exceção do hidrogênio (H) que tem apenas um elétron, apresentam um conjunto de subcamadas totalmente cheias e um único elétron na subcamada  $s$ , mais externa.

Assim, de forma a simplificar o problema de determinar os níveis de energia (estados ligados), podemos considerar que as subcamadas totalmente preenchidas juntamente com o núcleo destes átomos formam um núcleo efetivo. Dessa forma, nosso problema torna-se semelhante ao do átomo de hidrogênio. A correção que temos que levar em conta é o efeito de blindagem do potencial Coulombiano do núcleo pela presença das subcamadas internas.

Neste trabalho iremos considerar o átomo de sódio (Na) devido ao fato que, os resultados experimentais que simularemos foram obtidos utilizando este átomo.

O átomo de sódio (Na) tem seu estado fundamental expresso em notação espectroscópica por  $3S_{1/2}$ . O primeiro estado excitado é formado por um dubleto expresso por  $3P_{1/2}$  e  $3P_{3/2}$ , que designam as linhas  $D_1$  e  $D_2$ , respectivamente. Usualmente, em trabalhos experimentais utiliza-se a linha  $D_2$  do Na. A Fig.3.1 mostra os níveis de energia  $3S_{1/2}$  e  $3P_{3/2}$  para o átomo de Na. Além destes níveis, são mostrados os níveis hiperfinos (F), relacionados aos efeitos spin-órbita eletrônico e nuclear. A princípio cada um destes níveis são  $(2F+1)$  vezes degenerados, porém como o átomo está imerso em um campo magnético externo, por efeito Zeeman esta degenerescência é removida.

Se escolhermos polarizações convenientes dos lasers, de forma a sintonizarmos a transição, por dipolo elétrico ( $\Delta m_f = \pm 1$ ),  $3S_{1/2}(F=2, m_f=2) \rightarrow 3P_{3/2}(F=3, m_f=3)$  temos em muito boa aproximação um sistema de dois níveis. Entretanto, do ponto de vista realístico, devido a imperfeições no aparato experimental e na própria natureza estatística do processo de absorção laser  $\rightarrow$  átomo, o átomo que inicialmente efetua transições cíclicas  $3S_{1/2}(F=2, m_f=2) \rightarrow 3P_{3/2}(F=3, m_f=3)$ , pode



**Fig 3.1 - Níveis de energia do átomo de sódio ( $\text{Na}$ ) e os lasers sintonizados nos respectivos níveis envolvidos.**

eventualmente efetuar uma transição indevida indo por exemplo, para o nível  $3P_{3/2}(F=3, m_f=2)$  que dista apenas  $60 \text{ MHz}$  em energia do nível  $3P_{3/2}(F=3, m_f=3)$ , lesando assim o processo de aprisionamento. Com isto, tanto em experimentos de desaceleração quanto de aprisionamento de átomos neutros, devemos corrigir esta perda para aumentarmos a eficiência destes processos.

Uma das formas de se efetuar esta correção é introduzir conjuntamente aos lasers sintonizados na linha  $D_2$ , um outro conjunto de lasers sintonizados na transição  $3S_{1/2}(F=1, m_f=1) \rightarrow 3P_{3/2}(F=2, m_f=2)$ , de forma que possamos recuperar o átomo que por efetuar uma transição indevida termina no nível  $3S_{1/2}(F=1, m_f=1)$ . Este conjunto adicional de lasers é denominado de conjunto de lasers de rebombeio como mostrado

na Fig.3.1. Com a inclusão destes lasers de rebombeio podemos ainda considerar em muito boa aproximação, o átomo na AMO como um sistema de dois níveis uma vez que o rebombeio é apenas um artifício experimental e não está incluído na simulação.

### 3.3 - Simulação da AMO convencional

O primeiro estudo completo de como varia o número de átomos aprisionados em uma AMO convencional foi efetuado por Lindquist *et al* [1] em átomos de césio (Cs). Nesta referência os autores mostram como o número varia em função dos parâmetros usuais utilizados na AMO como por exemplo: gradiente de campo magnético, intensidade e dessintonia dos lasers. Os resultados teóricos obtidos a partir do modelo de captura 1-D, são ajustados por uma constante de normalização e comparados aos resultados experimentais.

O primeiro trabalho quantitativo em átomos de Na foi realizado por Milori e colaboradores [2] onde foi estudado o comportamento do número de átomos e do raio da nuvem observada em função dos parâmetros utilizados na AMO. Como já mencionamos no Capítulo II, o valor do raio da nuvem é um vínculo a ser satisfeito em nossas simulações. Dessa forma, iremos abaixo mostrar através de um modelo simples como calcular este valor.

#### 3.3.1 - Cálculo do raio da nuvem de átomos aprisionados.

Nesta seção, discutiremos como calcular o raio da nuvem de átomos aprisionados a partir do limite de temperatura dado pela teoria



Doppler, que considera que o resfriamento dos átomos ocorre apenas pelo recuo devido à absorção de fótons do campo de radiação.

A temperatura mínima dos átomos aprisionados pode ser obtida através de um procedimento simples desenvolvido por Bagnato e Zílio [3]. Na Ref.[3] os autores mostram que no equilíbrio, a energia cinética mínima dos átomos no interior da nuvem é dada por

$$K_{min} = \frac{3}{4} \hbar \frac{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)}{\Delta} (1+s)^2 \quad (3.1)$$

onde  $s$  é o parâmetro de saturação da transição atômica dado por

$$s = \frac{\Omega_0^2/2}{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)} \quad (3.2)$$

Como a força de pressão de radiação e a presença do campo magnético faz com que o átomo fique sujeito a um potencial que em primeira aproximação pode ser considerado harmônico, vamos supor que no limite do resfriamento o átomo fique oscilando no poço como um sistema conservativo. Utilizando o teorema da equipartição de energia podemos escrever

$$K_{min} = \frac{1}{2} k \langle r^2 \rangle \quad (3.3)$$

ou seja

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{4} \frac{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)^2}{\Delta^2} \frac{(1+s)^4}{s} \frac{1}{k\Gamma(g_i)} \quad (3.4)$$

onde usamos o fato que a constante de mola  $k$  é expressa por (veja Apêndice A)

$$k = \frac{16\hbar k_\lambda \Gamma(g_i) |\Delta| \Omega_0^2}{(4\Delta^2 + \Gamma^2 + 2\Omega_0^2)^2} \quad (3.5)$$

Da Eq.(3.4), vemos então que podemos calcular o raio da nuvem de átomos aprisionados em função dos vários parâmetros da AMO. Na Ref. [2] Milori *et al* estudaram o comportamento do raio da nuvem de átomos aprisionados para as duas possíveis configurações de sintonia dos lasers de aprisionamento e rebombeio para o átomo de Na.

O átomo de Na é o único elemento entre os alcalinos que permite a observação de duas nuvens de átomos aprisionados correspondentes a duas sintonias diferentes.

Na primeira, denominada tipo I, o laser de aprisionamento está sintonizado na transição  $3S_{1/2}(F=2, m_f=2) \rightarrow 3P_{3/2}(F=3, m_f=3)$  e o laser de rebombeio está sintonizado na transição  $3S_{1/2}(F=1, m_f=1) \rightarrow 3P_{3/2}(F=2, m_f=2)$  enquanto que na segunda configuração, denominada tipo II, o laser de aprisionamento está sintonizado na transição  $3S_{1/2}(F=1, m_f=1) \rightarrow 3P_{3/2}(F=0, m_f=0)$  e o laser de rebombeio está sintonizado na transição  $3S_{1/2}(F=2, m_f=1) \rightarrow 3P_{3/2}(F=2, m_f=2)$ . A nuvem formada na configuração tipo I apresenta um menor raio e número de átomos aprisionados que a nuvem formada na configuração tipo II. Entretanto,

sua densidade de átomos é maior. Neste trabalho, como já mencionamos, consideramos apenas a configuração (ou armadilha) tipo I.

Na Tabela 3.1 abaixo, mostramos como varia teoricamente o raio da nuvem de átomos aprisionados com o gradiente de campo magnético. Observamos que a medida em que o gradiente de campo magnético aumenta, o raio da nuvem diminui. Este comportamento é esperado pois, fisicamente, aumentando o gradiente de campo magnético, aumentamos a constante de mola da armadilha o que faz com que os átomos aprisionados oscilem mais próximos do centro da armadilha. Se aumentarmos o gradiente de campo a valores acima de 20 G/cm, experimentalmente é observada que a nuvem colapsa e desaparece. Teoricamente este seria o caso no limite  $g_x$  tendendo ao infinito!

<i>Raio (cm)</i>	<i><math>g_x</math> (G/cm)</i>
0,027	5
0,022	7,5
0,020	10
0,017	12,5
0,016	15
0,014	17,5
0,013	20

*Tab.3.1 - Dependência do raio médio da nuvem de átomos aprisionados na armadilha tipo I em função do gradiente de campo magnético. Os parâmetros experimentais foram:  $\Delta = -10$  MHz e  $\Omega_0 = 23,46$  MHz.*

Na Tabela 3.2 mostramos a variação do raio da nuvem de átomos aprisionados agora em função da frequência de Rabi. Observamos que o raio da nuvem cresce com o aumento da frequência de

Rabi. Este comportamento concorda com o experimental apenas para grandes valores da frequência de Rabi de acordo com o resultado observado experimentalmente por Milori *et al* [2].

<i>Raio (cm)</i>	<i><math>\Omega</math> (MHz)</i>
0,008	10,49
0,010	14,84
0,013	18,17
0,016	20,98
0,017	22,26
0,020	23,46

*Tab.3.2 - Dependência do raio médio da nuvem de átomos aprisionados na armadilha tipo I em função da frequência de Rabi. Os parâmetros experimentais foram:  $\Delta = -10$  MHz e  $g_x = 10$  G/cm.*

### 3.3.2 - Cálculo do número de átomos aprisionados.

Uma vez de posse dos valores do raio da nuvem de átomos aprisionados, podemos usar o modelo descrito na Seção 2.3 para calcularmos o número de átomos aprisionados na AMO convencional. Vamos considerar em nossa simulação quatorze átomos cujas configurações espaciais para os vetores posição e velocidade são mostrados na Tabela 3.3 abaixo.

A Fig.3.2(a) mostra os resultados experimentais obtidos por Milori *et al* [2] para variação do número de átomos em função do gradiente de campo magnético e a Fig.3.2(b) os respectivos resultados obtidos da simulação.

ÁTOMOS	$r$ (cm)	$\theta$	$\phi$	$\varphi$	$\delta$
1	0,6	0	0	0	0
2	0,6	90	0	0	180
3	0,6	90	45	0	180
4	0,6	90	90	0	180
5	0,6	0	0	0	1
6	0,6	0	0	0	2
7	0,6	1	0	0	0
8	0,6	2	0	0	0
9	0,6	3	0	0	0
10	0,6	0	0	5	1
11	0,6	0	0	10	1
12	0,6	0	0	15	1
13	0,6	0	0	30	1
14	0,6	0	0	45	1

*Tab 3.3 - Relação dos 14 átomos usados na simulação com suas respectivas configurações espaciais para os vetores posição e velocidade.*

Observamos das Figs. 3.2(a) e 3.2(b) que a medida em que aumentamos o gradiente de campo magnético, o número de átomos aprisionados começa a aumentar atingindo um máximo e depois diminui. Este comportamento é facilmente explicado pois, para gradientes de campos baixos a força restauradora é pequena e apenas átomos com baixas velocidades são capturados. Aumentando o gradiente de campo, aumentamos a força restauradora e por conseguinte átomos mais rápidos podem ser capturados levando a um aumento considerável no número  $N$ , consequência da dependência na quarta potência em  $v_c$ . A partir deste ponto, o gradiente de campo torna-se tão acentuado que os átomos não se mantêm em ressonância ao longo da trajetória de desaceleração e devido ao aumento na constante elástica o poço fica mais estreito, acarretando na diminuição do tempo de interação efetivo com o átomo. Em consequência destes fatos o número diminui.

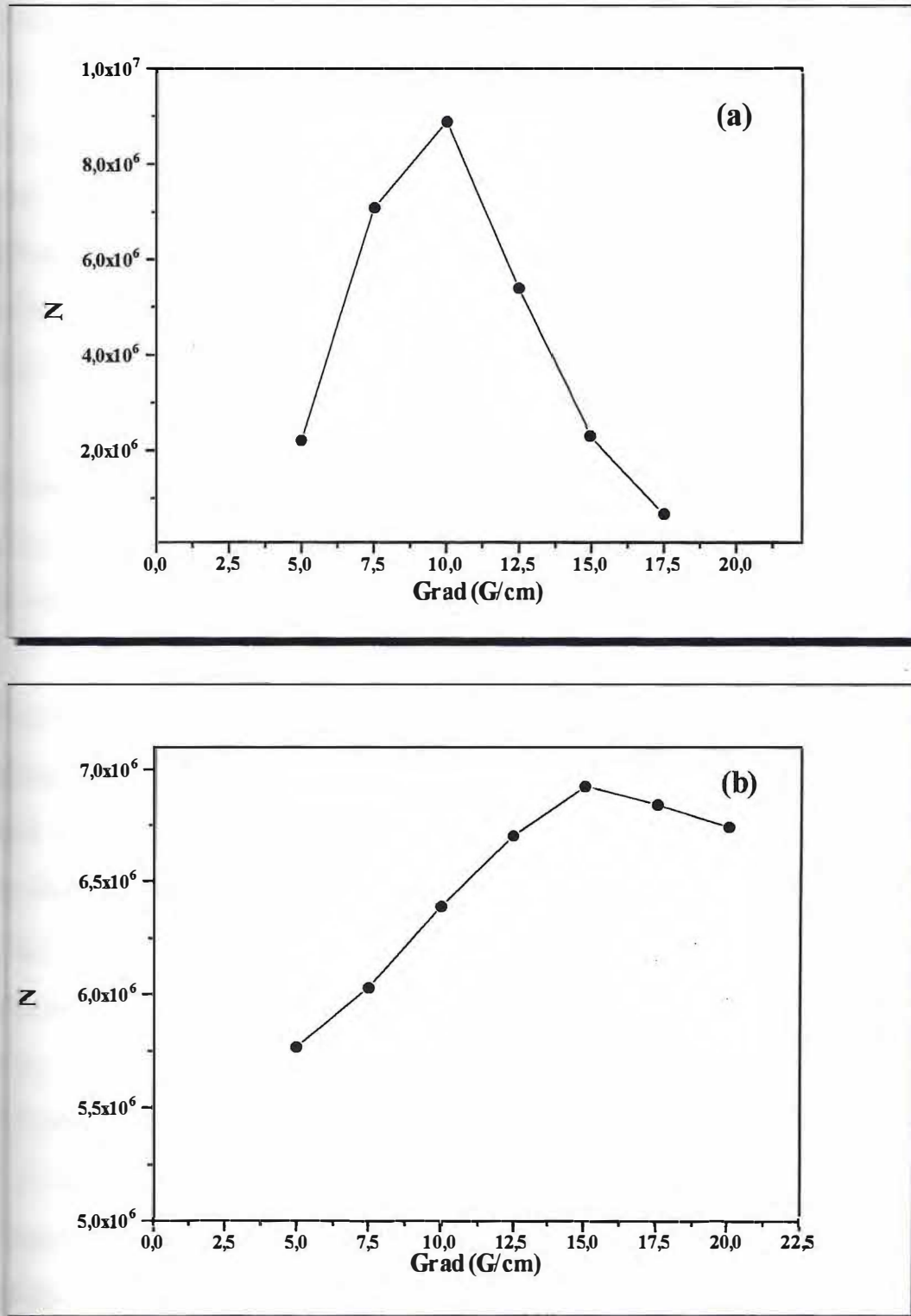


Fig 3.2 - Valores para o número de átomos aprisionados em função do gradiente de campo magnético. Os parâmetros utilizados foram:  $w=0,6\text{cm}$ ,  $\Omega=23,46\text{MHz}$  e  $\Delta=-10\text{MHz}$ . (a) valores experimentais e (b) valores simulados.

Embora o modelo teórico descreva razoavelmente bem o comportamento do número de átomos aprisionados em função do

gradiente de campo magnético, ele discorda consideravelmente quanto aos valores absolutos, além de apresentar o ponto de máximo para  $N$  deslocado. Estas diferenças surgem, é claro, da grande simplificação contida no modelo de dois níveis quando se tenta descrever sistemas complexos. Devemos observar que embora existam discrepâncias os números concordam em ordem de grandeza com os resultados experimentais.

Na Fig.3.3(a) apresentamos os resultados experimentais obtidos por Milori *et al* [2] para a variação do número de átomos aprisionados em função da frequência de Rabi e a Fig.3.2(b) os resultados obtidos a partir da simulação.

Observamos das Figs. 3.2(a) e 3.2(b) que ao aumentarmos a frequência de Rabi temos um aumento no número de átomos aprisionados. Este aumento é observado até valores da ordem de 18 MHz para a frequência de Rabi, onde a partir deste o número de átomos se mantém aproximadamente constante. Os resultados não concordam em valores absolutos mas também estão em pleno acordo com respeito a ordem de grandeza. Como conclusão das simulações acima discutidas, vemos que o modelo de dois níveis utilizado, mesmo em 3D, não descreve de forma precisa o comportamento do número de átomos aprisionados em função dos parâmetros da AMO. Entretanto, como iremos ver, ela descreve de forma precisa os resultados para AMO com feixes auxiliares.

#### 3.4 - Tentativas para o aumento do número de átomos aprisionados na AMO.

Como vimos, se apenas variarmos o gradiente de campo

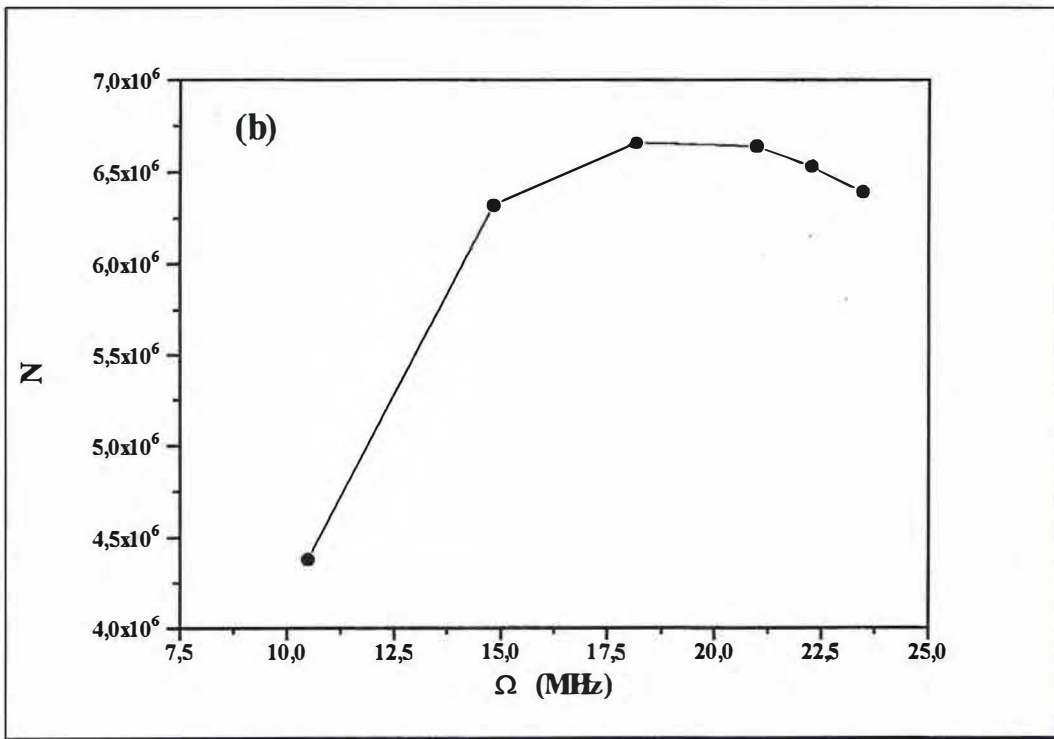
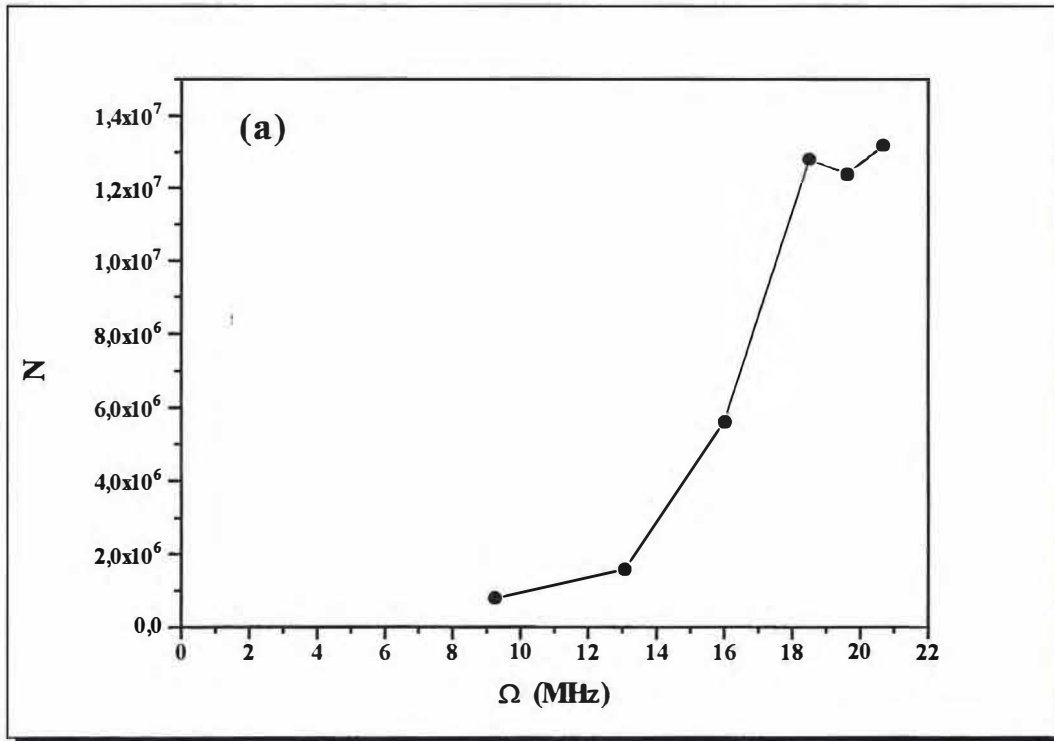


Fig.3.3 - Valores para o número de átomos aprisionados em função da frequência de rabi. Os parâmetros utilizados foram:  $w=0,6$  cm,  $\Delta=-10$  MHz e  $g_x=g_y=g_z/2 = 10$  G/cm. (a) valores experimentais e (b) valores simulados.



magnético ou a frequência de Rabi não conseguiremos um aumento apreciável do número de átomos aprisionados na AMO. Dessa forma, precisamos tentar variar outros parâmetros que possibilitem o aumento do número  $N$ .

Uma primeira possibilidade seria aumentarmos a dessintonia dos lasers de aprisionamento, haja visto que pela condição de ressonância devido ao efeito Doppler,  $|\Delta|=kv$ , quanto maior for a dessintonia para o vermelho da frequência de transição atômica, maior a velocidade dos átomos possíveis de serem aprisionados. No entanto, isto não se verifica como podemos observar da Fig.3.4, onde temos a variação do número de átomos aprisionados, que é proporcional ao sinal de intensidade (fluorescência), em função da dessintonia dos lasers obtida por Milori *et al* [2]. Observamos que a medida que a dessintonia varia do azul para o vermelho da transição atômica, o número de átomos aprisionados começa a aumentar, passa por um ponto de máximo e depois decresce.

A explicação para este comportamento pode ser entendida a partir da variação da constante elástica  $k$  em função da dessintonia dos lasers de aprisionamento, como mostrado na Fig.3.5.

Podemos observar da Fig.3.5 que para  $|\Delta|=0$  a constante elástica  $k$  é zero, o que implica que não temos força de aprisionamento presente na armadilha com isso podemos aprisionar apenas átomos com  $v=0$ ! A medida em que  $|\Delta|$  varia, os átomos passam a satisfazer a condição de ressonância e temos um aumento no valor da constante elástica  $k$  conseqüentemente na força de aprisionamento e, para  $|\Delta|=10\text{MHz}$ , temos o maior valor para a constante elástica  $k$  e a máxima eficiência de funcionamento da AMO. A partir deste ponto a constante

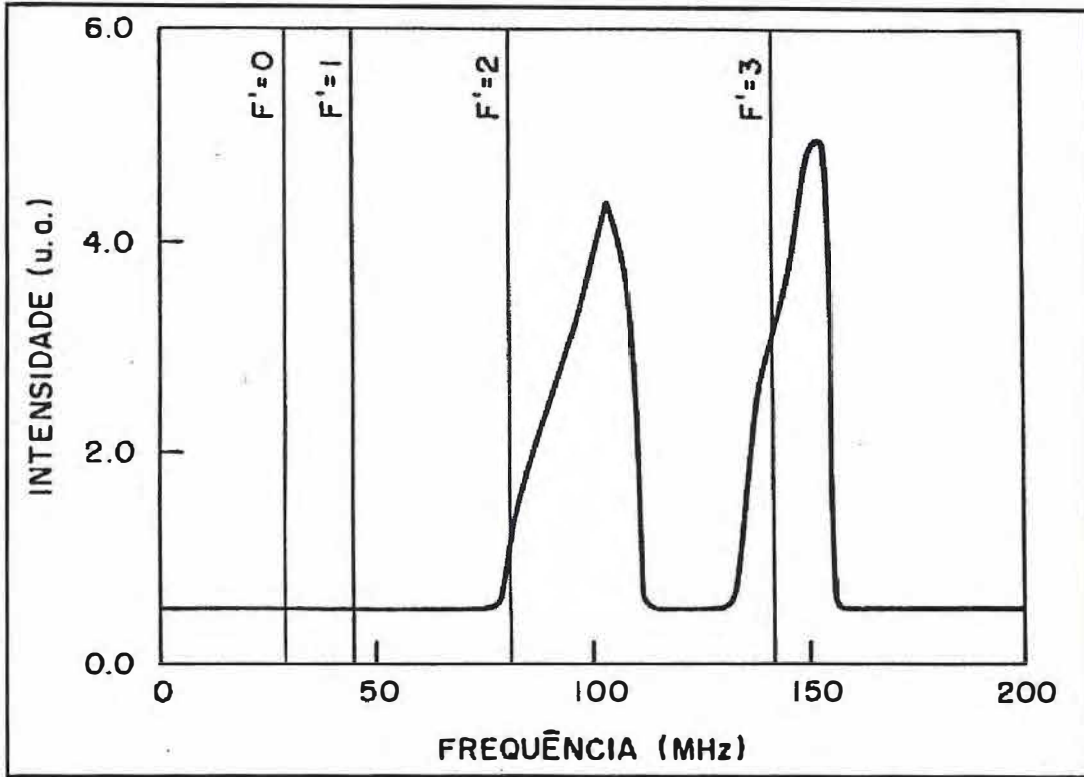


Fig.3.4 - Medida da fluorescência das nuvens de átomos aprisionados como função da frequência dos lasers.

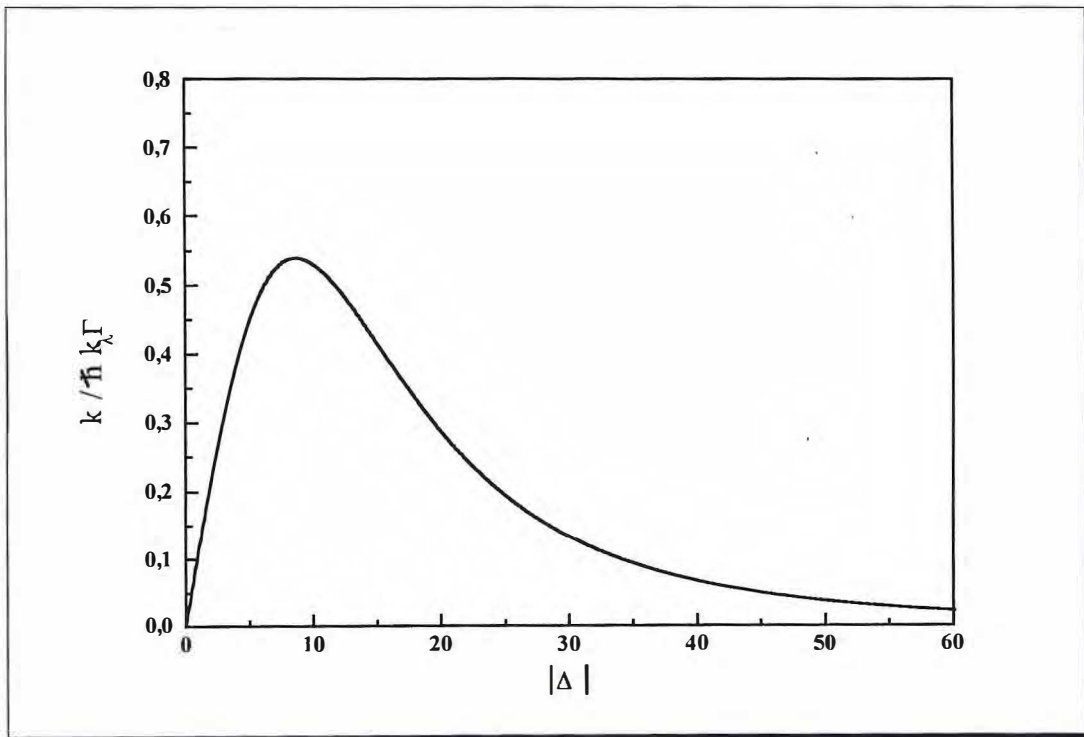


Fig.3.5 - Variação da constante elástica  $k$  em função da dessintonia dos feixes de aprisionamento. Os parâmetros utilizados foram:  $\Omega=23.46\text{MHz}$  e  $g_x = g_y = g_z/2 = 10 \text{ G/cm}$ .

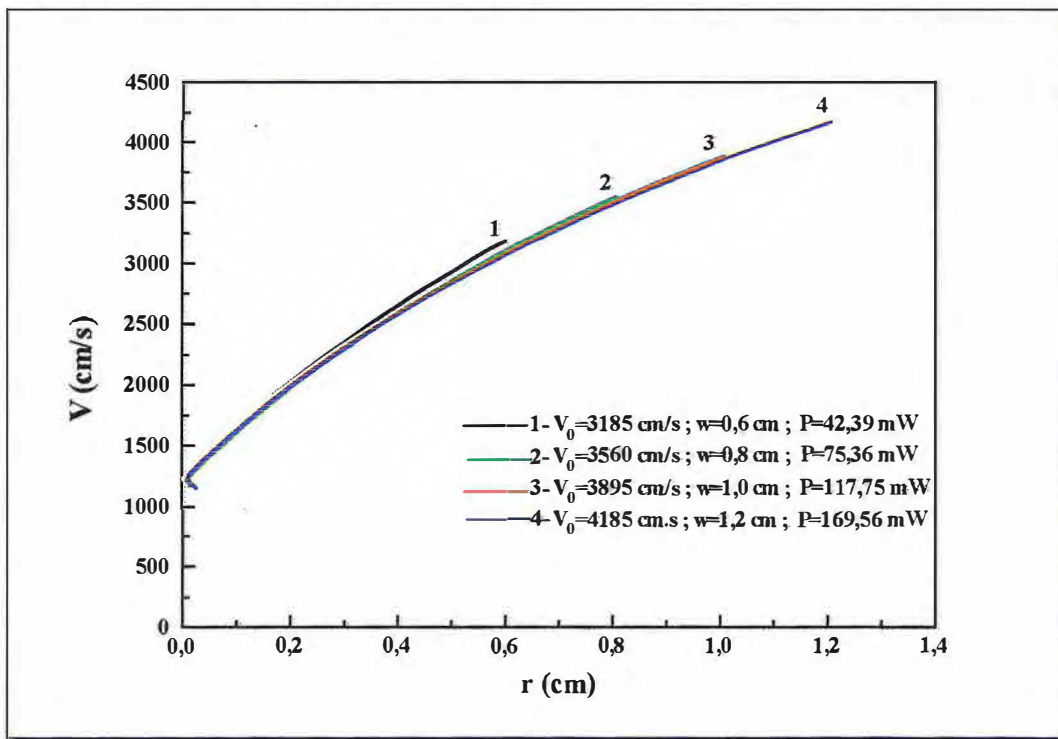
elástica diminui, acarretando assim na diminuição da força de aprisionamento.

Uma outra possibilidade seria, como primeiramente proposto por Gibble *et al* [4], aumentarmos a cintura dos feixes de aprisionamento e assim o tempo de interação entre o átomo e os feixes de aprisionamento. Para o átomo de césio Cs, cuja intensidade de saturação é de apenas  $I_s=1 \text{ mW/cm}^2$ , podemos com os lasers disponíveis, aumentarmos a cintura dos feixes em cerca de uma ordem de grandeza e assim observarmos um aumento de 200 vezes no número de átomos aprisionados. Para átomos de sódio (Na) esta técnica não é muito boa, pois devido ao fato que temos que manter o mesmo parâmetro de saturação para a transição atômica envolvida, ao aumentarmos a cintura dos feixes devemos aumentar a potência dos lasers. Do ponto de vista teórico isto não tem problema, porém, do ponto de vista experimental existem alguns inconvenientes. Por exemplo, nos experimentos realizados por Milori *et al* [4], utilizou-se apenas um laser de corante com potência de saída em torno de 500 mW, para deste derivar-se os seis lasers de aprisionamento. De forma que após passar por todo aparato óptico necessário para produzir a armadilha, cada feixe tinha no máximo 60 mW de potência.

Na Fig.3.6, mostramos um diagrama no espaço de fase que nos dá a idéia de como a potência necessária para manter o parâmetro de saturação da transição atômica cresce a medida em que aumentamos a cintura dos feixes lasers. O raio da nuvem considerado nesta simulação foi  $r_c=0.02 \text{ cm}$ .

Os índices 1,2,3 e 4 correspondem aos seguintes valores de cintura dos feixes de aprisionamento  $w=0,6 \text{ cm}$ ,  $w=0,8 \text{ cm}$ ,  $w=1,0 \text{ cm}$  e

$w=1,2$  cm respectivamente. Estes valores são tomados como a posição inicial do átomo (3) da Tabela.3.3.



**Fig.3.6 - Diagrama no espaço de fase mostrando como a potência aumenta quando variamos a cintura dos feixes de lasers. Os parâmetros utilizados foram:  $\Omega=23,46$  MHz,  $\Delta=-10$  MHz e  $g_x=g_y=g_z/2=10$  G/cm.**

Assim, com o aumento da cintura dos feixes vemos que não é possível, dentro das limitações experimentais, aumentar significativamente o número  $N$  de átomos aprisionados na AMO.

A saída para esta limitação experimental é, de acordo com os trabalhos iniciais de Sinclair *et al* [5] e Flemming *et al* [6], conjugar as duas propostas anteriores, ou seja, nos valermos do fato que aumentando a dessintonia e a cintura dos feixes, aumentamos o número de átomos na AMO. Assim a idéia básica é adicionarmos a um conjunto de feixes de aprisionamento com dessintonia e frequência de Rabi de forma a maximizar  $N$ , um outro conjunto de feixes, denominados de feixes de desaceleração, cuja frequência é variável para podermos aumentar o

deslocamento por efeito Doppler e conseqüentemente desacelerar átomos mais rápidos.

Em essência, os trabalhos de Sinclair *et al* [5] e Flemming *et al* [6] são muito parecidos. A diferença básica existente entre eles é que na Ref.[6], os feixes de aprisionamento e desaceleração não se superpõem espacialmente. Embora o modelo para descrever a captura de átomos desenvolvido neste trabalho, possa simular os resultados experimentais obtidos nas Refs. [5] e [6], iremos nos ater apenas ao trabalho de Flemming *et al*, pois de acordo com os dados por eles apresentados, sabemos qual o raio da nuvem de átomos aprisionados, um dado extremamente importante para se fazer a simulação, em cada condição de dessintonia dos feixes de desaceleração, também denominados de auxiliar.

De acordo com a Ref.[6], temos dois feixes concêntricos e não superpostos como mostra a Fig.3.7 abaixo.

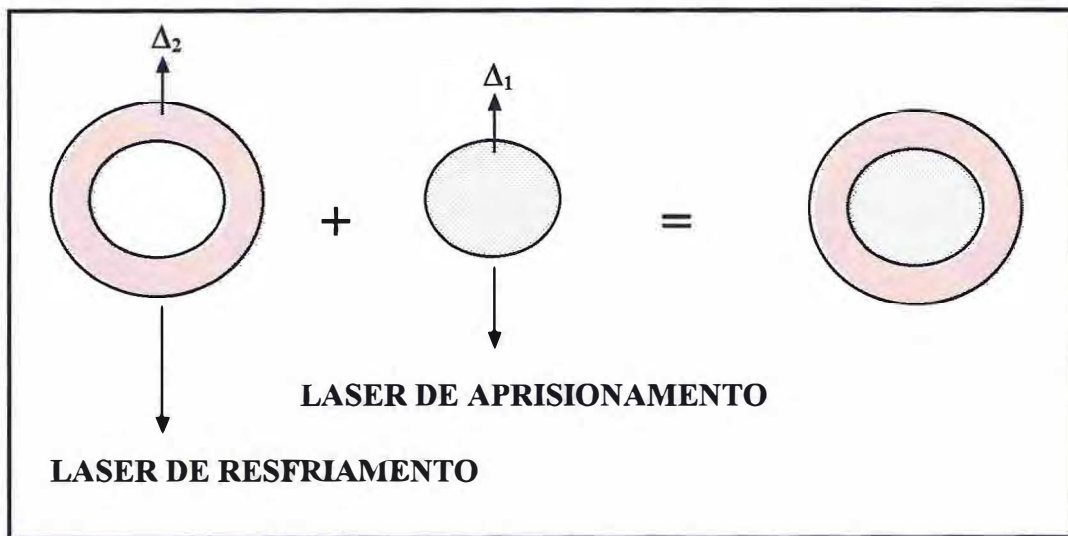
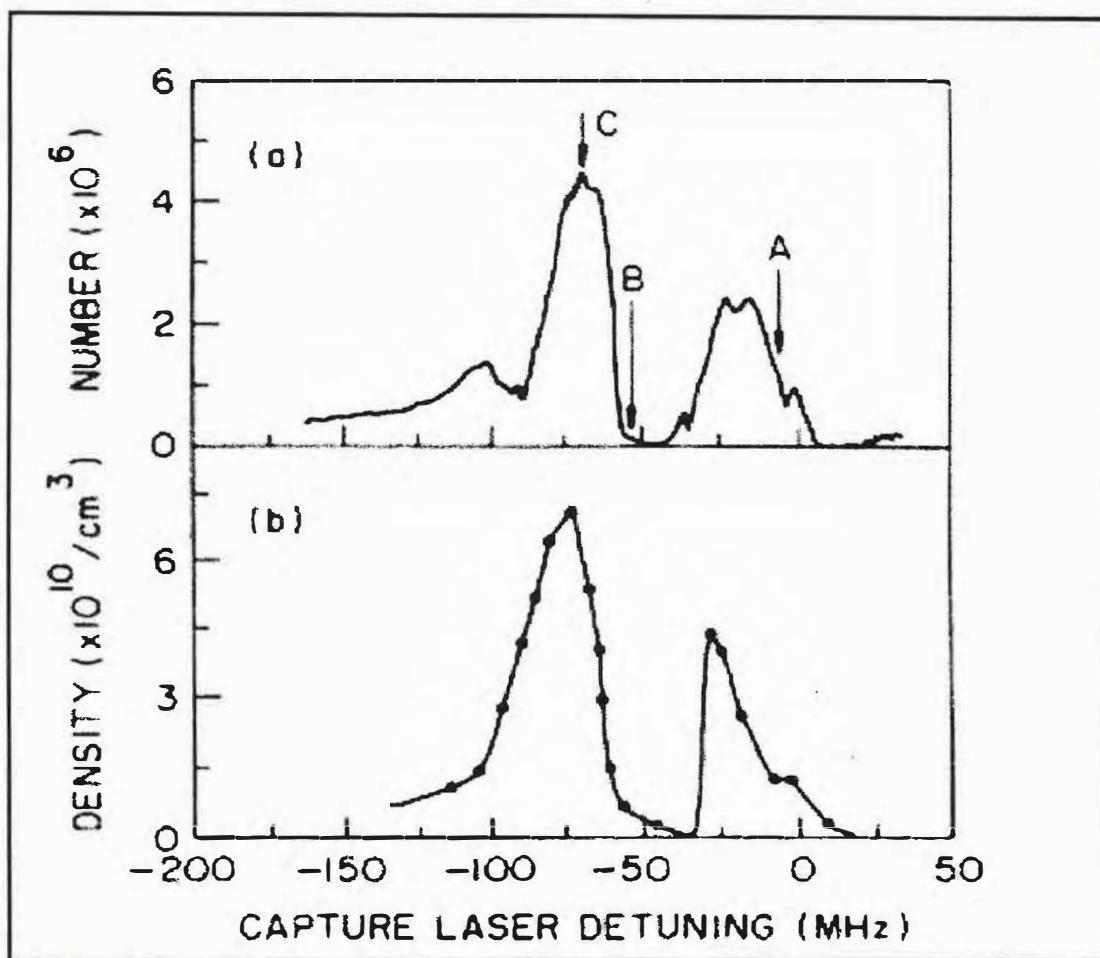


Fig.3.7 - Geometria dos feixes lasers usados para aumentar o número de átomos na AMO.

O feixe interno (aprisionamento) tem intensidade  $I_1=45 \text{ mW/cm}^2$  ( $\Omega=24,9 \text{ MHz}$ ), dessintonia  $\Delta_1= -10 \text{ MHz}$  (configuração tipo I) e cintura  $w_1=0,35$

cm, enquanto que o feixe externo (resfriamento) tem a mesma intensidade ( $I_1=I_2$ ), cintura  $w_2=0,6$  cm e dessintonia variável. Como podemos observar da Fig.3.8, ao variarem a dessintonia do laser auxiliar, Flemming *et al* observaram um espectro extremamente interessante da variação do número e densidade de átomos aprisionados.



**Fig.3.8 - Dependência do número (a) e da densidade (b) de átomos aprisionados como função da dessintonia dos feixes auxiliares.**

O ponto A corresponde a situação na qual ambos os feixes são sintonizados na configuração tipo I, e uma vez que possuem a mesma intensidade, isto é análogo a termos um só feixe na AMO. Este ponto é usado como referência para o número e a densidade de átomos aprisionados, de forma que para frequências na qual a fluorescência é

maior do que no ponto A, temos um aumento no processo de captura enquanto que para frequências menores temos uma diminuição no mecanismo de captura. Definindo o fator de ganho  $\eta$  como a razão entre o número de átomos para uma dada frequência do feixe auxiliar  $\Delta_2$  e o número de átomos para  $\Delta_2 = -10$  MHz, correspondendo ao ponto A, podemos caracterizar o acréscimo ou decréscimo no processo de captura. Assim, os resultados obtidos mostram que a mudança líquida é devido substancialmente ao uso de dois lasers com dessintonias diferentes.

De acordo com a Fig.3.8, quando a dessintonia do feixe auxiliar é menor que -10 MHz, observa-se um aumento na taxa de captura e conseqüentemente do número de átomos. Este aumento atinge um máximo para  $\Delta_2 = -25$  MHz e então decresce até um valor mínimo para  $\Delta_2 = -45$  MHz. A explicação para este fato é que para  $\Delta_2 < -25$  MHz as frequências dos lasers auxiliares estão para o azul da transição  $3S_{1/2}(F=2) \rightarrow 3P_{3/2}(F=2)$ . Visto que lasers sintonizados para o azul aceleram os átomos ao invés de desacelerá-los, temos então uma redução na taxa de captura uma vez que o laser estar expelindo os átomos da armadilha.

Quando a dessintonia do laser auxiliar está para o vermelho do ponto B, o número de átomos volta a aumentar, uma vez que a condição de ressonância para a configuração tipo II passa a ser satisfeita. A partir deste ponto a situação de funcionamento da AMO é a mais eficaz pois, os átomos são desacelerados pelos feixes auxiliares sintonizados na configuração tipo II e aprisionados pelos feixes originais (aprisionamento) sintonizados na configuração tipo I. O valor máximo para o número de átomos ocorre para  $\Delta_2 \approx -75$  MHz (ponto C). Mais uma vez, quando  $\Delta_2 < -75$  MHz, os lasers passam a estar sintonizados para o azul da transição  $3S_{1/2}(F=2) \rightarrow 3P_{3/2}(F=1)$  aquecendo os átomos e

ocasionando a diminuição do número  $N$ . Finalmente, quando  $\Delta_2 < -100$  MHz, efetivamente temos apenas a presença dos lasers originais.

Pela discussão acima podemos observar que o efeito de adicionar um outro conjunto de feixes lasers na AMO convencional leva a um aumento considerável do número de átomos aprisionados  $N$ .

Para simularmos completamente todos os resultados exibidos na Fig.3.8, devemos levar em conta um modelo bem mais complexo que o apresentado no Cap.II, onde agora todos os níveis hiperfinos e seus respectivos subníveis Zeeman devam ser considerados. Em outras palavras devemos considerar um modelo de multiníveis. Entretanto no intervalo  $-25 \text{ MHz} \leq \Delta_2 \leq 0$ , o átomo de sódio Na comporta-se essencialmente como um sistema de dois níveis, como mostramos na Seção 3.3, o que nos possibilita utilizar o modelo desenvolvido no Cap.II.

Na Fig.3.9 mostramos claramente, através do diagrama do espaço de fase, que ao variarmos a dessintonia dos feixes auxiliares (resfriamento) podemos capturar átomos mais rápidos e assim aumentar o número  $N$ .

Observe que a medida que variamos  $\Delta_2$ , começamos a reduzir a velocidade do átomo até o ponto em que os dois vínculos que garantem que o átomo seja capturado ( $v \leq 1178 \text{ cm/s}$  e  $r \leq 0,06 \text{ cm}$ ), são satisfeitos.

Na Fig.3.10 mostramos a simulação obtida utilizando 14 átomos para o resultados mostrados na Ref. [6]. O raio da nuvem de átomos observado pode ser diretamente calculado a partir da Fig.3.6(b) e é constante para todos os valores de  $\Delta_2$ , sendo igual a  $r_c \approx 0,02 \text{ cm}$ , pois após serem desacelerados, os átomos interagem apenas com os feixes internos que determinam assim o raio da nuvem formada pelos átomos



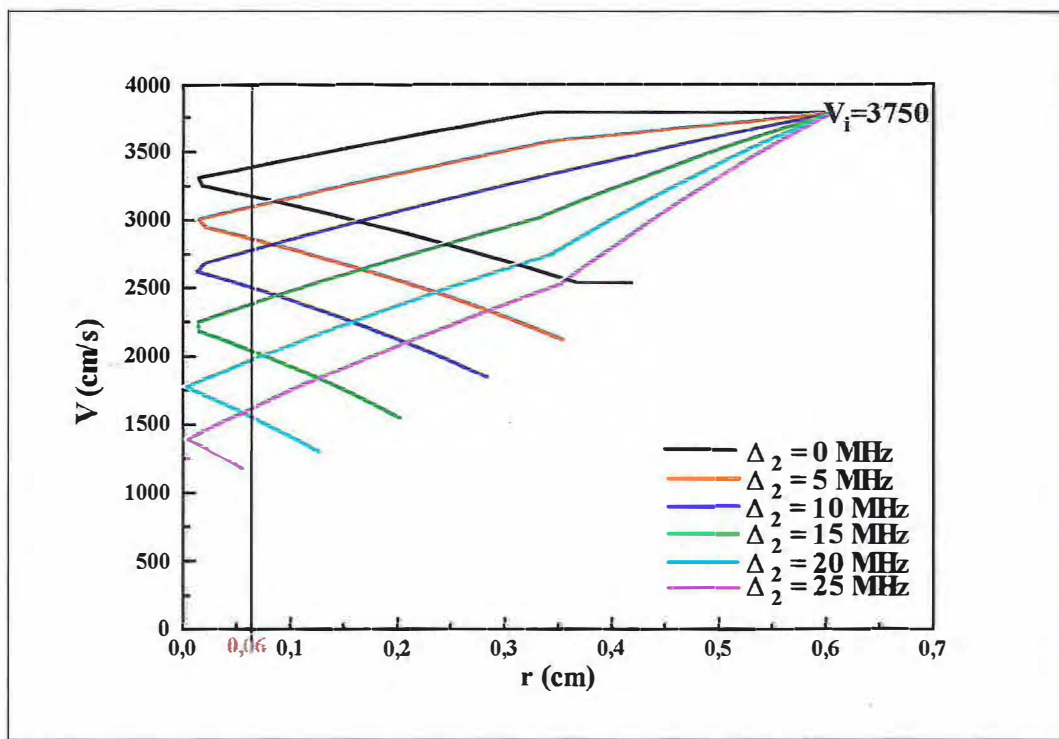
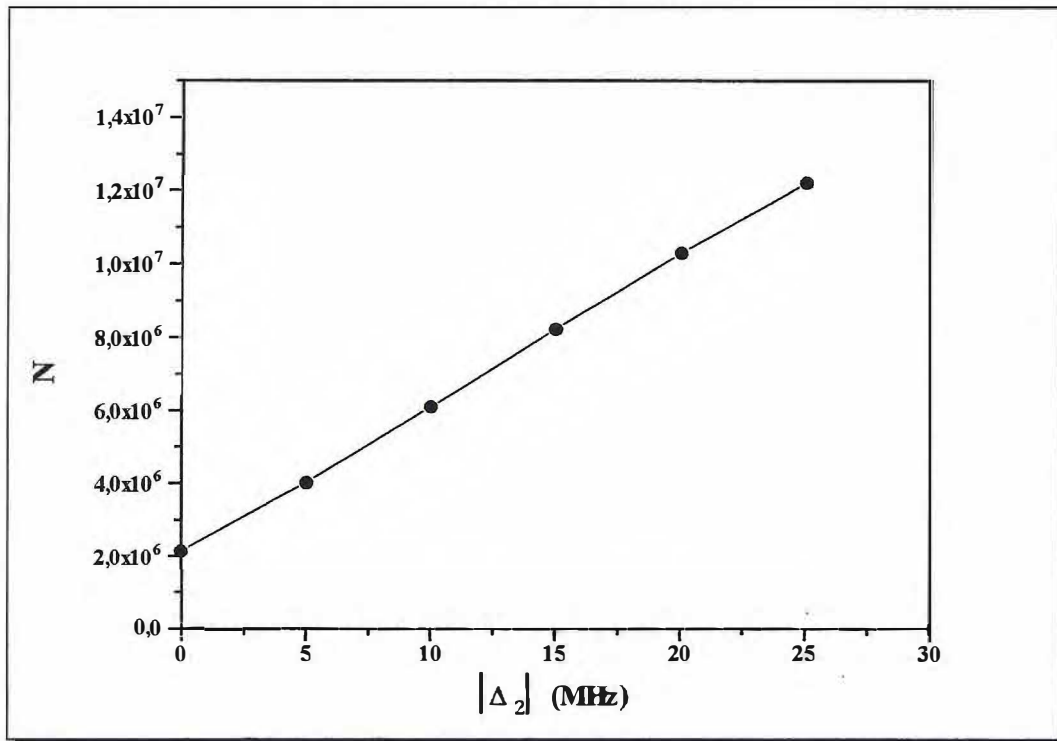


Fig.3.9 - Diagrama no espaço de fase mostrando que ao variarmos  $\Delta_2$  conseguimos aprisionar um átomo (3) com velocidade inicial  $v = 3750$  cm/s. Os parâmetros usados na simulação foram:  $w_1 = w_2 = 0,6$  cm,  $\Delta_1 = -10$  MHz,  $\Omega_1 = \Omega_2 = 24,9$  MHz e  $g_x = g_y = g_z/2 = 10$  G/cm.

internos que determinam assim o raio da nuvem formada pelos átomos aprisionados. Para  $\Delta_2 = 0$ , o deslocamento Doppler é zero e consequentemente os átomos são desacelerados e capturados apenas pelos feixes internos (originais). Neste caso temos  $\bar{v}_c = 2049,7$  cm/s e  $N = 2,15 \times 10^6$ . Para  $\Delta_2 = -5$  MHz, o deslocamento Doppler é diferente de zero e assim a taxa de captura aumenta levando a um aumento do número de átomos aprisionados, e neste caso  $\bar{v}_c = 2396,1$  cm/s e  $N = 4,02 \times 10^6$ . Para  $\Delta_2 = -10$  MHz,  $-15$  MHz,  $-20$  MHz e  $-25$  MHz temos respectivamente:  $\bar{v}_c = 2658,2$  cm/s e  $N = 6,09 \times 10^6$ ,  $\bar{v}_c = 2867,5$  cm/s e  $N = 8,24 \times 10^6$ ,  $v_c = 3035,4$  e  $N = 1,03 \times 10^7$  e  $v_c = 3164$  e  $N = 1,22 \times 10^7$ .

Observe que temos uma diferença entre os resultados experimentais e teóricos de cerca de uma ordem de grandeza. A explicação para este fato pode ser devido ou a um erro na determinação

experimental do número de átomos aprisionados ou na temperatura da célula utilizada por nós na simulação. Entretanto, se normalizarmos o ponto experimental equivalente a  $\Delta_2 = -10$  MHz pelo valor encontrado por Milori *et al* [2] que é de aproximadamente  $N = 8,9 \times 10^6$ , teremos um fator multiplicativo  $\varepsilon = 4$ . Com isto os resultados concordam entre si dentro de um erro menor que 5%.



*Fig.3.10 - Variação do número de átomos aprisionados em função da dessintonia dos feixes auxiliares. Os parâmetros utilizados foram:  $\Delta_1 = -10$  MHz,  $\Omega_1 = \Omega_2 = 24,9$  MHz,  $w_1 = w_2 = 0,6$  cm,  $xw_3 = 0,35$  cm e  $g_x = g_y = g_z/2 = 10$  G/cm.*

Na Tabela (3.5) apresentamos os resultados teóricos e experimentais para o fator de ganho  $\eta$ . Observamos com exceção do ponto referente a  $\Delta_2 = 0$ , uma ótima concordância entre os valores simulados e experimentais. A explicação para o pequeno erro obtido nesta simulação em relação as simulações apresentadas nas Figs. 3.2 e 3.3 é atribuída ao fato de que AMO com feixes auxiliares temos sempre

um conjunto de laser fixo de forma a maximizar a eficiência da configuração tipo I. Essencialmente a variação da dessintonia dos feixes auxiliares modifica apenas o termo de resfriamento Doppler. Esta técnica é de certa forma similar a utilizarmos inicialmente na armadilha um feixe de desaceleração.

$\Delta_2$	$\eta_{\text{teórico}}$	$\eta_{\text{exp}}$
0	0,35	0,52
-5	0,66	0,76
-10	1	1
-15	1,35	1,36
-20	1,69	1,76
-25	2,00	1,92

*Tab.3.5 - Valores para o ganho  $\eta$  experimental e teórico em função da dessintonia  $\Delta_2$  do laser auxiliar (resfriamento).*

## REFERÊNCIAS

- [1] - K. Lindquist, M. Stephens e C. Weiman, Phys. Rev. A **46**, 4082 (1992).
- [2] - D. M. B. P. Milori, M. T. Araújo, I. Guedes, S. C. Zílio e V. S. Bagnato, aceito para publicação no Braz. J. Phys, outubro de 1996.
- [3] - V. S. Bagnato e S. C. Zílio, Rev. Bras. Fis. **19**, 127 (1989).
- [4] - K. Gibble, S. Kasapi e S. Chu, Opt. Lett. **17**, 526 (1992).
- [5] - A. G. Sinclair, E. Riis e M. Snadden, J. Opt. Soc. Am. B **11**, 2333 (1994).
- [6] - J. Flemming, L. Marcassa, R. Horowicz, S. C. Zílio e V. S. Bagnato, Opt. Lett. **24**, 2529 (1996).

# ***CAPÍTULO IV***

## 4.1 - Conclusões

Apresentamos neste trabalho um estudo teórico das armadilhas magneto-ópticas convencional e com feixes auxiliares. Analizamos o comportamento do número de átomos aprisionados nestas armadilhas em função de alguns parâmetros experimentais como gradiente de campo magnético, dessintonia e intensidade dos feixes de laser.

Para obtermos o número de átomos aprisionados, utilizamos um modelo 3-D para calcular a velocidade de captura. Este modelo leva em conta a natureza 3-D do campo magnético e as expressões corretas para os perfis gaussianos de intensidade dos lasers. Além disto, permitenos considerar várias posições e velocidades iniciais do átomo e portanto obtermos um valor médio para a velocidade de captura. Isto elimina o uso da constante de normalização empregada nos modelos 1-D.

A seguir discutiremos pormenorizadamente, os resultados obtidos tanto na AMO convencional como na AMO com feixes auxiliares.

Com respeito a variação do número em função do gradiente de campo magnético, observamos que ao aumentarmos  $g_x$  aumentamos  $N$  até  $g_x=15$  G/cm onde  $N$  atinge seu valor máximo. A partir deste ponto observamos, em concordância com os resultados experimentais, que  $N$  diminui. A existência deste ponto de máximo, sugere que  $g_x$  influencia de duas formas diferentes a taxa de captura. Para baixos valores de  $g_x$ , a contribuição predominante surge devido ao fato que o campo magnético tende a encurvar as trajetórias dos átomos no diagrama de fase. Para baixos campos, o número  $N$  obtido pelo modelo é maior que o obtido experimentalmente. A razão para esta diferença é que no modelo também estamos simulando a desaceleração dos átomos. Assim, mesmo para baixos campos, alguns átomos satisfazem os vínculos impostos e então, o

modelo prevê de forma incorreta um número maior de átomos aprisionados. Entretanto para  $g_x=0$ , o segundo vínculo garante que não exista átomos aprisionados. Quando aumentarmos  $g_x$ , o primeiro ponto de retorno (potencial harmônico) torna-se próximo ao centro da armadilha, aumentando a velocidade de captura. Este efeito de  $g_x$  deixa de ser dominante, quando os deslocamentos Zeeman nas extremidades da região de aprisionamento, não são mais desprezíveis em relação a dessintonia e ao deslocamento Doppler. Em outras palavras, a partir do ponto de máximo, os átomos deixam de seguir o campo magnético adiabaticamente, ocasionando assim uma diminuição de  $N$ .

Com respeito a variação do número em função da frequência de Rabi (intensidade dos lasers), observamos que de forma menos sensível, o modelo descreve o comportamento experimental obtido. Para baixos valores da frequência de Rabi ( $\Omega$ ), a taxa de resfriamento é baixa e conseqüentemente capturamos poucos átomos. Aumentando-se  $\Omega$ , aumentamos  $N$ . Aqui temos uma diferença a mencionar. Enquanto que experimentalmente observamos uma variação linear de  $N$  versus  $\Omega$ , teoricamente observamos uma saturação seguida de uma redução. A explicação é devido ao fato que no procedimento de simulação não levamos em conta as perdas por reflexão e transmissão dos feixes lasers no aparato experimental. Isto acarreta na redução de  $\Omega$  e conseqüentemente de  $N$ . Um outro fato responsável pelas diferenças observadas é que, experimentalmente os feixes lasers da armadilha e os lasers de rebombeio estão acoplados por um modulador eletro-óptico. Assim, ao variarmos a intensidade dos lasers modificamos a intensidade dos lasers de rebombeio, que não são levados em conta na simulação.

Com respeito a variação do número com a dessintonia, não foi possível apresentarmos os números teóricos pois não tínhamos os

dados relativos aos raios da nuvem formada. No entanto, apresentamos uma discussão qualitativa do comportamento analisando a variação da constante de mola  $k$  em função de  $|\Delta|$ . Para  $|\Delta|=0$ , ou seja, na ressonância, pela relação  $|\Delta|=kv$  só aprisionaríamos átomos com  $v=0$  e conseqüentemente  $N=0$ . Aumentando  $|\Delta|$  observamos um aumento de  $k$  até um valor máximo e depois sua diminuição. A explicação para este fato é a seguinte. Para baixos valores de  $|\Delta|$ , devido ao efeito Doppler apenas átomos com baixas velocidades podem ser capturados. Ao aumentarmos  $|\Delta|$  aumentamos o deslocamento Doppler e então átomos mais rápidos podem ser capturados. Poderíamos pensar então que ao aumentarmos ainda mais  $|\Delta|$  aumentaríamos  $N$ . Isto não ocorre, pois aumentando-se  $|\Delta|$  ocorre uma diminuição da constante de mola o que leva a uma redução de  $N$ .

Como já mencionamos, embora o modelo utilizado não descreva corretamente os resultados experimentais para a AMO convencional, ele é capaz de descrever de forma extremamente satisfatória os resultados obtidos experimentalmente para AMO com feixes auxiliares. Entretanto, mencionamos que para a AMO convencional os resultados coincidem em ordem de grandeza, assegurando a aplicabilidade do modelo 3-D.

De acordo com os resultados apresentados na Fig.3.8 e na Tabela 3.5, observamos que o modelo utilizado reproduz o comportamento experimental com exceção para o valor  $\Delta_2 = 0$ , com um erro de apenas 5%. Este é um valor consideravelmente bom se pensarmos no grau de complexidade da AMO.

Como conclusão final, podemos destacar as seguintes contribuições deste trabalho:



- (i) Desenvolvimento de um modelo 3-D para estudar o processo de captura dos átomos em diferentes configurações de AMO,
- (ii) O uso de várias configurações de posição e velocidade iniciais de átomos para determinarmos  $v_c$ ,
- (iii) A eliminação das constantes de normalização utilizadas em outros trabalhos teóricos,
- (iv) Apresentação pela primeira vez da simulação do comportamento do número de átomos aprisionados na AMO convencional para átomos de sódio (Na), em função dos parâmetros experimentais, e
- (v) Descrição em muito boa concordância com os resultados experimentais, do comportamento do número de átomos aprisionados em função da dessintonia dos feixes de desaceleração na AMO com feixes auxiliares, também para átomos de sódio (Na).

## 4.2 - Perspectivas

Como perspectiva principal deste trabalho está a extensão do modelo desenvolvido para estudar a variação do número de átomos aprisionados na AMO convencional, utilizando outros átomos alcalinos, como por exemplo átomos de césio (Cs).

Também, a utilização do modelo desenvolvido para estudarmos outras configurações de AMO, projetadas para obtermos um aumento no número de átomos aprisionados.

# ***APÊNDICES***

# ***APÊNDICE A***

Neste apêndice, demonstraremos como podemos obter através de algumas aproximações, a equação do oscilador harmônico amortecido a partir da força de pressão de Radiação.

Em 1979, R. Cook (op.Cit.Cap.II) utilizou a teoria semiclássica, para descrever a interação átomo-laser e derivou a força de pressão de radiação, que é a base teórica para todos os experimentos de desaceleração, resfriamento e aprisionamento de átomos neutros. Com base na Ref.[6] do Cap. II, temos que a força de pressão de radiação exercida por um laser sobre um átomo, considerado como um sistema de dois níveis, consiste de duas partes: (i) Força de dipolo ou induzida, relacionada à interação entre o momento de dipolo atômico induzido e o gradiente de intensidade do campo de radiação; e (ii) Força espontânea que está associada à transferência de momentum do fóton para o átomo e à emissão espontânea. A força de dipolo é importante se tivermos um grande gradiente de intensidade do campo de radiação. Como os feixes utilizados na armadilha magneto-óptica possuem perfis de intensidade gaussianos não focalizados, este gradiente é pequeno. Dessa forma, a força de pressão de radiação responsável pelo resfriamento e captura dos átomos será a força espontânea dada por:

$$\vec{F} = \frac{\hbar\Gamma\Omega^2}{\left[4(\Delta - \vec{k}_\lambda \cdot \vec{v})^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2\right]} \vec{k}_\lambda \quad (\text{A.1})$$

Assim em uma dimensão podemos escrever para um átomo de dois níveis localizado na armadilha magneto-óptica

$$m \frac{dv_x}{dt} = F_+(x) - F_-(x) \quad (\text{A.2})$$

com  $F_{\pm}(x)$  dado por

$$F_{\pm}(x) = \frac{\hbar k_{\lambda} \Gamma \Omega^2}{\left\{ 4 \left[ \Delta \mp (k_{\lambda} v_x + \gamma g_x x) \right]^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2 \right\}} \quad (\text{A.3})$$

onde

-  $\gamma g_x x$  foi incluído de forma a considerarmos o deslocamento Zeeman nos níveis de energia, sendo  $\gamma$  a constante Zeeman que vale 1.4MHz/G para os átomos alcalinos e  $g_x$  é o gradiente de campo magnético expresso em G/cm,

-  $k_{\lambda} = 2\pi/\lambda$  é o módulo do vetor de onda do campo de radiação ,

-  $\Gamma = 10\text{MHz}$  é a largura de linha da transição atômica,

-  $\Omega = \mu E / \hbar$  é a frequência de Rabi da transição, que está relacionada a intensidade do campo de radiação,

-  $\Delta = \omega - \omega_0$  é dessintonia entre a frequência do laser ( $\omega$ ) e frequência da transição atômica ( $\omega_0$ ).

Na aproximação de campos baixos e pequenas velocidades temos  $\Delta > kv_x + \gamma g_x$ . Assim, podemos expandir o denominador até primeira ordem em  $\Delta/\xi$ , onde  $\xi = kv_x + \gamma g_x$ . Dessa forma obtemos

$$F = \frac{\hbar k_{\lambda} \Gamma}{4} \left[ \frac{\Omega^2}{\left( \Delta^2 - 2\xi\Delta + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega^2}{2} \right)} - \frac{\Omega^2}{\left( \Delta^2 + 2\xi\Delta + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega^2}{2} \right)} \right] \quad (\text{A.4})$$

Definindo  $\chi = \Delta^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega^2}{2}$ , temos assim

$$F = \frac{\hbar k_\lambda \Gamma}{4} \left[ \frac{\Omega^2}{\chi \left(1 - \frac{2\chi\Delta}{\chi}\right)} - \frac{\Omega^2}{\chi \left(1 + \frac{2\chi\Delta}{\chi}\right)} \right] \quad (\text{A.5})$$

Usando o fato de  $\Delta\xi \ll \chi$  e a aproximação  $(1+x)^{-1} \cong 1-x$  para  $x \ll 1$ , sendo  $x = \Delta\xi/\chi$ , obtemos:

$$F = \frac{\hbar k_\lambda \Gamma \Delta \Omega^2 \xi}{\chi^2} \quad (\text{A.6})$$

Substituindo os valores de  $\xi$  e  $\chi$  e lembrando que  $\Delta < 0$ , temos

$$F = -\frac{16\hbar k_\lambda^2 \Gamma \Omega^2 |\Delta|}{(4\Delta^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2)^2} v_x - \frac{16\hbar k_\lambda \Gamma \Omega^2 \gamma g_x |\Delta|}{(4\Delta^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2)^2} x \quad (\text{A.7})$$

que finalmente podemos escrever na forma

$$F = -\beta v_x - kx \quad (\text{A.8})$$

onde

$$\beta = \frac{16\hbar k_\lambda^2 \Gamma \Omega^2 |\Delta|}{(4\Delta^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2)^2} \quad (\text{A.9})$$

e

$$k = \frac{16\hbar k_x \Gamma \Omega^2 |\Delta| (\gamma_{g_x})}{(4\Delta^2 + \Gamma^2 + 2\Omega^2)^2} \quad (\text{A.10})$$

# ***APÊNDICE B***



Neste apêndice demonstraremos como descrever as condições iniciais, velocidade e posição, em termos de dois conjunto de coordenadas esféricas. Usamos um sistema de coordenada para a posição (O) e outro para a velocidade (O'), deduzindo as equações de transformação entre os mesmos.

A posição do átomo é definida em termos de  $\vec{r}, \theta$  e  $\phi$  em relação o sistema O de acordo com as seguintes equações, conforme mostrado na Fig.B.1.

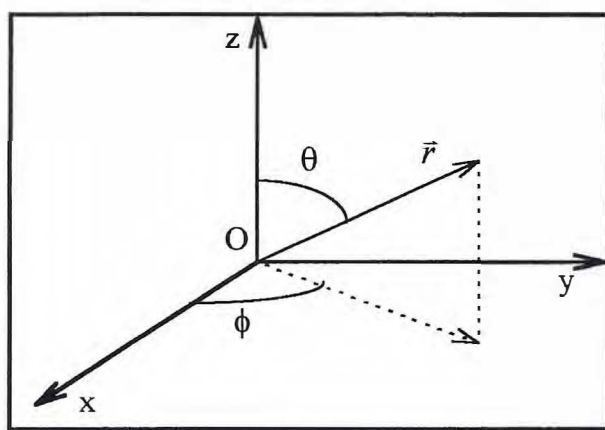


Fig.B.1 - Sistema de coordenadas O .

$$\begin{aligned}
 x &= r \operatorname{sen}\theta \cos\phi \\
 y &= r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi \\
 z &= r \cos\theta
 \end{aligned}
 \tag{B.1}$$

A velocidade do átomo por sua vez pode ser escrita em termos de  $\vec{v}, \delta$  e  $\phi$ , de acordo com a Fig.B.2, por

$$\begin{aligned}
 v_x &= v \operatorname{sen}\delta \cos\phi \\
 v_y &= v \operatorname{sen}\delta \operatorname{sen}\phi \\
 v_z &= v \cos\delta
 \end{aligned}
 \tag{B.2}$$

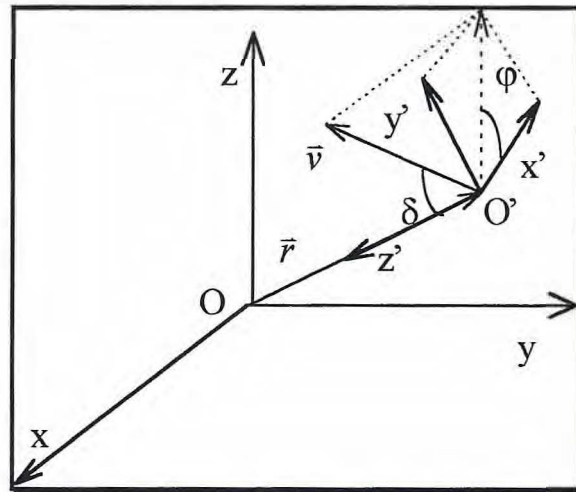


Fig.B.2 - Sistema de coordenadas O'.

A definição do sistema O' é feita com base na reta OO' que liga a origem do sistema O ao ponto onde o átomo se encontra e no plano perpendicular a reta OO', que contém os eixos x' e y'. Temos também que:

- O eixo z' é definido ao longo da reta OO' no sentido de O,
- O eixo y' é perpendicular ao z'
- O eixo x' fica definido em consequência das definições dos eixos z' e y', sendo paralelo ao plano xy.

Sendo assim, podemos projetar  $v_x'$  no plano xy e obtermos

$$v_x' = v_{\eta} = v \operatorname{sen} \delta \cos \varphi \quad (\text{B.3})$$

Tendo como referência a Fig.B.3 e Fig.B.4 projetamos  $v_y'$  e  $v_z'$  no eixo z e na reta NO, definindo também  $v_p$  sobre a mesma.

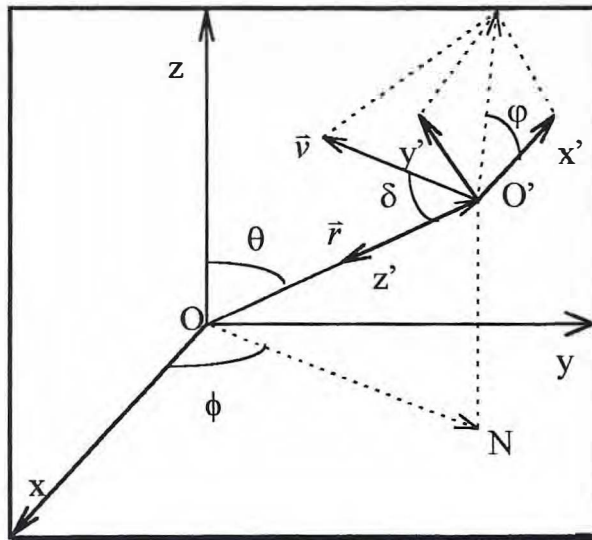


Fig.B.3 Projeções no plano xy.

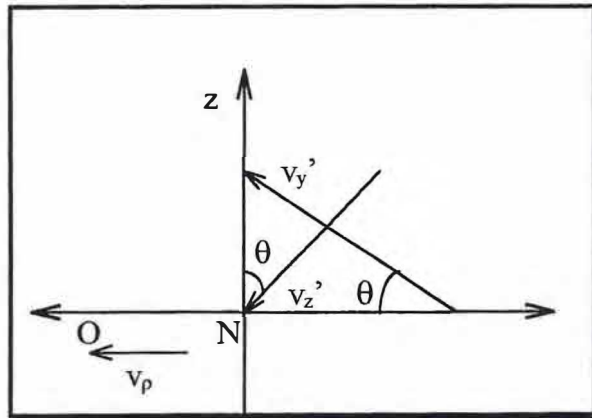


Fig.B.4 - Projeção no eixo z e na reta NO.

Com isto temos

$$v_z = v_y' \operatorname{sen}\theta - v_z' \operatorname{cos}\theta \quad (\text{B.4})$$

$$-v_\rho = v_y' \operatorname{cos}\theta + v_z' \operatorname{sen}\theta \quad (\text{B.5})$$

Olhando para as projeções dos vetores  $v_\eta$  e  $v_\rho$  no plano xy como mostra a Fig.B.5 podemos escrever

$$v_x = -v_\rho \operatorname{cos}\phi - v_\eta \operatorname{sen}\phi \quad (\text{B.6})$$

$$v_y = -v_\rho \operatorname{sen}\phi + v_\eta \operatorname{cos}\phi \quad (\text{B.7})$$

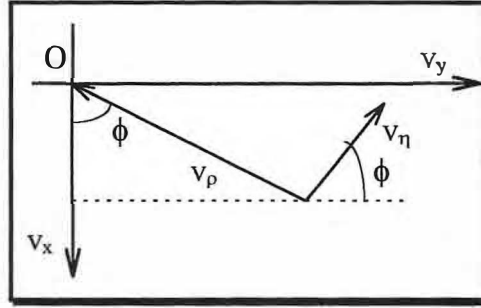


Fig.B.5 - Projeção de  $v_\rho$  e  $v_\eta$  no plano  $xy$ .

Combinando as equações anteriores tiramos as relações que definem as transformações entre os dois sistemas para que possamos descrever o átomo na armadilha magneto-óptica. Portanto

$$v_x = v[(\text{sen}\delta \text{sen}\varphi \cos\theta + \cos\delta \text{sen}\theta)\cos\phi - \text{sen}\delta \cos\varphi \text{sen}\phi] \quad (\text{B.8})$$

$$v_y = v[(\text{sen}\delta \text{sen}\varphi \cos\theta + \cos\delta \text{sen}\theta)\text{sen}\phi + \text{sen}\delta \cos\varphi \cos\phi] \quad (\text{B.9})$$

$$v_z = v(\text{sen}\delta \text{sen}\varphi \text{sen}\theta - \cos\delta \cos\theta) \quad (\text{B.10})$$

onde devemos ter

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \quad (\text{B.11})$$

onde

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1 \quad (\text{B.12})$$

sendo  $\cos\alpha$ ,  $\cos\beta$  e  $\cos\gamma$  denominados de cossenos diretores.

# *APÊNDICE C*

```

C
C   VERSAO DO PROGRAMA PARA DESENVOLVIMENTO DA TESE.

C   PROGRAMA PARA RESOLVER UM PROBLEMA DE UM SISTEMA DE EQUACOES
C   DIFERENCIAIS LINEARES UTILIZANDO O METODO DE RUNGE
C   KUTTA
C
C .....
C   IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C   EXTERNAL FCN
C   CHARACTER*6 PEPO1
C   DIMENSION Y(50),GRAD(6),OG(6),S(12)
C   DIMENSION CIN(6),COMM(5),CONST(3),COUT(30),W(6,11)
C   DIMENSION RAI0(100),TETAG(100),FIG(100),DELTAG(100),PSIG(100)
C   COMMON /INT/ NVAR
C   COMMON /GRADIENTE/ GRAD
C   COMMON /PASSA/ GA,XW,DL,XK,XW1,XW2,XW3
C   COMMON /OMEGA/ OG,F1,F2
C   COMMON /ESE/ S
C   DATA PI/3.141592653589793238D0/
C   DATA CIN(1)/0.D0/,CIN(2)/0.D0/,CIN(3)/0.D0/,CIN(4)/0.D0/,CIN(5)/0.D0/
C   DATA COMM(1)/0.D0/,COMM(2)/0.D0/,COMM(3)/0.D0/,COMM(4)/0.D0/
C   DATA CONST(1)/0.D0/,CONST(2)/0.D0/,CONST(3)/0.D0/

C
C
C   XD=1178.D0

C
C   DADOS DA ARMADILHA
C   DECLARACAO DO DESALINHAMENTO ( EM CENTIMETROS )

C
C   S(1)=0.D0
C   S(2)=0.D0
C   S(3)=(-1.D0)*S(1)
C   S(4)=0.D0
C   S(5)=(-1.D0)*S(1)
C   S(6)=0.D0
C   S(7)=S(1)
C   S(8)=0.D0
C   S(9)=0.D0
C   S(10)=0.D0
C   S(11)=0.D0
C   S(12)=0.D0

C
C   DECLARACAO DOS VALORES DE : K, DEL, OMEGA E GAMA (NA ORDEM
C   ABAIXO)

C
C   XK=1.7d-2
C   GA=10.D0

C
C   RCUT=0.02D0
C   DL1=-10.0D0
C   DL2=.0D0
C   XW1=1.2D0
C   XW2=0.6D0
C   WRITE(*,*)'XW3,Vi,dv'
C   READ(*,*)XW3,Vi,dv

```

```

C
C
C   INICIO DO CALCULO (LACO PRINCIPAL)
C
C   K=10
C   V=Vi-dv
C   DO 300 m=1,21
C   V=V+dv
C   K=10
C   ABERTURA DE ARQUIVOS
C
C   ifm=m+30
C   OPEN(ifm)
C
C   icont=0
1000 CONTINUE
C   TF=2.D0*XW1/V
C
C   CHAMADA DA ROTINA QUE CONTEM OS VALORES DE
C   RAI0,TETAG,FIG,DELTAG e PSIG PARA CADA ÁTOMO.
C
C   CALL ATERRA(K,RAIO,TETAG,FIG,DELTAG,PSIG)
C
C   WRITE(*,*) 'ATOMO ->',K-9
C   WRITE(*,*) RAI0(K),TETAG(K),FIG(K)
C   WRITE(*,*) DELTAG(K),PSIG(K)
C
C
C
C
C
C   GOTO 250
C   TETA=(TETAG(K)*PI)/180.d0
C
C   FI=(FIG(K)*PI)/180.d0
C
C   DELTA=(DELTAG(K)*PI)/180.d0
C   PSI=(PSIG(K)+90.d0)*PI/180.d0
C
C   X0=RAIO(K)*DSIN(TETA)*DCOS(FI)
C   Y0=RAIO(K)*DSIN(TETA)*DSIN(FI)
C   Z0=RAIO(K)*DCOS(TETA)
C
C   A=(DSIN(DELTA)*DSIN(PSI)*DCOS(TETA)+DCOS(DELTA)*DSIN(TETA))
C   B=DSIN(DELTA)*DCOS(PSI)
C   COSALFA=A*DCOS(FI)-B*DSIN(FI)
C
C   C=(DSIN(DELTA)*DSIN(PSI)*DCOS(TETA)+DCOS(DELTA)*DSIN(TETA))
C   D=DSIN(DELTA)*DCOS(PSI)
C   COSBETA=C*DSIN(FI)+D*DCOS(FI)
C
C   E=DSIN(DELTA)*DSIN(PSI)*DSIN(TETA)
C   F=DCOS(DELTA)*DCOS(TETA)
C   COSGAMA=E-F
C
C   VX0=V*COSALFA
C   VY0=V*COSBETA
C   VZ0=V*COSGAMA

```

```

C
C   FIM DA DECLARACAO DOS DADOS DE ENTRADA.
C
Y(1)=X0
Y(2)=VX0
Y(3)=Y0
Y(4)=VY0
Y(5)=Z0
Y(6)=VZ0

C
C
C
NVAR=6
N1=NVAR
N2=11
CIN(1)=0.0
TOL=0.000000001
T1=0.D0
T2=0.00001
TINC=0.00001
IFAIL=1

C
C   GERACAO DOS ARQUIVOS
C
R=DSQRT( (Y(1))**2 + (Y(3))**2 + (Y(5))**2 )
XV=DSQRT( Y(2)**2 + Y(4)**2 + Y(6)**2 )
C   WRITE(K,'(F8.6,F12.8,F15.8)') T1,R,XV
C   WRITE(*,'(F8.6,F12.8,F15.8)') TEMP,R,XV

C
C
100 CONTINUE
IF (R.LE.XW3) THEN
  DL=DL1
  XW=XW1
  GRADX=10.0D0
  GRADY=GRADX
  GRADZ=2.D0*GRADX
  OG(1)=23.46D0
  OG(2)=OG(1)
  OG(3)=OG(1)
  OG(4)=OG(1)
  OG(5)=OG(1)
  OG(6)=OG(1)
ELSE
  DL=DL2
  XW=XW2
  GRADX=10.D0
  GRADY=GRADX
  GRADZ=2.D0*GRADX
  OG(1)=24.9D0
  OG(2)=OG(1)
  OG(3)=OG(1)
  OG(4)=OG(1)
  OG(5)=OG(1)
  OG(6)=OG(1)
END IF

C
GRAD(2)=GRADX

```



```

GRAD(4)=GRADY
GRAD(6)=GRADZ
C
CALL D02PAF(T1,T2,NVAR,Y,CIN,TOL,FCN,COMM,CONST,COUT,
* W,N1,N2,IFAIL)
C
R=DSQRT( (Y(1))**2 + (Y(3))**2 + (Y(5))**2 )
XV=DSQRT( Y(2)**2 + Y(4)**2 + Y(6)**2 )
C
GERACAO DOS ARQUIVOS DE POSICAO E RAO
C
WRITE(K,'(F12.8,F15.8)') R,XV
C
WRITE(*,'(F8.6,F12.8,F15.8)') T1,R,XV
C
WRITE(60,'(F12.8,F12.8,F12.8)')Y(1),Y(3),Y(5)
C
WRITE(*,*) F1,F2
C
C
CONDICAO PARA SAIR DO LACO
C
IF (R.LE.RCUT.AND.XV.LE.XD) GO TO 200
C
C
IFAIL=1
T1=T2
T2=T2+TINC
IF (T2.LE.TF) GOTO 100
C
FECHAMENTO DO ARQUIVO K
C
CLOSE(K)
C
200 WRITE(ifm,*) 'ATOMO ->',K-9,V
C
WRITE(60,*) 'ATOMO ->',K
WRITE(ifm,'(F8.6,F12.8,F15.8)') T1,R,XV
C
WRITE(60,*) ' '
IF (R.LE.RCUT.AND.XV.LE.XD)THEN
WRITE(ifm,*)'CAPTURADO#####'
icont=icont+1
ELSE
WRITE(ifm,*)'NAO CAP          +++'
END IF
K=K+1
IF(K.LE.12) GOTO 1000
WRITE(ifm,*)'NUNMERO DE ATOMOS CAPTURADOS',icont
CLOSE(ifm)
C
CLOSE(60)
300 CONTINUE
STOP
END
C
C.....
C
SUBROUTINE FCN(X,Y,DYDX)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION DYDX(50),Y(50),GRAD(6),EX(50),OG(6),S(12)
COMMON /INT/ NVAR

```

```

COMMON /GRADIENTE/ GRAD
COMMON /PASSA/ GA,XW,DL,XK,XW1,XW2,XW3
COMMON /OMEGA/ OG,F1,F2
COMMON /ESE/ S

C
C           X1-> COORDENADA, V1-> VELOCIDADE, G1-> GRADIENTE DE CAMPO
C
PI=3.141592653589793238D0
EX(1)=DEXP( -( (Y(3)+S(1))**2 + (Y(5)+S(2))**2 )/(XW*XW) )
EX(2)=DEXP( -( (Y(3)+S(3))**2 + (Y(5)+S(4))**2 )/(XW*XW) )
EX(3)=DEXP( -( (Y(1)+S(5))**2 + (Y(5)+S(6))**2 )/(XW*XW) )
EX(4)=DEXP( -( (Y(1)+S(7))**2 + (Y(5)+S(8))**2 )/(XW*XW) )
EX(5)=DEXP( -( (Y(1)+S(9))**2 + (Y(3)+S(10))**2 )/(XW*XW) )
EX(6)=DEXP( -( (Y(1)+S(11))**2 + (Y(3)+S(12))**2 )/(XW*XW) )

C
ET=0.D0
DO 5 I=1,6
5   ET=ET + EX(I)
C
DO 10 I=1,NVAR
10  DYDX(I)=0.D0
C
C           DECLARACAO DO SISTEMA DE EQUACOES
C
DO 20 I=1,NVAR-1,2
20  DYDX(I)=DYDX(I)+Y(I+1)
C
DO 30 I=2,NVAR,2
C
F1=(OG(I-1)**2)*EX(I-1)/(4.D0*(DL+XK*Y(I)+1.4*GRAD(I)*Y(I-1))**2 +
* GA**2 + 2.D0*(OG(I-1)**2)*ET )
C
F2=(OG(I)**2)*EX(I)/( 4.D0*(DL-XK*Y(I)-1.4*GRAD(I)*Y(I-1))**2 +
* GA**2 + 2.D0*(OG(I)**2)*ET )
C
DYDX(I)=DYDX(I) + 2.D0*PI*3.0D6*GA*( F2 - F1 )
30  CONTINUE

C
RETURN
END

C
C.....
SUBROUTINE ATERRA(I,RAIO,TETAG,FIG,DELTAG,PSIG)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION RAIO(100),TETAG(100),FIG(100),DELTAG(100)
DIMENSION PSIG(100)

C
C DADOS DO PRIMEIRO ATOMO
C
RAIO(10)=0.6D0
TETAG(10)=0.D0
FIG(10)=0.D0
DELTAG(10)=0.D0
PSIG(10)=0.D0

C
C DADOS DO SEGUNDO ATOMO
C

```

```

RAIO(11)=0.6D0
TETAG(11)=90.D0
FIG(11)=0.D0
DELTAG(11)=180.D0
PSIG(11)=0.D0
C
C DADOS DO TERCEIRO ATOMO
C
RAIO(12)=0.6D0
TETAG(12)=90.D0
FIG(12)=45.D0
DELTAG(12)=180.D0
PSIG(12)=0.D0
C
C DADOS DO QUARTO ATOMO
C
RAIO(13)=0.6D0
TETAG(13)=90.D0
FIG(13)=90.D0
DELTAG(13)=180.D0
PSIG(13)=0.D0
C
C DADOS DO QUINTO ATOMO
C
RAIO(14)=0.6D0
TETAG(14)=0.D0
FIG(14)=0.D0
DELTAG(14)=1.D0
PSIG(14)=0.D0
C
C DADOS DO SEXTO ATOMO
C
RAIO(15)=0.6D0
TETAG(15)=0.D0
FIG(15)=0.D0
DELTAG(15)=2.D0
PSIG(15)=0.D0
C
C DADOS DO SETIMO ATOMO
C
RAIO(16)=0.6D0
TETAG(16)=0.D0
FIG(16)=0.D0
DELTAG(16)=3.D0
PSIG(16)=0.D0
C
C DADOS DO OITAVO ATOMO
C
RAIO(17)=0.6D0
TETAG(17)=1.D0
FIG(17)=0.D0
DELTAG(17)=0.D0
PSIG(17)=0.D0
C
C DADOS DO NONO ATOMO
C
RAIO(18)=0.6D0
TETAG(18)=2.D0

```

```

FIG(18)=0.D0
DELTAG(18)=0.D0
PSIG(18)=0.D0
C
C DADOS DO DECIMO ATOMO
C
RAIO(19)=0.6D0
TETAG(19)=3.D0
FIG(19)=0.D0
DELTAG(19)=0.D0
PSIG(19)=0.D0
C
C DADOS DO DECIMO PRIMEIRO ATOMO
C
RAIO(20)=0.6D0
TETAG(20)=0.D0
FIG(20)=0.D0
DELTAG(20)=1.D0
PSIG(20)=5.D0
C
C DADOS DO DECIMO SEGUNDO ATOMO
C
RAIO(21)=0.6D0
TETAG(21)=0.D0
FIG(21)=0.D0
DELTAG(21)=1.D0
PSIG(21)=10.D0
C
C DADOS DO DECIMO TERCEIRO ATOMO
C
RAIO(22)=0.6D0
TETAG(22)=0.D0
FIG(22)=0.D0
DELTAG(22)=1.D0
PSIG(22)=15.D0
C
C DADOS DO DECIMO QUARTO ATOMO
C
RAIO(23)=0.6D0
TETAG(23)=0.D0
FIG(23)=0.D0
DELTAG(23)=1.D0
PSIG(23)=30.D0
C
C DADOS DO DECIMO QUINTO ATOMO
C
RAIO(24)=0.6D0
TETAG(24)=0.D0
FIG(24)=0.D0
DELTAG(24)=1.D0
PSIG(24)=45.D0
C
C RETURN
C END
C.....

```

```
C
C   PROGRAMA QUE CONTEM AS SUBROTINAS NECESSARIAS PARA A
C   RESOLUCAO DE UM SISTEMA DE EQUACOES PELO METODO DE RUGE-KUTTA
C   DE 4 ORDEM
C
```

```
C*****
```

```

SUBROUTINE RK4(Y,DYDX,N,X,H,YOUT,DERIVS)
EXTERNAL DERIVS
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NMAX=1000)
DIMENSION Y(N),DYDX(N),YOUT(N),YT(NMAX),DYT(NMAX),DYM(NMAX)
HH=H*0.5
H6=H/6.
XH=X+HH
DO 11 I=1,N
  YT(I)=Y(I)+HH*DYDX(I)
11 CONTINUE
CALL DERIVS(XH,YT,DYT)
DO 12 I=1,N
  YT(I)=Y(I)+HH*DYT(I)
12 CONTINUE
CALL DERIVS(XH,YT,DYM)
DO 13 I=1,N
  YT(I)=Y(I)+H*DYM(I)
  DYM(I)=DYT(I)+DYM(I)
13 CONTINUE
CALL DERIVS(X+H,YT,DYT)
DO 14 I=1,N
  YOUT(I)=Y(I)+H6*(DYDX(I)+DYT(I)+2.*DYM(I))
14 CONTINUE
RETURN
END
```

```
C.....
```

```

SUBROUTINE RKQC(Y,DYDX,N,X,HTRY,EPS,YSCAL,HDID,HNEXT,DERIVS)
EXTERNAL RK4,DERIVS
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
PARAMETER (NMAX=1000,FCOR=.066666667,
* ONE=1.,SAFETY=0.9,ERRCON=6.D-4)
EXTERNAL DERIVS
DIMENSION Y(N),DYDX(N),YSCAL(N),YTEMP(NMAX),YSAV(NMAX),DYSAV(NMAX)
PGROW=-0.20
PSHRNK=-0.25
XSAV=X
DO 11 I=1,N
  YSAV(I)=Y(I)
  DYSAV(I)=DYDX(I)
11 CONTINUE
H=HTRY
1  HH=0.5*H
CALL RK4(YSAV,DYSAV,N,XSAV,HH,YTEMP,DERIVS)
X=XSAV+HH
CALL DERIVS(X,YTEMP,DYDX)
CALL RK4(YTEMP,DYDX,N,X,HH,Y,DERIVS)
X=XSAV+H
IF(X.EQ.XSAV)PAUSE 'Stepsize not significant in RKQC.'
CALL RK4(YSAV,DYSAV,N,XSAV,H,YTEMP,DERIVS)
ERRMAX=0.
```

```

DO 12 I=1,N
  YTEMP(I)=Y(I)-YTEMP(I)
  ERRMAX=MAX(ERRMAX,DABS(YTEMP(I)/YSCAL(I)))
12 CONTINUE
  ERRMAX=ERRMAX/EPS
  IF(ERRMAX.GT.ONE) THEN
    H=SAFETY*H*(ERRMAX**PSHRNK)
    GOTO 1
  ELSE
    HDID=H
    IF(ERRMAX.GT.ERRCON)THEN
      HNEXT=SAFETY*H*(ERRMAX**PGROW)
    ELSE
      HNEXT=4.*H
    ENDIF
  ENDIF
DO 13 I=1,N
  Y(I)=Y(I)+YTEMP(I)*FCOR
13 CONTINUE
  RETURN
  END
C
C.....
  SUBROUTINE ODEINT(YSTART,NVAR,X1,X2,EPS,H1,HMIN,
  *NOK,NBAD,DERIVS,RKQC)
  EXTERNAL DERIVS,RKQC
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  PARAMETER (MAXSTP=10000,NMAX=1000,TWO=2.0,ZERO=0.0,TINY=1.D-30)
  COMMON /PATH/ KMAX,KOUNT,DXSAV,XP(200),YP(10,200)
  DIMENSION YSTART(NVAR),YSCAL(NMAX),Y(NMAX),DYDX(NMAX)
  X=X1
  H=SIGN(H1,X2-X1)
  NOK=0
  NBAD=0
  KOUNT=0
  DO 11 I=1,NVAR
    Y(I)=YSTART(I)
11 CONTINUE
  XSAV=X-DXSAV*TWO
  DO 16 NSTP=1,MAXSTP
    CALL DERIVS(X,Y,DYDX)
    DO 12 I=1,NVAR
      YSCAL(I)=DABS(Y(I))+DABS(H*DYDX(I))+TINY
12 CONTINUE
    IF(KMAX.GT.0)THEN
      IF(DABS(X-XSAV).GT.DABS(DXSAV)) THEN
        IF(KOUNT.LT.KMAX-1)THEN
          KOUNT=KOUNT+1
          XP(KOUNT)=X
          DO 13 I=1,NVAR
            YP(I,KOUNT)=Y(I)
13 CONTINUE
          XSAV=X
        ENDIF
      ENDIF
    ENDIF
    IF((X+H-X2)*(X+H-X1).GT.ZERO) H=X2-X
    CALL RKQC(Y,DYDX,NVAR,X,H,EPS,YSCAL,HDID,HNEXT,DERIVS)

```

```

IF(HDID.EQ.H)THEN
  NOK=NOK+1
ELSE
  NBAD=NBAD+1
ENDIF
IF((X-X2)*(X2-X1).GE.ZERO)THEN
  DO 14 I=1,NVAR
    YSTART(I)=Y(I)
14  CONTINUE
    IF(KMAX.NE.0)THEN
      KOUNT=KOUNT+1
      XP(KOUNT)=X
      DO 15 I=1,NVAR
        YP(I,KOUNT)=Y(I)
15  CONTINUE
      ENDIF
      RETURN
    ENDIF
    IF(DABS(HNEXT).LT.HMIN) PAUSE 'Stepsize smaller than minimum.'
    H=HNEXT
16 CONTINUE
    PAUSE 'Too many steps.'
    RETURN
  END
C.....
C
C   SUBROTINAS DA 'NAG' NECESSARIAS PARA A APLICACAO DO METODO DE
C   RUNGE-KUTTA.
C
C.....
SUBROUTINE D02PAF(X, XEND, N, Y, CIN, TOL, FCN, COMM, CONST,
* COUT, W, IW, IW1, IFAIL)
C  MARK 7 RELEASE. NAG COPYRIGHT 1978.
C  MARK 7F REVISED. IER-209 (OCT 1979)
C  MARK 7G REVISED. IER-216 (FEB 1980)
C  MARK 8 REVISED. IER-246 (APR 1980).
C  MARK 8A REVISED. IER-251 (AUG 1980).
C  INTEGRATES THE N DIFFERENTIAL EQUATIONS DEFINED
C  BY FCN FROM X TO XEND. THE VALUES AT X
C  OF THE SOLUTION MUST BE GIVEN IN Y
C  AND THE CALCULATED VALUES ARE RETURNED
C  IN THE SAME VECTOR. THE LOCAL ERROR
C  PER STEP IS CONTROLLED BY TOL. VARIOUS
C  OPTIONS ARE CONTROLLED BY CIN AND
C  THE WORKSPACE W WHICH MUST HAVE
C  FIRST DIMENSION N1 .GE. N AND
C  SECOND DIMENSION .GE.7. USEFUL
C  OUTPUT IS ALSO RETURNED IN CIN AND
C  W, PERMITTING EFFICIENT INTEGRATION.
C
C  .. SCALAR ARGUMENTS ..
REAL*8 TOL, X, XEND
INTEGER IFAIL, IW1, IW, N
C  .. ARRAY ARGUMENTS ..
REAL*8 CIN(6), COMM(5), CONST(3), COUT(14), W(IW,IW1), Y(N)
C  .. SUBROUTINE ARGUMENTS ..
C  FCN
C  ..

```

```

C .. LOCAL SCALARS ..
  DOUBLE PRECISION SRNAME
  REAL*8 EXP1, EXPI, FAC1, FAC2, FAC3, FAC4, FAC5, FAC6, FAC7,
  * FAC8, FAC9, FAC, FNORM, HEST1, HEST, RAT1, RAT, S, T,
  * TOLEST, YNORM
  INTEGER I, IEND, IND, ISIG, ISTEP, J, K, N2, I1
  LOGICAL CALLS, HALVE, INIT, INTER, REDUCE, START, TEST
C .. FUNCTION REFERENCES ..
  REAL*8 X02AAF, X02ABF
  INTEGER P01AAF
C .. SUBROUTINE REFERENCES ..
C D02YAF
C ..
  EXTERNAL FCN
  DATA SRNAME /8H D02PAF /, FAC /10.E0/, FAC1 /0.1E0/, FAC3
  * /2.E0/, FAC4 /0.8E0/, FAC5 /0.25/, FAC6 /0.25/, FAC8 /0.2/,
  * FAC9 /0.2/
C
C SET CONSTANTS
C
  HEST1 = 0.
  INIT = .FALSE.
  EXP1 = FAC6
  EXPI = FAC5
  IND = 0
  ISIG = 0
  INTER = .FALSE.
  ISTEP = 2
  N2 = 7
  TEST = .FALSE.
  CALLS = .FALSE.
  IF (CIN(1).EQ.0.) GO TO 60
  DO 20 I=1,3
    IF (COMM(I).NE.0.) GO TO 60
  20 CONTINUE
  IF (CIN(1).NE.5. .OR. COMM(4).LE.0.) GO TO 40
  TEST = .TRUE.
  IF (CIN(2).GE.3.) GO TO 320
  GO TO 820
  40 IF (CIN(1).NE.6. .OR. COMM(4).GE.0.) GO TO 60
  TEST = .TRUE.
  IF (CIN(2).GE.3.) GO TO 320
  GO TO 680
C
C ARGUMENT TESTS
C
  60 IF (IW.GE.N .AND. N.GT.0 .AND. IW1.GE.7) GO TO 100
C WORKSPACE WRONGLY DIMENSIONED
  80 IND = 1
  CIN(1) = -1.
  GO TO 2500
  100 IF (TOL.GT.0.) GO TO 120
C ERROR TOLERANCE NOT POSITIVE
  IND = 1
  CIN(1) = -2.
  GO TO 2500
  120 IF (CIN(1).EQ.0.) GO TO 140
  IF (CIN(1).EQ.1.) GO TO 200

```



```

    IF (CIN(1).GE.2. .AND. CIN(1).LE.6.) GO TO 240
C   CIN(1) OUT OF RANGE
    IND = 1
    CIN(1) = -3.
    GO TO 2500
C
C   SET INPUT AND OUTPUT PARAMETERS
C
140 DO 160 I=2,5
    CIN(I) = 0.
160 CONTINUE
    DO 180 I=1,4
    COMM(I) = 0.
180 CONTINUE
    CONST(1) = 0.
    CONST(2) = FAC3
    CONST(3) = FAC4
200 COUT(11) = X02AAF(S)
    COUT(12) = X02ABF(S)
    COUT(13) = DABS(CIN(3))
    COUT(14) = DABS(CIN(4))
    CIN(6) = 0.
    ISTEP = 0
    S = 0.E0
    DO 220 I=1,N
    S = DMAX1(S,DABS(Y(I)))
220 CONTINUE
    INIT = .TRUE.
    COUT(1) = 0.
    COUT(2) = 0.
    COUT(3) = 0.
    COUT(4) = X
    COUT(5) = X
    COUT(6) = S
    COUT(7) = S
    COUT(8) = 0.
    COUT(9) = 0.
    COUT(10) = 0.
    IF (CIN(1).EQ.0.) GO TO 760
    GO TO 280
C
C   ARGUMENT TESTS FOR CIN(1).GT.0.
C
240 IF ((COUT(4).GE.COUT(5) .AND. X.LT.COUT(4)) .OR.
    * (COUT(4).LT.COUT(5) .AND. X.GE.COUT(4))) GO TO 260
    IF (X.EQ.XEND) GO TO 280
    IF ((X.GE.COUT(4) .AND. XEND.GE.X) .OR. (X.LT.COUT(4) .AND.
    * XEND.LT.X)) GO TO 280
260 CIN(1) = 1.
    INTER = .TRUE.
    GO TO 200
280 IF (CIN(2).EQ.0. .OR. CIN(2).EQ.1. .OR. CIN(2).EQ.2. .OR.
    * CIN(2).EQ.3. .OR. CIN(2).EQ.4.) GO TO 300
C   CIN(2) OUT OF RANGE
    IND = 1
    CIN(1) = -4.
    GO TO 2500
300 IF (CIN(2).LT.3.) GO TO 380

```

```

320 IF (IW1.LT.8) GO TO 80
    N2 = 8
    DO 340 I=1,N
        IF (W(I,7).GT.0.) GO TO 340
C   SCALING OF TOLERANCE NON-POSITIVE
    IND = 1
    CIN(1) = -5.
    GO TO 2500
340 CONTINUE
    IF (CIN(2).EQ.4.) GO TO 380
    IF (IW1.LT.9) GO TO 80
    N2 = 9
    DO 360 I=1,N
        IF (Y(I).NE.0. .OR. W(I,8).GT.0.) GO TO 360
C   FLOOR ZERO AND SOLUTION ZERO IN SAME COMPONENT
    IND = 1
    CIN(1) = -6.
    GO TO 2500
360 CONTINUE
380 IF (.NOT.TEST) GO TO 400
    IF (COMM(4).LT.0.) GO TO 680
    GO TO 820
400 IF (CONST(1).EQ.0.) GO TO 440
    IF (CONST(1).EQ.1.) GO TO 420
C   CONST(1) INVALID
    IND = 1
    CIN(1) = -7.
    GO TO 2500
420 EXPI = FAC9
    EXP1 = FAC8
440 IF (CONST(2).GE.0. .AND. CONST(3).GE.0.) GO TO 480
C   CONST(2) OR CONST(3) INVALID
460 IND = 1
    CIN(1) = -8.
    GO TO 2500
480 IF (CONST(2).EQ.0.) CONST(2) = FAC3
    IF (CONST(3).EQ.0.) CONST(3) = FAC4
    IF (CONST(2).LE.1./CONST(3) .OR. CONST(2).LE.1. .OR.
    * CONST(3).GE.1.) GO TO 460
    IF (COMM(1).GE.0.) GO TO 500
C   COMM(1) OUT OF RANGE
    IND = 1
    CIN(1) = -9.
    GO TO 2500
500 IF (COMM(1).GT.0.) CALLS = .TRUE.
    IF (COMM(2).EQ.0.) GO TO 540
    IF (COMM(2).GT.0.) GO TO 520
C   COMM(2) OUT OF RANGE
    IND = 1
    CIN(1) = -10.
    GO TO 2500
520 IF (COUT(6).LT.COMM(2)) GO TO 540
C   INITIAL VECTOR TOO LARGE
    IND = 1
    COMM(2) = 0.
    CIN(1) = -11.
    GO TO 2500
540 IF (COMM(3).EQ.0.) GO TO 600

```

```

IF (IW1.LT.10) GO TO 80
N2 = 8
IF (CIN(2).EQ.3.) N2 = 11
IF (IW1.LT.N2) GO TO 80
DO 560 I=1,N
  IF (Y(I).NE.W(I,9)) GO TO 560
C  INITIAL VECTOR ATTAINS GIVEN VALUE
  IND = 1
  COMM(3) = 0.
  CIN(1) = -12.
  GO TO 2500
560 CONTINUE
  DO 580 I=1,N
    W(I,10) = Y(I)
580 CONTINUE
C
C  TEST INPUT PARAMETERS FOR INTERRUPT ON POSITION
C
600 IF (COMM(4).GE.0.) GO TO 760
  IF (CIN(1).GT.1.) GO TO 680
  IF (X.EQ.XEND .AND. COMM(5).EQ.X) GO TO 840
  IF (X.NE.XEND) GO TO 640
C  VALUE OF CIN(1) DOES NOT PERMIT EXTRAPOLATION
620 IND = 1
  CIN(1) = -13.
  GO TO 740
640 IF ((X.GE.COMM(5) .AND. XEND.LT.COMM(5)) .OR. (X.LT.COMM(5)
* .AND. XEND.GE.COMM(5))) GO TO 760
  IF (INTER) GO TO 660
C  VALUE OF CIN(1) DOES NOT PERMIT EXTRAPOLATION
GO TO 620
C  ORDER OF POINTS X,COUT(4) AND COUT(5) INCORRECT
660 IND = 1
  CIN(1) = -14.
  GO TO 740
680 IF (X.EQ.COUT(5) .OR. X.EQ.COUT(4)) GO TO 660
  IF ((X.GE.COUT(4) .AND. COUT(4).LT.COUT(5)) .OR.
* (X.LT.COUT(4) .AND. COUT(4).GE.COUT(5))) GO TO 660
  IF (X.EQ.XEND) GO TO 840
  IF (DSIGN(1.D0,XEND-X).NE.DSIGN(1.D0,X-COUT(5))) GO TO 660
  IF (COMM(5).EQ.COUT(5) .OR. COMM(5).EQ.XEND) GO TO 700
  IF (DSIGN(1.D0,COMM(5)-COUT(5)).NE.DSIGN(1.D0,COMM(5)-XEND)) GO TO
* 700
C  INTERRUPT POINT NOT IN RANGE
  IND = 1
  CIN(1) = -15.
  GO TO 740
700 IF (COMM(5).EQ.COUT(5) .OR. COMM(5).EQ.X) GO TO 720
  IF (DSIGN(1.D0,COMM(5)-COUT(5)).EQ.DSIGN(1.D0,COMM(5)-X))GO TO 760
720 CIN(1) = 6.
740 COMM(4) = 0.
  GO TO 2500
C
C  SET DEFAULTS
C
760 IF (TEST) GO TO 820
  IF (DABS(CIN(4)).GT.DABS(CIN(3)) .OR. CIN(4).EQ.0.) GO TO 780
C  USER SET HMIN.GT.HMAX

```

```

IND = 1
CIN(1) = -16.
GO TO 2500
780 COUT(13) = DMAX1(2.D0*COUT(11)*DABS(XEND-X),DABS(CIN(3)))
FAC7 = 0.5
IF (CIN(1).GE.2.) FAC7 = 1.
COUT(14) = FAC7*DABS(XEND-X)
IF (CIN(4).EQ.0.) GO TO 800
COUT(14) = DMIN1(DABS(COUT(14)),DABS(CIN(4)))
800 IF (CIN(1).GE.2.) GO TO 820
CALL FCN(X, Y, W(1,1))
IF (CALLS) COMM(1) = COMM(1) - 1.
C
C INITIALISATION
C
820 IF (X.NE.XEND) GO TO 880
IF (CIN(1).LE.1.) GO TO 860
IF (CIN(1).NE.2. .OR. CIN(6).NE.0.) GO TO 860
C REPEATED CALL WITH X=XEND
IND = 1
CIN(1) = -17.
GO TO 2500
C
C RETURN WHEN X=XEND
C
840 COMM(4) = 0.
860 CIN(5) = 0.
CIN(6) = 0.
CIN(1) = 2.
GO TO 2500
C
C X.NE.XEND INITIALLY
C
880 IEND = 0
REDUCE = .FALSE.
HALVE = .FALSE.
RAT1 = 1.
IF (CIN(1).EQ.0.) GO TO 920
IF (CIN(1).EQ.1.) CIN(6) = CIN(5)
IF (CIN(6).EQ.0.) GO TO 900
IF (DSIGN(1.D0,CIN(6)).NE.DSIGN(1.D0,XEND-X)) CIN(6) = 0.D0
900 IF (CIN(2).EQ.2.) FAC2 = COUT(12)/COUT(11)
IF (DABS(CIN(6)).GE.COUT(13) .AND. CIN(1).GE.2.) GO TO 1460
920 ISTEP = 0
START = .TRUE.
IF (CIN(6).NE.0.) GO TO 1120
C
C ESTIMATE STEP
C
CIN(1) = 1.
FNORM = 0.E0
YNORM = 0.E0
DO 940 I=1,N
YNORM = DMAX1(YNORM,DABS(Y(I)))
FNORM = DMAX1(FNORM,DABS(W(I,1)))
940 CONTINUE
TOLEST = TOL
J = IDINT(CIN(2)+0.1D0) + 1

```

```

GO TO (960, 1100, 980, 1000, 1040), J
960 S = DMAX1(1.D0,YNORM)
GO TO 1080
980 S = DMAX1(YNORM,FAC2)
GO TO 1080
1000 DO 1020 I=1,N
    T = W(I,7)*DMAX1(W(I,8),DABS(Y(I)))
    IF (I.EQ.1) S = T
    S = DMIN1(S,T)
1020 CONTINUE
GO TO 1080
1040 DO 1060 I=1,N
    IF (I.EQ.1) S = W(1,7)
    S = DMIN1(S,W(I,7))
1060 CONTINUE
1080 TOLEST = TOLEST*S
1100 S = DSQRT(COUT(11))
    CIN(6) = (XEND-X)*(TOLEST*COUT(11)**EXPI*DMAX1(S,YNORM)/
    * DMAX1(S,YNORM))
1120 DO 1140 I=1,N
    W(I,4) = Y(I)
    W(I,5) = W(I,1)
1140 CONTINUE
    IF (DABS(CIN(6)).LT.COUT(13)) CIN(6) = DSIGN(COUT(13),XEND-X)
    IF (DABS(CIN(6)).GT.COUT(14)) CIN(6) = DSIGN(COUT(14),CIN(6))
    ISIG = 1
    GO TO 1560
C
C RETURN FOR INITIAL STEP
C
1160 IF (COMM(1).GT.0 .OR. .NOT.CALLS) GO TO 1220
C TOO MANY FCN CALLS TAKEN STARTING
1180 IND = 7
    DO 1200 I=1,N
    Y(I) = W(I,4)
1200 CONTINUE
    COUT(9) = COUT(9) + 1.
    GO TO 2500
1220 IF (DABS(HEST).LT.DABS(CIN(6))) GO TO 1240
C
C ESTIMATED STEP LARGER THAN INITIAL STEP
C
    IF (DABS(CIN(6))*CONST(2).GT.COUT(14)) GO TO 1380
    IF (DABS(HEST).GT.COUT(14)) HEST = DSIGN(COUT(14),HEST)
    IF (REDUCE) GO TO 1380
    IF (DABS(HEST).LT.CONST(2)*CONST(2)*DABS(CIN(6))) GO TO 1380
    CIN(6) = HEST
    GO TO 1420
1240 IF (DABS(CIN(6)).GT.COUT(13)) GO TO 1300
C ERROR TOLERANCE TOO SMALL FOR INITIAL STEP
1260 COUT(9) = COUT(9) + 1.
    DO 1280 I=1,N
    Y(I) = W(I,4)
1280 CONTINUE
    IND = 4
    GO TO 2500
C
C ESTIMATED STEP SMALLER THAN INITIAL STEP

```

```

C
1300 T = CIN(6)/CONST(2)
      IF (DABS(HEST).GT.DABS(T)) GO TO 1380
      T = T*FAC1
      IF (DABS(HEST).LT.DABS(T)) HEST = T
      CIN(6) = HEST
      IF (DABS(CIN(6)).LT.COUT(13)) CIN(6) = DSIGN(COUT(13),XEND-X)
      GO TO 1400
C
C   INSIGNIFICANT ERROR ESTIMATE ON INITIAL STEP
C
1320 IF (ISIG.EQ.4) GO TO 1360
      IF (REDUCE) GO TO 1340
      IF (DABS(CIN(6)).EQ.COUT(14)) GO TO 1360
      CIN(6) = CIN(6)*FAC
      IF (DABS(CIN(6)).GT.COUT(14)) CIN(6) = DSIGN(COUT(14),CIN(6))
      GO TO 1420
1340 IF (ISIG.EQ.3) GO TO 1260
      ISIG = 3
      CIN(6) = CIN(6)/FAC3
      GO TO 1400
C
C   INITIAL STEP ACCEPTED
C
1360 HEST = CIN(6)
1380 START = .FALSE.
      GO TO 1960
C
C   INITIAL STEP REJECTED TRY AGAIN
C
1400 REDUCE = .TRUE.
1420 DO 1440 I=1,N
      Y(I) = W(I,2)
1440 CONTINUE
      COUT(9) = COUT(9) + 1.
      GO TO 1520
C
C   TAKE A STEP, CHECK AGAINST LENGTH OF RANGE
C
1460 IF (ISTEP.LT.2) ISTEP = ISTEP + 1
1480 IF (((X+CIN(6))-XEND)*DSIGN(1.0D0,XEND-X).LT.0.0) GO TO 1520
      IF (ISTEP.EQ.-1) GO TO 1500
      CIN(6) = XEND - X
      RAT1 = DABS(COUT(4)-X)/DABS(CIN(6))
1500 IEND = 1
1520 DO 1540 I=1,N
      W(I,4) = W(I,2)
      W(I,5) = W(I,3)
1540 CONTINUE
1560 CALL D02YAF(X, CIN(6), N, Y, FCN, W, IW, N2)
      IF (CALLS) COMM(1) = COMM(1) - 4.
C
C   ESTIMATE NEW STEP
C
      IF (CIN(2).GE.3.) GO TO 1760
      S = 0.E0
      T = 0.
      J = 0

```

```

DO 1580 I=1,N
  IF (S.GT.DABS(W(I,6))) GO TO 1580
  J = I
  T = W(I,N2)
  S = DABS(W(I,6))
1580 CONTINUE
  IF (T.EQ.0.) GO TO 1640
1600 RAT = RAT1
  IF (START) GO TO 1320
  IF (J.NE.IDINT(COUT(10)+0.1D0)) GO TO 1940
  HEST = CIN(6)
  IF (DABS(HEST).EQ.COUT(14) .OR. IEND.EQ.1) GO TO 1940
  IF (DABS(HEST).LT.DABS(HEST1)) GO TO 1620
  HEST1 = HEST
  RAT = CONST(2)
  GO TO 1940
1620 IND = 3
  GO TO 2500
1640 J = 0
  K = IDINT(CIN(2)+0.1D0) + 1
  GO TO (1680, 1660, 1720), K
1660 RAT = (TOL/S)**EXP1
  GO TO 1940
1680 T = 1.E0
  DO 1700 I=1,N
    T = DMAX1(T,DABS(Y(I)))
1700 CONTINUE
  RAT = (TOL*T/S)**EXP1
  GO TO 1940
1720 T = FAC2
  DO 1740 I=1,N
    T = DMAX1(T,DABS(Y(I)))
1740 CONTINUE
  RAT = (TOL*T/S)**EXP1
  GO TO 1940
1760 IF (CIN(2).EQ.4.) GO TO 1800
  DO 1780 I=1,N
C  RELATIVE ERROR FAILURE
  IF (W(I,8).GT.0.0) GO TO 1780
  IF ((Y(I).GE.0.0 .AND. W(I,2).GE.0.0) .OR. (Y(I).LT.0.0
* .AND. W(I,2).LT.0.0)) GO TO 1780
  IND = 6
  GO TO 2500
1780 CONTINUE
1800 J = -1
  I1 = 0
  DO 1920 I=1,N
    IF (W(I,6).NE.0.) GO TO 1840
    IF (W(I,N2).EQ.0.) GO TO 1820
    IF (I1.EQ.0) J = I
    GO TO 1920
1820 IF (J.LT.0) J = I
  GO TO 1920
1840 IF (CIN(2).EQ.4.) GO TO 1860
  T = DMAX1(W(I,8),DABS(Y(I)))*W(I,7)/DABS(W(I,6))
  GO TO 1880
1860 T = W(I,7)/DABS(W(I,6))
1880 IF (I1.EQ.0) GO TO 1900

```

```

        IF (S.LE.T) GO TO 1920
1900  S = T
        J = 0
        I1 = 1
        IF (W(I,N2).EQ.1.) J = I
1920  CONTINUE
        IF (J.NE.0) GO TO 1600
        RAT = (TOL*S)**EXP1
1940  HEST = RAT*CIN(6)
        IF (START) GO TO 1160
C
C   TEST ESTIMATED STEP
C
1960  IF (DABS(HEST).GE.DABS(CIN(6))) GO TO 2100
C
C   STEP REJECTED
C
        RAT1 = 1
        IEND = 0
        IF (ISTEP.LT.0) GO TO 2060
        HALVE = .TRUE.
        HEST = HEST*CONST(3)
        COUT(9) = COUT(9) + 1.
        DO 1980 I=1,N
            Y(I) = W(I,2)
            W(I,3) = W(I,5)
            W(I,2) = W(I,4)
1980  CONTINUE
        T = CIN(6)/CONST(2)
        IF (DABS(HEST).LT.DABS(T)) HEST = T
        CIN(6) = HEST
        IF (DABS(CIN(6)).GE.COUT(13)) GO TO 2020
C   STEP LENGTH TOO SMALL
2000  IND = 2
        GO TO 2500
2020  IF (COMM(1).GT.0. .OR. .NOT.CALLS) GO TO 1480
        IF (ISTEP.LT.2) GO TO 1180
C   TOO MANY FCN CALLS
2040  IND = 5
        GO TO 2500
C
C   STEP REJECTED AFTER INTERRUPT IN FIRST STEP
C
2060  IF (COMM(1).LT.0.) GO TO 1180
        CIN(6) = (X-COUT(4))*0.5
        IF (DABS(CIN(6)).LT.COUT(13)) GO TO 2000
        X = COUT(4)
        DO 2080 I=1,N
            Y(I) = W(I,4)
            W(I,1) = W(I,5)
2080  CONTINUE
        COUT(9) = COUT(9) + 2.
        INIT = .TRUE.
        START = .TRUE.
        REDUCE = .TRUE.
        ISTEP = 0
        GO TO 1560
C

```



```

C  STEP ACCEPTED
C
2100 COUT(5) = COUT(4)
      COUT(4) = X
      X = X + CIN(6)
      HEST1 = 0.
      COUT(10) = FLOAT(J)
      COUT(8) = COUT(8) + 1.
      IF (.NOT.INIT) GO TO 2120
      INIT = .FALSE.
      CIN(5) = CIN(6)
      COUT(1) = CIN(6)
      COUT(2) = CIN(6)
      GO TO 2140
2120 IF (DABS(CIN(6)).LT.DABS(COUT(1))) COUT(1) = CIN(6)
      IF (DABS(CIN(6)).GT.DABS(COUT(2))) COUT(2) = CIN(6)
2140 IF (HEST.EQ.CIN(6) .AND. DABS(HEST).EQ.COUT(14)) GO TO 2220
      HEST = HEST*CONST(3)
      IF (DABS(CIN(6)).EQ.COUT(14) .OR. IEND.EQ.1) COUT(3) = COUT(3)
      * + 1.
      IF (.NOT.HALVE) GO TO 2160
      HALVE = .FALSE.
      HEST = 0.5*(HEST+CIN(6))
2160 IF (IEND.EQ.1) GO TO 2180
      T = CONST(2)*CIN(6)
      IF (DABS(HEST).GT.DABS(T)) HEST = T
      IF (DABS(HEST).GT.COUT(14)) HEST = DSIGN(COUT(14),HEST)
      IF (DABS(HEST).LT.COUT(13)) HEST = DSIGN(COUT(13),XEND-X)
      GO TO 2200
2180 CIN(6) = CIN(6)*RAT1
      IF (DABS(CIN(6)).GE.DABS(HEST)) GO TO 2220
2200 CIN(6) = HEST
2220 S = 0.E0
      DO 2240 I=1,N
          S = DMAX1(S,DABS(Y(I)))
2240 CONTINUE
      COUT(6) = DMAX1(S,COUT(6))
      COUT(7) = DMIN1(S,COUT(7))
      CALL FCN(X, Y, W(1,1))
      IF (CIN(1).EQ.0.) GO TO 2460
      IF (COMM(3).EQ.0.) GO TO 2280
      DO 2260 I=1,N
          IF (DABS(Y(I)-W(I,9)).LT.DABS(W(I,10)-W(I,9))) W(I,10) = Y(I)
2260 CONTINUE
2280 IF (.NOT.CALLS) GO TO 2300
      COMM(1) = COMM(1) - 1.
      IF (COMM(1).LE.0.) GO TO 2040
2300 IF (IEND.EQ.1) GO TO 2480
      IF (ISTEP.GE.0) GO TO 2310
      ISTEP = -ISTEP
      GO TO (2375, 2370, 2500, 2410), ISTEP
C
C  TEST INTERRUPTS
C
2310 IF (COMM(3).EQ.0.) GO TO 2360
      DO 2340 I=1,N
          IF (Y(I).EQ.W(I,9)) GO TO 2320
          IF ((W(I,2).GE.W(I,9) .AND. Y(I).GE.W(I,9)) .OR.

```

```

* (W(I,2).LT.W(I,9) .AND. Y(I).LT.W(I,9))) GO TO 2340
C COMPONENTS ACHIEVE GIVEN VALUE
2320 CIN(1) = 3.
    IF (ISTEP.EQ.0) GO TO 2420
    GO TO 2375
2340 CONTINUE
C NORM OF SOLUTION TOO LARGE TOO CONTINUE
2360 IF (COMM(2).EQ.0. .OR. COUT(6).LT.COMM(2)) GO TO 2380
    CIN(1) = 4.
    IF (ISTEP.EQ.0) GO TO 2420
2370 COMM(2) = 0.0
    GO TO 2500
2375 COMM(3) = 0.0
    GO TO 2500
2380 IF (COMM(4).EQ.0.) GO TO 2440
    IF (COMM(4).LT.0.) GO TO 2400
C INTERRUPT EVERY STEP
    CIN(1) = 5.
    IF (ISTEP.EQ.0) GO TO 2420
    GO TO 2500
2400 IF ((COMM(5).GE.X .AND. XEND.GE.X) .OR. (COMM(5).LT.X .AND.
* XEND.LT.X)) GO TO 2440
C INTERRUPT AT SPECIFIED POINT
    CIN(1) = 6.
    IF (ISTEP.EQ.0) GO TO 2420
2410 COMM(4) = 0.0
    GO TO 2500
2420 IF (COMM(1).LT.0.) GO TO 1180
    ISTEP = -IDINT(CIN(1)-1.5D0)
    GO TO 1480
2440 IF (COMM(1).LT.0.) GO TO 2040
2460 IF (IEND.EQ.0) GO TO 1460
C NORMAL RETURN
2480 CIN(1) = 2.
    X = XEND
C
C RETURN TO MAIN PROGRAM
C
2500 IF (CALLS .AND. COMM(1).EQ.0.) COMM(1) = -1.
    IFAIL = P01AAF(IFAIL,IND,SRNAME)
    IF (CIN(1).GE.0. .AND. IFAIL.GT.0) CIN(1) = 7.
    RETURN
    END
C.....
SUBROUTINE D02YAF(X, H, N, Y, FCN, W, IW1, IW2)
C MARK 7 RELEASE. NAG COPYRIGHT 1978.
C .. SCALAR ARGUMENTS ..
    REAL*8 H, X
    INTEGER IW1, IW2, N
C .. ARRAY ARGUMENTS ..
    REAL*8 W(IW1,IW2), Y(N)
C .. SUBROUTINE ARGUMENTS ..
C FCN
C ..
C .. LOCAL SCALARS ..
    REAL*8 EPS, S
    INTEGER I, NI
C .. LOCAL ARRAYS ..

```

```

REAL*8 C(10)
C .. FUNCTION REFERENCES ..
REAL*8 X02AAF
C ..
EPS = X02AAF(0.0)
C(1) = 1./6.
C(2) = 1./3.
C(3) = 0.125
C(4) = 0.375
C(5) = 0.5
C(6) = 1.5
C(7) = 2.0
C(8) = 2./3.
C(9) = 0.2
C(10) = 4./3.
N1 = 6
IF (IW2.EQ.4) N1 = 4
IF (IW2.EQ.6) N1 = 5
DO 20 I=1,N
    W(I,3) = Y(I) + C(2)*H*W(I,1)
20 CONTINUE
    CALL FCN(X+C(2)*H, W(1,3), W(1,N1))
    DO 40 I=1,N
        IF (N1.EQ.5) W(I,4) = 0.5*(W(I,N1)-W(I,1))*C(2)*H
        W(I,3) = Y(I) + C(1)*H*(W(I,1)+W(I,N1))
40 CONTINUE
        CALL FCN(X+C(2)*H, W(1,3), W(1,N1))
        DO 60 I=1,N
            W(I,2) = Y(I) + H*(C(3)*W(I,1)+C(4)*W(I,N1))
60 CONTINUE
            CALL FCN(X+C(5)*H, W(1,2), W(1,3))
            DO 100 I=1,N
                IF (N1.EQ.4) GO TO 80
                W(I,IW2) = -C(2)*W(I,1) - C(10)*W(I,3) + C(6)*W(I,N1)
80    W(I,2) = Y(I) + H*(C(5)*W(I,1)-C(6)*W(I,N1)+C(7)*W(I,3))
100 CONTINUE
                CALL FCN(X+H, W(1,2), W(1,N1))
                DO 140 I=1,N
                    W(I,2) = Y(I)
                    Y(I) = Y(I) + H*(C(1)*(W(I,1)+W(I,N1))+C(8)*W(I,3))
                    IF (N1.EQ.4) GO TO 120
                    W(I,3) = W(I,N1)
                    W(I,N1) = C(9)*H*(W(I,IW2)+C(1)*W(I,N1))
                    S = 0.d0
                    IF (DABS(W(I,N1)).LE.30.d0*C(9)*EPS*DABS(H)*DMAX1(DABS(W(I,IW2))
* ,C(1)*DABS(W(I,3)))) S = 1.d0
                    W(I,IW2) = S
120    W(I,3) = W(I,1)
140 CONTINUE
                RETURN
            END
C.....
INTEGER FUNCTION P01AAF(IFAIL, ERROR, SRNAME)
C MARK 1 RELEASE. NAG COPYRIGHT 1971
C MARK 3 REVISED
C MARK 4A REVISED, IER-45
C MARK 4.5 REVISED

```

```

C MARK 7 REVISED (DEC 1978)
C RETURNS THE VALUE OF ERROR OR TERMINATES THE PROGRAM.
  INTEGER ERROR, IFAIL, NOUT
  DOUBLE PRECISION SRNAME
C TEST IF NO ERROR DETECTED
  IF (ERROR.EQ.0) GO TO 20
C DETERMINE OUTPUT UNIT FOR MESSAGE
  CALL X04AAF (0,NOUT)
C TEST FOR SOFT FAILURE
  IF (MOD(IFAIL,10).EQ.1) GO TO 10
C HARD FAILURE
  WRITE (NOUT,99999) SRNAME, ERROR
C STOPPING MECHANISM MAY ALSO DIFFER
  CALL P01AAZ
C STOP
C SOFT FAIL
C TEST IF ERROR MESSAGES SUPPRESSED
  10 IF (MOD(IFAIL/10,10).EQ.0) GO TO 20
  WRITE (NOUT,99999) SRNAME, ERROR
  20 P01AAF = ERROR
  RETURN
99999 FORMAT (1H0, 38HERROR DETECTED BY NAG LIBRARY ROUTINE , A8,
  * 11H - IFAIL = , I5//)
  END
c.....
  SUBROUTINE P01AAZ
C CALL TRACE
  STOP '? FAILURE DETECTED BY NAG LIBRARY ROUTINE'
  END
c.....
  REAL*8 FUNCTION X02AAF(X)
C NAG COPYRIGHT 1975
C MARK 4.5 RELEASE
  REAL*8 X
C * EPS *
C RETURNS THE VALUE EPS WHERE EPS IS THE SMALLEST
C POSITIVE
C NUMBER SUCH THAT 1.0 + EPS > 1.0
C THE X PARAMETER IS NOT USED
C FOR ICL 1900
c X02AAF = 2.0**(-37.0)
  X02AAF = 1.0D-20
C FOR DEC10
C X02AAF = "146400000000
  RETURN
  END
c.....
  REAL*8 FUNCTION X02ABF(X)
C NAG COPYRIGHT 1975
C MARK 4.5 RELEASE
  REAL*8 X
C * RMIN *
C RETURNS THE VALUE OF THE SMALLEST POSITIVE REAL FLOATING-
C POINT NUMBER EXACTLY REPRESENTABLE ON THE COMPUTER
C THE X PARAMETER IS NOT USED
C FOR ICL 1900
c X02ABF = 2.0**(-257.0)
  X02ABF = 1.0D-200

```

```

C   FOR DEC10
C   X02ABF = "000400000000
      RETURN
      END
c.....
      SUBROUTINE X04AAF(I,NERR)
C   MARK 7 RELEASE. NAG COPYRIGHT 1978
C   MARK 7C REVISED IER-190 (MAY 1979)
C   IF I = 0, SETS NERR TO CURRENT ERROR MESSAGE UNIT NUMBER
C   (STORED IN NERR1).
C   IF I = 1, CHANGES CURRENT ERROR MESSAGE UNIT NUMBER TO
C   VALUE SPECIFIED BY NERR.
C
C   *** NOTE ***
C   THIS ROUTINE ASSUMES THAT THE VALUE OF NERR1 IS SAVED
C   BETWEEN CALLS. IN SOME IMPLEMENTATIONS IT MAY BE
C   NECESSARY TO STORE NERR1 IN A LABELLED COMMON
C   BLOCK /AX04AA/ TO ACHIEVE THIS.
C
C   .. SCALAR ARGUMENTS ..
      INTEGER I, NERR
C   ..
C   .. LOCAL SCALARS ..
      INTEGER NERR1
C   ..
      DATA NERR1 /6/
      IF (I.EQ.0) NERR = NERR1
      IF (I.EQ.1) NERR1 = NERR
      RETURN
      END
c.....

```