



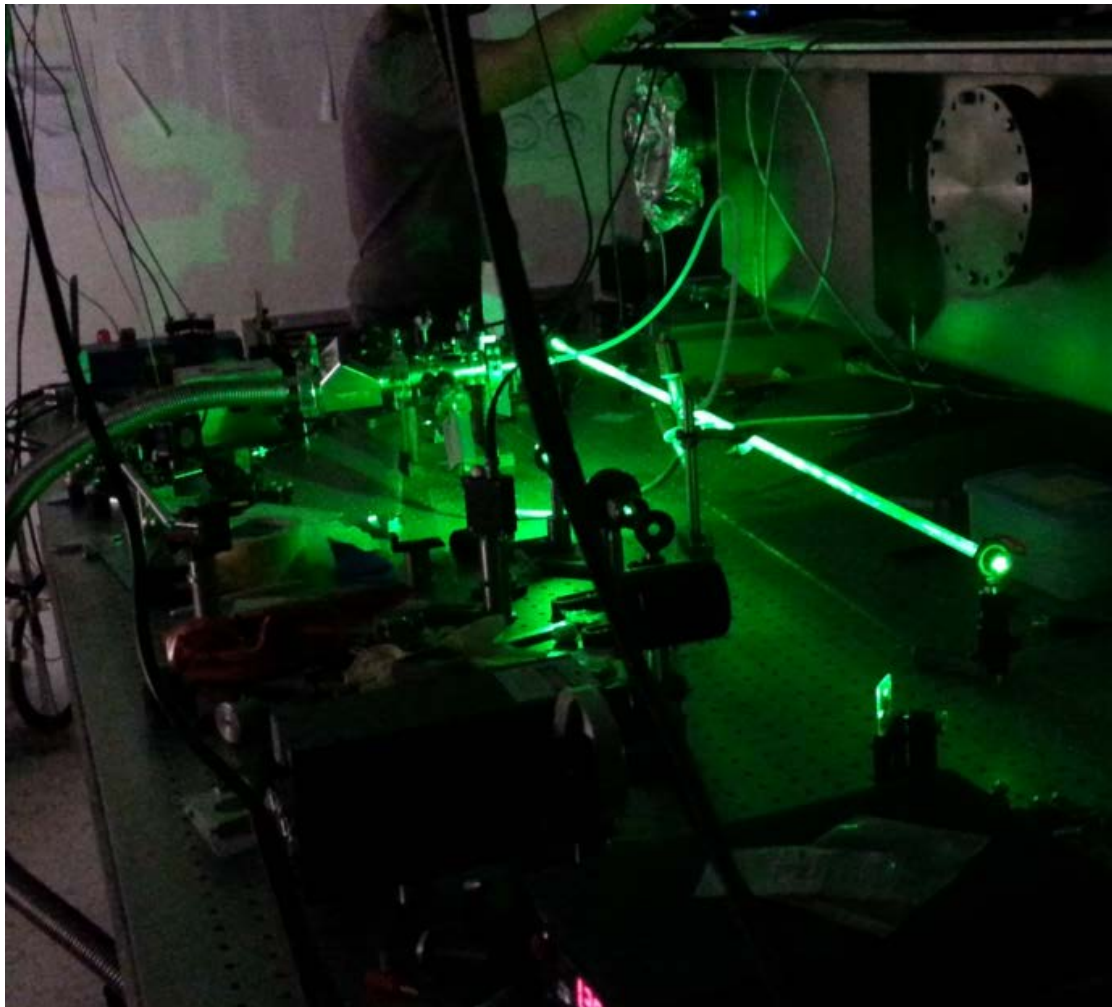
Πανεπιστήμιο Κρήτης

Τμήμα Φυσικής



Διπλωματική Εργασία

ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΠΗΓΗΣ ΑΤΟΜΙΚΟΥ ΙΩΔΙΟΥ ΥΨΗΛΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ



Φοιτητής: **Γ. Χατζηδρόσος**

ph3994

Ηράκλειο, Δεκέμβριος 2014

Περιεχόμενα

Περίληψη.....	3
Εισαγωγή.....	4
Περιγραφή της πειραματικής διαδικασίας.....	6
Πείραμα.....	8
Βαθμονόμηση ισχύος laser φωτοδιάσπασης και τάσης φωτοδιόδων.....	8
Βαθμονόμηση απωλειών παραθύρων:.....	9
Μέτρηση απορρόφησης στα 1315nm και αντιπαραβολή με θεωρία.....	11
Εξάρτηση πυκνότητας ατομικού ιωδίου από ισχύ του laser φωτοδιάσπασης και εξαγωγή συντελεστών επανασύνδεσης.....	15
Εξάρτηση από θερμοκρασία.....	18
Προσπάθεια μείωσης ρυθμού επανασύνδεσης τοιχωμάτων (kw).....	20
Συμπεράσματα.....	22
Παραρτήματα.....	24
Βιβλιογραφία:.....	28

Περίληψη

Σκοπός της Διπλωματικής εργασίας ήταν η παραγωγή ατομικού ιωδίου υψηλής πυκνότητας από την φωτοδιάσπαση μοριακού ιωδίου με χρήση πράσινου laser (532nm) και η μελέτη της εξάρτησης της παραγόμενης πυκνότητας από την ισχύ του laser φωτοδιάσπασης, τη θερμοκρασία, και τις ιδιότητες του κελιού. Η όλη διαδικασία αποτελεί τμήμα ενός μεγαλύτερου πειράματος που η ομάδα έχει αναλάβει.

Η γενική διαδικασία που ακολουθήσαμε για την παραγωγή ατομικού ιωδίου και την μεγιστοποίηση της παραγόμενης πυκνότητας αυτού ήταν η ακόλουθη:

- Σχεδιασμός και υλοποίηση πειραματικής διάταξης απορρόφησης ατομικού ιωδίου. Ευθυγράμμιση και βελτιστοποίηση αυτής.
- Βαθμονόμηση ισχύος laser φωτοδιάσπασης (532nm)
- Βαθμονόμηση απωλειών παραθύρων
- Εξαγωγή πυκνότητας ατομικού ιωδίου από προσαρμογή των μετρήσεων στη θεωρία.
- Σχεδιασμός και κατασκευή κελιού και δοκιμή εσωτερικών επιστρώσεων για ελαχιστοποίηση της αντίδρασης επανασύνδεσης ατομικού σε μοριακό ιώδιο στα τοιχώματα του κελιού.
- Μελέτη εξάρτησης πυκνότητας ατομικού ιωδίου από την ισχύ του laser φωτοδιάσπασης και μελέτη των ρυθμών επανασύνδεσης.

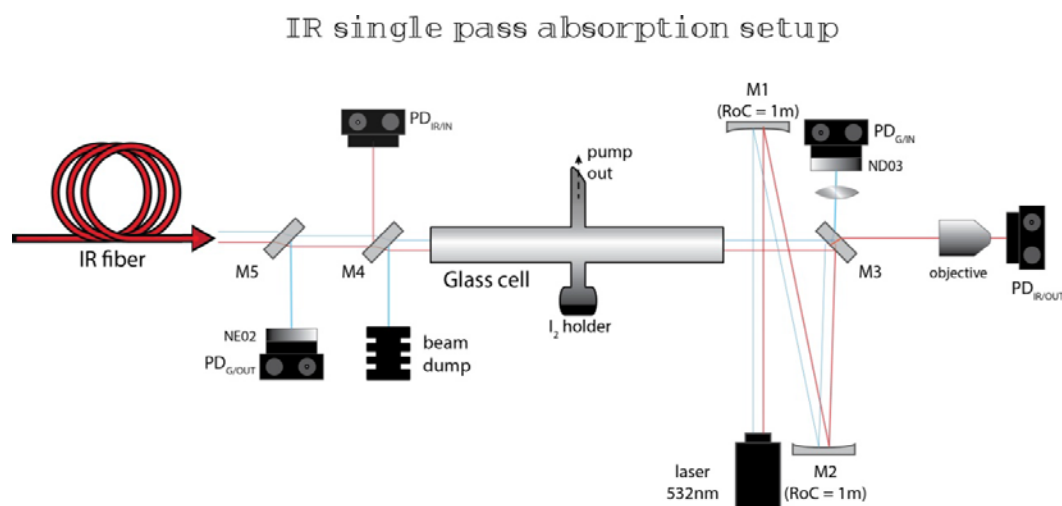
Εισαγωγή

Κίνητρο

Το κίνητρο για τη μελέτη και κατασκευή πηγής ατομικού ιωδίου από την ερευνητική ομάδα του κ. Ρακιτζή είναι ότι το ιώδιο αποτελεί ένα πρόσφορο σύστημα για τη μελέτη της παραβίασης της συμμετρίας ομοτιμίας (Parity Non-Conservation / PNC) σε ατομικά συστήματα [1-3]. Η μελέτη φαινομένων PNC σε ατομικά συστήματα έχει ενδιαφέρον γιατί αποσκοπεί στο να εξετάσει, να επαληθεύσει και πιθανά να επεκτείνει το καθιερωμένο μοντέλο (Standard Model) μέσω μετρήσεων σε χαμηλές ενέργειες και, συνεπώς, με χαμηλό κόστος σε σύγκριση με τα πειράματα φυσικής υψηλών ενεργειών. Το ιώδιο συναντάται στη φύση σε μορφή διατομικού μορίου (I_2). Σκοπός μας ήταν να μελετήσουμε και να βελτιστοποιήσουμε τη παραγωγή ατομικού ιωδίου από μοριακό μέσω της αντίδρασης φωτοδιάσπασης $I_2 + h\nu \rightarrow I + I$, που λαμβάνει χώρα στη περιοχή των 532 nm (πράσινο).

Πειραματική διάταξη

Για να μετρήσουμε την πυκνότητα ατομικού ιωδίου αυτό που κάνουμε είναι να μετράμε απορρόφηση στη γραμμή $5P_{3/2}^0 \rightarrow 5P_{1/2}^0$, η οποία ενεργειακά βρίσκεται στους 7602.79 cm^{-1} ή σε μήκος κύματος $\lambda_{\text{vac}} = 1315.27 \text{ nm}$ περίπου. Με βάση την απορρόφηση αυτή, το νόμο των Beer – Lambert και την ατομική θεωρία του ιωδίου είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε τη πυκνότητα ατομικού ιωδίου. Για να μετρήσουμε την απορρόφηση χρησιμοποιήσαμε την πειραματική διάταξη της εικόνας 1.



Εικόνα 1: πειραματική διάταξη

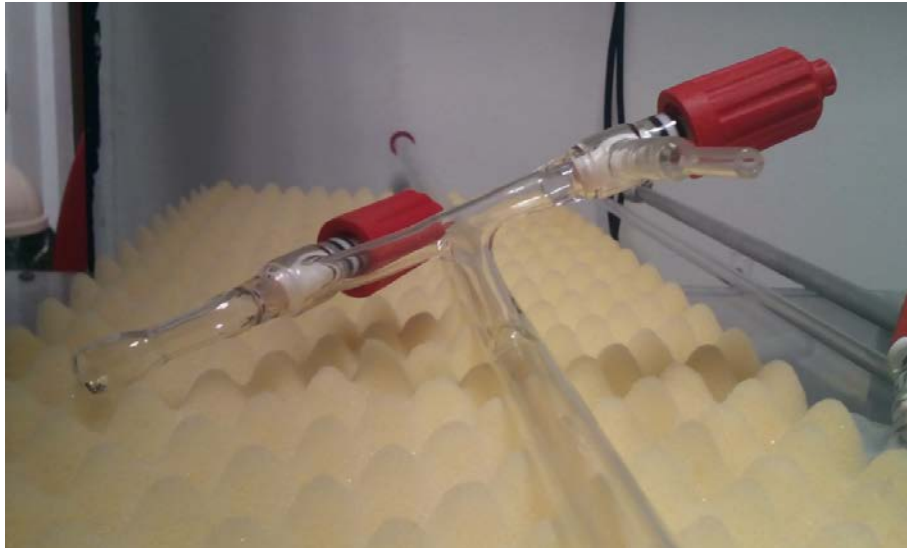
Υπέρυθρο φως (IR) στα 1315 nm (σε συντονισμό με την επιθυμητή μετάβαση) εξέρχεται από οπτική ίνα (IR fiber) και διέρχεται μέσα από το κελί του

ιωδίου (Glass cell, μήκους 120cm) για να καταλήξει, μέσω ενός φακού (objective), στη φωτοδίοδο ανίχνευσης ($PD_{IR,OUT}$). Ένα μικρό τμήμα της δέσμης εκτρέπεται από το κάτοπτρο M4 προς την φωτοδίοδο ελέγχου ($PD_{IR,IN}$), ώστε να παρακολουθούμε την ισχύ του IR που εισέρχεται στο κελί (το σκέλος αυτό δεν είναι απαραίτητο). Προς την αντίθετη με το IR κατεύθυνση διαδίδεται το laser φωτοδιάσπασης (532 nm), την εισερχόμενη και εξερχόμενη στο κελί ισχύ του οποίου παρακολουθούμε με τις φωτοδίοδους $PD_{G,IN}$ και $PD_{G,OUT}$. Εντός του κελιού οι δύο δέσμες επικαλύπτονται, ώστε να μεγιστοποιείται η έκθεση του IR στα άτομα ιωδίου που παράγονται από τη φωτοδιάσπαση. Το laser φωτοδιάσπασης έπειτα συνεχίζει την ποριά του προς το κάτοπτρο M4 το οποίο χρησιμεύει στο να μειώνει την ισχύ του έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε την σύζευξη στην οπτική ίνα του υπέρυθρου laser (IR fiber / βλέπε εικόνα 1), κάτι το οποίο πιθανόν θα δημιουργούσε αρνητική ανάδραση στο IR laser.

Το ίδιο το κελί φαίνεται στην εικόνα 2. Είναι αεροστεγώς κλεισμένο και διαθέτει δοχείο στο οποίο τοποθετούμε μοριακό ιώδιο σε στερεή μορφή (I_2 holder / βλ. και εικόνα 3) και έξοδο για άντληση υπό κενό (pump out / βλ. και εικόνα 3). Οι μετρούμενες ποσότητες του πειράματος είναι τα φωτορεύματα που αναπτύσσονται στις φωτοδίοδους $PD_{IR,OUT}$ (και για λόγους ελέγχου ενίοτε στην $PD_{IR,IN}$, χωρίς όμως να είναι απαραίτητη η μέτρηση της), $PD_{G,IN}$ και $PD_{G,OUT}$, τα οποία μετατρέπουμε σε διαφορές δυναμικού πάνω σε αντιστάσεις $2.2k\Omega$ και καταγράφουμε σε παλμογράφο. Συμπληρωματικά καταγράφεται η πίεση στο εσωτερικό του κελιού με ένα μετρητή Pirani και η θερμοκρασία στην οποία πραγματοποιείται το πείραμα. Η διαδικασία μέτρησης περιγράφεται στην επόμενη ενότητα.



Εικόνα 2: κελί πειραματικής διάταξης



Εικόνα 3: περιοχή εναπόθεσης I_2 και υποδοχή για αντλία κενού στο κελί

Περιγραφή της πειραματικής διαδικασίας

Το στερεό I_2 έχει τάση ατμών που δίνονται από το γενικό τύπο της μορφής $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$, με $A = 3.36429$, $B = 1039.159$ και $C = -146.589$, T η θερμοκρασία σε Κ και P η πίεση ατμών σε bar [4]. Το laser στα 532nm φωτοδιασπά βάσει της αντίδρασης $I_2 + h\nu \rightarrow I + I$, με ρυθμό $J = \sigma \Phi$, όπου Φ η ροή φωτονίων στα 532 nm (photons/sec) και $\sigma = 2.8 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ η ενεργός διατομή φωτοδιάσπασης, και το ατομικό ιώδιο επανασυνδέεται κυρίως μέσω δύο διαδικασιών, (α) επανασύνδεση με ρυθμό k_r στον όγκο του ατμού $I + I + A \rightarrow I_2 + A$, όπου A τρίτο σώμα (σημαντικότερο A είναι το ίδιο το I_2) και (β) επανασύνδεση με ρυθμό k_w στα τοιχώματα $I + wall \rightarrow I_{wall}$ και εν συνεχεία $I_{wall} + I_{wall} \rightarrow I_2$. Σε ισορροπία υπάρχει μία τελική σταθερή πυκνότητα ατομικού ιωδίου με την οποία αλληλεπιδρά το IR.

Προκειμένου να δούμε την απορρόφηση του IR από τον ατμό ιωδίου, σαρώνουμε τη συχνότητα του πάνω από τη γραμμή απορρόφησης και καταγράφουμε τη διέλευση φωτός στη δίοδο $PD_{IR,OUT}$. Η κανονικοποίηση της απορρόφησης γίνεται απουσία του laser στα 532nm, οπότε ατομικό ιώδιο δεν υπάρχει και το IR περνάει από το κελί χωρίς απορρόφηση. Προκειμένου να υπολογίσουμε τους ρυθμούς επανασύνδεσης χρειάζεται να γνωρίζουμε τη πυκνότητα μοριακού ιωδίου. Αυτή υπολογίζεται από τη μετρούμενη απορρόφηση του laser στα 532 nm, μέσω των τιμών των $PD_{G,IN}$ και $PD_{G,OUT}$. Για τη μελέτη των ρυθμών επανασύνδεσης, και κυρίως του ρυθμού k_w , πραγματοποιήσαμε διάφορες επικαλύψεις στο εσωτερικό του κελιού. Τέλος, η σε πρώτη φάση μελέτη της θερμοκρασιακής εξάρτησης, έγινε με πραγματοποίηση του πειράματος σε θερμοκρασία δωματίου και στους 0°C.

Σε όλη τη διαδικασία, οι βασικότεροι παράγοντες οι οποίοι επηρεάζουν την παραγόμενη πυκνότητα ατομικού ιωδίου στο κελί είναι συνοπτικά οι παρακάτω:

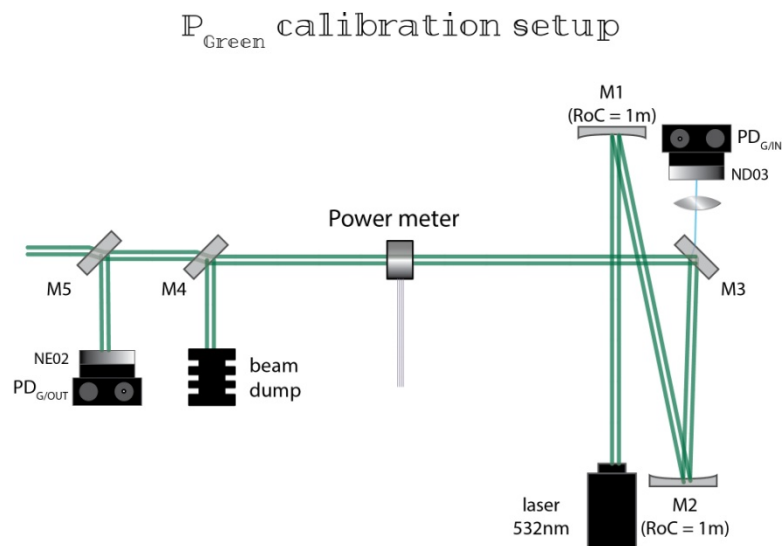
1. Η ισχύς του laser φωτοδιάσπασης.

2. Η θερμοκρασία/πυκνότητα μοριακού ιωδίου (και ο αντίστοιχος ρυθμός επανασύνδεσης k_r).
3. Η γεωμετρία και επιφάνεια/επικαλύψεις του κελιού (και ο αντίστοιχος ρυθμός επανασύνδεσης k_w).
4. Πιθανή παρουσία αερίων buffer μέσα στο κελί.

Πείραμα

Με σκοπό να μειώσουμε, όσο αυτό είναι δυνατόν, τα συστηματικά σφάλματα του πειράματος χρειάζεται να πραγματοποιήσουμε κάποιες αρχικές μετρήσεις πριν αρχίσουμε το πείραμα. Συγκεκριμένα, πρέπει να βρούμε α) την σχέση μεταξύ της τάσης που αναπτύσσεται στις φωτοδιόδους και της ισχύος του πράσινου laser και β) τις απώλειες ισχύος στα παράθυρα του κελιού

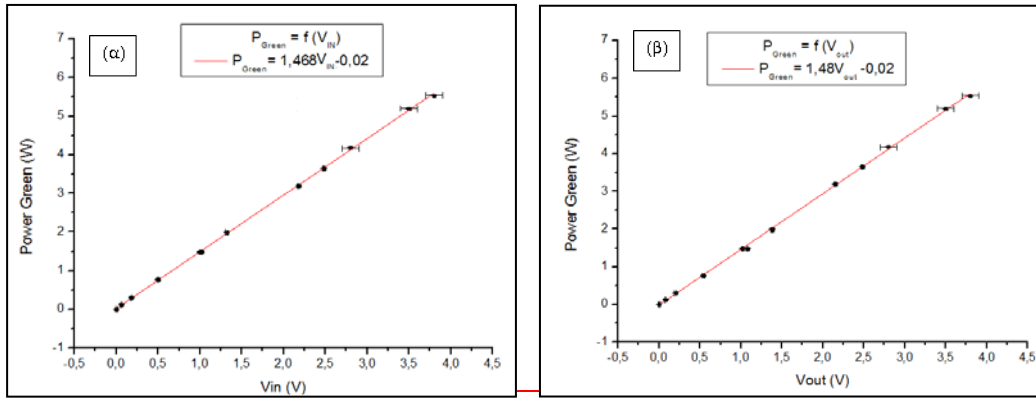
Βαθμονόμηση ισχύος laser φωτοδιάσπασης και τάσης φωτοδίων



Εικόνα 4: βαθμονόμηση ισχύος πράσινου laser.

Ο σκοπός εδώ είναι να συσχετίσουμε την ισχύ του laser φωτοδιάσπασης στη περιοχή του κελιού με τις ενδείξεις των φωτοδίων $PD_{G,IN}$ και $PD_{G,OUT}$. Όπως φαίνεται στην εικόνα 4, πράσινο φως ξεκινάει από το laser 532nm μέσω των κατόπτρων M1 και M2 κατευθύνεται στο κάτοπτρο M3 όπου εκεί μικρό μέρος του κατευθύνεται στην φωτοδίοδο $PD_{G,IN}$ και το υπόλοιπο συνεχίζει προς την θέση όπου κανονικά θα είχαμε το κελί. Περνώντας έπειτα από τα κάτοπτρα M4 και M5 καταλήγει στην φωτοδίοδο $PD_{G,OUT}$. Τέλος στην θέση του κελιού τοποθετούμε τον μετρητή ισχύος του πράσινου laser (power meter).

Αυξάνοντας σταδιακά την ισχύ του laser φωτοδιάσπασης και μετρώντας τις αντίστοιχες τάσεις στις φωτοδιόδους $PD_{G,IN/OUT}$, με χρήση averaging στον παλμογράφο, έτσι ώστε να μειώσουμε τα στατιστικά σφάλματα, καταλήγουμε στις καμπύλες βαθμονόμησης που φαίνονται στην εικόνα 5.



Εικόνα 5: (α) Μετρούμενη ισχύς Laser φωτοδιάσπασης συναρτήσει της τάσης της φωτοδιόδου (α) $PD_{G,IN}$ (τάση/ισχύς εισόδου) (β) $PD_{G,OUT}$ (τάση/ισχύς εξόδου)

Οι προσαρμογή των δεδομένων δίνει:

$$\begin{aligned} PD_{G,IN}: P_{Green,IN} &= 1.468 V_{IN} - 0.02 \\ PD_{G,OUT}: P_{Green,OUT} &= 1.48 V_{OUT} - 0.02 \end{aligned} \quad (1)$$

Έχουμε συνδέσει έτσι την ένδειξη τάσης που μας δείχνει ο παλμογράφος για τις φωτοδιόδους με την ισχύ του πράσινου laser.

Όμοια διαδικασία θα μπορούσαμε να ακολουθήσουμε για το υπέρυθρο laser αλλά κάτι τέτοιο δεν είναι απαραίτητο μιας και σε αυτό που μας ενδιαφέρει η σχετική μεταβολή της έντασης με και χωρίς ιώδιο στο κελί.

Βαθμονόμηση απωλειών παραθύρων:

Πρακτικά έχουμε έναν ακόμη παράγοντα απώλειας. Το κελί έχει παράθυρα στις εισόδους του τα οποία μας δημιουργούν απώλειες ισχύος. Παραδείγματος χάρη λόγω ανακλάσεων ή σκέδασης σε αυτά, ένα ποσοστό από το πράσινο laser δεν μπαίνει ποτέ μέσα στο κελί. Οπότε το επόμενο βήμα στην ανάλυση μας είναι να μετρήσουμε, με το κάθε παράθυρο ξεχωριστά και έπειτα και με τα δύο παράθυρα μαζί, το ποσοστό της διερχόμενης ισχύος του laser. Από τις ενδείξεις των φωτοδιόδων τις οποίες έχουμε βαθμονομήσει ήδη μπορούμε για διαφορετικές τιμές εισερχόμενης ισχύος να υπολογίσουμε την επί τοις εκατό διέλευση πράσινου φωτός από τα παράθυρα της διάταξης. Παίρνοντας αρκετές τιμές υπολογίζουμε μια μέση τιμή για την διέλευση, που δίνεται παρακάτω:

$$\text{Παράθυρο \#1: } T_{w1} = (90,8 \pm 0,1)\%$$

$$\text{Παράθυρο \#2: } T_{w2} = (90.5 \pm 0,1)\% \quad (2)$$

$$\text{Δυο παράθυρα: } T_w = (82.2 \pm 0,2)\%$$

Και παρατηρούμε σωστά πως το γινόμενο των συντελεστών διέλευσης των παραθύρων 1 και 2 μας δίνει το συντελεστή διέλευσης από τα δυο παράθυρα.

Σε αυτό το σημείο να τονίσουμε τη σημασία που έχει ο σωστός καθαρισμός των οπτικών. Οι αρχικές μετρήσεις που είχαμε για τα παράθυρα ήταν οι ακόλουθες:

Παράθυρό #1: $(49,3 \pm 0,1)\%$

Παράθυρο #2: $(85.5 \pm 0,1)\%$

Δυο παράθυρα: $(42.8 \pm 0,2)\%$

Τα παραπάνω ποσοστά βελτιώθηκαν μέχρι την τιμή που παρουσιάζουμε στην εξίσωση (2) με καθαρίσμα με χημική διαδικασία. Παρόλα αυτά είναι προφανές ότι εάν δεν είχαμε κάνει την αντίστοιχη μέτρηση θα είχαμε χάσει πολύ μεγάλο ποσοστό ισχύος laser το οποίο εάν δεν γνωρίζαμε θα μας οδηγούσε σε λάθος συμπεράσματα για την εισερχόμενη και εξερχόμενη ισχύ του laser φωτοδιάσπασης στο κελί και, κατ' επέκταση, για την υπολογιζόμενη πυκνότητα μοριακού ιωδίου.

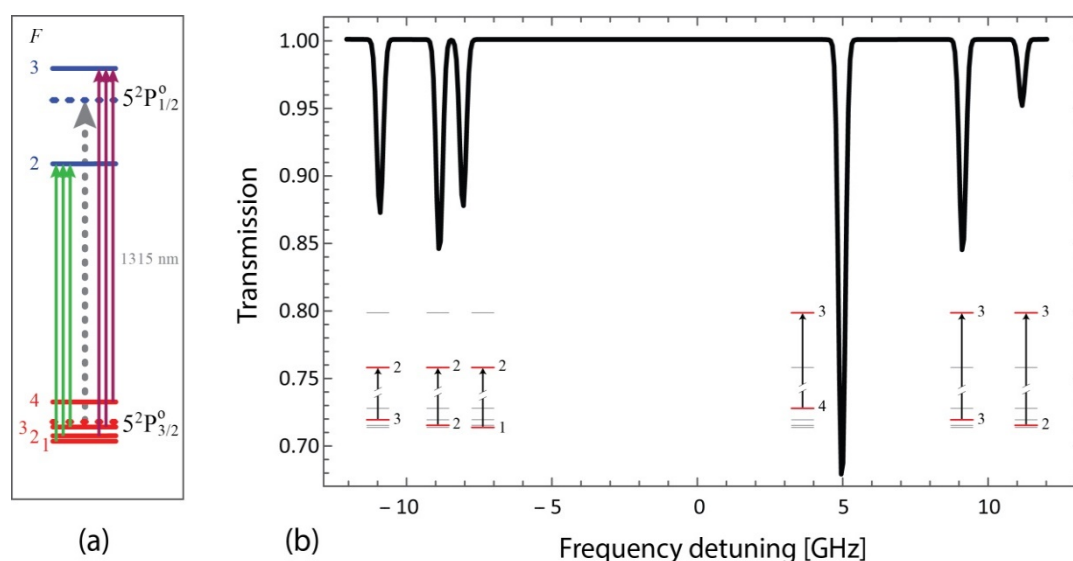
Συνολική βαθμονόμηση:

Συνδυάζοντας τα παραπάνω, καταλήγουμε ότι η συνολική εισερχόμενη και εξερχόμενη ισχύς του laser φωτοδιάσπασης που αλληλεπιδρά με τον ατμό I_2 θα είναι:

$$\begin{aligned} P_{G,IN} &= T_{w1} \times P_{Green,IN} = 0.908 \times (1.468 V_{IN} - 0.02) \\ P_{G,OUT} &= P_{Green,OUT} / T_{w2} = (1.48 V_{OUT} - 0.02) / 0.855 \end{aligned} \quad (3)$$

Μέτρηση απορρόφησης στα 1315nm και αντιπαραβολή με θεωρία

Έχοντας κάνει αυτή την προετοιμασία εκτελούμε το πείραμα. Τοποθετούμε αρχικά I_2 στην περιοχή I_2 holder του κελιού, που φαίνεται στην εικόνα 3 και ασφαλίζουμε την βαλβίδα. Έπειτα αφού έχουμε μειώσει την πίεση μέσα στο κελί περίπου στα 10^{-2} mbar, με αντλία κενού μέσω του pump out, κλείνουμε την βαλβίδα του pump out και ανοίγουμε την βαλβίδα του I_2 holder. Λόγω τάσης ατμών (όπως έχουμε αναφέρει στην Εισαγωγή στο κομμάτι της πειραματικής διαδικασίας) διαχέεται στο κελί αέριο I_2 . Είναι σημαντικό να σημειωθεί εδώ ότι η τελική πυκνότητα I_2 στο κελί καθορίζεται από τη θερμοκρασία του ψυχρότερου σημείου (*cold spot*) στην επιφάνεια του κελιού με την οποία το I_2 έρχεται σε επαφή, και όχι π.χ. από τη θερμοκρασία του I_2 στη περιοχή του holder ή αλλού. Έπειτα ανάβουμε το laser φωτοδιάσπασης το οποίο ξεκινά τη διαδικασία $I_2 + h\nu \rightarrow I + I$. Ταυτόχρονα ανάβουμε το υπέρυθρο laser και σαρώνουμε μια περιοχή συχνοτήτων, εύρους μερικών GHz, γύρω από την μετάβαση $5P_{3/2}^o \rightarrow 5P_{1/2}^o$ του ιωδίου. Το ενεργειακό σχήμα και η θεωρητική μορφή αυτής της γραμμής απορρόφησης του ατομικού ιωδίου φαίνονται στην εικόνα 6. Παρατηρούμε ότι το φάσμα απορρόφησης χωρίζεται σε δύο ευδιάκριτες ομάδες, την $F \rightarrow F' = 2$ (με $F = 1, 2, 3$) και την $F \rightarrow F' = 3$ (με $F = 2, 3, 4$), όπου F (F') οι κβαντικοί αριθμοί υπέρλεπτης υφής της κατάστασης $5P_{3/2}^o$ ($5P_{1/2}^o$).



Εικόνα 6: (α) Ενεργειακό σχήμα μετάβασης $5P_{3/2}^o \rightarrow 5P_{1/2}^o$ του ατομικού ιωδίου στα 1315 nm (β) Θεωρητικό φάσμα απορρόφησης. Σε κάθε συντονισμό σημειώνεται η αντίστοιχη $F \rightarrow F'$ μετάβαση.

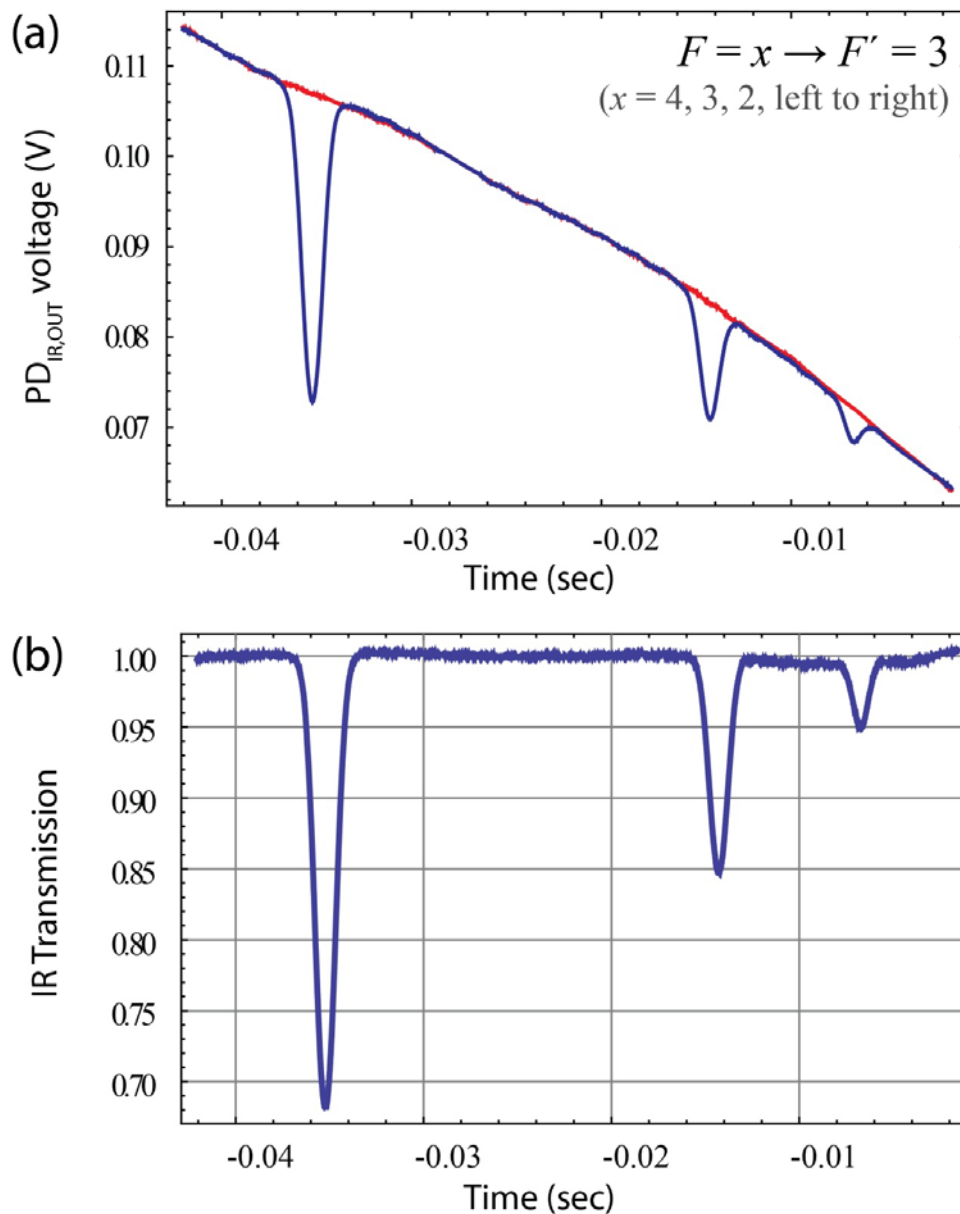
Από τις βαθμονομημένες φωτοδιόδους (τις οποίες έχουμε τοποθετήσει όπως φαίνεται στην εικόνα 1) μπορούμε να μετράμε ανά πάσα στιγμή την τιμή της ισχύος η οποία εισέρχεται και εξέρχεται από το κελί για κάθε laser ξεχωριστά. Μέσω των φωτοδίοδων παίρνουμε στον παλμογράφο μια εικόνα για τις γραμμές απορρόφησης.

Αφού έχουμε αυτήν, σταματάμε την ροή φωτονίων από το laser φωτοδιάσπασης με ένα beam bump και παίρνουμε στον παλμογράφο την εικόνα έντασης για το υπέρυθρο laser, ενώ αυτό κάνει σάρωση συχνοτήτων, χωρίς απορρόφηση. Να θυμίσουμε ότι απουσία του laser φωτοδιάσπασης δεν υπάρχει μέσα στο κελί ατομικό ιώδιο για να απορροφήσει στο υπέρυθρο, άρα με τη μέθοδο αυτή πραγματοποιούμε την απαραίτητη μέτρηση υποβάθρου για το IR laser, η οποία μας χρησιμεύει στην κανονικοποίηση της καμπύλης απορρόφησης όπως φαίνεται στην εικόνα 7. Στις μετρήσεις αυτές πρέπει να γίνουν οι εξής διαδικασίες:

α) αντιστοίχιση τιμών άξονα x, από μονάδες χρόνου (χρόνος μέτρησης / σάρωσης) σε μονάδες συχνοτήτων (αποσυντονισμός / detuning από τη κεντρική συχνότητα απορρόφησης)

β) Σύγκριση με θεωρία και εξαγωγή πειραματικής τιμής πυκνότητας ατομικού ιωδίου

Το (α) γίνεται γνωρίζοντας τις σταθερές υπέρλεπτης υφής για το ιώδιο και χρησιμοποιώντας το τύπο για τον ενεργειακό διαχωρισμό λόγω υπέρλεπτης υφής για να υπολογίσουμε τις συχνότητες συντονισμού της κάθε μετάβασης $F \rightarrow F'$ (βλ. παράρτημα, όπου δίνονται οι απαραίτητες σχέσεις). Κατόπιν εντοπίζουμε τις χρονικές στιγμές στις οποίες εμφανίζονται οι συντονισμοί και πραγματοποιούμε γραμμική προσαρμογή χρόνων – συχνοτήτων.



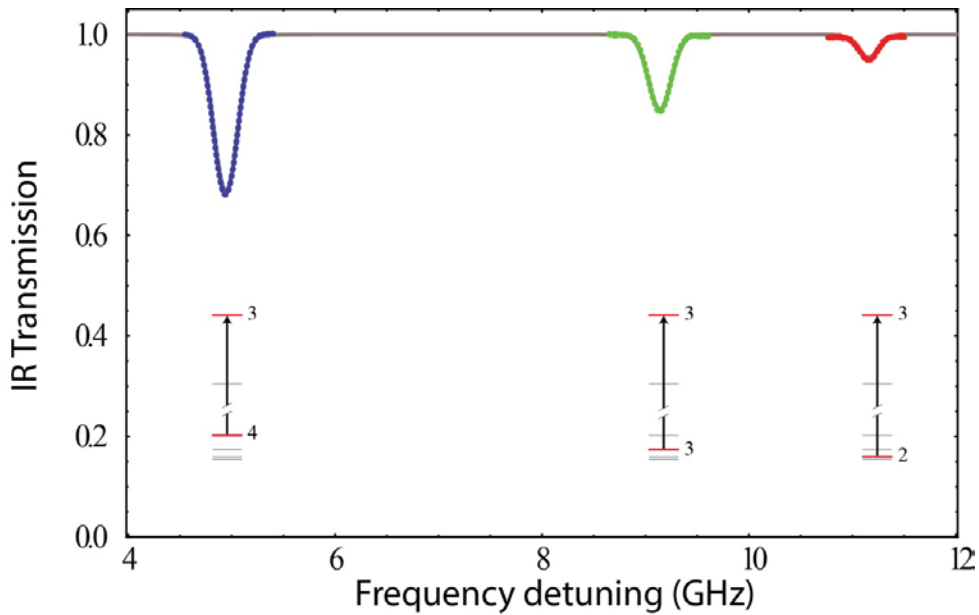
Εικόνα 7: (α) Ισχύς διέλευσης υπέρυθρου laser με (μπλε) και χωρίς (κόκκινο) laser φωτοδιάσπασης στην ομάδα γραμμών $F \rightarrow F' = 3$
 (β) Κανονικοποιημένες γραμμές διέλευσης του α

Για το (β) χρησιμοποιούμε προσαρμογή των πειραματικών γραμμών απορρόφησης με τους θεωρητικούς τύπους και αφήνουμε σαν ελεύθερες παραμέτρους τη πυκνότητα του ιωδίου και το φασματικό εύρος Lorentz.

Εφαρμογή των παραπάνω βημάτων μας δίνει εικόνες προσαρμογής θεωρίας / πειράματος, όπως η εικόνα 8, όπου φαίνεται τόσο η θεωρητική προσαρμογή όσο και οι πειραματικά μετρούμενες γραμμές. Οι μετρήσεις της εικόνας 8 αποτελούν τη μέγιστη σταθερή απορρόφηση από ατομικό ιώδιο που κατορθώσαμε να επιτύχουμε σε θερμοκρασία δωματίου, και αντιστοιχούν σε μία πυκνότητα ατομικού ιωδίου:

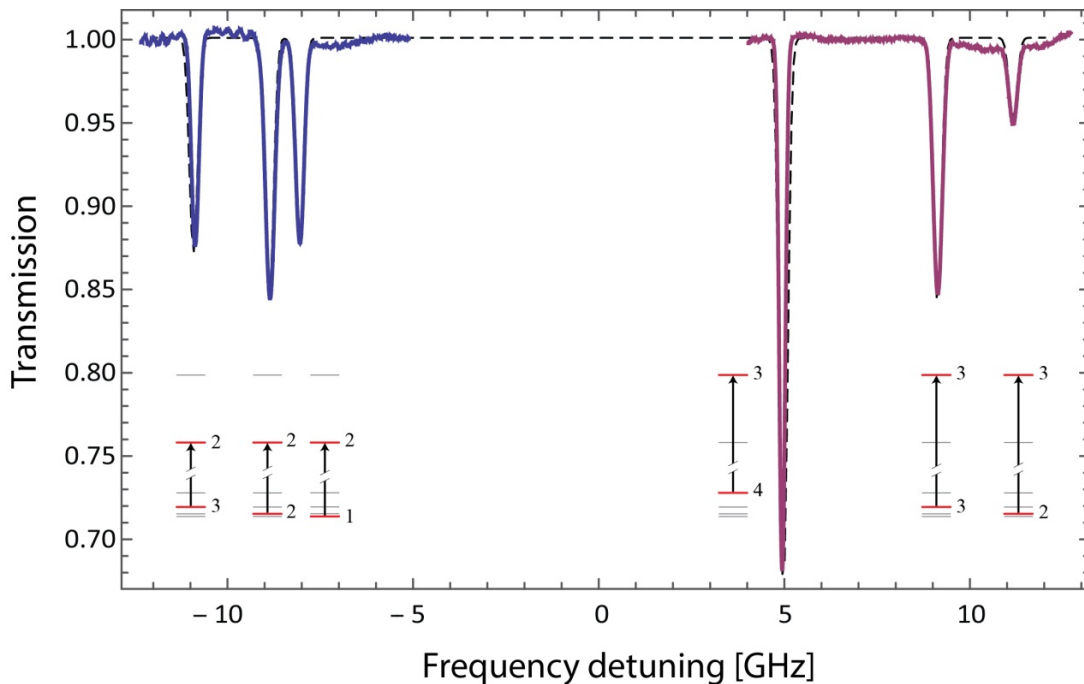
$$[I] = (8.5 \pm 0.2) \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

ενώ το φασματικό εύρος Lorentz βρέθηκε κοντά στην αναμενόμενη τιμή $\Gamma_L = 3$ MHz.



Εικόνα 8: Μετατροπή στον χώρο των συχνοτήτων και προσέγγιση με θεωρητικές τιμές.

Πραγματοποιώντας αντίστοιχες μετρήσεις στην ομάδα μεταβάσεων $F \rightarrow F' = 2$, και ακολουθώντας τις ίδιες διαδικασίες προκύπτει η εικόνα 9, που παρουσιάζει το συνολικό φάσμα απορρόφησης του ιωδίου στη συγκεκριμένη γραμμή.



Εικόνα 9: Συνολικό φάσμα απορρόφησης ατομικού ιωδίου στα 1315nm για πυκνότητα $[I] = (8.5 \pm 0.2) \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$. Με μπλε η ομάδα $F'= 2$, με μωβ η ομάδα $F'= 3$ και με

διακεκομμένη γραμμή η θεωρητική καμπύλη.

Εξάρτηση πυκνότητας ατομικού ιωδίου από ισχύ του Laser φωτοδιάσπασης και εξαγωγή συντελεστών επανασύνδεσης

Είναι σημαντικό να γνωρίζουμε την εξάρτηση της παραγόμενης πυκνότητας ατομικού ιωδίου από την ισχύ του Laser φωτοδιάσπασης, αλλά και να διερευνήσουμε πως η επανασύνδεση του ατομικού ιωδίου σε μοριακό επηρεάζει και τελικά καθορίζει τη μέγιστη πυκνότητα που μπορεί να επιτευχθεί.

Μεταβάλλοντας, λοιπόν, την ισχύ του Laser φωτοδιάσπασης και ακολουθώντας τη διαδικασία της προηγούμενης ενότητας, προκύπτουν τα πειραματικά σημεία του γραφήματος της εικόνας 10. Η εξίσωση ρυθμών που περιγράφει την εξάρτηση της πυκνότητας ατομικού ιωδίου από τις παραμέτρους του πειράματος δίνεται από:

$$\frac{d[I]}{dt} = \sigma \Phi [I_2] - k_r [I]^2 [I_2] - k_w [I], \quad (4)$$

όπου $\sigma = 2.8 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ η ενεργός διατομή φωτοδιάσπασης, Φ η ροή φωτονίων στα 532 nm σε φωτόνια/sec, η οποία συνδέεται με τη μετρούμενη ισχύ, P , μέσω της σχέσης $\Phi = P / (hc/\lambda)$, k_r ο ρυθμός επανασύνδεσης ατομικού σε μοριακό ιώδιο στον όγκο του αερίου και k_w ο ρυθμός επικόλλησης ατομικού ιωδίου στα τοιχώματα του κελιού. Ο πρώτος όρος στο δεξί μέλος της (4) παράγει ατομικό ιώδιο, ενώ οι άλλοι δύο το καταναλώνουν. Η πυκνότητα μοριακού ιωδίου στο κελί είναι σταθερή για σταθερή θερμοκρασία και υπολογίζεται από μετρήσεις του συντελεστή διέλευσης του πράσινου Laser μέσα από το κελί:

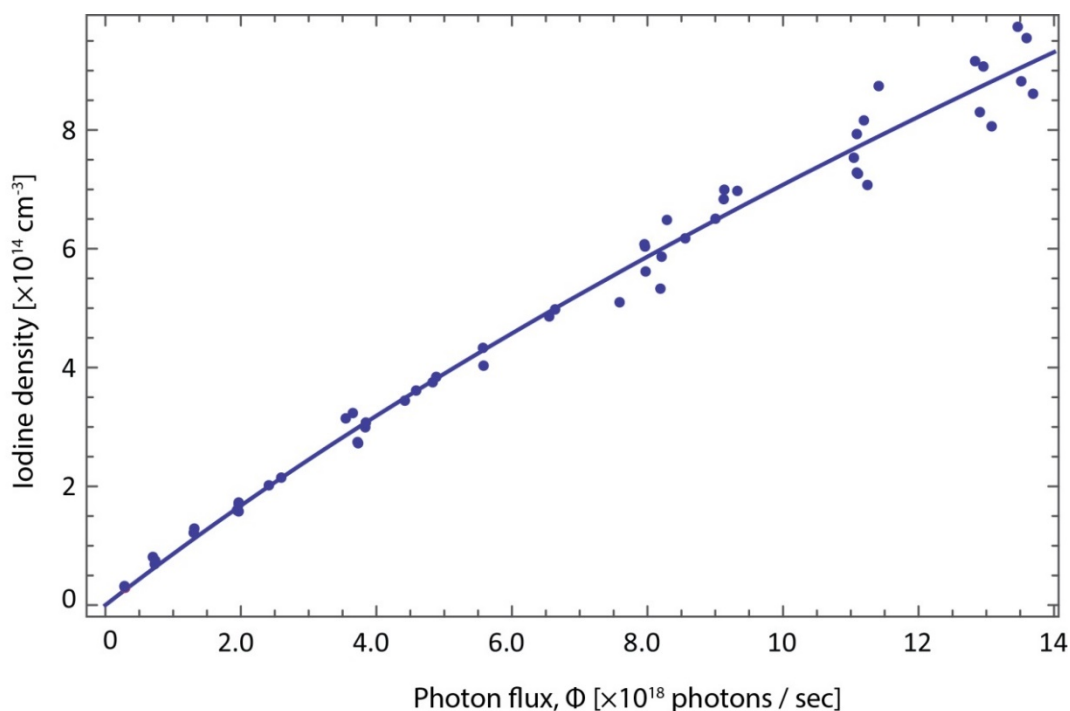
$$\frac{P_{G,OUT}}{P_{G,IN}} = e^{-\sigma L [I_2]} = 0.31 \pm 0.05 \Rightarrow [I_2] = (3.5 \pm 0.2) \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \quad (5)$$

Λύνοντας την εξίσωση (4) για στατική κατάσταση (steady state, δηλαδή $d [I]/dt = 0$) ως προς $[I]$, παίρνουμε:

$$[I]_{\infty} = \frac{-k_w + \sqrt{k_w^2 + 4 [I_2]^2 k_r \sigma \Phi}}{2 [I_2] k_r} \quad (6)$$

Την εξίσωση αυτή χρησιμοποιούμε για τη προσαρμογή των πειραματικών σημείων, με ελεύθερες παραμέτρους τις σταθερές επανασύνδεσης k_r και k_w . Η προσαρμοσμένη καμπύλη φαίνεται στην εικόνα 10. Από το αποτέλεσμα της προσαρμογής προκύπτουν οι σταθερές k_r και k_w :

$$\begin{aligned} k_r &= (8.1 \pm 0.4) \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1} \\ k_w &= (78 \pm 4) \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (7)$$



Εικόνα 10: Πυκνότητα ατομικού ιωδίου συναρτήσεως της ροής φωτονίων του laser φωτοδιάσπασης σε θερμοκρασία δωματίου. Φαίνονται τα πειραματικά σημεία και η προσαρμογή με την εξίσωση (6).

Παρατηρούμε ότι τα πειραματικά αποτελέσματα προσεγγίζονται ικανοποιητικά από τη συνάρτηση της εξίσωσης (6) και, τουλάχιστον για τις περιοχές ισχύος του laser φωτοδιάσπασης στις οποίες εργαζόμαστε, ο όρος επανασύνδεσης που φαίνεται να κυριαρχεί είναι αυτός της επικόλλησης στα τοιχώματα του κελιού. Παρατηρούμε επίσης ότι η προσαρμοσμένη τιμή για τη σταθερά επανασύνδεσης στον όγκο του αερίου απέχει από τη τιμή της βιβλιογραφίας, $k_r = (3.1 \pm 0.3) \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [6], γεγονός που χρήζει περαιτέρω διερεύνησης.

Αξίζει επίσης να παρατηρήσουμε από την εξίσωση (6) τι συμβαίνει στις δυο ακραίες περιπτώσεις όπου $k_w \approx 0$ και $k_w \gg k_r$.

i) Συγκεκριμένα στην περίπτωση που $k_w \approx 0$

$$[I]_{\infty} = \sqrt{\frac{\sigma\Phi}{k_r}}$$

που σημαίνει ότι θα βλέπαμε μια εξάρτηση $[I] = A \cdot \sigma^{1/2}$ για την

πυκνότητα του ατομικού ιωδίου

ii) Εάν από την άλλη $k_w \gg k_r$ τότε αναπτύσσοντας την ρίζα στην σχέση (6) κατά Taylor και κρατώντας μόνο τους δύο πρώτους όρους θα οδηγούμασταν στην σχέση:

$$[I]_{\infty} = \frac{-k_w + \sqrt{k_w^2 + 4 [I_2]^2 k_r \sigma \Phi}}{2 [I_2] k_r} = \frac{-k_w + k^2 w + 2 [I_2]^2 k_r \sigma \Phi}{2 [I_2] k_r} = \frac{-k_w + k^2 w}{2 [I_2] k_r} + [I_2] \sigma \Phi$$

όπου μας δίνει γραμμική εξάρτηση σε σχέση με την ροή των φωτονίων.

Άρα από την συμπεριφορά γραφημάτων όπως αυτό της εικόνας 10 μπορούμε να βγάλουμε συμπεράσματα για το ποιος όρος είναι πιο σημαντικός. Στην περίπτωση που παρουσιάζεται στην εικόνα 10 βλέπουμε μια ενδιάμεση σχέση για την εξάρτηση της πυκνότητας ατομικού ιωδίου.

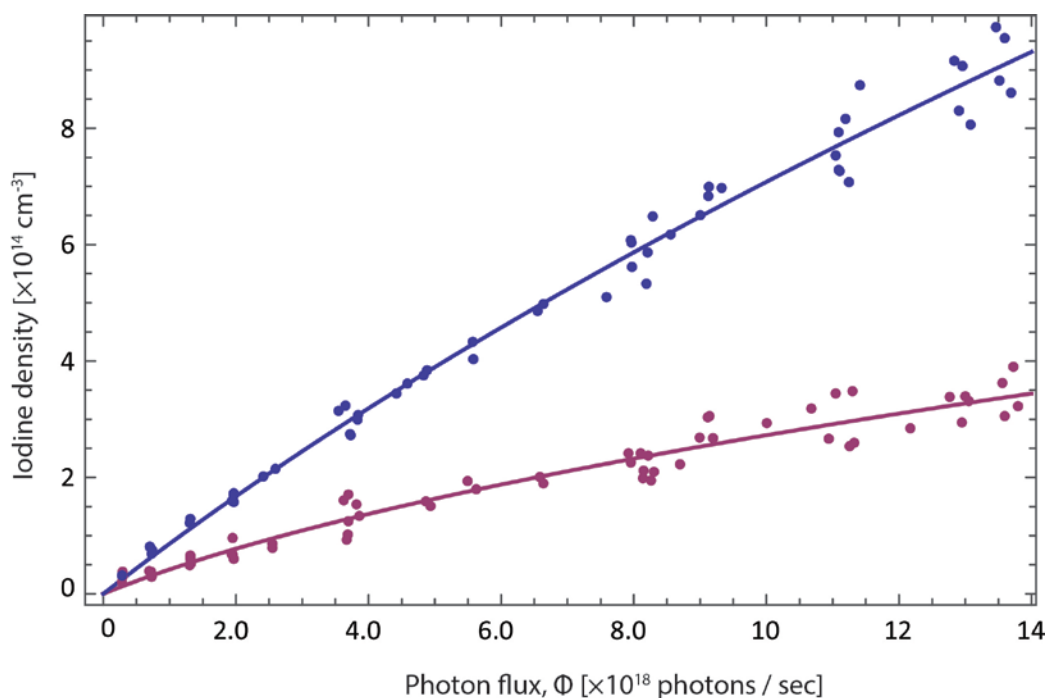
Εξάρτηση από θερμοκρασία

Επαναλαμβάνουμε τις προηγούμενες μετρήσεις εξάρτησης της πυκνότητας από την ισχύ του laser φωτοδιάσπασης, αλλά αυτή τη φορά εμβαπτίζοντας το δοχείο του I₂ σε πάγο. Με αυτό τον τρόπο δημιουργούμε ένα ψυχρό σημείο (cold spot) και η πυκνότητα μοριακού ιωδίου σε όλο τον όγκο του κελιού καθορίζεται από τη θερμοκρασία αυτού του cold spot (εν προκειμένω 0°C).

Εν συνεχεία συγκρίνουμε τις γραμμές σε θερμοκρασία δωματίου (όπου εκτελούμε συνήθως το πείραμα) και στην θερμοκρασία των 0°C. Τα αποτελέσματα φαίνονται στην εικόνα 11 και μπορούμε να δούμε ότι σε θερμοκρασία δωματίου η απορρόφηση, άρα και η πυκνότητα ατομικού ιωδίου, είναι μεγαλύτερες. Πραγματοποιώντας και πάλι προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων χρησιμοποιώντας την εξίσωση (6), για τις σταθερές επανασύνδεσης προκύπτουν τα εξής:

$$\begin{aligned} k_r &= (111 \pm 6) \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1} \\ k_w &= (52 \pm 4) \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (8)$$

Σε σχέση με τις προσαρμοσμένες τιμές της εξ. (7) για θερμοκρασία δωματίου παρατηρείται μία σημαντική αύξηση του ρυθμού επανασύνδεσης στον όγκο του αερίου, k_r , γεγονός αναμενόμενο από τη θεωρία, και μία πτώση του ρυθμού επανασύνδεσης στα τοιχώματα.



Εικόνα 11: Πυκνότητα ατομικού ιωδίου συναρτήσει της ροής φωτονίων του laser φωτοδιάσπασης για θερμοκρασία δωματίου (μπλε) και για $\vartheta = 0^\circ\text{C}$ (μωβ)

Για τη μελέτη θερμοκρασιών μεγαλύτερων από τη θερμοκρασία δωματίου είναι απαραίτητο είτε να αυξήσουμε τη θερμοκρασία του περιβάλλοντος χώρου στο επιθυμητό επίπεδο, είτε να τυλίξουμε ολόκληρο το κελί με κάποιου είδους θερμαινόμενης ταινίας (heat tape), προσέχοντας να μην αφήνουμε μη θερμαινόμενα σημεία στην επιφάνειά του καθώς, όπως προείπαμε, η πυκνότητα μοριακού ιωδίου στο κελί καθορίζεται από τη θερμοκρασία του ψυχρότερου σημείου με το οποίο έρχεται σε επαφή το αέριο μοριακό ιώδιο. Τέτοιες μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν ποιοτικά, αλλά όχι διεξοδικά, με θέρμανση του κελιού μέχρι περίπου τους 90°C . Οι μετρήσεις αυτές έδειξαν ότι η αύξηση της πυκνότητας μοριακού ιωδίου λόγω της αύξησης της θερμοκρασίας εν γένει συνεπάγεται και την αύξηση της πυκνότητας ατομικού ιωδίου (εντονότερη απορρόφηση).

Συμπερασματικά τα αποτελέσματά μας δείχνουν ότι η αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί σε μεγαλύτερες πυκνότητες παραγόμενου ατομικού ιωδίου. Παρόλα αυτά, στις μετρήσεις πολωσιμετρίας στις οποίες θα χρησιμοποιηθεί η στήλη αερίου ατομικού ιωδίου που παράγουμε υπεισέρχονται κι άλλοι παράγοντες που επηρεάζονται από τη θερμοκρασία, όπως για παράδειγμα το εύρος των φασματικών γραμμών, αλλά και τεχνικές περιπλοκές που απορρέουν από την απαίτηση ομοιόμορφης και σταθερής θέρμανσης και θερμικής μόνωσης του κελιού. Έτσι εκκρεμεί μία διεξοδική μελέτη της θερμοκρασιακής εξάρτησης του πολωσιμετρικού σήματος και των δυνατοτήτων αντιμετώπισης των τεχνικών θεμάτων που προκύπτουν από τη θέρμανση του κελιού προκειμένου να καθοριστεί η ιδανική θερμοκρασία πραγματοποίησης του πειράματος.

Προσπάθεια μείωσης ρυθμού επανασύνδεσης τοιχωμάτων (k_w)

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, εκτός από την επανασύνδεση $I + I + A \rightarrow I_2 + A$ στον όγκο του αερίου, μεγάλο ρόλο φαίνεται να παίζει και η επανασύνδεση ατομικού ιωδίου σε μοριακό με ρυθμό k_w στα τοιχώματα $I + wall \rightarrow I_{wall}$ και εν συνεχεία $I_{wall} + I_{wall} \rightarrow I_2$. Μια προσπάθεια της ομάδας για την μείωση αυτού του συντελεστή επανασύνδεσης ήταν να επικαλύψουμε το εσωτερικό του κελιού με διάφορες χημικές ενώσεις, προκειμένου να μειωθεί η πιθανότητα επικόλλησης στο τοίχωμα. Συγκεκριμένα οι επικαλύψεις που δοκιμάστηκαν ήταν:

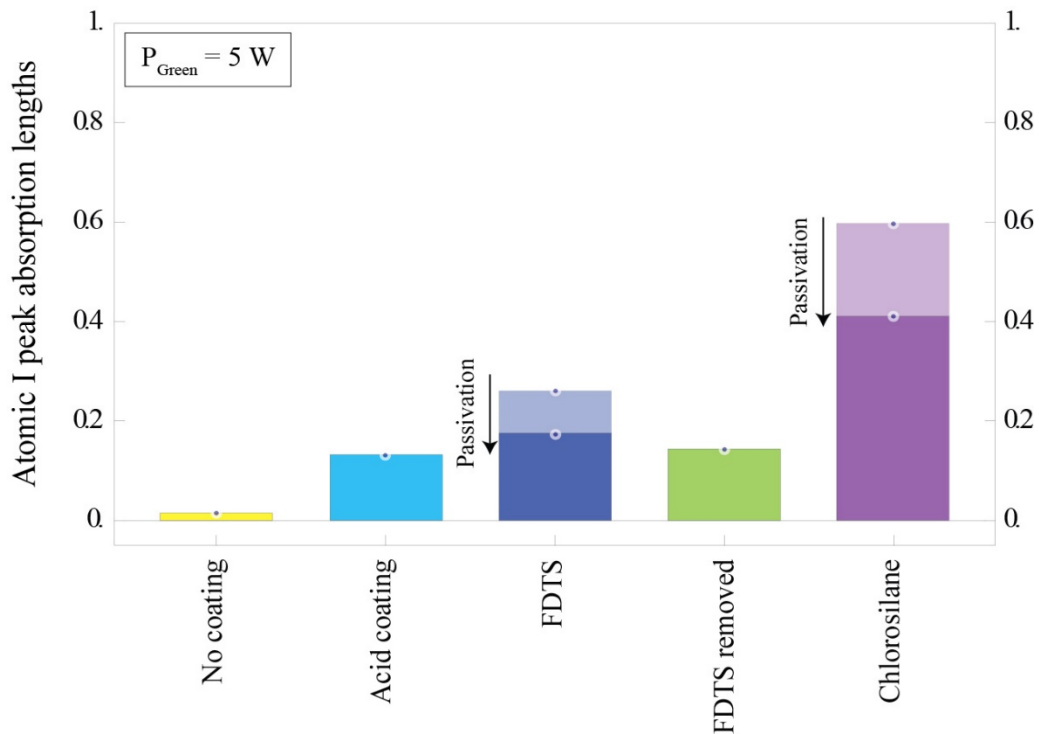
- Χωρίς επικάλυψη
- Παραφίνη: $CH_3(CH_2)_{14}COO(CH_2)_{12}CH_3$
- Chlorosilane: $HSiCl_3$
- Perfluorodecyltrichlorosilane (FDTS): $C_{10}H_4Cl_3F_{17}Si$
- Αραιό φωσφορικό οξύ, H_3PO_4

Ο τρόπος επικάλυψης ήταν η τοποθέτηση των υλικών σε υγρή μορφή μέσα στο κελί και έπειτα άντληση αυτού με σκοπό την δημιουργία τάσης ατμών. Λόγω της τάσης ατμών είχαμε διάχυση του υλικού στο κελί και στη συνέχεια προσκόλληση αυτού πάνω στο γυαλί. Η εξαίρεση σε αυτήν την διαδικασία ήταν το αραιό φωσφορικό οξύ, το οποίο αφέθηκε να διαποτίσει το εσωτερικό του κελιού πριν ξεπλυθεί.

Η επικάλυψη λειτουργεί εκμεταλλευόμενη τη μεγάλη ηλεκτραρνητικότητα του ιωδίου δημιουργώντας μια επίσης ηλεκτραρνητική επίστρωση στην επιφάνεια του κελιού. Σαν αποτέλεσμα, η επίστρωση του κελιού απωθεί τα άτομα ιωδίου εμποδίζοντας τη προσκόλληση τους στην επιφάνεια του κελιού και, κατ' επέκταση, τη πραγματοποίηση της αντίστοιχης αντίδρασης επανασύνδεσης.

Στην εικόνα 12 παρουσιάζονται μετρήσεις του μέγιστου μετρούμενου αριθμού μηκών απορρόφησης (absorption lengths) στη μετάβαση $4 \rightarrow 3$ του ατομικού ιωδίου για διάφορες επικαλύψεις του εσωτερικού του κελιού. Όλες οι μετρήσεις πραγματοποιούνται στην ίδια θερμοκρασία, χρησιμοποιείται η ίδια ισχύς του laser φωτοδιάσπασης (~ 5 W), ενώ όλα τα χρησιμοποιούμενα κελιά έχουν τα ίδια γεωμετρικά χαρακτηριστικά (μήκος και εσωτερική διάμετρο). Έτσι, η μέτρηση του αριθμού των μηκών απορρόφησης είναι, σε όλες τις περιπτώσεις, σε ευθεία αναλογία με τη παραγόμενη πυκνότητα ατομικού ιωδίου. Παρατηρούμε ότι γενικά η διαδικασία επανασύνδεσης στα τοιχώματα είναι πολύ σημαντική και ότι η διαφορά μίας αποτελεσματικής επικάλυψης από μία μη αποτελεσματική είναι πολύ μεγάλη στις παραγόμενες τελικές πυκνότητες ατομικού ιωδίου. Από τις μετρήσεις προκύπτει ότι, μεταξύ των επικαλύψεων που δοκιμάσαμε, η επικάλυψη με chlorosilane είναι με σημαντική διαφορά η αποτελεσματικότερη. Παρόλα αυτά, τόσο στη περίπτωση του chlorosilane, όσο και του FDTS, η αποτελεσματικότητα της επικάλυψης μειώνεται με

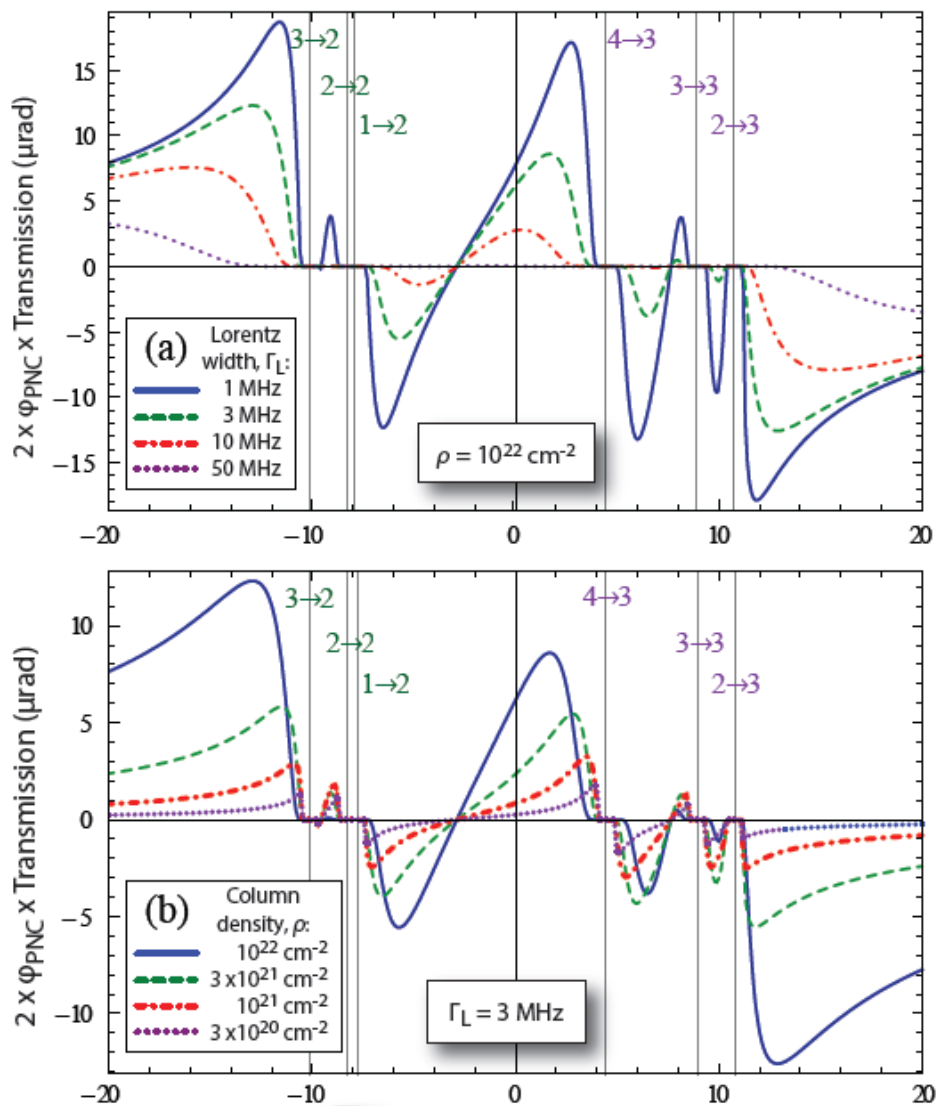
τη πάροδο του χρόνου, μέχρις ότου να επέλθει σταθεροποίηση. Πιστεύουμε ότι αυτό οφείλεται σε παθητικοποίηση (passivation) των τοιχωμάτων από το μοριακό ιώδιο. Να παρατηρήσουμε σε αυτό το σημείο ότι οι μετρήσεις για επικάλυψη με παραφίνη κρίθηκαν μη αξιόπιστες, λόγω διαφόρων αστοχιών κατά τη διαδικασία επικάλυψης. Περαιτέρω διερεύνηση τόσο της διαδικασίας επικάλυψης, όσο και του μηχανισμού παθητικοποίησης κρίνονται απαραίτητες, ενώ υπάρχει σχεδιασμός για τη δοκιμή και άλλων υλικών.



Εικόνα 12: Σύγκριση της απόδοσης των διάφορων επικαλύψεων στο εσωτερικό του κελιού. Απεικονίζεται ο αριθμός absorption lengths (μηκών απορρόφησης) του IR laser που μετρείται στη μετάβαση $4 \rightarrow 3$ για την ίδια ισχύ του εισερχόμενου laser φωτοδιάσπασης (~5 W). Ο αριθμός μηκών απορρόφησης είναι ευθέως ανάλογος της πυκνότητας ατομικού ιωδίου, αν οι υπόλοιπες πειραματικές συνθήκες μεταξύ των διαφόρων μετρήσεων είναι οι ίδιες.

Συμπεράσματα

Συμπερασματικά, κρίνουμε ότι η διαδικασία παραγωγής ατομικού ιωδίου μέσω φωτοδιάσπασης μοριακού ιωδίου στα 532 nm είναι επιτυχής και υποσχόμενη. Οι πυκνότητες που αναμέναμε να επιτευχθούν για τη δεδομένη διαθέσιμη ισχύ του Laser φωτοδιάσπασης, εν πολλοίς επιτεύχθηκαν, επιβεβαιώνοντας έτσι τους αρχικούς μας υπολογισμούς [1] (και εικόνα 13).



Εικόνα 10: Προσομοίωση σήματος με συχνότητα (α) για την ίδια πυκνότητα στήλης (10^{22} cm^{-2}) και διάφορες συνεισφορές Lorentz (από 1 έως 50 MHz), και (b) για το ίδιο μήκος Lorentz (3 MHz) και διάφορες πυκνότητες στήλης (εως 10^{22} από $3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$)

Παρόλα αυτά εκκρεμούν ακόμη διάφορα θέματα:

- η περαιτέρω μελέτη της θερμοκρασιακής εξάρτησης της παραγόμενης πυκνότητας ατομικού ιωδίου και συγκεκριμένα:
 - ο η επίλυση τεχνικών ζητημάτων που προκύπτουν από τη θέρμανση
 - ο η εύρεση της ιδανικής θερμοκρασίας πραγματοποίησης των πειραμάτων μας
- η περαιτέρω μελέτη των επικαλύψεων:
 - ο η μελέτη της διαδικασίας παθητικοποίησης
 - ο η μελέτη και σταθεροποίηση των επικαλύψεων σε βάθος χρόνου
 - ο η χρήση νέων υλικών επικάλυψης
- η χρήση laser φωτοδιάσπασης μεγαλύτερης ισχύος για την εξερεύνηση των ορίων της μεθόδου
- η χρήση κελιών διαφορετικής διαμέτρου για τη μελέτη της εξάρτησης από τη γεωμετρία του κελιού
- η πλήρης απομόνωση τόσο της οπτικής ίνας, όσο και της φωτοδιόδου ανίχνευσης του IR laser από το σκεδαζόμενο φως στα 532 nm, το οποίο προκαλούσε διάφορες διακυμάνσεις στις μετρήσεις μας
- η περαιτέρω μελέτη του ρυθμού επανασύνδεσης k_r και η διερεύνηση των αιτιών για τις οποίες παρατηρούμε απόκλιση από τη βιβλιογραφία

... και ό,τι προκύψει στη πορεία...

Παραρτήματα

Παράρτημα Α: Απορρόφηση

Δείκτης διάθλασης και απορρόφηση:

Όταν ο φως περνάει μέσα από ένα μέσο, ένα μέρος αυτού θα απορροφηθεί. Μπορούμε να λάβουμε υπόψιν μας αυτή την απορρόφηση εάν ορίσουμε ένα μιγαδικό δείκτη διάθλασης $\mathbf{n} = \mathbf{n}' + i\mathbf{n}''$. Σε αυτόν το πραγματικό μέρος καθορίζει την ταχύτητα φάσης, ενώ το n'' στο φανταστικό μέρος καθορίζει τις απώλειες του φωτός λόγω απορρόφησης όταν το ηλεκτρομαγνητικό κύμα διαδίδεται μέσα στο υλικό. Κάτι τέτοιο γίνεται προφανές εάν εισάγουμε αυτή την έκφραση για το δείκτη διάθλασης στην έκφραση για το ηλεκτρικό πεδίο. Ένα επίπεδο ηλεκτρομαγνητικό κύμα που διαδίδεται στον άξονα z έχει εξίσωση της ακόλουθης μορφής:

$$E(z,t) = E_0 e^{i(kz - \omega t)} = E_0 e^{i\left(\frac{2\pi(n' + in'')}{\lambda}z - \omega t\right)} = e^{-k''z} E_0 e^{i(k'z - \omega t)}$$

Εδώ βλέπουμε λοιπόν πως το κ δίνει έναν όρο φθίνοντος εκθετικού όπως περιμέναμε και από το νόμο των Beer-Lambert. Δεδομένου ότι η ένταση του ηλεκτρομαγνητικού κύματος είναι ανάλογη του τετραγώνου του πλάτους του ηλεκτρικού πεδίου, $I \propto |E|^2$, ο συντελεστής απορρόφησης γίνεται $2k'' = 4\pi n''/\lambda$.

Ο νόμος Beer – Lambert:

Ο νόμος των Beer – Lambert ορίζει ότι ο συντελεστής διέλευσης ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας μέσα από ένα υλικό φθίνει εκθετικά με το γινόμενο του συντελεστή απορρόφησης του υλικού και της απόστασης που η ακτινοβολία διανύει μέσα στο υλικό (*path-length*). Το γινόμενο αυτό φέρει το γενικό όνομα *απορροφητικότητα*, ενώ ο συντελεστής απορρόφησης είναι το γινόμενο της πυκνότητας του υλικού και της ενεργού διατομής απορρόφησης. Έτσι ο νόμος Beer – Lambert στις φυσικές επιστήμες συναντάται σε οποιαδήποτε από τις παρακάτω μορφές:

$$T = \frac{I_{\text{OUT}}}{I_{\text{IN}}} = e^{-A} = e^{-l/l_0} = e^{-\alpha l} = e^{-N\sigma l},$$

όπου A η *απορροφητικότητα* (*absorptivity*) του υλικού, α ο *συντελεστής απορρόφησης* (*absorption coefficient*), l η απόσταση που διανύει το φως μέσα στο υλικό, l_0 το *μήκος απορρόφησης* (*absorption length*) στο οποίο ο συντελεστής διέλευσης πέφτει στο $1/e$, N η πυκνότητα του υλικού και σ η ενεργός διατομή απορρόφησης. Να σημειωθεί ότι ο συντελεστής διέλευσης εξαρτάται από τη συχνότητα της εισερχόμενης ακτινοβολίας εφόσον η ενεργός διατομή απορρόφησης εξαρτάται από αυτήν και ότι ο νόμος Beer – Lambert ισχύει για εντάσεις εισερχόμενης ακτινοβολίας

στη γραμμική περιοχή, δηλαδή στη περιοχή όπου η απόκριση του υλικού είναι γραμμική στην ένταση του εισερχόμενου φωτός.

Ενεργός διατομή απορρόφησης σ :

Ο αριθμός των φωτονίων που απορροφώνται εξαρτάται από: α) τον αριθμό των εισερχόμενων φωτονίων, β) τον αριθμό των συστατικών που απορροφούν ανά μονάδα όγκου του μέσου (πυκνότητα), και γ) το μήκος της διαδρομής που διανύουν τα φωτόνια στο μέσο. Ποσοτικά, ο αριθμός dN των φωτονίων που απορροφώνται ανά μονάδα μήκους διαδρομής, σε ένα απειροστό τμήμα ds της διαδρομής της δέσμης της ακτινοβολίας μεταξύ των σημείων s και $s+ds$ είναι ανάλογος του αριθμού N των φωτονίων που διεισδύουν μέχρι το βάθος s , του αριθμού n των απορροφητών ανά μονάδα όγκου (αριθμητική πυκνότητα σε μονάδες όγκου), και της ενεργού διατομής απορρόφησης σ . Δηλαδή: $\frac{dN}{ds} = -Nn\sigma$ Η ενεργός διατομή απορρόφησης εκφράζεται σε μονάδες επιφάνειας και καθορίζει το πόσο ισχυρά απορροφά ένα συστατικό την ακτινοβολία σε κάποιο μήκος κύματος, και εκφράζει την πιθανότητα να συμβεί απορρόφηση. Αν, για παράδειγμα, $\sigma = 0$, τότε από την προκύπτει ότι δεν απορροφάται κανένα φωτόνιο ($dN/ds = 0$). Η ενεργός διατομή εξαρτάται από το μήκος κύματος των φωτονίων, μερικώς από την πόλωσή τους, και από το είδος και την κατάσταση του απορροφητή.

Παράρτημα Β: Υπέρλεπτη Υφή (Hyperfine structure)

Οι υπέρλεπτες αλληλεπιδράσεις οφείλονται σε φαινόμενα μεταξύ των ηλεκτρονίων και του πυρήνα. Ο πυρήνας έχει μια μικρή μαγνητική ροπή της τάξεως του $\mu_B / 2000$ που οφείλεται στο πυρηνικό spin. Η μαγνητική αυτή ροπή μπορεί να αλληλεπιδράσει με το μαγνητικό πεδίο που οφείλεται στην κίνηση των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα. Η αλληλεπίδραση αυτή δημιουργεί μετατοπίσεις των ενεργειακών σταθμών περίπου 2000 φορές μικρότερες από αυτές που οφείλονται στην λεπτή υφή. Ο διαχωρισμός των ενεργειακών σταθμών λόγω αυτού του φαινομένου ονομάζεται hyperfine splitting. Η ενεργειακή διαφορά μεταξύ αυτών των σταθμών δίνεται από τον τύπο:

$$\Delta E_{hf} = \frac{1}{2}AK + B \frac{\frac{3}{2}K(K+1) - 2I(I+1)J(J+1)}{4I(2I-1)J(2J-1)} \text{ όπου:}$$

A, B : σταθερές υπέρλεπτης υφής.

$$K = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)$$

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{J} \text{ με τιμές } F = |I - J|, \dots, I + J \text{ με βήμα } 1$$

I : πυρηνικό spin

J : ηλεκτρονική τροχιακή στροφορμή

Στον τύπο ο πρώτος όρος προέρχεται από τη μαγνητοδιπολική αλληλεπίδραση και ο δεύτερος από την ηλεκτρική τετραπολική αλληλεπίδραση, ενώ υπάρχουν και όροι μεγαλύτερης τάξης που δεν μας ενδιαφέρουν γιατί είναι κατά πολύ πιο ασθενείς.

Παράρτημα Γ: Ρυθμός επανασύνδεσης Ιωδίου

Ατομικό ιώδιο παράγεται μέσω απορρόφησης φωτονίων της δέσμης του πράσινου laser και καταναλώνεται μέσω επανασύνδεσης στον όγκο του αερίου παρουσία μοριακού ιωδίου και μέσω επικόλλησης στα τοιχώματα του κελιού. Η εξίσωση ρυθμών που περιγράφει αυτές τις διαδικασίες είναι η:

$$\frac{d[I]}{dt} = \sigma \Phi [I_2] - k_r [I]^2 [I_2] - k_w [I],$$

όπου:

Φ : η ροή φωτονίων

σ : η ενεργός διατομή απορρόφησης ακτινοβολίας στα 532 nm από I_2

$[I]$: η πυκνότητα ατομικού ιωδίου.

$[I_2]$: η πυκνότητα μοριακού ιωδίου.

k_w : ο ρυθμός επικόλλησης ατομικού ιωδίου στα τοιχώματα.

k_r : ο ρυθμός επανασύνδεσης ατομικού ιωδίου παρουσία μοριακού ιωδίου στον όγκο του αερίου.

Σε στάσιμη κατάσταση (steady state) $\frac{d[I]}{dt} = 0 \Rightarrow \sigma \Phi [I_2] - k_r [I]^2 [I_2] - k_w [I] = 0$.

Λύνοντας ως προς $[I]$ προκύπτει η εξίσωση (6), $[I] = \frac{-k_w + \sqrt{k_w^2 + 4\sigma\Phi [I_2] k_r}}{2[I_2] k_r}$

Παράρτημα Δ: Γραμμές απορρόφησης

Η απορρόφηση φωτός από ένα ατομικό σύστημα στη περιοχή ενός ατομικού συντονισμού δεν είναι ποτέ αυστηρά μονοχρωματική. Φυσικές διεργασίες όπως η αυθόρμητη εκπομπή, οι μεταξύ των ατόμων συγκρούσεις, η θερμική κίνηση των ατόμων και άλλες, δημιουργούν μία φασματική διαπλάτυνση των γραμμών απορρόφησης, με αποτέλεσμα το υλικό να μπορεί να απορροφήσει φως σε μία – εν γένει στενή – περιοχή γύρω από την ακριβή συχνότητα συντονισμού, έστω και με μειωμένη πιθανότητα.

Η φασματική απόκριση ενός ατομικού ατμού σε ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία κοντά σε ένα τέτοιο ατομικό συντονισμό εκφράζεται μέσω της εξάρτησης του πραγματικού (διασπορά) και φανταστικού (απορρόφηση) μέρους του δείκτη διάθλασης, $n = n' + in''$, από τη συχνότητα της εισερχόμενης ακτινοβολίας, σύμφωνα με την αντισυμμετρική και συμμετρική, αντίστοιχα, κατανομή Lorentz:

$$n' \propto L'(\omega - \omega_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\omega - \omega_0}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (\Delta 1)$$

$$n'' \propto L''(\omega - \omega_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (\Delta 2)$$

όπου ω η (γωνιακή) συχνότητα του H/M κύματος, ω_0 η συχνότητα συντονισμού της ατομικής μετάβασης και Γ το πλήρες πλάτος στο ήμισυ του μεγίστου (FWHM) της κατανομής. Η παραπάνω εξισώσεις ισχύουν όταν ο μηχανισμός διαπλάτυνσης της φασματικής γραμμής είναι *ομοιογενής*, δηλαδή όταν όλα τα συμμετέχοντα στο μηχανισμό άτομα επηρεάζονται από το μηχανισμό με ισοδύναμο τρόπο. Παραδείγματα τέτοιας διαπλάτυνσης είναι το φυσικό φασματικό εύρος (διαπλάτυνση λόγω αυθόρμητης εκπομπής) ή η διαπλάτυνση λόγω ασυνεχειών φάσης που προκαλούνται από συγκρούσεις μεταξύ των ατόμων.

Στη περίπτωση ύπαρξης *ανομοιογενών* μηχανισμών διαπλάτυνσης, δηλαδή μηχανισμών όπου κάθε συμμετέχον άτομο επηρεάζεται με διαφορετικό τρόπο, οι εξισώσεις (Δ1) και (Δ2) παύουν να ισχύουν. Η συνηθέστερη περίπτωση τέτοιου μηχανισμού είναι η διαπλάτυνση Doppler που οφείλεται στη θερμική κίνηση των ατόμων. Στη περίπτωση αυτή, η φασματικές γραμμές περιγράφονται από το λεγόμενο προφίλ *Voigt*, το οποίο αποτελεί συνέλιξη μίας Λορεντζιανής με μία Γκαουσιανή κατανομή. Ο λόγος που δεν έχουμε αυστηρά Γκαουσιανές κατανομές είναι ότι στα φυσικά συστήματα οι ομοιογενείς μηχανισμοί διαπλάτυνσης είναι πάντα παρόντες. Για υπολογιστικούς λόγους είναι προτιμητέο, αντί το ολοκλήρωμα συνέλιξης να υπολογίζεται σε κάθε σημείο, η κατανομή Voigt να εκφραστεί μέσω της συνάρτησης Faddeeva, $w(z)$, $z \in \mathbb{C}$:

$$w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz) = w'(x, y) + iw''(x, y) \quad (\Delta 3)$$

Συγκεκριμένα, στη περίπτωση της διαπλάτυνσης Doppler, για ένα άτομο μάζας M και για μεταβάσεις γύρω από συχνότητα ω_0 , το ημιπλάτος Doppler στο $1/e$ είναι:

$$\Delta\omega_D = \omega_0 \sqrt{\frac{2k_b T}{Mc^2}} \quad (\Delta 4)$$

όπου k_b η σταθερά του Boltzmann, c η ταχύτητα του φωτός και T η θερμοκρασία ατμού.

Οι κατανομές διασποράς και απορρόφησης της γραμμής σε αυτή τη περίπτωση σχετίζονται με το πραγματικό w' και το φανταστικό w'' μέρος της Faddeeva συνάρτησης, αντιστοίχως, μέσω των:

$$L''(\omega - \omega_0) \rightarrow V''(\omega - \omega_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{w'(\frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega_D}, \frac{\Gamma/2}{\Delta\omega_D})}{\Delta\omega_D} \quad (\Delta 5)$$

$$L'(\omega - \omega_0) \rightarrow V'(\omega - \omega_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{w''(\frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega_D}, \frac{\Gamma/2}{\Delta\omega_D})}{\Delta\omega_D} \quad (\Delta 6)$$

Σε κάθε περίπτωση, η φασματικές κατανομές των ατομικών μεταβάσεων που χρησιμοποιούμε στις μετρήσεις μας διαμορφώνουν τη συχνοτική εξάρτηση τόσο της μετρούμενης περιστροφής της πόλωσης του εισερχόμενου φωτός, μέσω του πραγματικού μέρους του δείκτη διάθλασης, n' , όσο και της απορρόφησης του φωτός, μέσω της ενεργού διατομής απορρόφησης η οποία είναι ευθέως ανάλογη του φανταστικού μέρους του δείκτη διάθλασης, n'' .

Βιβλιογραφία:

- [1] G. E. Katsoprinakis, L. Bougas, & T. P. Rakitzis, *Calculation of parity-nonconserving optical rotation in iodine at 1315 nm* (PHYSICAL REVIEW A) **87** (2013)
- [2] L. Bougas, G. E. Katsoprinakis, W. von Klitzing, J. Sapirstein, & T. P. Rakitzis, *Cavity-Enhanced Parity-Nonconserving Optical Rotation in Metastable Xe and Hg* (PHYSICAL REVIEW LETTERS) **108**(2012)
- [3] L. Bougas, G. E. Katsoprinakis, W. von Klitzing, and T. P. Rakitzis, *Fundamentals of cavity-enhanced polarimetry for parity-nonconserving optical rotation measurements: Application to Xe, Hg, and I* (PHYSICAL REVIEW A) **89** (2014)
- [4] Stull, Daniel R., Vapor Pressure of Pure Substances. Organic and Inorganic Compounds, Ind. Eng. Chem., 1947, 39, 4, 517-540. [doi:10.1021/ie50448a022]
- [5] R. N. Zare, *Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Physics and Chemistry* (Wiley Interscience, New York, 1987).
- [6] J. K. K. Ip and G. Burns, J. Chem. Phys. 56, 3155 (1972).