

Logbook de Análise de Dados: Espectroscopia Raio-X e Óptica Fina

Grupo 2D

Diogo Pires, n° 84233 — João Cruz, n°84395 — João Rato, n° 84397

LFEA — Departamento de Física — MEFT — IST

02-03-2018

Espectroscopia Raio-X: Cristalografia

I Expressões e Valores Importantes

Lei de Bragg:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \implies d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} \quad , \quad \delta d = \frac{n\lambda \cos \theta}{2 \sin^2 \theta} \delta \theta \quad (1)$$

Espaçamento entre planos:

$$d = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2)$$

	E (keV)	λ (pm)
K_α	17.443	71.080
K_β	19.651	63.095

Tabela 1: Valores de E e λ do Mo tabelados

Constantes de Rede:

$$a_0(\text{NaCl}) = 564.02 \text{ pm} \quad a_0(\text{LiF}) = 403.51 \text{ pm} \quad a_0(\text{Si}) = 543.10 \text{ pm} \quad a_0(\text{Al}) = 404.95 \text{ pm}$$

II Método de Ajustes

Expressão utilizada:

$$C = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} + ax + b \quad (3)$$

Em que C são as contagens obtidas para cada ângulo, que se obtêm multiplicando a taxa de contagem obtida no laboratório pelo tempo de aquisição em cada ângulo. Note-se que a variável x representa, no caso do NaCl, o comprimento de onda e, no caso dos outros cristais, o ângulo de incidência. Para o erro de C fez-se \sqrt{C} . Utilizou-se uma recta para modular o sinal de background (Bremsstrahlung) porque apesar de globalmente se assemelhar a uma exponencial negativa (depois da subida inicial), como os picos são bastante localizados, a aproximação linear é bastante concordante.

III NaCl - Calibração

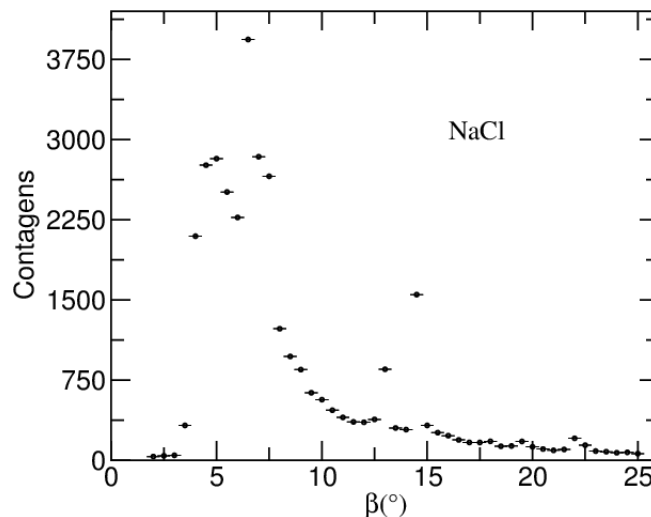


Figura 1: Espectro Total do NaCl

III.I Dados dos ajustes

Converteram-se os ângulos de incidência em comprimento de onda recorrendo à expressão (1), uma vez que o valor de $2d$ para o NaCl é assumido desde início como conhecido (apresentado acima). Para cada ordem de difracção foi utilizado o valor de n correspondente, pelo que a conversão de ângulo em comprimento de onda é feita seccionalmente. A conversão do desvio padrão para FWHM (largura a meia altura), também apresentada nas tabelas, é dada por:

$$FWHM = 2\sqrt{2\ln(2)}\sigma \quad \sigma_{FWHM} = 2\sqrt{2\ln(2)}\sigma_\sigma \quad (4)$$

	N (pm · ctgs)	σ (pm)	FWHM (pm)	μ (pm)	δ (%)
K_α	73044 ± 334	1.3858 ± 0.0061	3.263 ± 0.014	71.2364 ± 0.0073	0.22
K_β	24019 ± 270	1.336 ± 0.016	3.146 ± 0.038	63.331 ± 0.016	0.37

Tabela 2: Primeira Ordem

	N (pm · ctgs)	σ (pm)	FWHM (pm)	μ (pm)	δ (%)
K_α	8786 ± 75	0.6254 ± 0.0050	1.473 ± 0.012	71.2100 ± 0.0061	0.18
K_β	3101 ± 59	0.717 ± 0.016	1.688 ± 0.038	63.196 ± 0.016	0.16

Tabela 3: Segunda Ordem

	N (pm · ctgs)	σ (pm)	FWHM (pm)	μ (pm)	δ (%)
K_α	1294 ± 25	0.4442 ± 0.0086	1.046 ± 0.020	71.1504 ± 0.0096	0.10
K_β	275 ± 17	0.320 ± 0.023	0.754 ± 0.054	63.389 ± 0.024	0.47

Tabela 4: Terceira Ordem

	N (pm · ctgs)	σ (pm)	FWHM (pm)	μ (pm)	δ (%)
K_α	191 ± 10	0.370 ± 0.021	0.871 ± 0.049	71.064 ± 0.022	0.02
K_β	34 ± 8	0.249 ± 0.068	0.59 ± 0.16	63.137 ± 0.073	0.07

Tabela 5: Quarta Ordem

Todos os centróides têm um desvio ao valor tabelado menor que 0.5%, que será então uma estimativa (por excesso, porque só 1 em 8 desvios é que se aproxima de 0.5%, o do K_β da 3ª ordem) para o erro associado à calibração do sistema.

Calcula-se também a potência resolutive em cada ordem de difracção para cada pico, dada por $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{\mu}{FWHM}$.

Ordem	K_α	K_β
1	21.83	20.13
2	48.34	37.44
3	68.02	84.07
4	81.59	107.01

Tabela 6: Resoluções

III.II Ficheiros com dados importantes referentes ao NaCl

NaCl.2D.txt

IV Método para a Identificação do Plano de Corte nos restantes cristais

A partir dos valores de λ dados na Tabela 1 e dos dados experimentais (centróides em θ), e com recurso a (1), tira-se o d experimental para o cristal considerado.

Depois, faz-se a média dos d obtidos para cada ordem, se fizer sentido (se forem todos parecidos), de modo a ter-se um \bar{d} para se estudar os planos cristalinos. Depois, com recurso a (2), e tendo a_0 tabelado, encontram-se as melhores combinações (h, k, l) e descobre-se o plano.

V LiF

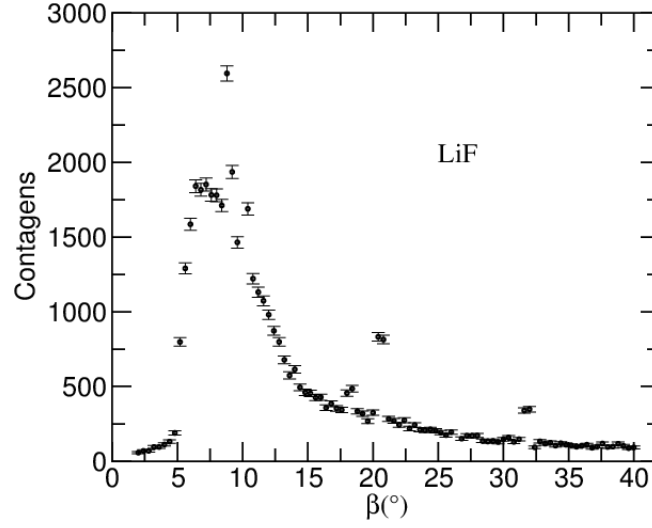


Figura 2: Espectro Total do LiF

V.I Resultados dos Ajustes

Os dados foram obtidos no laboratório com $\Delta\theta = 0.1^\circ$ e $\Delta t = 10$ s.

Tabelas dos dados de ajuste:

	μ ($^\circ$)	$FWHM$	σ ($^\circ$)
K_α	10.100 ± 0.004	0.3014	0.125 ± 0.005
K_β	8.960 ± 0.014	0.299	0.137 ± 0.015

Tabela 7: Primeira Ordem

	μ ($^\circ$)	$FWHM$	σ ($^\circ$)
K_α	20.620 ± 0.003	0.32	0.134 ± 0.003
K_β	18.22 ± 0.01	0.33	0.159 ± 0.012

Tabela 8: Segunda Ordem

	μ ($^\circ$)	$FWHM$	σ ($^\circ$)
K_α	31.88 ± 0.01	0.39	0.145 ± 0.014
K_β	28.01 ± 0.02	0.23	0.137 ± 0.033

Tabela 9: Terceira Ordem

V.II Plano de Corte

n=1:

$$K_\alpha: d = 202.62 \pm 0.079 \text{ pm}$$

$$K_\beta: d = 202.54 \pm 0.314 \text{ pm}$$

n=2:

$$K_\alpha: d = 201.87 \pm 0.028 \text{ pm}$$

$$K_\beta: d = 201.77 \pm 0.107 \text{ pm}$$

n=3:

$$K_\alpha: d = 201.9 \pm 0.057 \text{ pm}$$

$$K_\beta: d = 201.52 \pm 0.132 \text{ pm}$$

$$\bar{d} = 202.04 \pm 0.120 \text{ pm}$$

Usando a expressão (2), tem-se: $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 1.99 \approx 2$, logo:

(h,k,l) possível: (2,0,0), que dá um $d_{teor} = 201.76$, havendo um desvio de $\delta d = 0.14\%$ entre o valor experimental e teórico.

V.III Ficheiros com dados importantes referentes ao LiF

LiF_2D.txt

VI Si

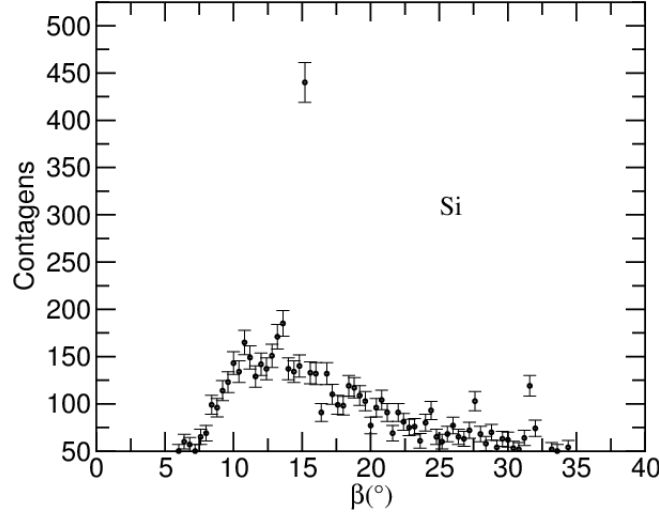


Figura 3: Espectro Total do Si

VI.I Resultados dos Ajustes

Os dados foram obtidos no laboratório com $\Delta\theta = 0.1^\circ$ e $\Delta t = 10$ s.

Tabelas dos parâmetros de ajuste da equação (3):

	a (ctgs/ $^\circ$)	b (ctgs)	N (ctgs \cdot $^\circ$)	μ ($^\circ$)	σ ($^\circ$)
K_α	-32.040 ± 6.105	913.540 ± 97.802	485.290 ± 9.854	15.118 ± 0.002	0.116 ± 0.002
K_β	-7.066 ± 5.934	536.417 ± 78.140	123.496 ± 7.587	13.375 ± 0.007	0.121 ± 0.009

Tabela 10: Primeira Ordem (picos mais bem definidos do espectro)

	a (ctgs/ $^\circ$)	b (ctgs)	N (ctgs \cdot $^\circ$)	μ ($^\circ$)	σ ($^\circ$)
K_α	-8.281 ± 1.288	424.238 ± 39.840	128.655 ± 6.200	31.535 ± 0.010	0.189 ± 0.012
K_β	-4.275 ± 4.313	322.601 ± 116.68	49.052 ± 5.080	27.691 ± 0.012	0.117 ± 0.013

Tabela 11: Segunda Ordem

Os valores de μ são utilizados em (1) substituindo-se no θ .

VI.II Plano de Corte

n=1:

K_α : $d = 136.269 \pm 0.018$ pm

K_β : $d = 136.378 \pm 0.070$ pm

n=2:

K_α : $d = 135.903 \pm 0.039$ pm

K_β : $d = 135.775 \pm 0.054$ pm

$\bar{d} = 136.081 \pm 0.045$ pm

Usando a expressão (2), tem-se: $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 3.99 \approx 4$, logo:

(h,k,l) possível: (4,0,0), que dá um $d_{teor} = 135.775$, havendo um desvio de $\delta d = 0.2\%$ entre o valor experimental e teórico.

VI.III Ficheiros com dados importantes referentes ao Si

Si_2D.txt

VII Al

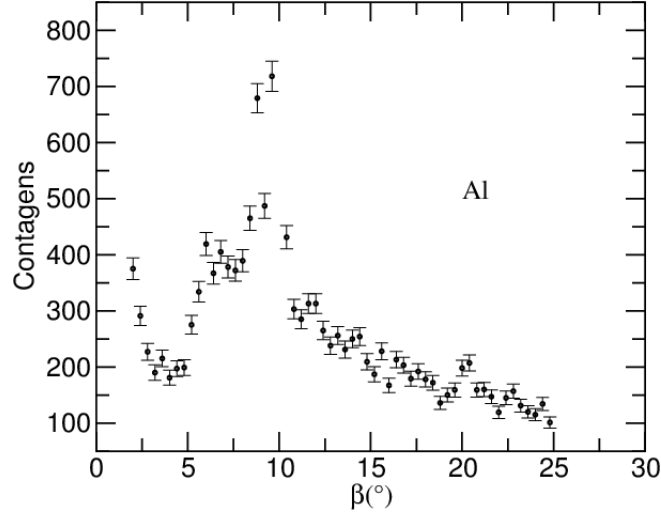


Figura 4: Espectro Total do Al

VII.I Resultados dos Ajustes

Os dados foram obtidos no laboratório com $\Delta\theta = 0.1^\circ$.

Tabelas dos parâmetros de ajuste da equação (3):

	a (ctgs/ $^\circ$)	b (ctgs)	N (ctgs \cdot $^\circ$)	μ ($^\circ$)	σ ($^\circ$)
K_α	-1090.55 ± 54.32	13499.5 ± 500.5	2827.20 ± 69.82	9.971 ± 0.002	0.227 ± 0.005
K_β	-	1370.88 ± 26.62	472.029 ± 37.488	8.816 ± 0.010	0.246 ± 0.016

Tabela 12: Primeira Ordem, $\Delta t_\alpha = 20$ s, $\Delta t_\beta = 10$ s

Na tabela acima, o K_β não tem o parâmetro a associado porque se ajustou a gaussiana adicionada de uma constante de *offset* vertical (b) ao invés da recta, dado que os dados experimentais de background se comportavam como constantes na região referida.

	a (ctgs/ $^\circ$)	b (ctgs)	N (ctgs \cdot $^\circ$)	μ ($^\circ$)	σ ($^\circ$)
K_α	-156.019 ± 3.385	3470.75 ± 64.24	544.373 ± 52.963	20.492 ± 0.022	0.564 ± 0.038
K_β	-	-	-	-	-

Tabela 13: Segunda ordem, $\Delta t_\alpha = 10$ s

Na tabela acima, apenas se apresenta o pico K_α dado que este era o único distinguível para a segunda ordem. Os valores de μ são utilizados em (1) substituindo-se no θ .

VII.II Plano de Corte

n=1:

$$K_\alpha: d = 205.256 \pm 0.041 \text{ pm}$$

$$K_\beta: d = 205.841 \pm 0.232 \text{ pm}$$

n=2:

$$K_\alpha: d = 203.041 \pm 0.209 \text{ pm}$$

$$\bar{d} = 204.713 \pm 0.161 \text{ pm}$$

Usando a expressão (2), tem-se: $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 1.98 \approx 2$, logo:

(h,k,l) possível: (2,0,0), que dá um $d_{teor} = 202.475$, havendo um desvio de $\delta d = 1.1\%$ entre o valor experimental e teórico.

VII.III Ficheiros com dados importantes referentes ao Al

Al_2D.txt

VIII Identificação de um cristal desconhecido

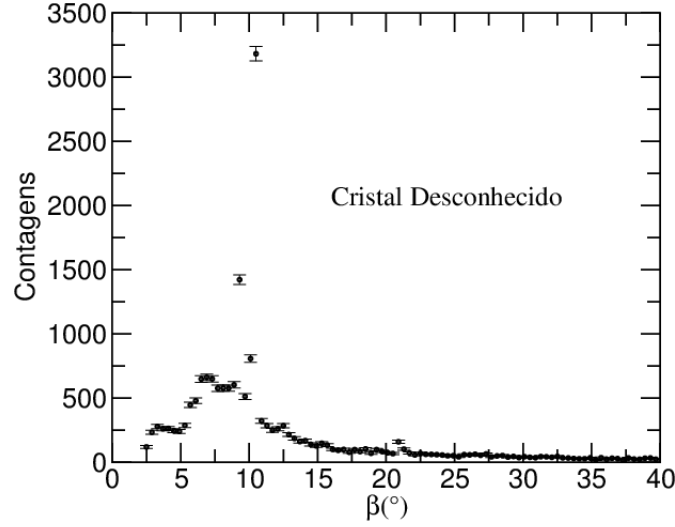


Figura 5: Espectro Total do Cristal Desconhecido

VIII.I Resultados dos Ajustes

Os dados foram obtidos no laboratório com $\Delta\theta = 0.1^\circ$ e $\Delta t = 10$ s.

	a (ctgs/°)	b (ctgs)	N (ctgs · °)	μ (°)	σ (°)
K_α	-508.629 ± 15.529	6620.09 ± 168.60	2326.66 ± 19.14	10.441 ± 0.001	0.110 ± 0.001
K_β	-306.803 ± 49.736	4323.27 ± 438.26	762.263 ± 23.035	9.287 ± 0.002	0.116 ± 0.003

Tabela 14: Primeira Ordem ($t_{aq} = 5$ min 10 s)

	a (ctgs/°)	b (ctgs)	N (ctgs · °)	μ (°)	σ (°)
K_α	-16.872 ± 3.336	593.918 ± 68.094	214.383 ± 6.861	21.070 ± 0.004	0.125 ± 0.005
K_β	-31.884 ± 13.046	871.86 ± 234.80	63.225 ± 8.386	18.660 ± 0.011	0.111 ± 0.015

Tabela 15: Segunda Ordem ($t_{aq_\alpha} = 5$ min 10 s, $t_{aq_\beta} = 2$ min 30 s)

VIII.II Obtenção dos parâmetros de rede a_0

Neste caso, a_0 é desconhecido, portanto calcula-se d pelo mesmo método (tendo os centróides μ em θ das tabelas anteriores). De seguida, experimentam-se vários valores de (h,k,l) e calculam-se os respectivos a_0 , comparando com valores tabelados.

Obtenção do d médio (\bar{d}):

n=1:

$$K_\alpha: d = 196.112 \pm 0.019 \text{ pm}$$

$$K_\beta: d = 195.486 \pm 0.042 \text{ pm}$$

n=2:

$$K_\alpha: d = 197.715 \pm 0.036 \text{ pm}$$

$$K_\beta: d = 197.202 \pm 0.112 \text{ pm}$$

$$\bar{d} = 196.629 \pm 0.052 \text{ pm}$$

Experimentação de vários índices de Miller

Utilizou-se a expressão:

$$a_0 = \bar{d}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad , \quad \delta a_0 = \delta \bar{d}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (5)$$

Decidiu-se considerar valores de índices de Miller tais que a raiz da soma dos seus quadrados não fosse superior a 4, dado que este já equivale a um valor elevado de a_0 (786.516 pm) para o \bar{d} obtido e, portanto, o cristal a encontrar tem, certamente, valores de (h,k,l) compreendidos nesta região. De notar que na tabela, não existem os valores de $\sqrt{7}$ e $\sqrt{15}$, porque não há forma de $h^2 + k^2 + l^2$ ser 7 ou 15, com h,k,l compreendidos entre 0 e 4.

$\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	2	$\sqrt{5}$	$\sqrt{6}$	$\sqrt{8}$
a_0 (pm)	196.629 \pm 0.052	278.075 \pm 0.074	340.571 \pm 0.090	393.258 \pm 0.104	439.676 \pm 0.116	481.641 \pm 0.127	556.151 \pm 0.147

$\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$	3	$\sqrt{10}$	$\sqrt{11}$	$\sqrt{12}$	$\sqrt{13}$	$\sqrt{14}$	4
a_0 (pm)	589.887 \pm 0.156	621.795 \pm 0.164	652.145 \pm 0.172	681.143 \pm 0.180	708.956 \pm 0.187	735.718 \pm 0.195	786.516 \pm 0.208

Tabela 16: Valores da constante de rede a_0 para vários índices de Miller

Retiram-se duma tabela de constantes de rede conhecidas¹ os valores próximos dos intervalos de incerteza de alguns a_0 experimentais, para comparação:

Cristal	Pt	HfN e NbN	NaCl	InP	PbS
a_0 (pm)	391.200	439.200	564.020	586.870	593.620

Cristal	KCl	NaI	KBr	KI	EuTiO ₃
a_0 (pm)	629.000	647.000	660.000	707.000	781.000

Tabela 17: Valores tabelados de a_0 de alguns cristais

Por observação do cristal que foi posto na montagem, pode-se confirmar que era de aspecto baço e esbranquiçado. Assim, Pt, que é um metal puro, foi excluído como potencial cristal mistério, bem como HfN, NbN, InP, PbS, e EuTiO₃, pela pouca semelhança em termos visuais com o cristal manuseado no laboratório.

Sobram NaCl, KCl, NaI, KBr e KI, que têm todos a mesma estrutura (FCC).

O NaCl é um forte candidato, dado que, estando o seu a_0 no intervalo de incerteza ao que corresponde um valor de $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = \sqrt{8}$, os valores de h,k,l que satisfazem essa equação são do tipo (2,2,0). Atentando às regras de selecção para a estrutura do NaCl, vê-se que constitui uma hipótese válida, dado que os 3 valores são pares.

O KCl, no entanto, não pode ser o cristal mistério porque, dado que está associado ao valor de $\sqrt{10}$, o (h,k,l) teria que ser do tipo (3,1,0) ou seja, uma junção de números pares e ímpares, o que viola as condições para esta estrutura.

Já para o NaI é possível, dado que $\sqrt{11}$ pode ser resultado de (h,k,l) = (3,1,1) em que todos são ímpares.

O KBr está na mesma situação do NaI, já que partilham a mesma estrutura.

Finalmente, o KI não é uma hipótese válida dado que $\sqrt{13}$ é obtido com índices de Miller do tipo (3,2,0), que tem números pares e ímpares.

Escolha Final

Pesando os argumentos apresentados anteriormente e o facto de, no guia, estar explícito que se usariam dois cristais NaCl com cortes diferentes, conclui-se que o cristal mistério é o NaCl com índices de Miller (2,2,0).

IX Reflectividade Relativa

Comparar as contagens dos outros cristais com as do NaCl (2,0,0), utilizando os picos de 1ª ordem apenas. Não se usa a radiação Bremsstrahlung porque os dados das zonas que não os picos foram retirados de maneira diferente ($\Delta\beta$ maior e Δt menor). Só se usa a primeira ordem porque, para além de no alumínio não ser visível a segunda ordem, no silício e no NaCl (2,2,0) a segunda é a última visível, e por vezes com algum esforço, estando mais sujeita a erros e flutuações estatísticas.

¹Lattice constants for various materials at 300 K, Lattice Constant, Wikipedia

Cristal	Contagens ($K_\alpha + K_\beta$)	Reflectividade (%)
NaCl	97063	100
LiF	10942	11.3
Si	608	0.6
Al	3299	3.40
Unknown	3089	3.18

Tabela 18: Reflectividade dos cristais relativamente ao NaCl

X Reflectividade Absoluta

Comparando as contagens totais do cristal de NaCl, num range de ângulos dos 2° aos 25°, com as contagens relativas à emissão da fonte sem cristal, diretamente para o detetor, em torno dos 0°, obtemos:

Cristal	Contagens Totais	Reflectividade (%)
NaCl	608.1	$\frac{608.1}{14549} \approx 4.18\%$
Fonte (sem cristal)	14549	

Tabela 19: Reflectividade absoluta do NaCl

Espectroscopia Atômica: Efeito de Zeeman

I Verificação da condição de interferência

Interessa o comportamento da posição relativa das riscas em função do número da risca. Assim, note-se que os valores absolutos das posições são pouco relevantes, são apenas valores de referência tendo em conta o equipamento utilizado na medição. Um desvio no valor da posição igual em todos os pontos é controlado por um parâmetro independente no ajuste que se segue. Como o instrumento utilizado na medição das distâncias tinha uma certa folga (às vezes ao tirar a mão o ponteiro mexia imenso, sendo que a mira não), definiu-se o erro de cada posição como 0.01 mm, que é a menor divisão da escala.

Aos pontos obtidos ajustou-se uma expressão do tipo $y = a\sqrt{bx} - e + c$

Risca	Posição (mm)
1	-0.07 ± 0.01
2	0.24 ± 0.01
3	0.49 ± 0.01
4	0.68 ± 0.01
5	0.88 ± 0.01
6	1.05 ± 0.01
7	1.19 ± 0.01
8	1.33 ± 0.01

Tabela 20: Posição das riscas sem campo magnético

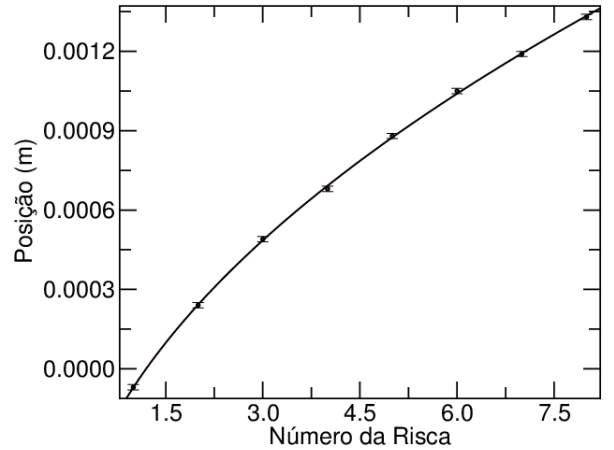


Figura 6: Ajuste

a	b	e	χ^2/n_{gl}
$(7.82 \pm 0.21) \cdot 10^{-4}$	$(-8.92 \pm 0.78) \cdot 10^{-4}$	-0.102 ± 0.166	0.64

Tabela 21: Parâmetros de ajuste - Condição de interferência

O parâmetro e é compatível com 0, pelo que a aproximação de $e = 0$ tomada na preparação é válida. O χ^2/n_{gl} está ligeiramente baixo, pelo que o erro pode ter sido sobrestimado. Ver-se-á no resto da análise.

II Desdobramento das riscas com aplicação de campo magnético

Como são necessários valores de campo magnético correspondentes a intensidades de corrente diferentes do fornecido no guia, fez-se um ajuste linear aos pontos da tabela para poder fazer a conversão. Os dados da tabela não têm erro explicitado. Contudo, como os campos magnéticos dependem linearmente da intensidade de corrente, o ajuste linear é necessariamente um modelo válido

(assume-se que não se está perante nenhum caso extremo em que os materiais têm respostas não lineares). Assim, escolheu-se o erro associado aos valores de campo magnético apresentados na tabela (igual para todos) de modo a se ter $\chi^2/n \approx 1$, obtendo-se uma estimativa para os erros associados aos valores de campo magnético fornecidos (valor final de 0.005 T).

Do ajuste a $B = aI + b$ tem-se ($\sigma_B = \sqrt{(a\sigma_I)^2 + (I\sigma_a)^2 + \sigma_b^2}$):

a (T/A)	b (T)	χ^2/n
$(3.256 \pm 0.031) \cdot 10^{-2}$	$(1.536 \pm 0.390) \cdot 10^{-2}$	1.002

Tabela 22: Parâmetros de ajuste - Campo magnético vs Intensidade de corrente

Cálculo das diferenças de frequência entre riscas, $\Delta\nu$

Tem-se:

$$\Delta\lambda = \frac{\delta a}{\Delta a} \frac{\lambda^2 \sqrt{n^2 - 1}}{2d(n^2 - 1)} \quad \sigma_{\Delta\lambda} = \Delta\lambda \sqrt{\left(\frac{\sigma_{\delta a}}{\delta a}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{\Delta a}}{\Delta a}\right)^2} \quad (6)$$

Nesta equação, com a variação do campo magnético, apenas δa varia. Usou-se primeiro os dados de observação longitudinal, por apenas se verem 2 riscas e, por ser mais fácil de as distinguir, haver, *a priori*, uma confiança maior nos dados medidos. Indica-se a posição da risca superior. δa obtém-se subtraindo essa posição à posição inicial da risca, 0.13 mm.

Δa é simplesmente a distância entre 2 riscas sem aplicação de campo magnético (considera-se a distância entre a 1ª e 2ª riscas observadas). $\Delta a = 0.31 \pm 0.01$ mm. Sabendo $d = 4.04$ mm, $\lambda = 643.8$ nm e $n = 1.4567$ pode-se então calcular $\Delta\lambda$ para cada campo aplicado. Tem-se também:

$$\Delta\nu = \frac{c\Delta\lambda}{\lambda^2} \quad \sigma_{\Delta\nu} = \Delta\nu \frac{\sigma_{\Delta\lambda}}{\Delta\lambda}$$

Podendo-se calcular, então, o desvio em frequências provocado pelo campo magnético. O erro para δa foi obtido por propagação quadrática, tendo-se $\sigma_{\delta a} \approx 0.014$ mm.

$I \pm 0.1$ (A)	$\delta a \pm 0.014$ (mm)	$\Delta\lambda$ (pm)	$\Delta\nu$ (s ⁻¹)	B (T)
3.8	0.040	6.25 ± 2.20	$(4.52 \pm 1.59) \cdot 10^9$	0.1391 ± 0.0052
6.0	0.050	7.81 ± 2.20	$(5.65 \pm 1.59) \cdot 10^9$	0.2107 ± 0.0054
9.0	0.060	9.37 ± 2.21	$(6.78 \pm 1.60) \cdot 10^9$	0.3084 ± 0.0058
12.0	0.070	10.94 ± 2.21	$(7.92 \pm 1.60) \cdot 10^9$	0.4061 ± 0.0063
15.0	0.080	12.50 ± 2.22	$(9.05 \pm 1.61) \cdot 10^9$	0.5038 ± 0.0069
18.0	0.080	12.50 ± 2.22	$(9.05 \pm 1.61) \cdot 10^9$	0.6014 ± 0.0075
19.4	0.090	14.06 ± 2.23	$(10.18 \pm 1.62) \cdot 10^9$	0.6470 ± 0.0079

Tabela 23: Dados de desdobramento em 2 riscas

Como se tem:

$$\Delta\nu = \frac{e}{m} \frac{B}{4\pi}$$

Pode-se ajustar os dados obtidos a uma recta para tentar obter uma estimativa para $\frac{e}{m}$, e razão entre a carga e a massa de um electrão. Ajustou-se então uma recta da forma:

$$\Delta\nu = \frac{a}{4\pi} B + c$$

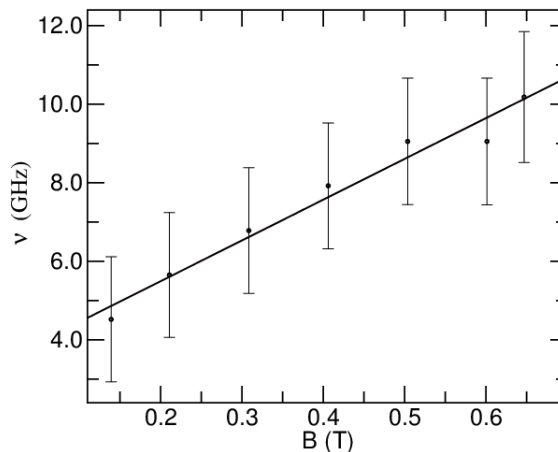


Figura 7: Ajuste - Observação longitudinal de B

Obtiveram-se, então, os resultados:

a (C/kg)	c (s ⁻¹)	χ^2_{ngl}
$(1.30 \pm 0.43) \cdot 10^{11}$	$(3.42 \pm 1.49) \cdot 10^9$	0.06

Tabela 24: Parâmetros de ajuste - Observação longitudinal de B

De facto, os erros parecem sobrestimados, uma vez que o χ^2_{ngl} está demasiado pequeno. Contudo, no laboratório o instrumento de medida tem oscilações muito grandes, tanto assim que houve várias medições que tiveram de ser repetidas várias vezes, pelo que considerar a menor divisão da escala como erro de posição medida não parece de todo exagerado. O parâmetro a corresponde ao valor experimental obtido para a razão entre a carga e a massa do electrão. Obteve-se um desvio ao valor teórico ($e/m \approx 1.759 \cdot 10^{11}$ C/kg) de cerca de 26%. O valor de c é compatível com 0 a 3σ . Não sendo um valor muito alto, também não é muito baixo, podendo evidenciar um sistemático. Sabe-se que existe um não contabilizado pelo facto das riscas sem aplicação de campo magnético, na verdade estarem sobre acção de um campo residual, uma vez que a fonte de corrente utilizada não começava em 0 A, mas por volta dos 0.4 A.

II.I Repetição do processo para 3 riscas observáveis (observação transversal)

Posição inicial da risca: 0.13 mm

$I \pm 0.1$ (A)	$\delta a \pm 0.014$ (mm)	$\Delta\lambda$ (pm)	$\Delta\nu$ (s ⁻¹)	B (T)
6.8	0.070	10.94 ± 2.21	7.92 ± 1.60	0.2368 ± 0.0055
7.5	0.070	10.94 ± 2.21	7.92 ± 1.60	0.2596 ± 0.0056
11.0	0.080	12.50 ± 2.22	9.05 ± 1.61	0.3735 ± 0.0061
14.0	0.090	14.06 ± 2.23	10.18 ± 1.62	0.4712 ± 0.0067
16.5	0.100	15.62 ± 2.24	11.31 ± 1.62	0.5526 ± 0.0072
19.0	0.100	15.62 ± 2.24	11.31 ± 1.62	0.6340 ± 0.0078

Tabela 25: Dados de desdobramento em 3 riscas

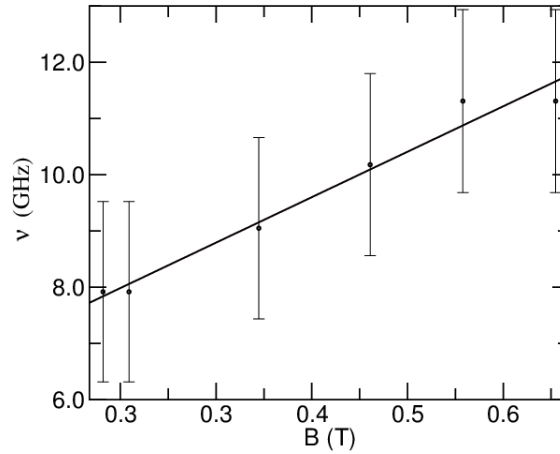


Figura 8: Ajuste - Observação transversal de B

Dados obtidos do ajuste:

a (C/kg)	c (s ⁻¹)	χ^2_{ngl}
$(1.21 \pm 0.57) \cdot 10^{11}$	$(5.56 \pm 2.01) \cdot 10^9$	0.03

Tabela 26: Parâmetros de ajuste - Observação transversal de B

Obteve-se um desvio ao valor teórico de $\approx 31\%$. A discussão dos resultados para o parâmetro c e para o χ^2_{ngl} é uma repetição do que foi dito no caso anterior.

II.II FSR e Poder Resolutivo

Como no caso de observação longitudinal do campo magnético era mais fácil ver as riscas (por serem apenas 2), o que fez com que se distinguísse separação entre riscas mais cedo que no caso da observação transversal, usa-se apenas esse caso para efeitos de cálculo de poder resolutivo e free spectral range.

Tem-se então, de acordo com a Tabela (23), que a separação de riscas foi detectada a 3.8 ± 0.1 A que, com o valor medido de $\delta a = 0.04 \pm 0.01$ mm, se traduz em $\Delta\lambda = 6.25 \pm 2.20$ pm. Como o comprimento de onda emitido pelo laser é de 643.8 nm, então tem-se, para o poder resolutivo: $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \approx 1.03 \cdot 10^5$

De modo a determinar o *Free Spectral Range*, avalia-se o significado do mesmo. Este corresponde à distância em frequência entre repetições do espectro. Neste caso, corresponde à distância entre 2 riscas consecutivas quando não há aplicação de campo

magnético. Assim, não é necessário multiplicar pelo rácio $\delta a/\Delta a$ a equação (6). Assim, o free spectral range corresponde a $\Delta\lambda \approx 4.84 \cdot 10^{-2}$ nm. Isto traduz-se então em $\text{FSR} \approx 3.50 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$

Espectroscopia Fina: Interferómetro Fabry-Perot

I Amplitude de deslocamento do Piezo

Para se obter ΔL , calculou-se primeiro a amplitude em tensão ΔV aplicada ao piezo. Para tal, com o conjunto de dados tirado, simplesmente subtraíram-se as tensões máximas às mínimas, para cada um dos grupos de dados e fez-se a média, dado que os valores são diferentes, devido ao ruído electrónico existente.

Finalmente, para ter ΔL , é necessário estabelecer uma relação com ΔV . Para tal, utiliza-se o Free Spectral Range (FSR) em unidades de comprimento e em unidades de tensão. Para o FSR_V (em Volts), faz-se novamente a média, nos grupos de dados, das diferenças dos mesmos picos sucessivos. O FSR em unidades de comprimento de onda é dado por: $\text{FSR} = \frac{\lambda}{2}$, com $\lambda = 638.2$ nm.

A relação final fica, portanto:

$$\Delta L = \frac{\lambda}{2} \frac{1}{\text{FSR}_V} \Delta V \quad , \quad (\delta \Delta L)^2 = \frac{\lambda^2}{4} \frac{1}{(\text{FSR}_V)^2} \left(\frac{1}{(\text{FSR}_V)^2} (\Delta V)^2 (\delta \text{FSR}_V)^2 + (\delta \Delta V)^2 \right) \quad (7)$$

No decurso da experiência utilizaram-se 2 lasers (de potências 2 mW e 20 mW) e, como tal, de modo a poderem-se recolher os dados no registador, o circuito eléctrico foi alterado o que tornou o ΔV substancialmente diferente nestes 2 casos. Portanto, fez-se a devida distinção e o cálculo dos dois ΔL referentes a cada laser.

I.I Laser de 2 mW

$$\begin{aligned} \Delta V &= \frac{8.96 + 8.97 + 8.96 + 9.02 + 9.01 + 9 + 9.02 + 9.02 + 9.02}{9} = 8.998 \pm 0.038 \text{ V} \\ \text{FSR}_V &= \frac{5.02 + 4.765 + 4.57 + 4.83 + 5.08 + 4.75 + 4.72 + 4.54 + 5.19}{9} = 4.83 \pm 0.36 \text{ V} \\ \Delta L &= 594.5 \pm 44.4 \text{ nm} \end{aligned}$$

I.II Laser de 20 mW

$$\begin{aligned} \Delta V &= \frac{7.81 + 7.82 + 7.81 + 7.86 + 7.86 + 7.86}{6} = 7.837 \pm 0.027 \text{ V} \\ \text{FSR}_V &= \frac{3.31 + 3.74 + 3.62 + 3.44 + 3.32 + 3.5}{6} = 3.49 \pm 0.25 \text{ V} \\ \Delta L &= 716.6 \pm 51.4 \text{ nm} \end{aligned}$$

II FSR e Finesse

Para se obter a finesse experimental, calculou-se através de um ajuste o FSR e o FWHM, utilizando-se então:

$$f = \frac{\text{FSR}}{\text{FWHM}} \quad (8)$$

II.I Laser 2mW

II.I.1 Distância L1 (7.60 ± 0.02 cm)

Para dois modos, obtiveram-se os seguintes dados:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.627	4.784 ± 0.003
2	0.713	

Tabela 27: Dados relativos ao ajuste para 2 modos (2mW, L1)

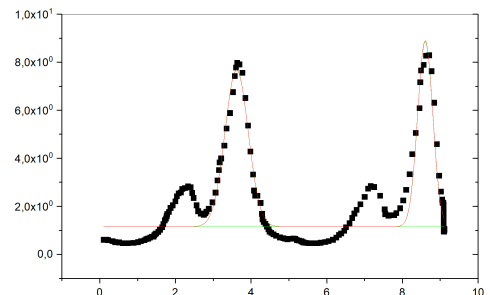


Figura 9: Ajuste para 2 modos (2mW, L1)

Fazendo a média:

$$f_{2\text{modos}} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 7.168 \pm 0.005 \quad (9)$$

Para três modos, obtiveram-se os seguintes dados:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.652	4.557 ± 0.004
2	0.628	

Tabela 28: Dados relativos ao ajuste para 3 modos (2mW, L1)

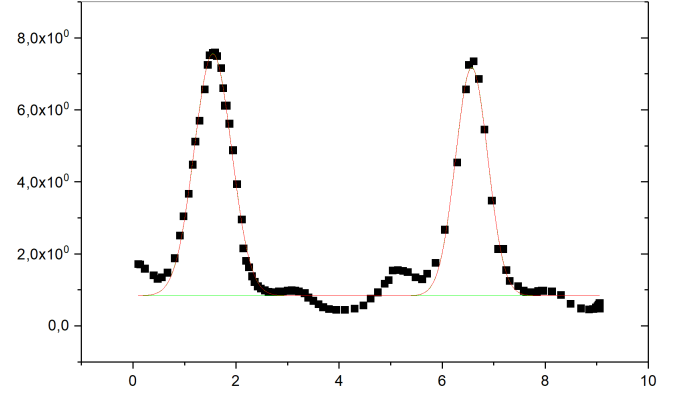


Figura 10: Ajuste para 3 modos (2mW, L1)

Fazendo a média:

$$f_{3\text{modos}} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 7.127 \pm 0.006 \quad (10)$$

Por fim, para obter f_{L1} faz-se: $\frac{f_{2\text{modos}} + f_{3\text{modos}}}{2}$, obtendo-se $f_{L1} = 7.148 \pm 0.004$

II.I.2 Distância L2 (4.06 ± 0.02 cm)

Para dois modos, obtiveram-se os seguintes dados:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.462	3.472 ± 0.004
2	0.507	

Tabela 29: Dados relativos ao ajuste para 2 modos (2mW, L2)

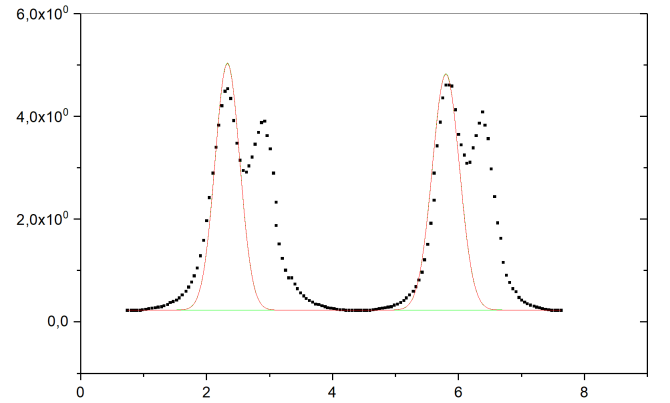


Figura 11: Ajuste para 2 modos (2mW, L2)

2

Fazendo a média:

$$f_{2\text{modos}} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 7.185 \pm 0.008 \quad (11)$$

Para três modos, obtiveram-se os seguintes dados:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.483	3.444 ± 0.003
2	0.434	

Tabela 30: Dados relativos ao ajuste para 3 modos (2mW, L2)

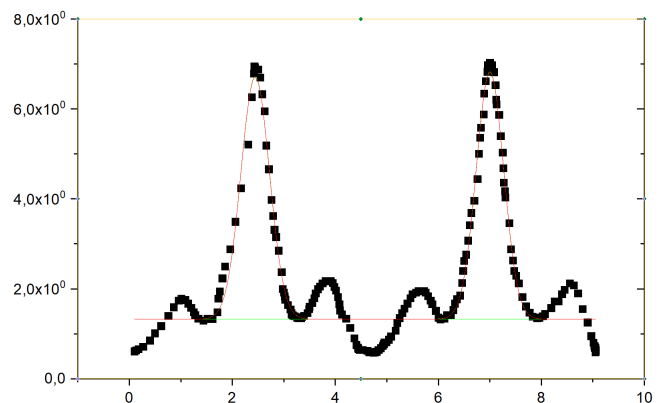


Figura 12: Ajuste para 3 modos (2mW, L2)

2

Fazendo a média:

$$f_{3modos} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 7.534 \pm 0.007 \quad (12)$$

Por fim, para obter f_{L2} faz-se: $\frac{f_{2modos} + f_{3modos}}{2}$, obtendo-se $f_{L2} = 7.359 \pm 0.005$.

II.I.3 Comparação com o valor teórico

Obtém-se o valor teórico para a finesse através do seguinte cálculo, dependente apenas da refletividade $R = r^2 = 0.8$:

$$f = \frac{\pi r}{1 - r^2} = \frac{\pi \sqrt{R}}{1 - R} = 14.05 \quad (13)$$

Faz-se então a média entre o valor de f_{L1} obtido para a primeira distância entre espelhos, e de f_{L2} obtido para a segunda distância entre espelhos:

$$f_{exp} = \frac{f_{L1} + f_{L2}}{2} = 7.253 \pm 0.003 \quad (14)$$

Por fim, obtem-se o desvio face ao valor teórico através de:

$$\delta f = \frac{f_{teorico} - f_{exp}}{f_{teorico}} = 48.4\% \quad (15)$$

II.II Laser 20 mW

II.II.1 Distância L1

Para quatro modos, obtiveram-se os seguintes dados:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.360	3.508 ± 0.002
2	0.292	

Tabela 31: Dados relativos ao ajuste para 4 modos (20mW, L1)

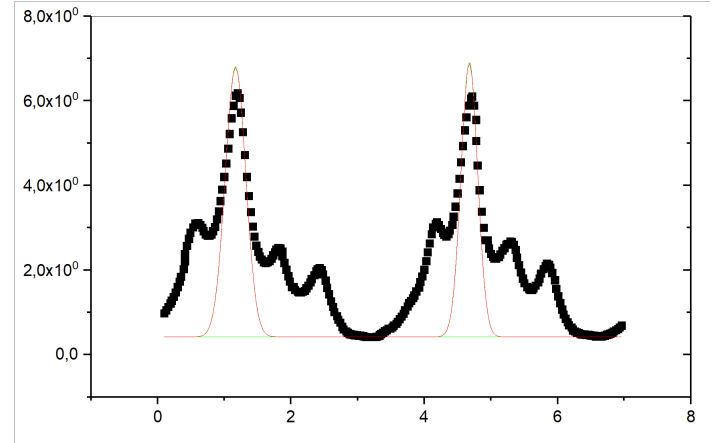


Figura 13: Ajuste para 4 modos (20mW, L1)

Fazendo a média:

$$f_{4modos} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 10.872 \pm 0.006 \quad (16)$$

Para cinco modos, obtiveram-se os seguintes dados:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.304	3.437 ± 0.001
2	0.271	

Tabela 32: Dados relativos ao ajuste para 5 modos (20mW, L1)

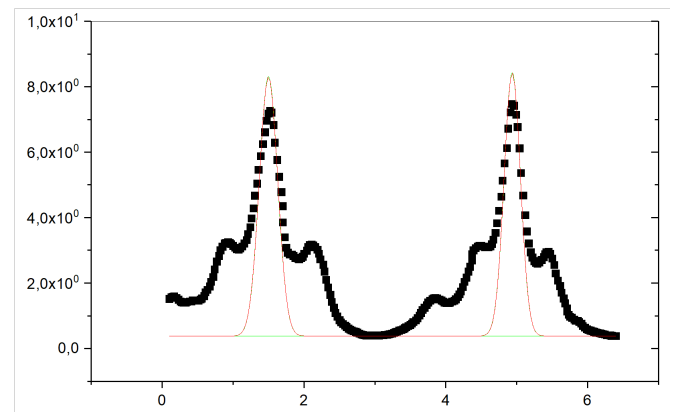


Figura 14: Ajuste para 5 modos (20mW, L1)

Fazendo a média:

$$f_{5modos} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 12.017 \pm 0.004 \quad (17)$$

Por fim, para obter f_{L1} faz-se: $\frac{f_{4modos} + f_{5modos}}{2}$, obtendo-se $f_{L1} = 11.444 \pm 0.004$

II.II.2 Distância L2

Devido à potência do laser e à redução da distância L, foi observado um declínio acentuado na resolução, sendo que no que se esperava obter quatro ou cinco modos, obteve-se apenas um modo (os quatro estão presentes, porém a baixa resolução apenas nos permite distinguir um). Como tal obteve-se então o seguinte:

Pico	FWHM (V)	FSR (V)
1	0.847	3.4856 ± 0.0002
2	0.812	

Tabela 33: Dados relativos ao ajuste para 20mW, L2

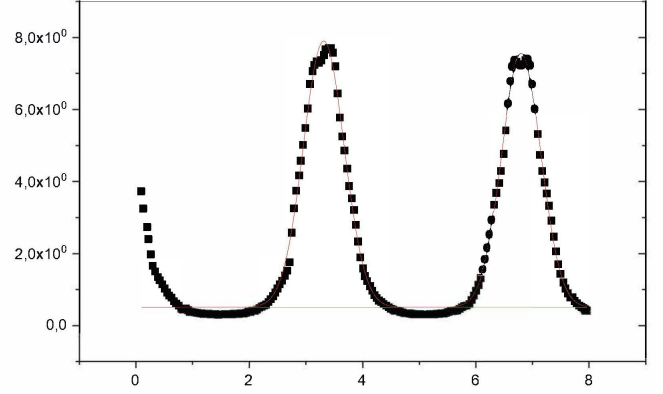


Figura 15: Ajuste para 20mW, L2

Fazendo a média:

$$f_{1modo} = \frac{f_1 + f_2}{2} = \frac{\frac{FSR}{FWHM_1} + \frac{FSR}{FWHM_2}}{2} \approx 4.204 \pm 0.002 \quad (18)$$

sendo que neste caso,

$$f_{L2} = f_{1modo} = 4.204 \pm 0.002 \quad (19)$$

II.II.3 Comparação com o valor teórico

Faz-se então a média entre o valor de f_{L1} obtido para a primeira distância entre espelhos, e de f_{L2} obtido para a segunda distância entre espelhos:

$$f_{exp} = \frac{f_{L1} + f_{L2}}{2} = 7.824 \pm 0.002 \quad (20)$$

Por fim, obtem-se o desvio face ao valor teórico através de:

$$\delta f = \frac{f_{teorico} - f_{exp}}{f_{teorico}} = 44.3\% \quad (21)$$

III Potência Resolutiva, A

Para calcular a potência resolutiva A, usou-se o FSR no domínio das frequências, dado por:

$$FSR_L = \frac{c}{2L} \quad , \quad \delta FSR_L = \frac{c}{2L^2} \delta L \quad (22)$$

sendo então A dado por:

$$A = \frac{\nu}{FSR_L} \cdot f_L \quad (23)$$

onde $\nu = \frac{c}{\lambda}$.

III.I 2 mW

Para a primeira distância entre espelhos L1, obteve-se:

$$A_{L1} = \frac{\nu}{FSR_{L1}} \cdot f_{L1} = (2.352 \pm 0.012) \times 10^6 \quad (24)$$

sendo que para a segunda distância entre espelhos L2, se obteve:

$$A_{L2} = \frac{\nu}{FSR_{L2}} \cdot f_{L2} = (1.582 \pm 0.012) \times 10^6 \quad (25)$$

III.II 20 mW

Para a primeira distância entre espelhos L1, obteve-se:

$$A_{L1} = \frac{\nu}{FSR_{L1}} \cdot f_{L1} = (3.798 \pm 0.018) \times 10^6 \quad (26)$$

sendo que para a segunda distância entre espelhos L2, se obteve:

$$A_{L2} = \frac{\nu}{FSR_{L2}} \cdot f_{L2} = (0.911 \pm 0.007) \times 10^6 \quad (27)$$

IV Espaçamento entre modos

As conversões das distâncias de Volt para Hz (de modo a ter termo de comparação com o valor do fornecedor) são feitas segundo:

$$d(\text{Hz}) = \frac{FSR_L}{FSR} d(\text{V}) \quad , \quad \text{em que } FSR_L \text{ é o já definido acima } (1.974 \cdot 10^9 \text{ Hz}) \text{ e } FSR \text{ é o obtido pelos ajustes} \quad (28)$$

$$(\delta d(\text{Hz}))^2 = (d(\text{Hz}))^2 \left[\left(\frac{\delta FSR_L}{FSR_L} \right)^2 + \left(\frac{\delta d(\text{V})}{d(\text{V})} \right)^2 + \left(\frac{\delta FSR}{FSR} \right)^2 \right] \quad (29)$$

IV.I Laser de 2 mW

Utilizaram-se os dados referentes a L1, com $FSR = 4.784 \pm 0.003 \text{ V}$ para 2 modos e $FSR = 4.557 \pm 0.004 \text{ V}$ para 3 modos.

Modos	2	3
Distância (V)	1.65	1.49
	1.39	1.47
	1.3	1.52
	1.55	1.44
	1.41	1.63
	1.59	1.37
	1.52	1.44
	1.48	1.42
	1.35	1.42
	1.29	1.38
		1.55
Média Dist (V)	1.45 ± 0.20	1.47 ± 0.16
Média Dist (MHz)	$598 \pm 6.8 \cdot 10^{-3}$	$637 \pm 4.8 \cdot 10^{-3}$
Espaçamento Médio (MHz)	$617.5 \pm 5.8 \cdot 10^{-3}$	

Tabela 34: Valores usados para o cálculo do espaçamento entre modos do Laser de 2 mW

Comparando com o valor teórico apresentado no guia (614 MHz), verifica-se a existência de um desvio de 0.6%.

IV.II Laser de 20 mW

$FSR = 3.508 \pm 0.002 \text{ V}$ para 4 modos

Modos	4		
Distância (V)	0.72	0.60	0.63
	0.62	0.60	0.58
	0.62	0.56	0.62
	0.53	0.60	0.53
	0.66	0.57	0.63
	0.55	0.60	0.53
	0.66	0.59	0.59
	0.61	0.59	0.61
	0.51	0.65	0.62
	0.56	0.43	0.53
	0.70	0.52	0.57
			0.55
Espaçamento Médio (V)	0.59 ± 0.16		
Espaçamento Médio (MHz)	$332 \pm 8.1 \cdot 10^{-3}$		

Tabela 35: Valores usados para o cálculo do espaçamento entre modos do Laser de 20 mW

V Banda de Ganho

V.I Laser de 2 mW

Para obter uma estimativa da curva de ganho, ajustou-se uma gaussiana com um parâmetro independente aos pontos perto dos picos de cada modo (não podia ser só ao pico porque é preciso ter mais pontos que parâmetros livres), assumindo que o *threshold* do laser está a cerca da meia altura da gaussiana. Para fixar isso, atribui-se ao parâmetro independente o valor simétrico do valor mais alto nos pontos considerados (esse ponto corresponde a uma estimativa para o centróide, sendo que por o parâmetro independente com o valor simétrico força a gaussiana a passar em zero na sua meia altura). Por estas razões escolheu-se fazer esta estimativa num conjunto de dados onde fossem visíveis 3 modos, uma vez que num caso minimamente simétrico como esse a estimativa do centróide da gaussiana é melhor do que se só se tivesse a trabalhar com 2 modos.

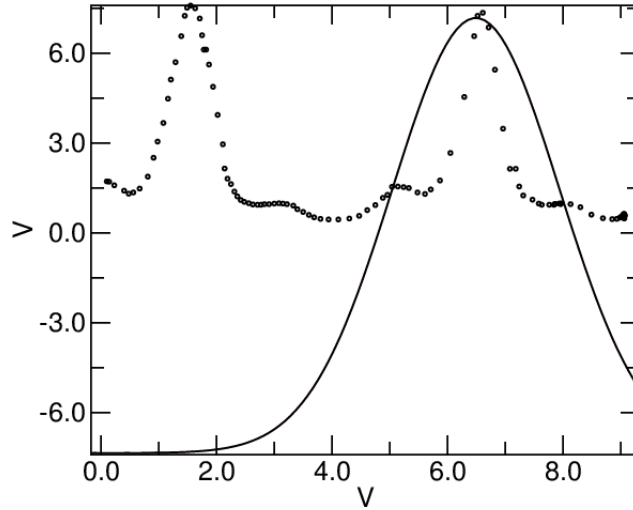


Figura 16: Estimativa da curva de ganho - Laser de 2 mW

$$FWHM = 2\sqrt{2\ln(2)}\sigma$$

Obteve-se um desvio padrão $\sigma \approx 1.45 \text{ V} \Rightarrow FWHM \approx 3.41 \text{ V} \Rightarrow FWHM \approx 1.48 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$. Isto representa um desvio ao valor teórico (1.5 GHz)^[2] de $\approx 1.33\%$.

V.II Laser de 20 mW

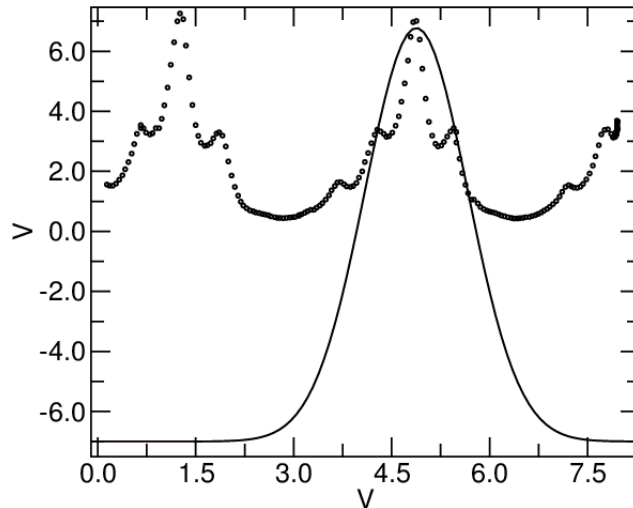


Figura 17: Estimativa da curva de ganho - Laser de 20 mW

Obteve-se um desvio padrão $\sigma \approx 0.787 \text{ V} \Rightarrow FWHM \approx 1.85 \text{ V} \Rightarrow FWHM \approx 8.01 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. No entanto é notória aqui a presença de um erro. Contudo o ajuste para mais modos da maneira descrita acima é muito mais complicado, uma vez que é necessário que o máximo da gaussiana tenha o valor simétrico do termo independente para forçar a meia altura a passar em 0. Com mais "clusters" de pontos esta tarefa é mais complicada, pelo que a estimativa não é muito boa neste caso. Sabe-se, contudo, que é uma estimativa por defeito. Obtém-se um erro teórico de $\approx 47\%$, o que realça a dificuldade de analisar a largura da banda de ganho deste laser comparativamente ao anterior, menos potente.

²<http://www.phys.unm.edu/msbahae/Optics%20Lab/HeNe%20Laser.pdf>

A Fazer para a Apresentação

- Espaçamento dos modos do laser de 20 mW (após obtenção do valor do fabricante)
- Repetição da última secção (Banda de Ganho) para mais grupos de dados
- Comparações entre os vários instrumentos/métodos
- No Fabry-Perot, comparar qualidade dos dados quando a rampa de tensão sube mais devagar/depressa