

Apsorpcijske vrpce RbCs molekule na površini hladne helijeve kapljice

Mladen Movre, Robert Beuc, Berislav Horvatić

Institut za fiziku, Bijenička cesta 46, p.p. 304, HR-10001 Zagreb

- **RbCs** je najteža heteronuklearna dvoatomna alkalijska molekula
- znatno međudjelovanje spina i staze
- znatan stalni električni dipolni moment

Moguće primjene:

- tvorba ultrahladnih heteronuklearnih molekula
- tvorba Bose- Einsteinova kondenzata
- tvorba "qubita" u kvantnom računalu

Molekula RbCs može se formirati na površini hladne helijeve kapljice ($T = 0.4$ K). Pritom se ohladi u najniže rovibracijsko stanje najnižeg singuletnog ili tripletnog elektronskog stanja ($v'' = 0, J'' \approx 0$).

U aproksimaciji $J' = J'' = 0$ koeficijent apsorpcije glasi

$$k(\nu) = \frac{8\pi^3\nu}{3hc} N \sum_{v'} |\langle \phi_0 | D(R) | \phi_{v'} \rangle|^2 g(\nu - \nu_{ij})$$

N – gustoća molekula u početnom stanju

$D(R)$ – dipolni moment prijelaza ($\Lambda'' \rightarrow \Lambda'$)

$g(\nu - \nu_{ij})$ – funkcija oblika linije:

- za slobodnu molekulu g je δ funkcija
- na kapljici g je gaussian širine ≈ 30 cm^{-1}

Energije i valne funkcije vibracijskih nivoa određene su dijagonalizacijom $N_p \times N_p$ matrice hamiltonijana predstavljene na mreži od $N_p = 790$ ekvidistantnih vrijednosti međuatomskih razmaka. Franck-Condovi faktori $|\langle \Phi_0 | \Phi_{v'} \rangle|^2$ dobiveni su zbrajanjem umnožaka valnih funkcija u svakoj od točaka mreže.

MODEL

Sumu po v' zamjenjujemo integralom po (kvazikontinuiranoj) energiji E

$$\phi(E) = \sqrt{\partial E / \partial \nu} \phi_0 \rightarrow k(\nu) = \frac{8\pi^3\nu}{3c} N |\langle \phi_0 | D(R) | \phi(E) \rangle|^2$$

- **Aproksimacija** [Gislason, *JCP* **58** (1973) 3702]

$$\langle \phi_0 | D(R) | \phi(E) \rangle = \frac{1}{\sqrt{|v'|}} D(R_i) \phi_0(R_i)$$

(R_i - povratna točka gornjeg potencijala.)

- **osnovno stanje** (aproksimacija: H.O.)

$$\phi_0(R) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sigma^{1/2}} e^{-\frac{(R-R_0)^2}{2\sigma^2}}$$

$$E_g = V_g + \frac{1}{2} h\omega \quad h\nu = V_e - E_g + V_e'(R_i - R_0)$$

$$\sigma = \sqrt{\hbar/\mu\omega} = \Delta R/2$$

Slijedi

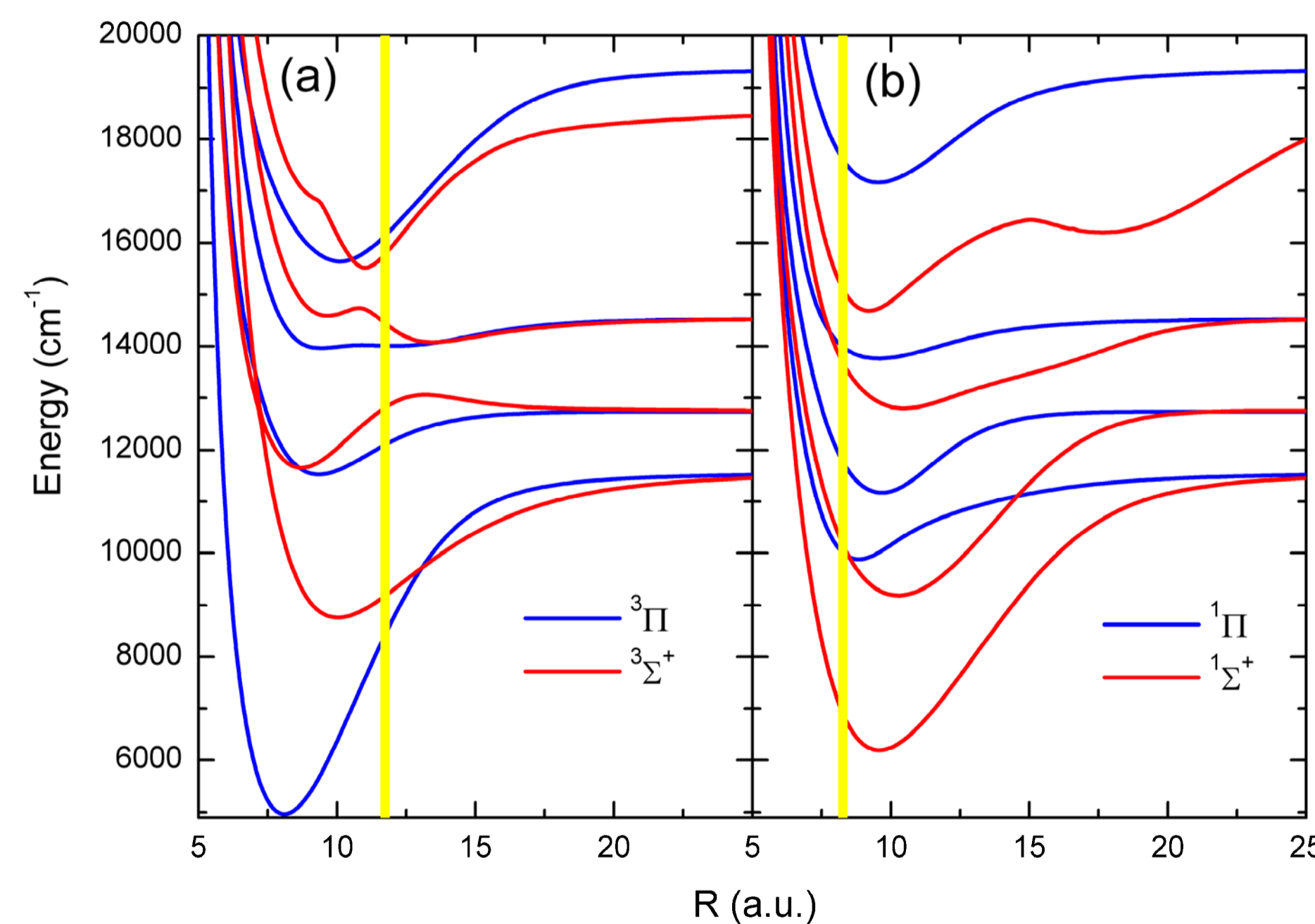
$$k(\nu) = \frac{8\pi^3\nu}{3c} N [D(R_0)]^2 \frac{1}{w} \sqrt{\frac{2}{w}} e^{-\frac{2}{w^2}(E_0 - h\nu)^2}$$

$$E_0 = V_e - E_g \equiv h\nu_0 \quad w = |2V_e'\sigma|$$

Sporo promjenjiva $D(R)$ zamijenjena s $D(R_0)$.

Zbog nedovoljne točnosti potencijalnih krivulja i nepotpunog poznavanja dipolnih momenata prijelaza, račun je proveden za slučaj Hundovog vezanja (a), uz zanemarivanje vezanja spina i staze te pretpostavku konstantnih dipolnih momenata prijelaza.

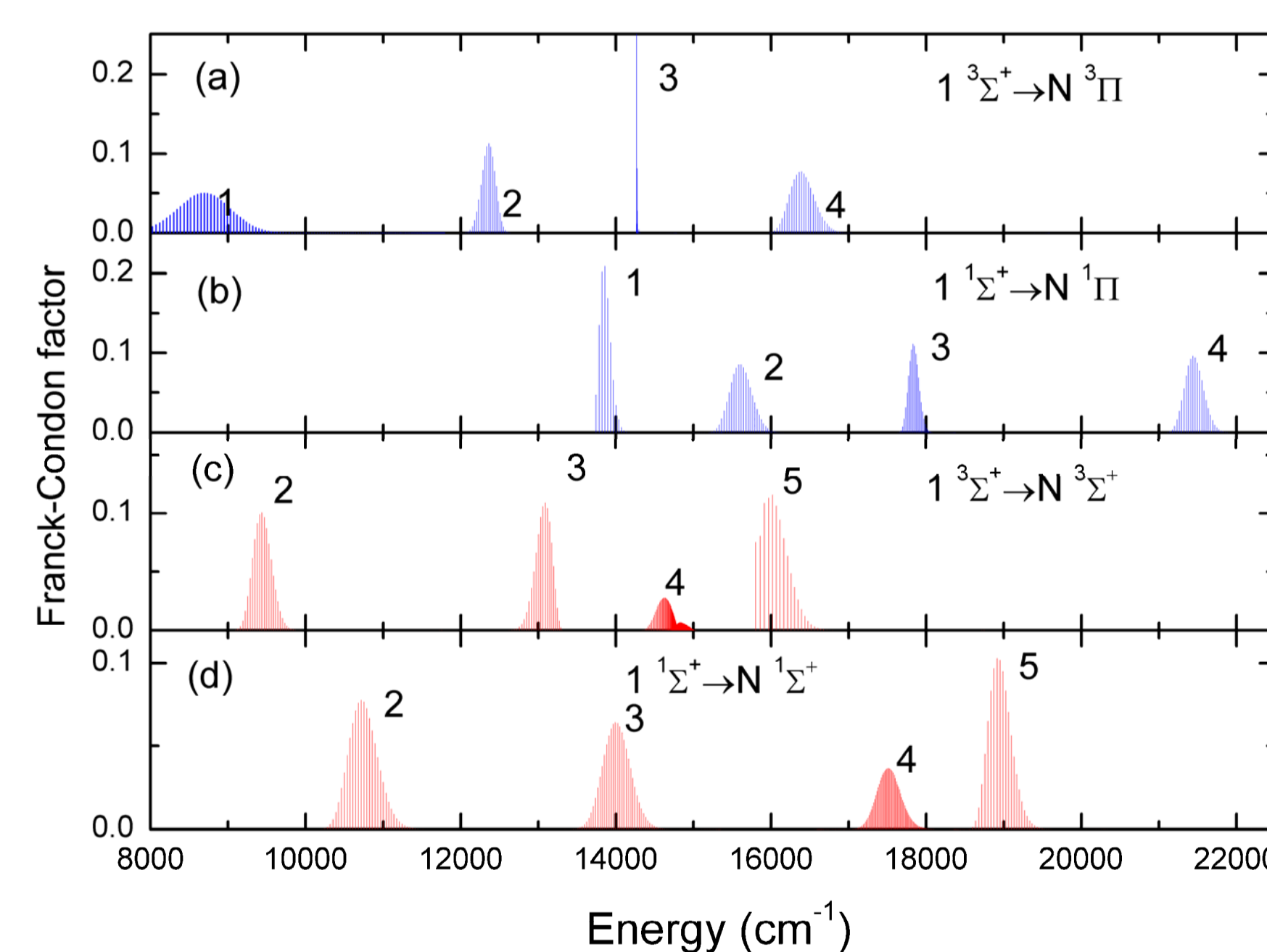
Rezultati mogu poslužiti kao prva aproksimacija pri usporedbi s budućim eksperimentalnim spektrima, za njihovu jednostavnu interpretaciju kao i određivanje nekih od parametara potencijalnih krivulja.



Slika 1. Potencijalne krivulje [Allouche *et al.*, *J. Phys. B* **33** (2000) 2307].

Najniža četiri pobuđena stanja: (a) tripletna; (b) singuletna. Asimptote odgovaraju stanjima razdvojenih atoma.

Područje međuatomskih razmaka od značaja za teorijsko predviđanje označeno je vertikalnom žutom vrpcom.



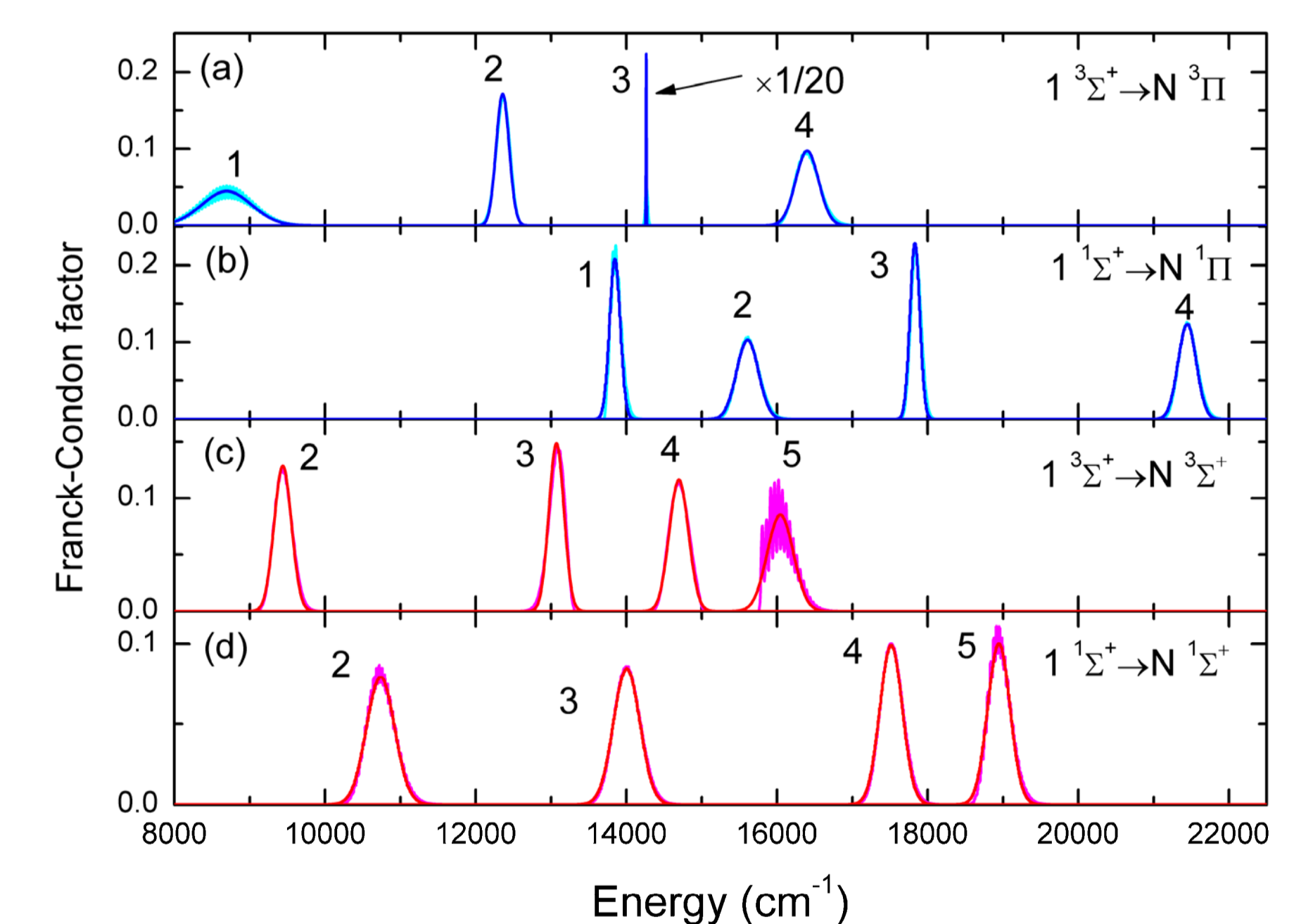
Slika 2. Apsorpcijske vrpce slobodne RbCs molekule u hladnim uvjetima ($T = 0.4$ K) za Hundov slučaj (a).

Franck-Condovi faktori izračunati su za prijelaze s najnižeg vibracijskog stanja. Funkcija oblika linije aproksimirana je δ funkcijom.

Položaji linija unutar vrpce prikazani su vertikalnim crtama.

(a) i (b) $N = 1, 2, 3, 4$

(c) i (d) $N = 2, 3, 4, 5$



Slika 3. Apsorpcijske vrpce RbCs molekule na helijevoj kapljici ($T = 0.4$ K) za Hundov slučaj (a).

Kvantomehanički oblici vrpce, dobiveni korištenjem Gaussove funkcije oblika linije (širine 30 cm^{-1}) centrirane na izračunate frekvencije prijelaza ν_{ij} (slika 2), uspoređeni su s jednostavnom formulom našeg modela [Beuc *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **435** (2007) 236]

$$k(\nu) = \frac{8\pi^3\nu}{3c} N [D(R_0)]^2 \frac{1}{w} \sqrt{\frac{2}{w}} e^{-\frac{2}{w^2}(E_0 - h\nu)^2}$$