

Apsorpcijske vrpce RbCs molekula u gustojoj pari

Berislav Horvatić, Robert Beuc, Mladen Movre

horvatic@ifs.hr

beuc@ifs.hr

movre@ifs.hr

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

ŠTO:

Izračunali smo približan oblik apsorpcijskih vrpca u spektru molekule **RbCs** u području valnih duljina od **450 do 1000 nm** i za **visoke temp. ~700 K**.

KAKO:

Za proračun **reduciranog koeficijenta apsorpcije** korištena je

- porodica elektronskih potencijalnih krivulja za Hundov slučaj vezanja **a** (najbolje što ima),

uz **pretpostavku**

- konstantnih spinski dozvoljenih dipolnih momenata prijelaza, određenih iz **pretpostavke**
- asimptotske ($R \rightarrow \infty$) jednakosti svih molekularnih oscilatornih jakosti (proizvoljno = 1);
- zanemarivanje energije vezanja spina i staze.

Račun je **poluklasičan, kvazistatički**,

[R. Beuc, V. Horvatić, J. Phys. B **25** (1992) 1497], uz korištenje

uniformne Airyjeve aproksimacije

- izbjegava singularitete uzrokovane kvazistatičkim oblicima linija i uzima u obzir interferencije među doprinosima različitih Condonovih točaka.

ZAŠTO:

Praktični cilj tih teorijskih simulacija je dvojak:

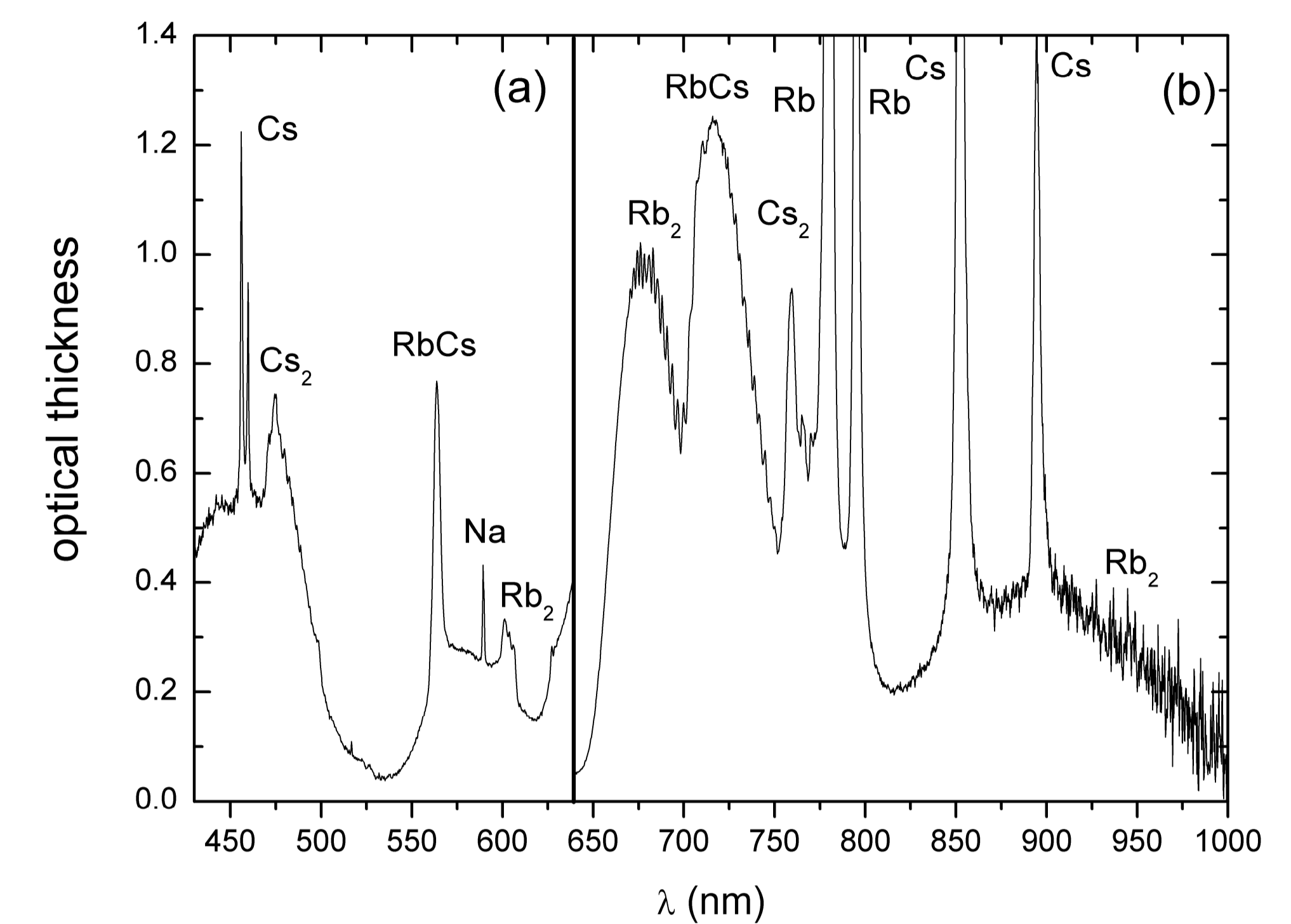
(1a) identifikacija/interpretacija eksperimentalno opaženih vrpca, tj. njihovo pripisivanje određenim radijacijskim prijelazima među stanjima RbCs dimera;

(1b) Na razini **primjene**, teorijska predviđanja usmjeravaju potragu za vrpcama prikladnim za razne tehnološke svrhe, kao npr. razvijanje učinkovitih i "ugodnih" izvora svjetlosti;

(2) "povratno testiranje" korištene metode i aproksimacija: svako bitnije odstupanje eksperimentalno opaženog spektra od teorijski predviđenog ukazivalo bi na potrebu složenijih računa koji uključuju ovisnost dipolnih momenata prijelaza o R i međudjelovanje spina i staze.

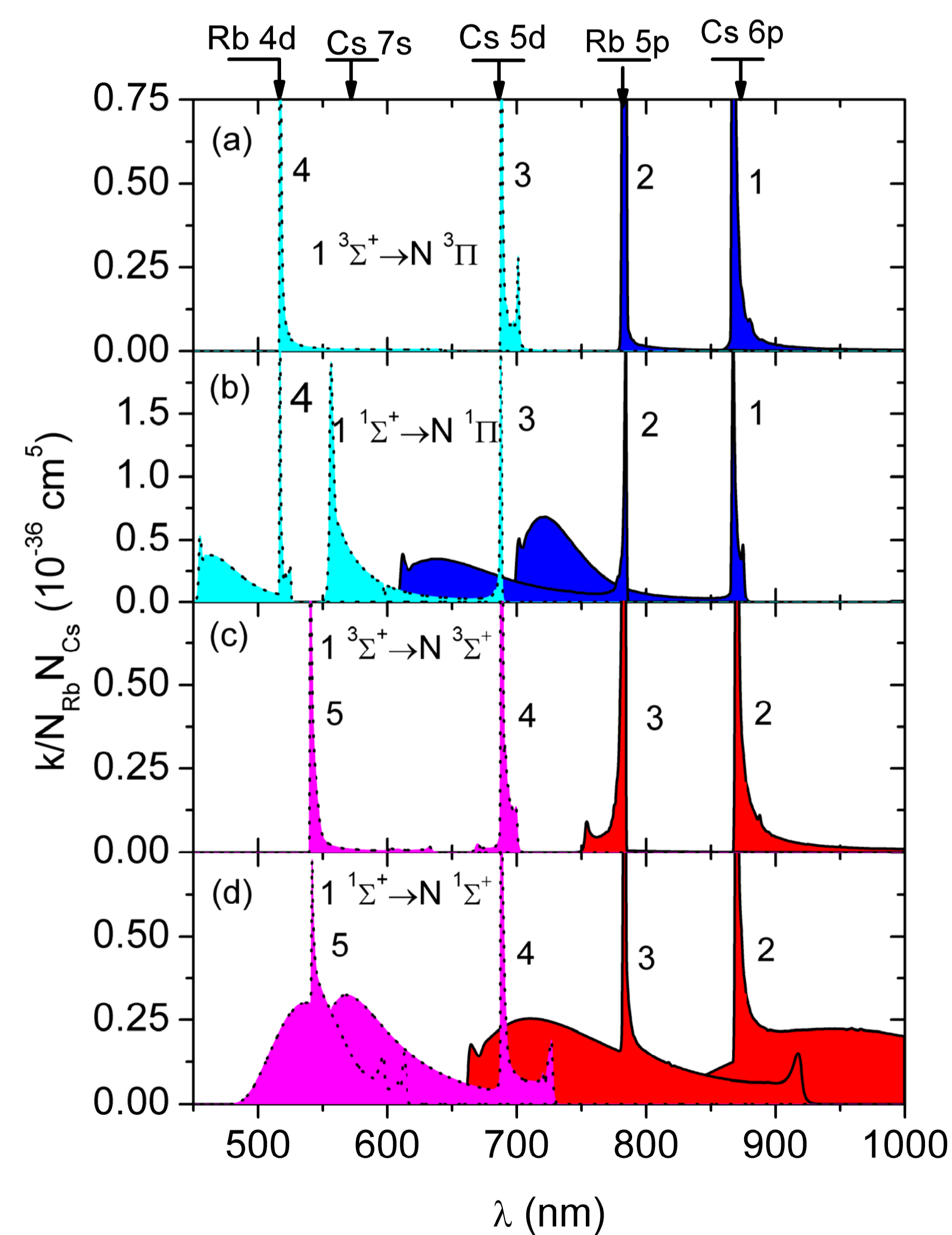
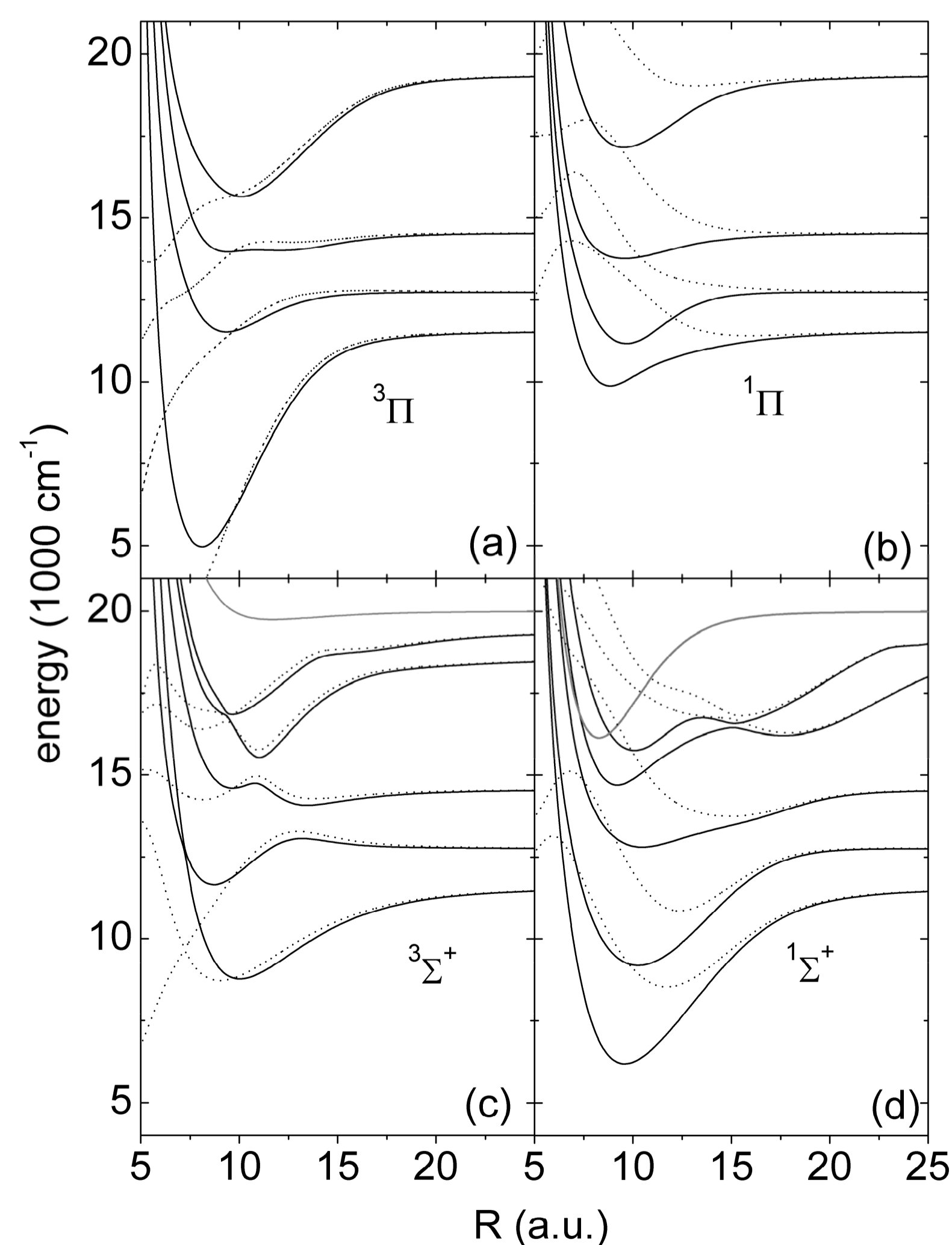
USPOREDBA S EKSPERIMENTOM:

Teorijski spektri RbCs dimera uspoređeni su s eksperimentalnima, dobivenima u vrlo gustim parama smjese Rb i Cs. Pokazalo se da **relativno skromna** korištena teorijska sredstva daju prepoznatljivije i dosta točne teorijske simulacije apsorpcijskih vrpca, pa dostaju za uspješnu interpretaciju spektra.



Eksperimentalni izlaz ("output"), a za nas ulaz:

apsorpcijski spektar smjese vrlo gustih para Rb i Cs izmjeren na temperaturama **(a) 757 K** i **(b) 641 K**;
 → superpozicija doprinosa Rb_2 , Cs_2 i $RbCs$ vrpca
 [R. Beuc et al., Appl. Phys B **88** (2007) 111]

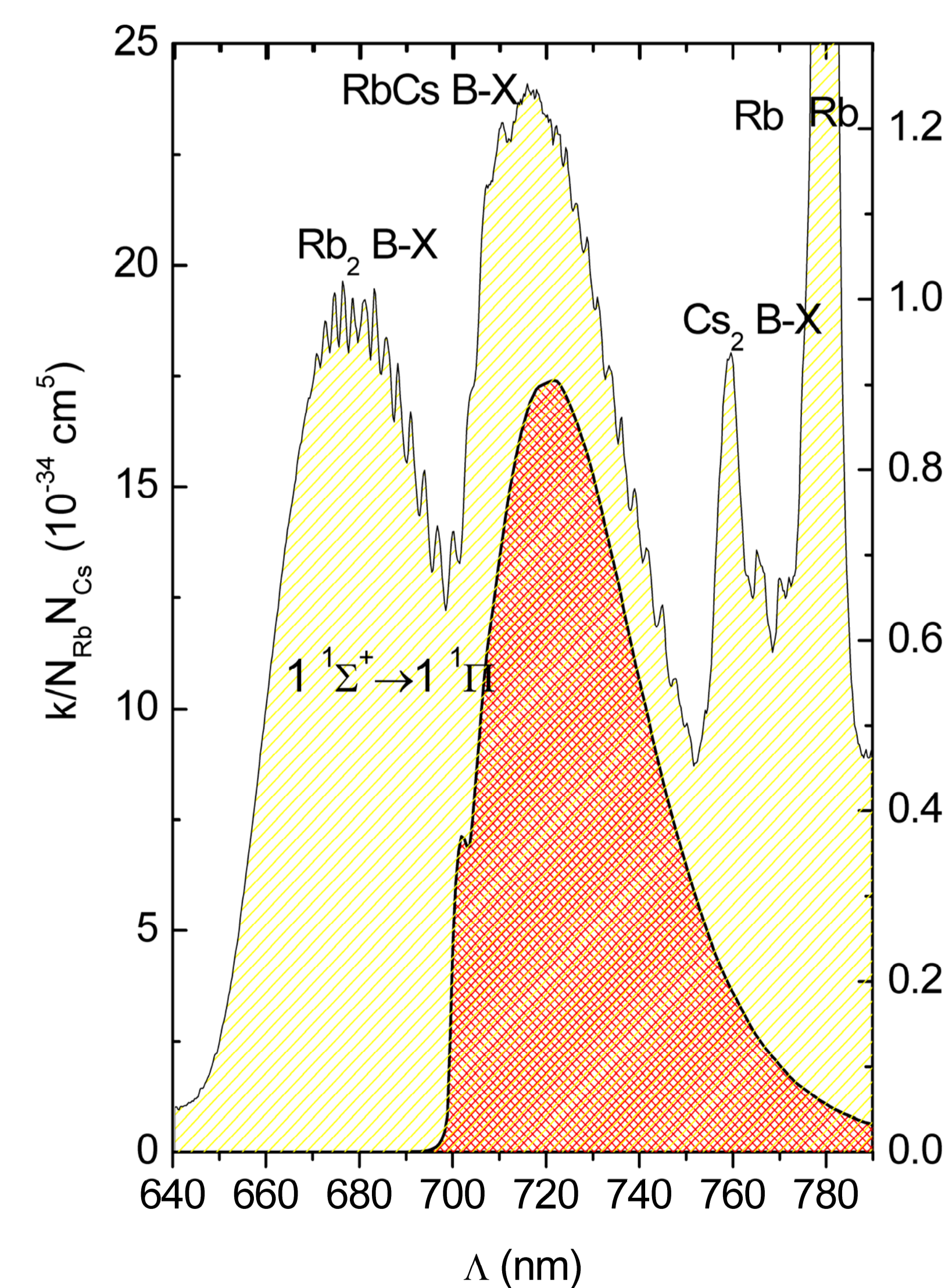


Teorijski ulaz ("input"):

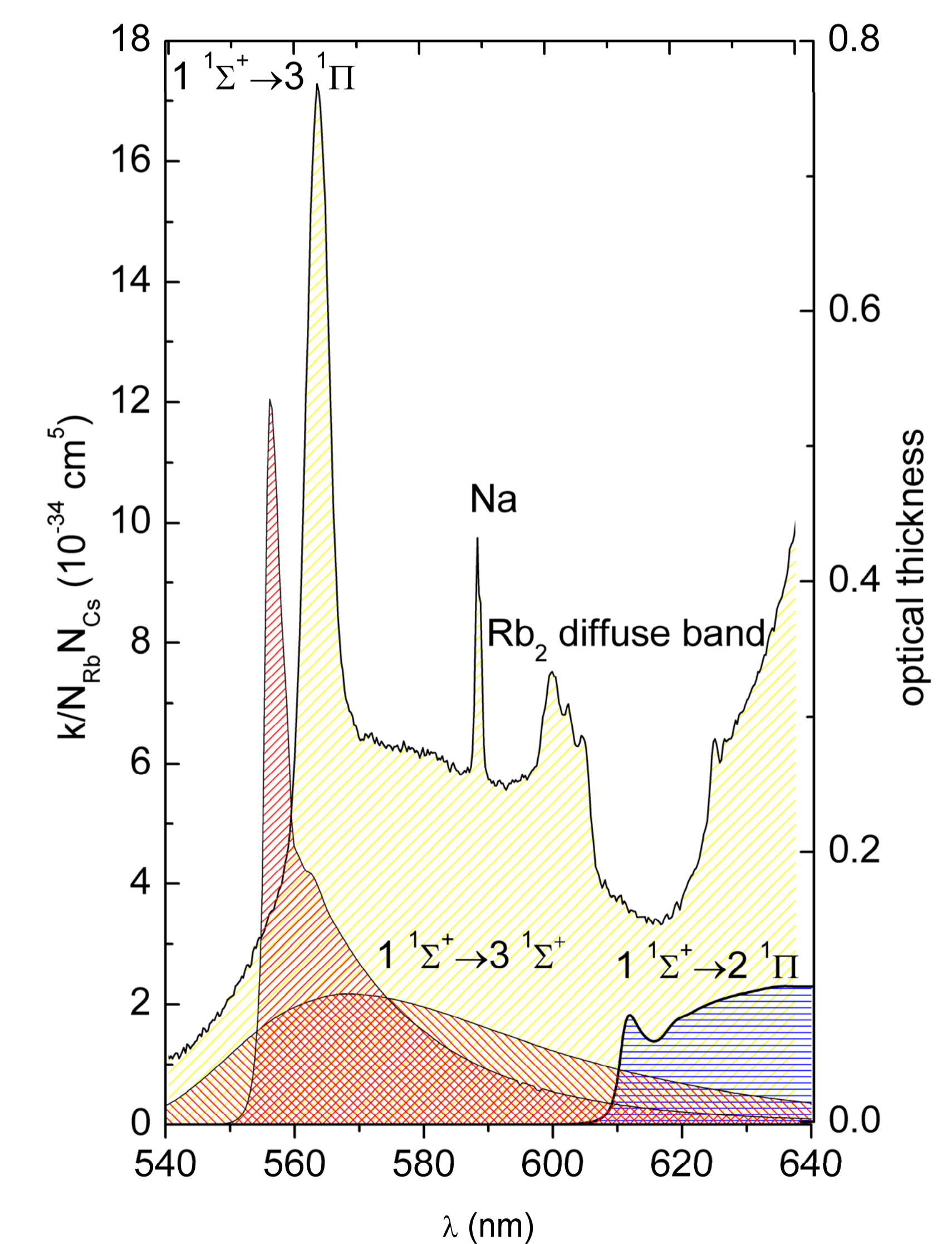
— potencijalne krivulje pobuđenih elektronskih stanja
 odgovarajući diferentni potencijali
 [A. R. Allouche et al., J. Phys B **33** (2000) 2307]
 Ishodište energije je na asimptoti $Rb(5^2S) + Cs(6^2S)$.

Teorijski izlaz ("output"): reducirani koeficijent apsorpcije para RbCs za "reprezentativnu" temperaturu $T = 720$ K

plavo i **crveno**: asimptotski **dozvoljeni** prijelazi
tirkizno i **ljubičasto**: asimptotski **zabranjeni** prijelazi
Oštre vrpce na zabranjenim asimptotama su artefakti pretp. konst. dip. momenata i neće biti eksp. opazive.



Usporedbom eksp. i teor. rezultata za $T = 641$ K vrpca oko 717 nm prepoznata je kao $RbCs$ B-X vrpca koja potječe od **singuletnog** prijelaza $1\ 1\Sigma^+ \rightarrow 1\ 1\Pi$ s dominantnim **vezano – vezano** doprinosima. → U eksp. spektru jasno vidljiva vibracijska struktura.



Usporedba eksp. i teor. rezultata za $T = 757$ K u području difuzne $RbCs$ vrpce oko 563 nm. Iako vrpca izgleda kao da potječe od tripletnog prijelaza (glatka, bez strukture), teor. analiza pokazuje da se radi o **singuletnom** prijelazu, $1\ 1\Sigma^+ \rightarrow 3\ 1\Pi$, ali s dominantnim **vezano – slobodno** doprinosima.