

# Polare Moleküle

Hauptseminar: Physik der kalten Gase

Lena Daschke

---

14.05.2013

# Übersicht

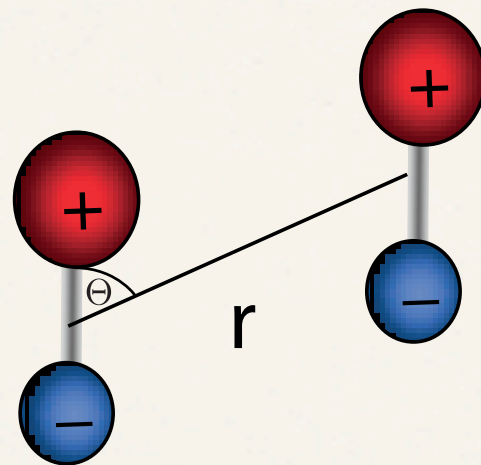
---

- ❖ 1. Generelle Eigenschaften von Molekülen
- ❖ 2. Direkte Kühlmethoden von Molekülen
- ❖ 3. Herstellung von ultrakalten Molekülen
- ❖ 4. Stabilität von ultrakalten Molekülen
- ❖ 5. Theoretische Beschreibung von 2D Systemen



# Motivation

---

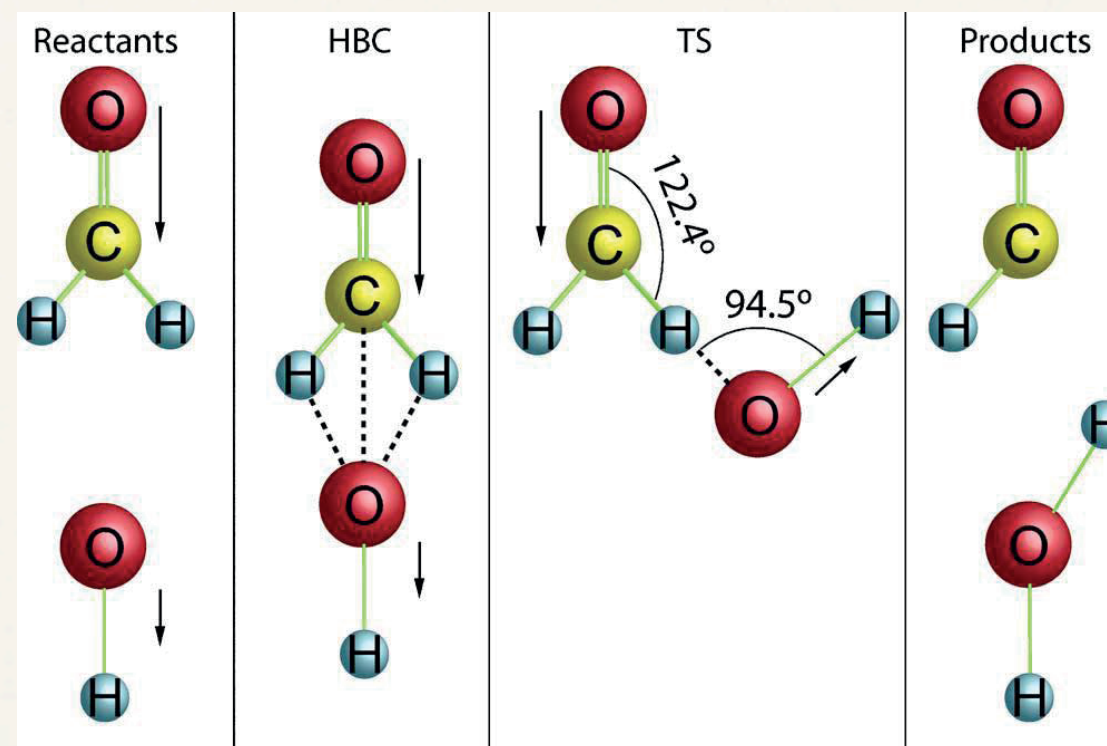


- ❖ anisotrope, langreichweitige WW:  $U = \frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3}$
- ❖ Elektrisches Dipolmoment sehr stark  $\frac{\mu_0 \mu^2}{d^2 / \epsilon_0} \propto 10^{-4}$
- ❖ Innere Freiheitsgrade von polaren Molekülen als Qubits



# Motivation

- ❖ Über Dipolmomente steuerbare chemische Reaktionen



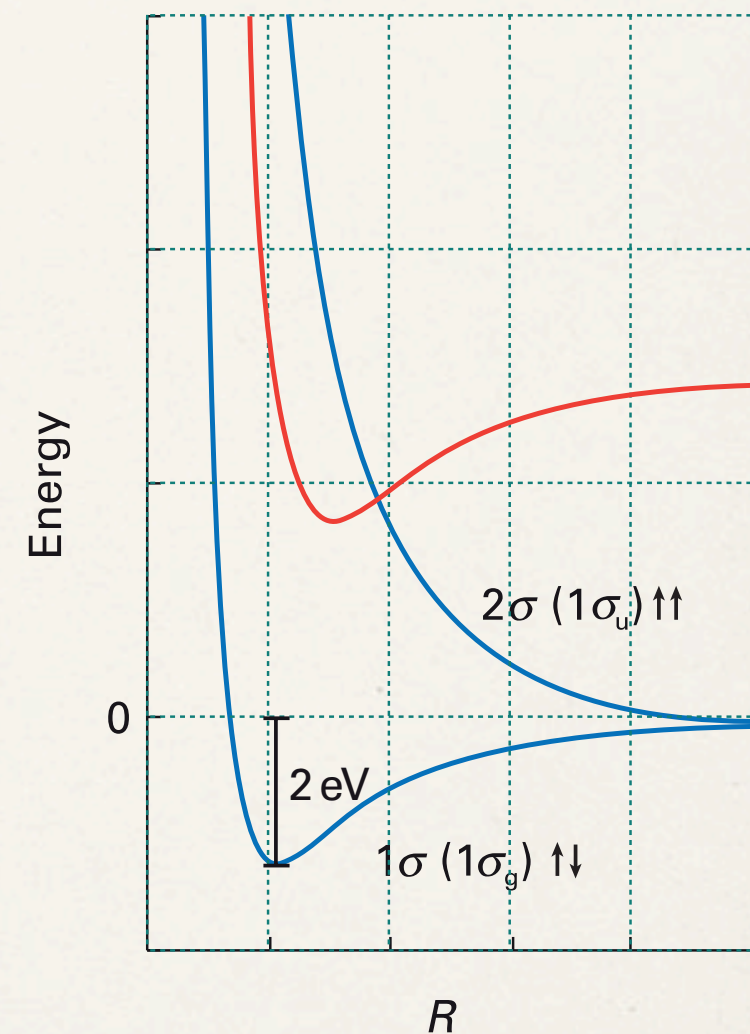
- ❖ Verbindung von Supraleitung und BEC

E. R. Hudson et al., Phys. Rev. A 73, 063404 (2006)



## 1.1 Molekülpotential

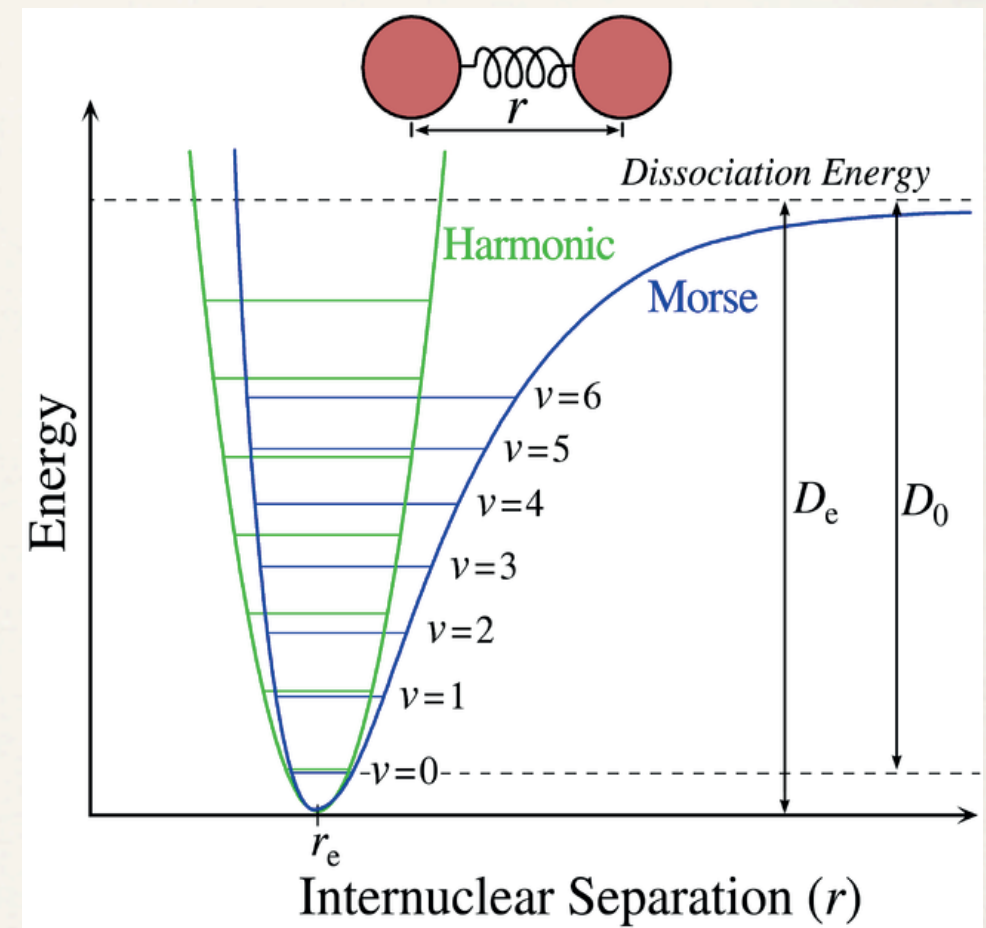
- ❖ Am Beispiel Wasserstoff
- ❖ Lösung der Schrödingergleichung  
→ symmetrische und antisymmetrische Kombination der Wellenfunktion
- ❖ antisymmetrisch  $\sigma_u$  → antibindend
- ❖ symmetrisch  $\sigma_g$  → bindend
- ❖ Bindungsenergien  $\approx$  eV



P. W. Atkins, Physical Chemistry (8th Edition)

## 1.2 Vibrationszustände

- ❖ Potential von zweiatomigen Molekülen  
→ anharmonischer Oszillator
- ❖ Vibrationszustände nicht äquidistant
- ❖ Quantenzahl:  $v$

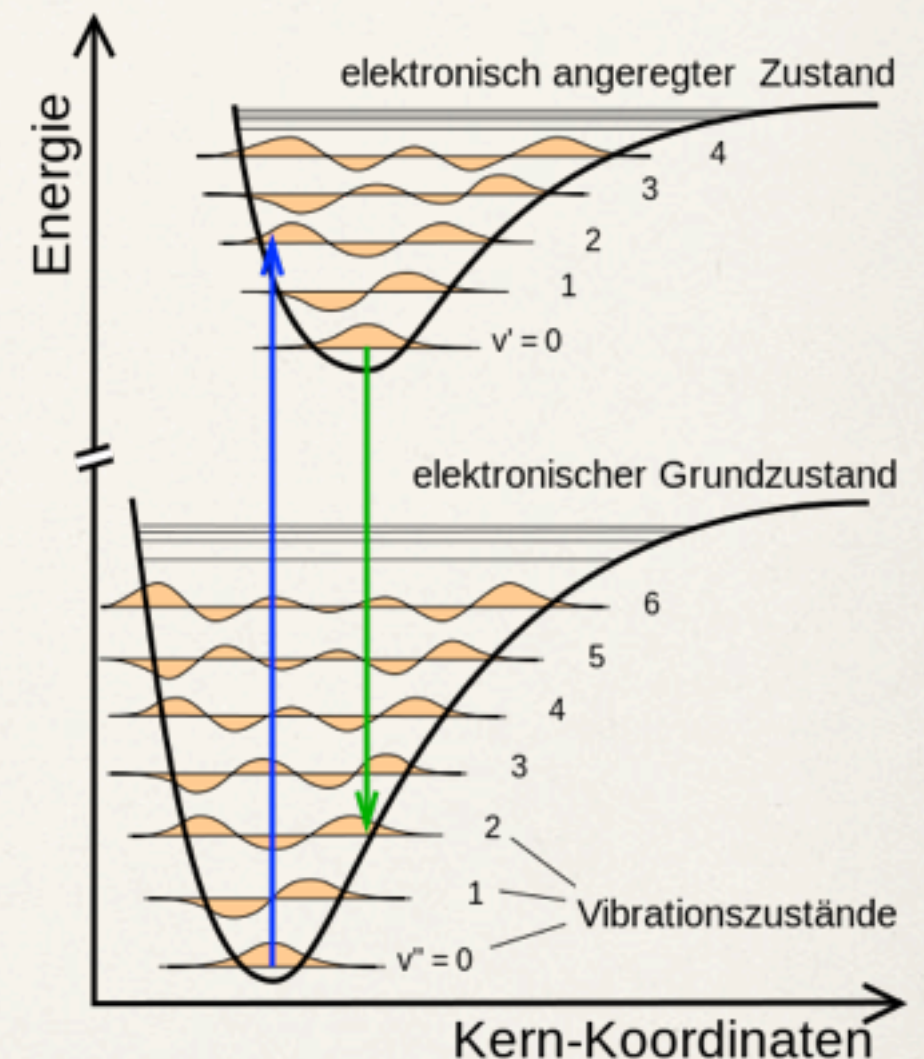


<http://de.wikipedia.org/wiki/Morsepotential>



## 1.3 Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

- ❖ Wellenfunktionen der Vibrationszustände eines zweiatomigen Moleküls
- ❖ Franck-Condon-Prinzip  
→ Übergänge zwischen hohen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

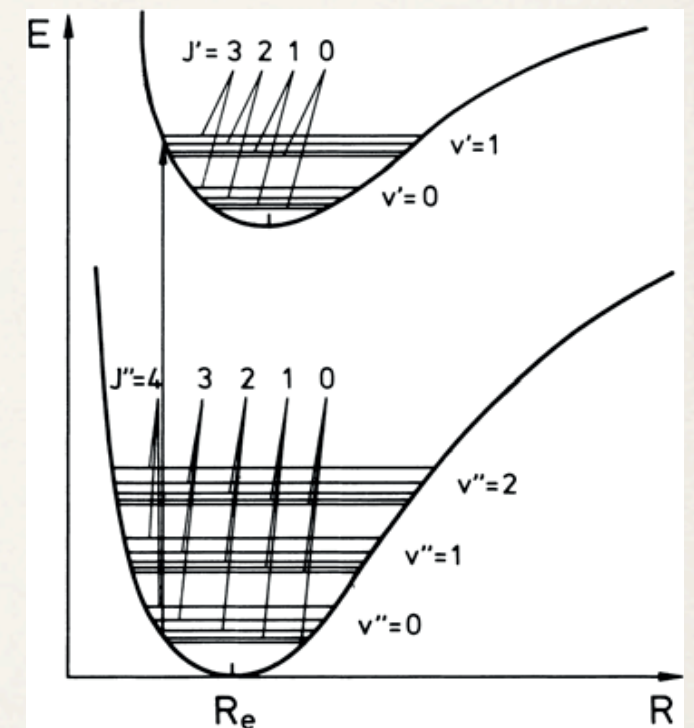


<http://de.wikipedia.org/wiki/Franck-Condon-Prinzip>



## 1.4 Rotationszustände

- ❖ Hantelmodell: nicht starrer Rotator  
→ Rotation um z-Achse nicht möglich,  
da  $L_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi} = 0$
- ❖ Abstände der Rotationszustände werden nach oben hin größer
- ❖ Quantenzahl: J
- ❖ Rovibrationaler Grundzustand:  $v, J = 0$



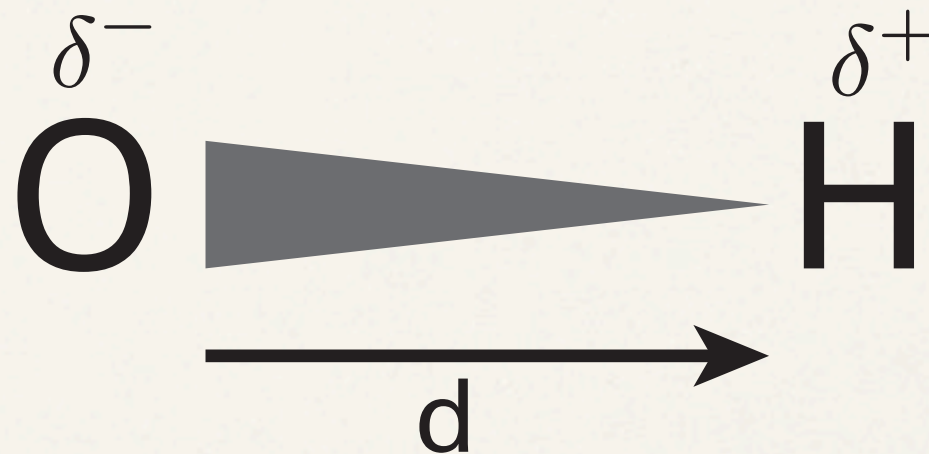
Haken Wolf, Molekülphysik und  
Quantenchemie (5. Auflage)



## 1.5 Polare Moleküle

---

- ❖ permanentes elektrisches Dipolmoment  $d$
- ❖  $d = e \cdot a_0$



# Übersicht

---

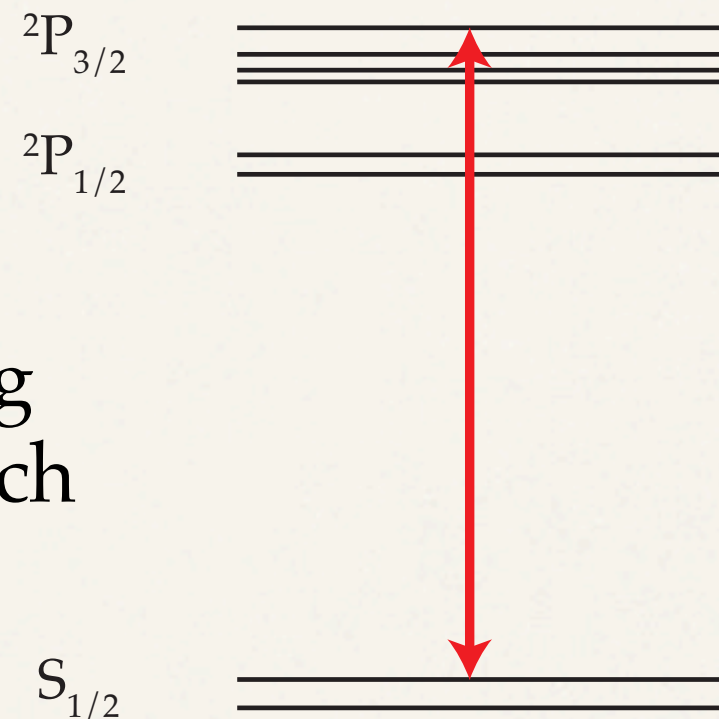
- ❖ 1. Generelle Eigenschaften von Molekülen
- ❖ **2. Direkte Kühlmethoden von Molekülen**
- ❖ 3. Herstellung von ultrakalten Molekülen
- ❖ 4. Stabilität von ultrakalten Molekülen
- ❖ 5. Theoretische Beschreibung von 2D Systemen



# 2.1 Atomare Kühlverfahren

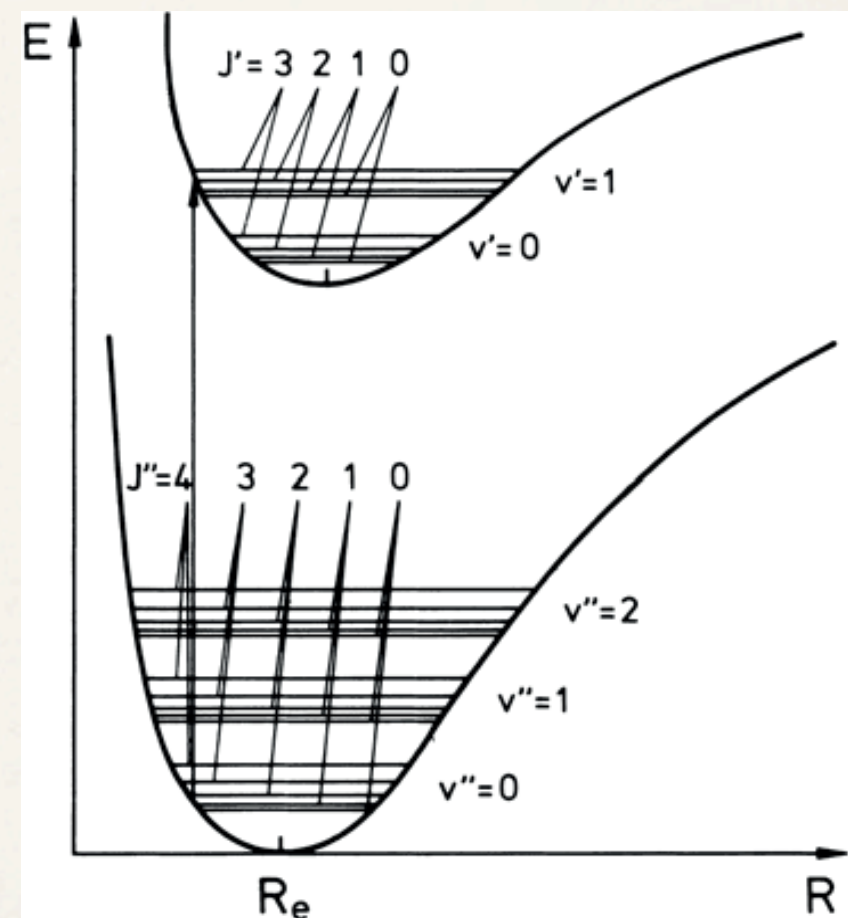
---

- ❖ geschlossener Übergang  
→ Laserkühlung möglich



# 2.1 Atomare Kühlverfahren

- ❖ Viele Vibrations- und Rotationszustände  
→ kein geschlossener Übergang  
→ keine effiziente Laserkühlung



Haken Wolf, Molekülphysik und Quantenchemie (5. Auflage)



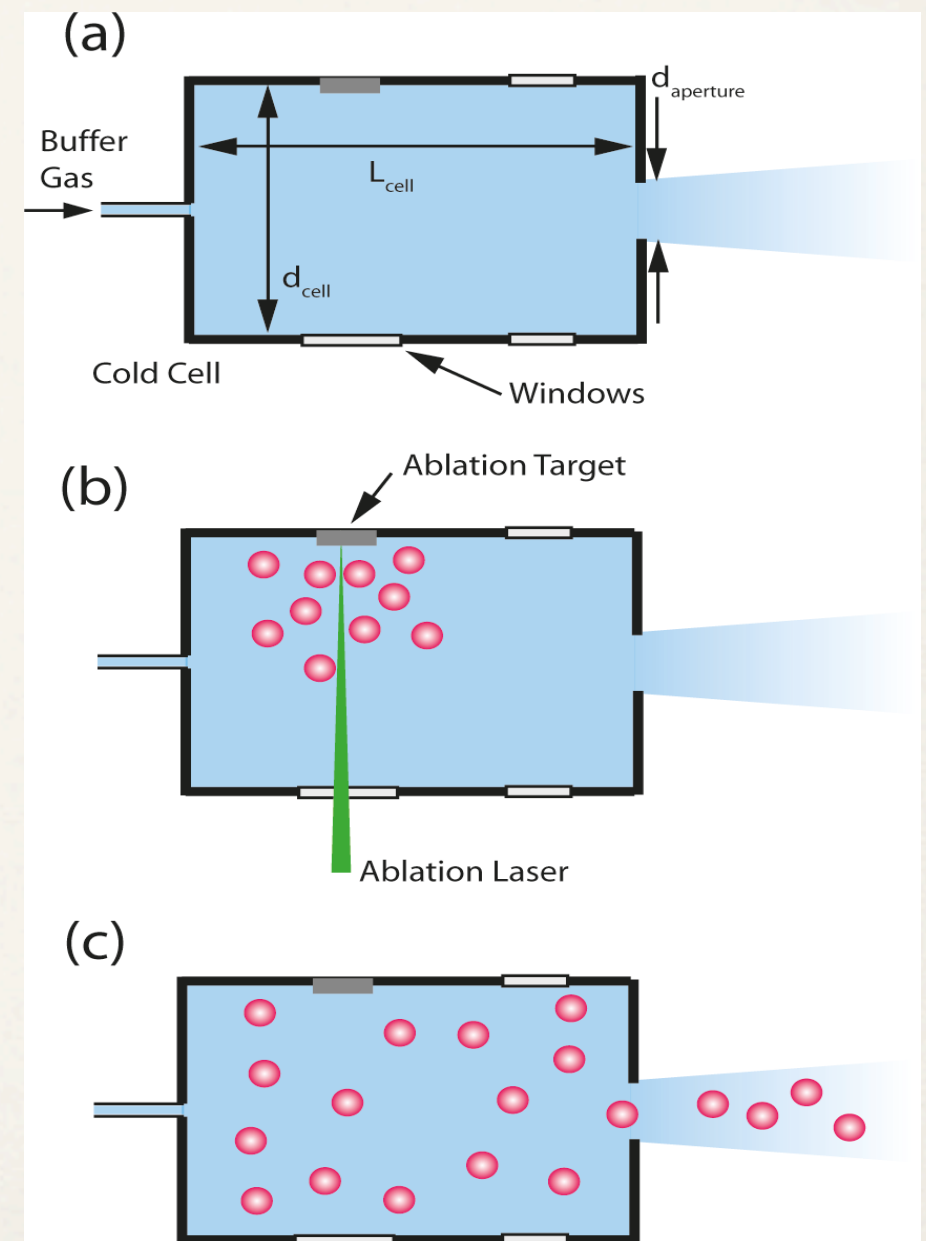
# 2.1 Atomare Kühlverfahren

---

- ❖ Verdampfungskühlung: - inelastische Stöße führen zu chemischen Reaktionen → Molekülverlust
- ❖ BEC: - Phasenraumdicke  $D \approx 1$ 
  - Teilchendichte  $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
  - Temperatur  $T = 100 \text{ nK}$

# 2.2 Puffergas Kühlung

- ❖ Puffergas: Helium → bei 4 K flüssig → reaktionsträge
- ❖ Teilchendichte  $n = 10^8 \text{ cm}^{-3}$
- ❖ Erreichbare Temperatur ca. 2 K

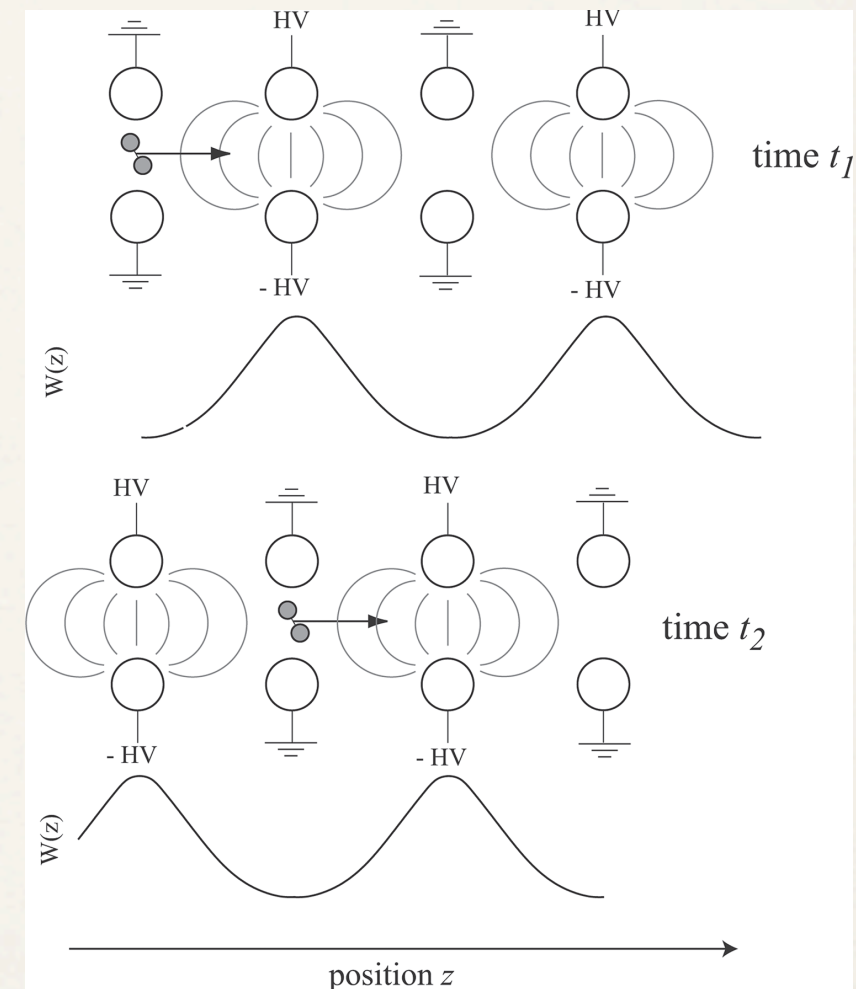


The Buffer Gas Beam: An Intense, Cold, and Slow Source for Atoms and Molecules  
Chemical Reviews 112, 4803 (2012)



# 2.3 Stark Abbremsers

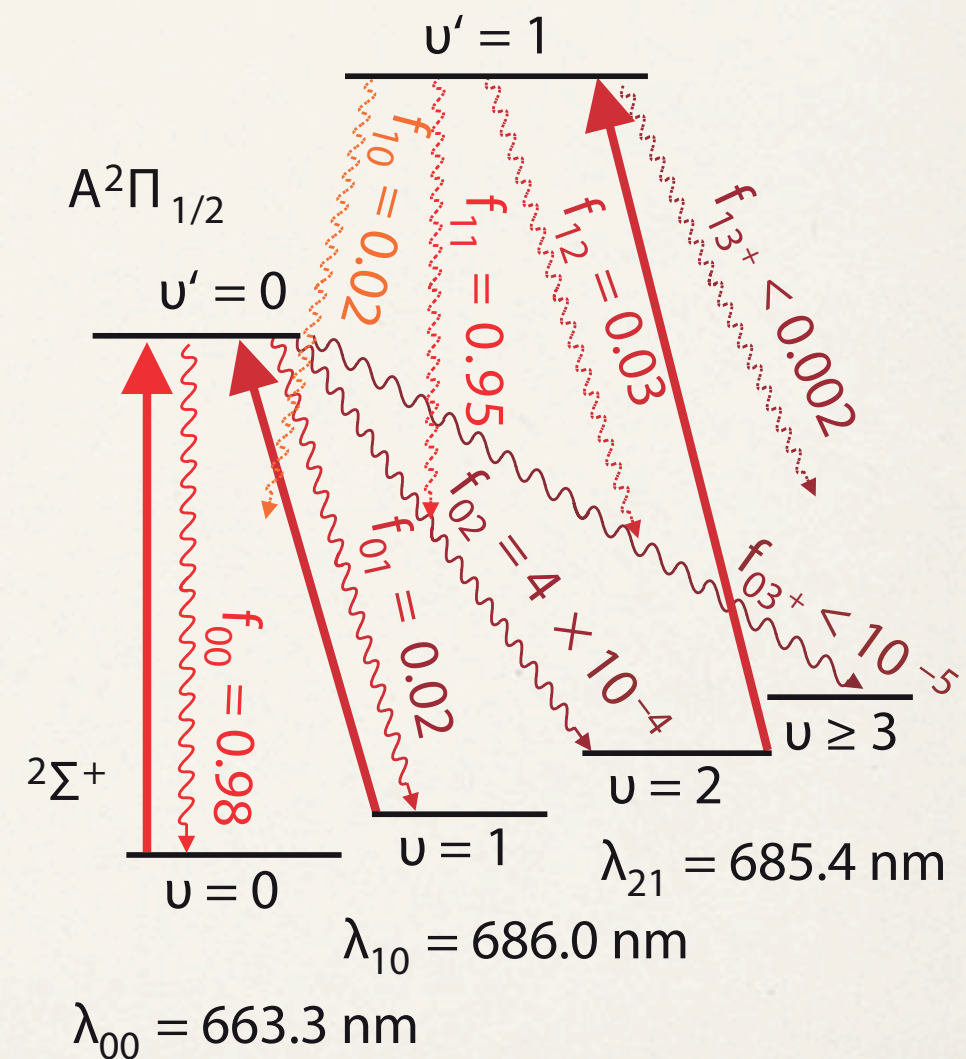
- ❖  $W = \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$
- ❖  $F = d \cdot \nabla E$
- ❖ 40 kV an Elektroden mit 3 mm Abstand
- ❖ Teilchendichte  $n = 10^7 \text{ cm}^{-3}$
- ❖ Erreichbare Temperatur ca. 1 mK



Manipulation and Control of Molecular Beams  
Chemical Reviews 112, 4828 (2012)

# 2.4 Direkte Laserkühlung

- ❖ SrF
- ❖ Kühlung von 50 mK auf 5 mK
- ❖ Verlust von 5% der Teilchen

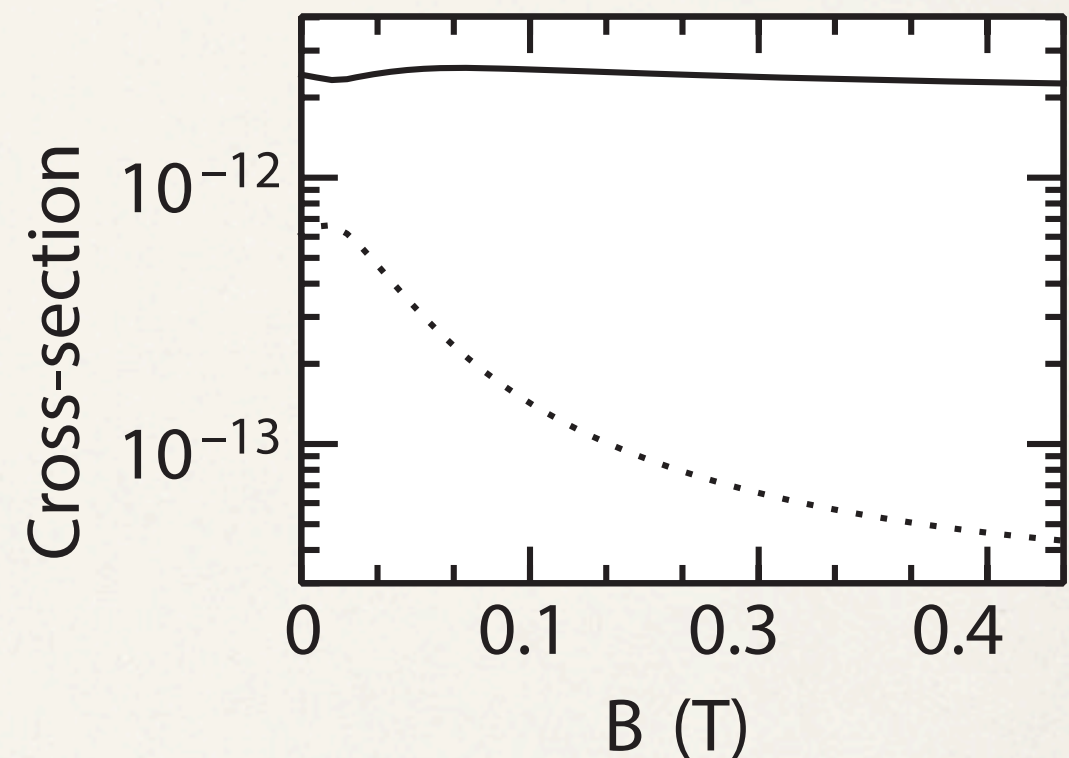


Laser cooling of a diatomic molecule  
Nature 467,820-823 (2010)



# 2.5 Verdampfungskühlung

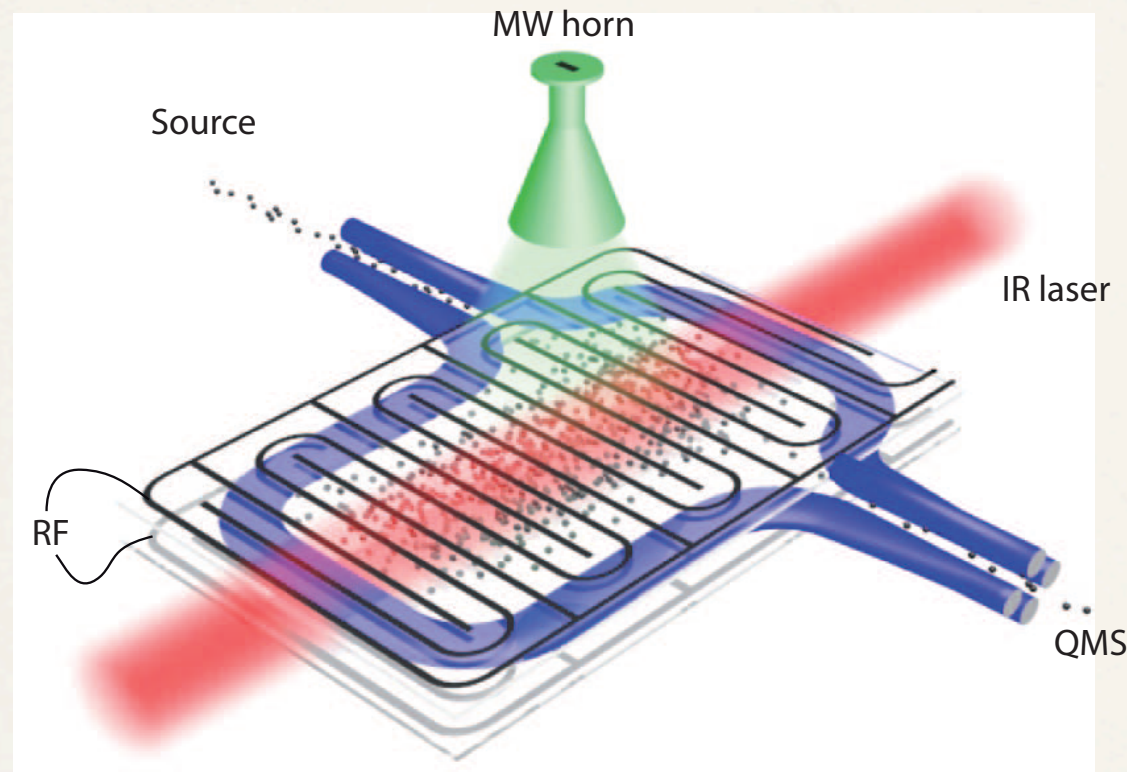
- ❖ neutrales OH
- ❖ Teilchendichte  
 $n = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
- ❖ Kühlung von 20 mK auf 5 mK



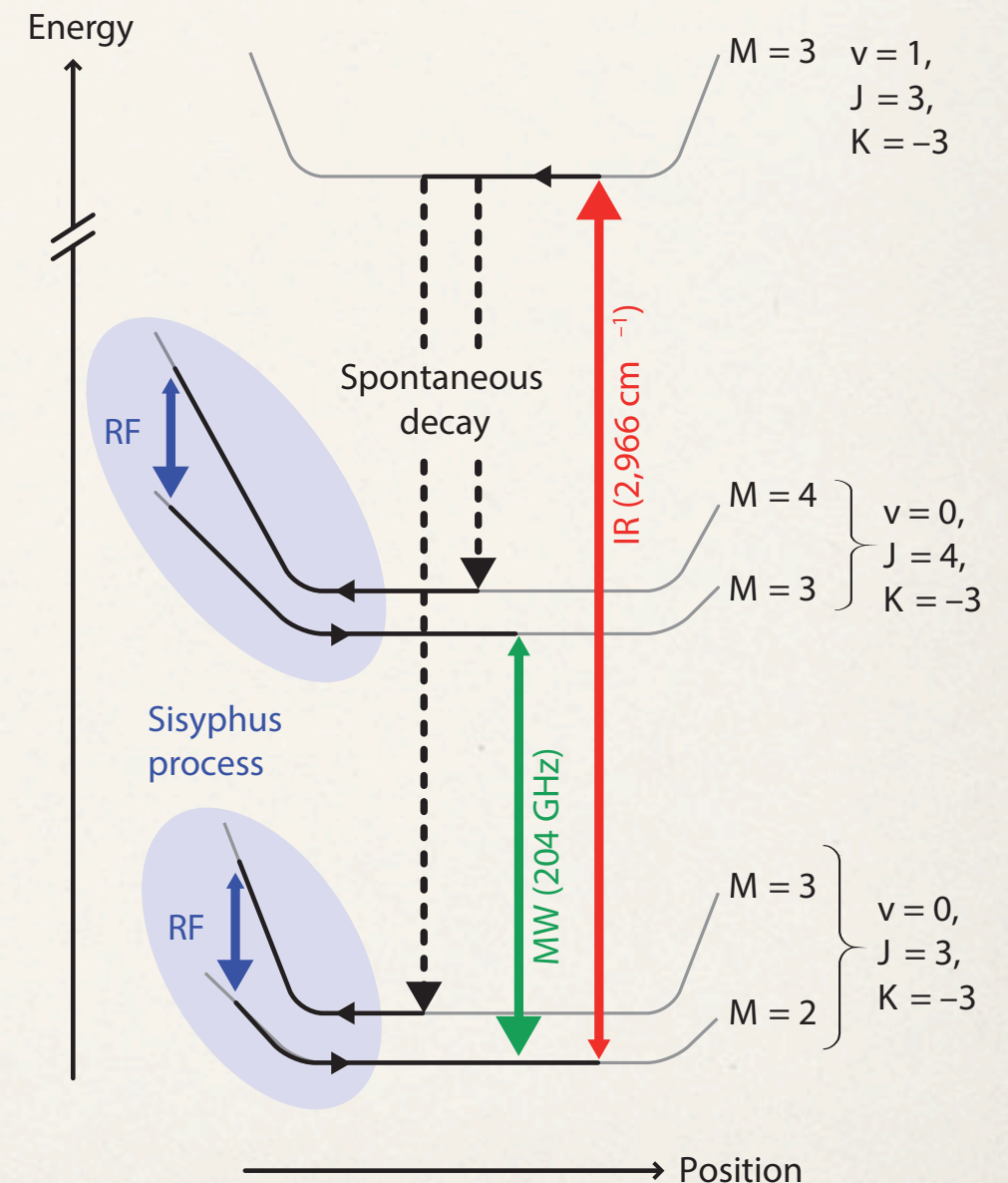
Evaporative cooling of the dipolar hydroxyl radical  
Nature 492, 396-400 (2012)



# 2.6 Sisyphuskühlung



- ❖  $\text{CH}_3\text{F}$
- ❖ Kühlung von 400 mK auf 29 mK



Sisyphus cooling of electrically trapped polyatomic molecules  
Nature 491, 570–573 (2012)



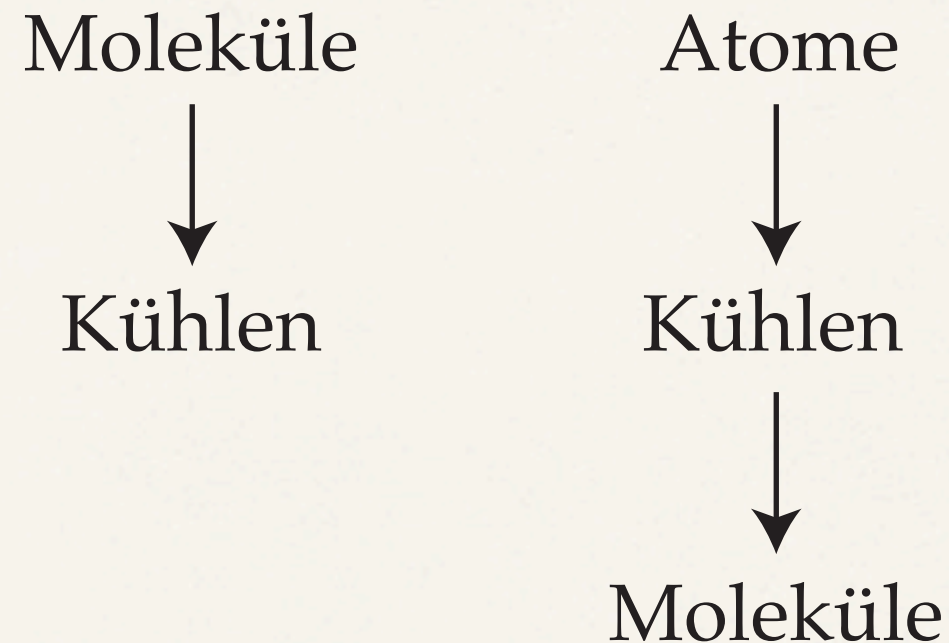
# Übersicht

---

- ❖ 1. Generelle Eigenschaften von Molekülen
- ❖ 2. Direkte Kühlmethoden von Molekülen
- ❖ **3. Herstellung von ultrakalten Molekülen**
- ❖ 4. Stabilität von ultrakalten Molekülen
- ❖ 5. Theoretische Beschreibung von 2D Systemen

### 3.1 Neuer Kühlansatz

---

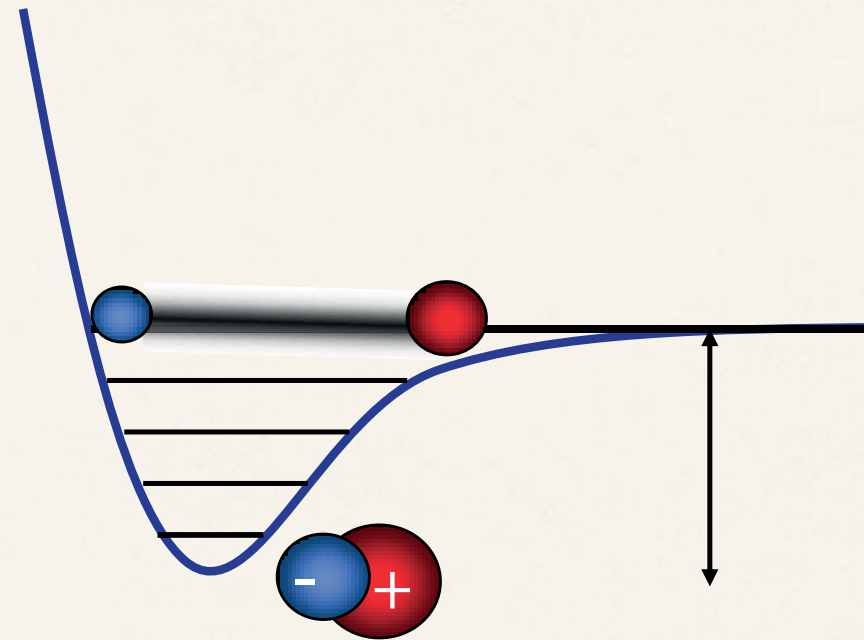


- ❖ Molekülerzeugung durch Feshbachresonanz
- ❖ Ultrakaltes atomares Gas mit hoher Phasenraumdichte
- ❖ Mischung aus fermionischen  $^{40}\text{K}$  und bosonischen  $^{87}\text{Rb}$  Atomen



# 3.2 Probleme mit Feshbachmolekülen

---

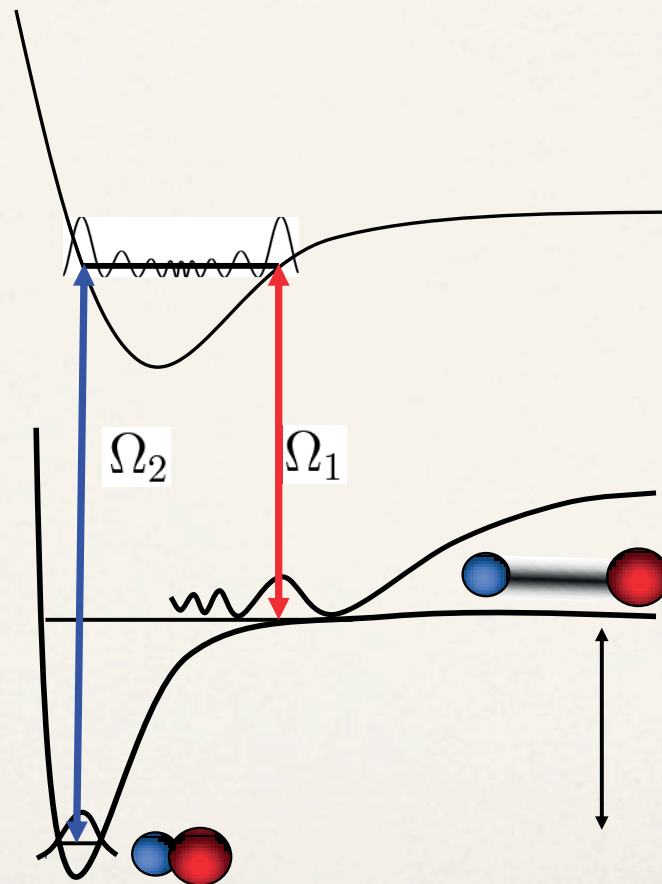


- ❖ Sehr große Bindungslänge → schwaches Dipolmoment
  - ❖ Bindungslänge verkleinern
- Wie bekommt man das Molekül in den Grundzustand?

Ultracold polar molecules, S. Ospelkaus  
Conference on Research Frontiers in Ultra-Cold Atoms 4 - 8 May 2009

# 3.3 Motivation für STIRAP

- ❖ **stimulated Raman adiabatic passage**
- ❖ 1 Photonenübergang nicht möglich (Franck-Condon Faktor)

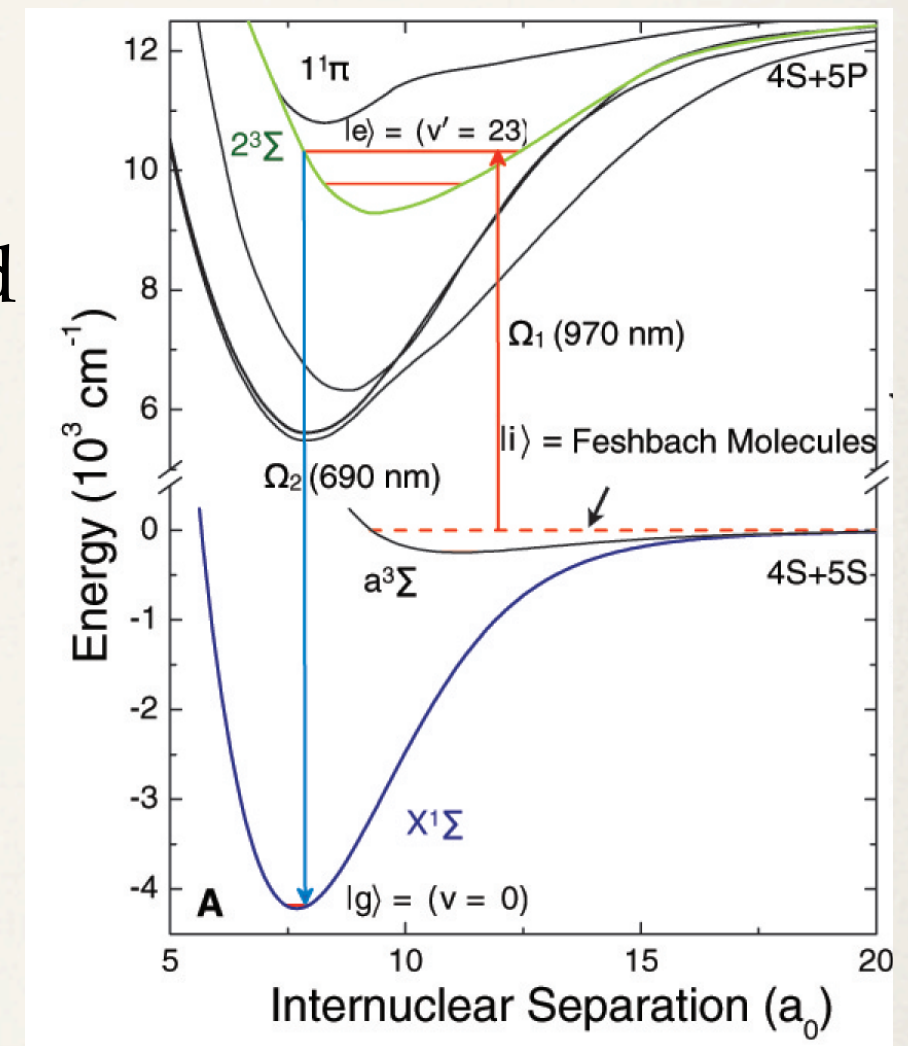


Ultracold polar molecules, S. Ospelkaus  
Conference on Research Frontiers in Ultra-Cold Atoms 4 - 8 May 2009



### 3.4 STIRAP

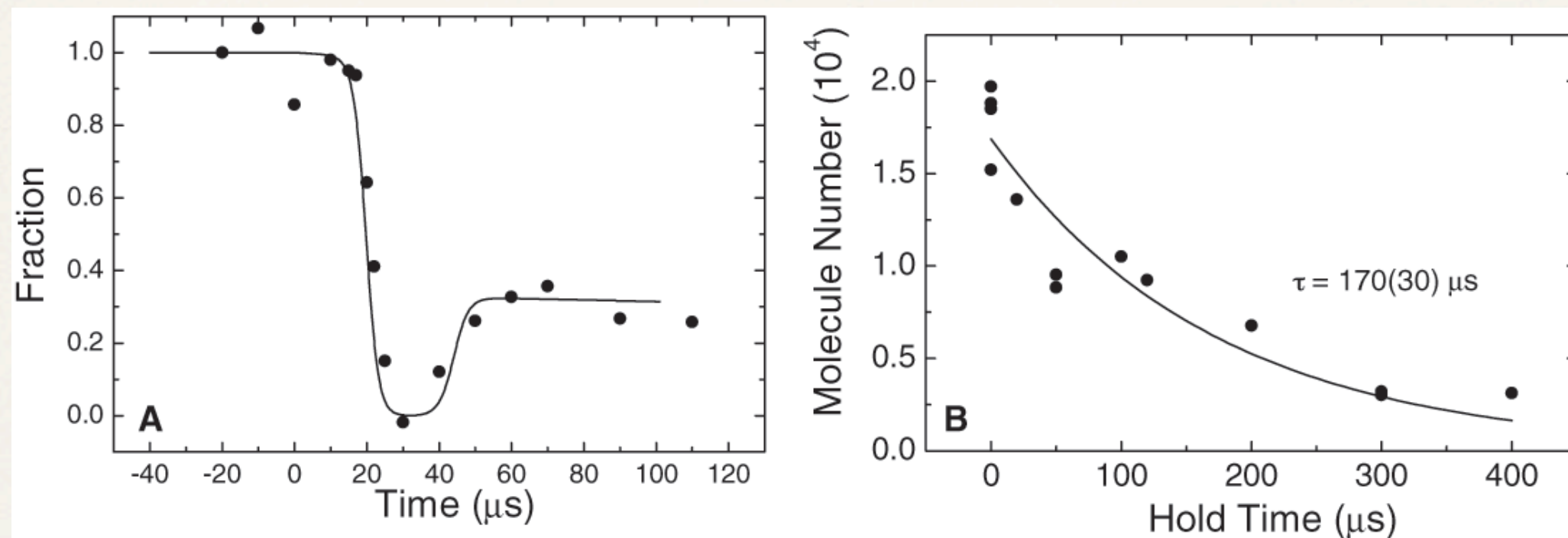
- ❖ Elektronisch angeregter Zwischenzustand mit großem Franck-Condon Faktor zum rovibrationalen Grundzustand und Zustand der Feshbachmoleküle
- ❖ Ramanübergang ohne frei werdende Bindungsenergie in rovibrationalen Grundzustand
- ❖ Teilchendichte  $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
- ❖ Erreichbare Temperatur ca. 350 nK



A High Phase-Space-Density Gas of Polar Molecules  
Science 322, 231-233 (2008)



## 3.5 Effizienz von STIRAP



- ❖ 56% der Moleküle bleiben erhalten

A High Phase-Space-Density Gas of Polar Molecules  
Science 322, 231-233 (2008)



# Übersicht

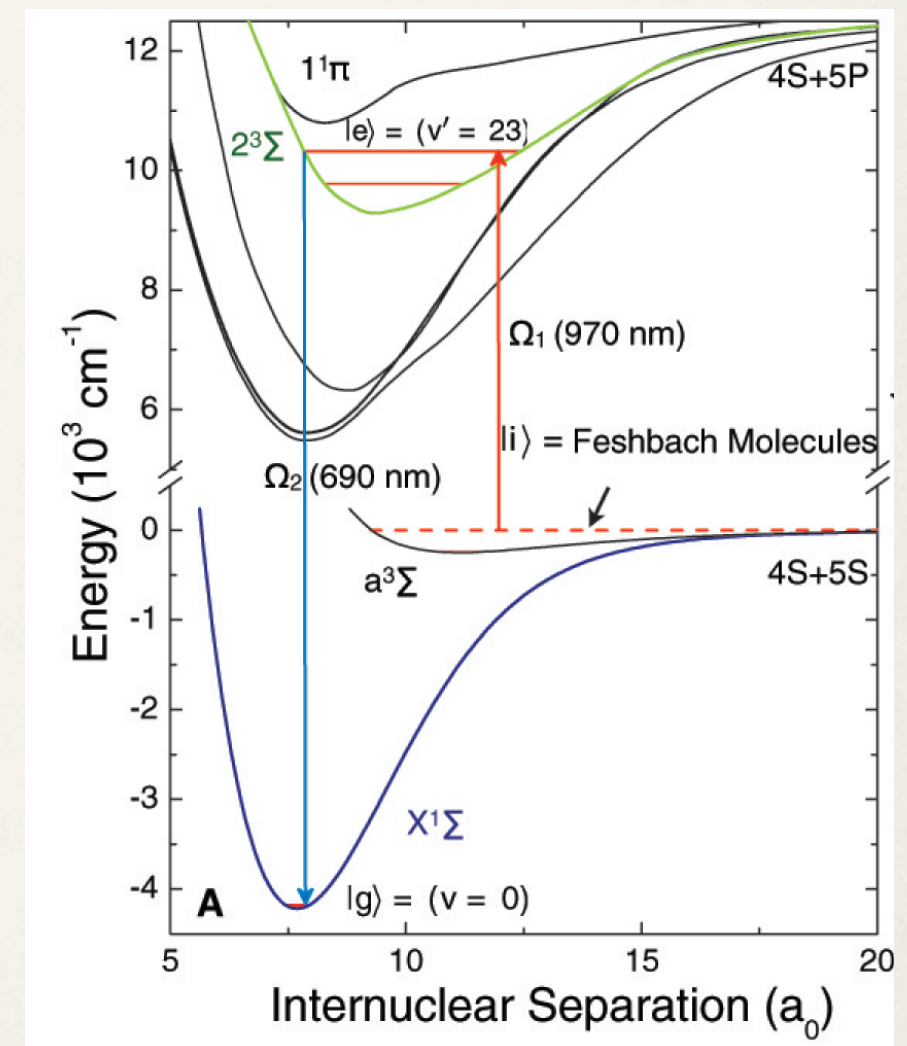
---

- ❖ 1. Generelle Eigenschaften von Molekülen
- ❖ 2. Direkte Kühlmethoden von Molekülen
- ❖ 3. Herstellung von ultrakalten Molekülen
- ❖ **4. Stabilität von ultrakalten Molekülen**
- ❖ 5. Theoretische Beschreibung von 2D Systemen



### 4.1 Dipolmoment im rovibrationalen Grundzustand

- ❖ Grundzustand ist  $\Sigma \rightarrow$  s-Welle  
 $\rightarrow L = 0, v = 0$  und  $J = 0$   
 $\rightarrow$  keine Vorzugsrichtung
- ❖ Isotrope Elektronenstruktur
- ❖ Kein Dipolmoment
- ❖ Erzeugung einer Vorzugsachse durch externes E-Feld



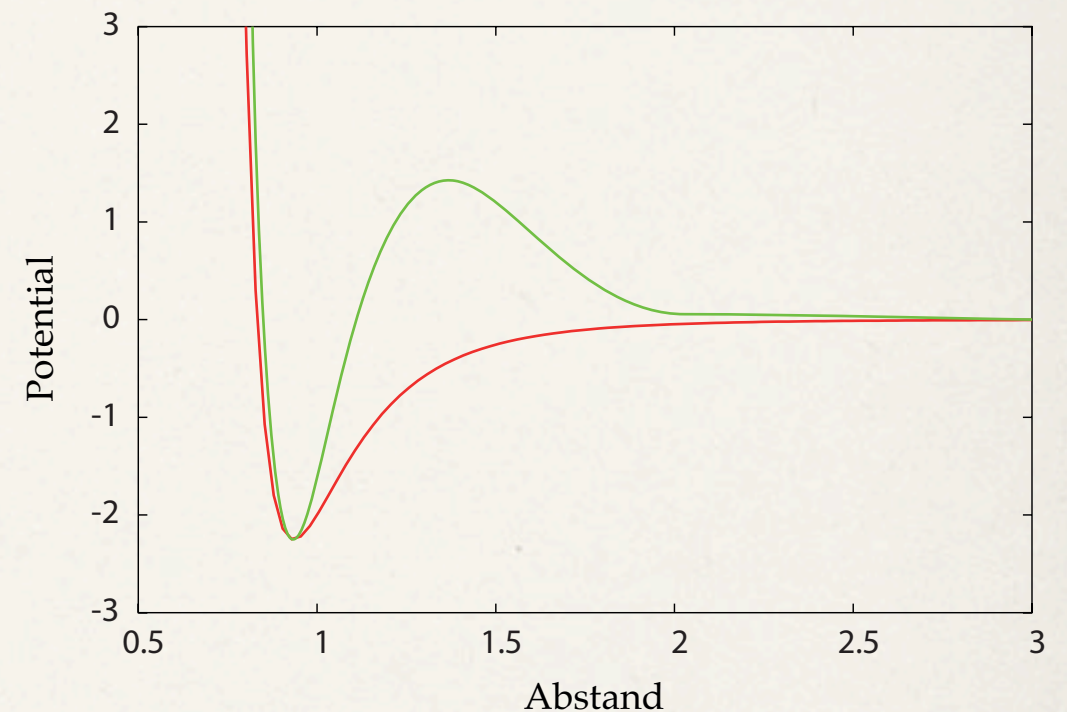
A High Phase-Space-Density Gas of Polar Molecules  
Science 322, 231-233 (2008)



# 4.2 Streutheorie

---

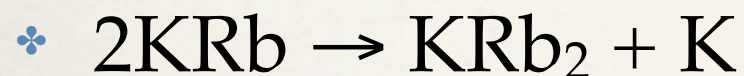
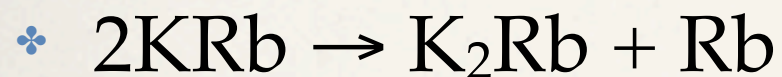
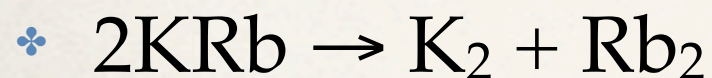
- ❖  $V_{\text{eff}} = \frac{2m}{\hbar^2} \left[ V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right]$
- ❖ Bosonen  $\rightarrow$  s-Wellenstreuung erlaubt
- ❖ Fermionen  $\rightarrow$  p-Wellenstreuung  
 $\rightarrow$  Tunneln durch Barriere



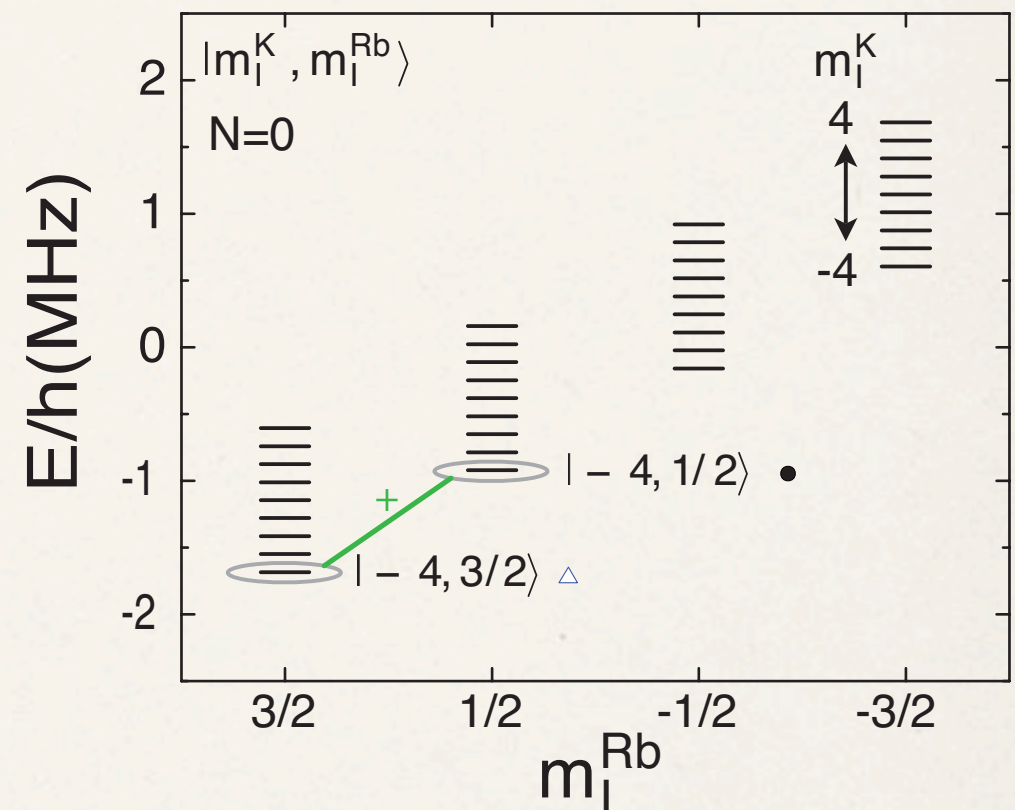
Schematischer Plot eines s-Wellen Streuungs Potentials (rot) und eines p-Wellen Streuungs Potentials (grün)

## 4.3 Chemische Reaktionen

❖ Spontane Reaktionen:



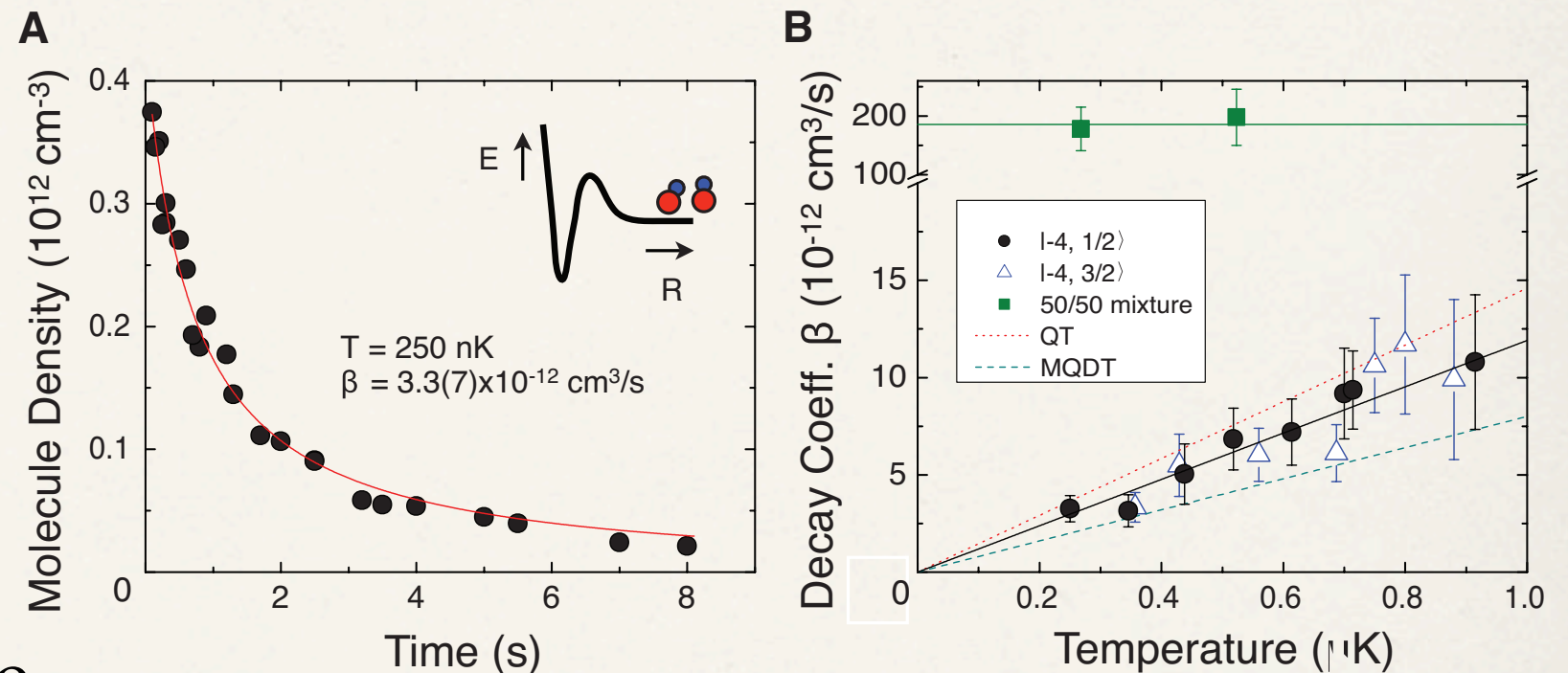
❖ Reaktionen können durch präparieren bestimmter Spinzustände verhindert werden



Quantum-State Controlled Chemical Reactions of Ultracold Potassium-Rubidium Molecules  
Science 327, 853-857 (2010)



### 4.4 Chemische Reaktionen ohne angelegtes Feld

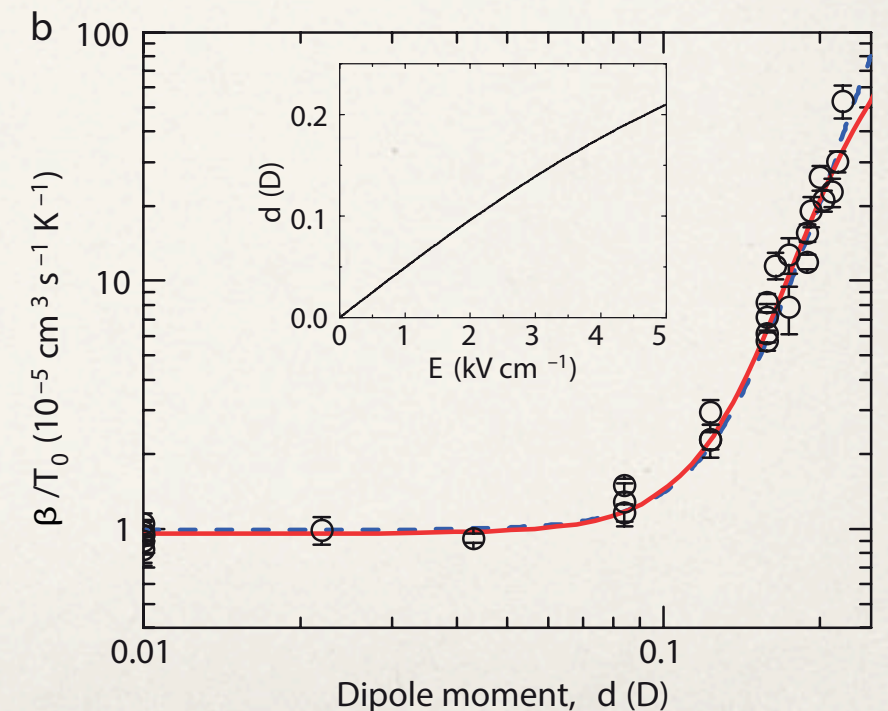
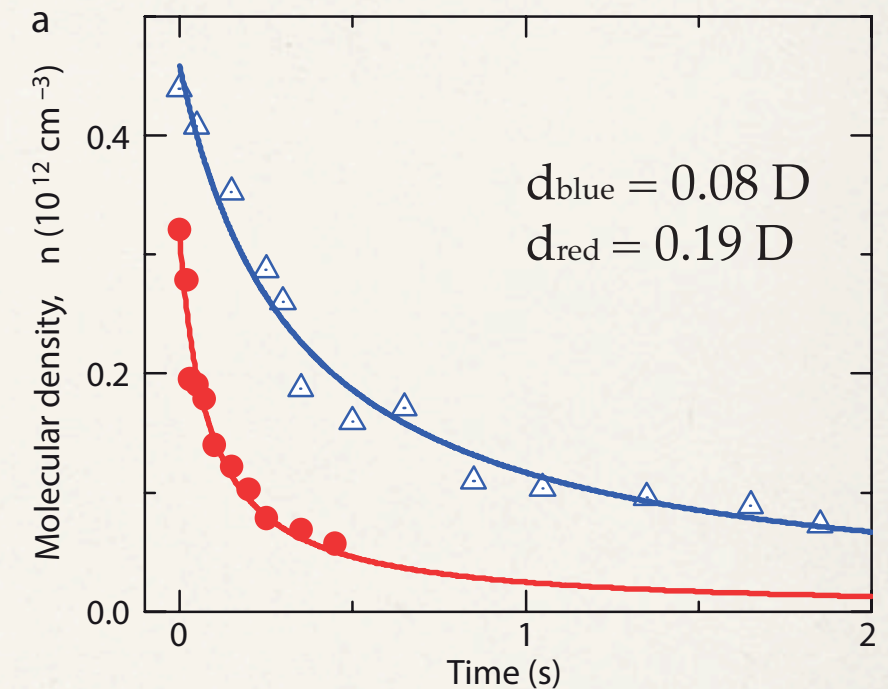


- ❖ Fermionische Moleküle  
→ antisymmetrische Wellenfunktion beschreibt Stoß von zwei Molekülen
- ❖ Bei kleinen Abständen → chemische Reaktionen  
→ Verlust von Molekülen
- ❖  $\beta(T) \propto T^L$



### 4.5 Chemische Reaktionen mit angelegtem Feld

- ❖  $\beta/T_0 \propto d^p$ , mit  $p = \text{const.}$
- ❖ Bei angelegtem elektrischen Feld wird Barrierenhöhe verändert

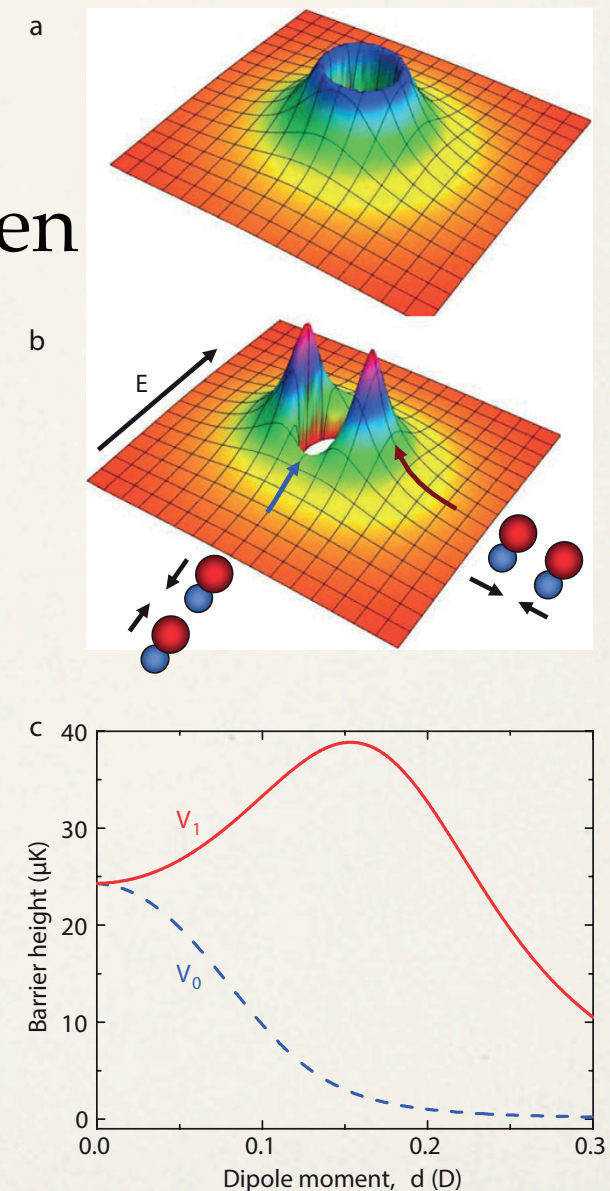


Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime  
 Nature 464, 1324-1328 (2010)



### 4.5 Chemische Reaktionen mit angelegtem Feld

- ❖ Anisotrope Dipolwechselwirkungen beeinflussen bei angelegtem Feld die Barrierenhöhe
- ❖  $V_1 \rightarrow$  repulsiv
- ❖  $V_0 \rightarrow$  attraktiv
- ❖ Barriere für „side-by-side“ Stöße hoch  $\rightarrow$  stabil



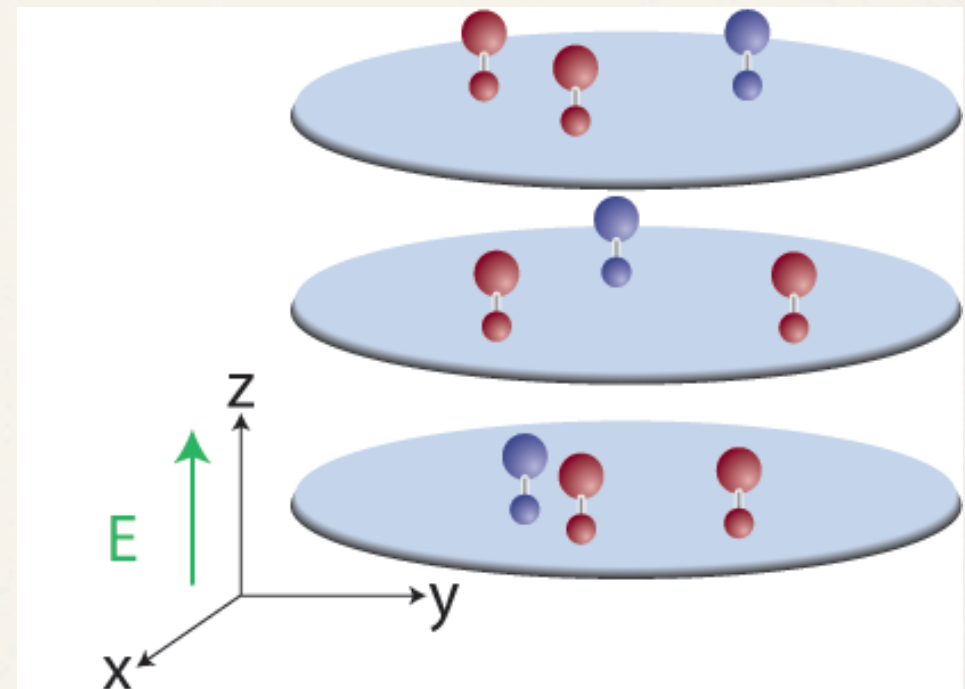
Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime  
Nature 464, 1324-1328 (2010)



### 4.6 Chemische Reaktionen mit Feld und in 2D

---

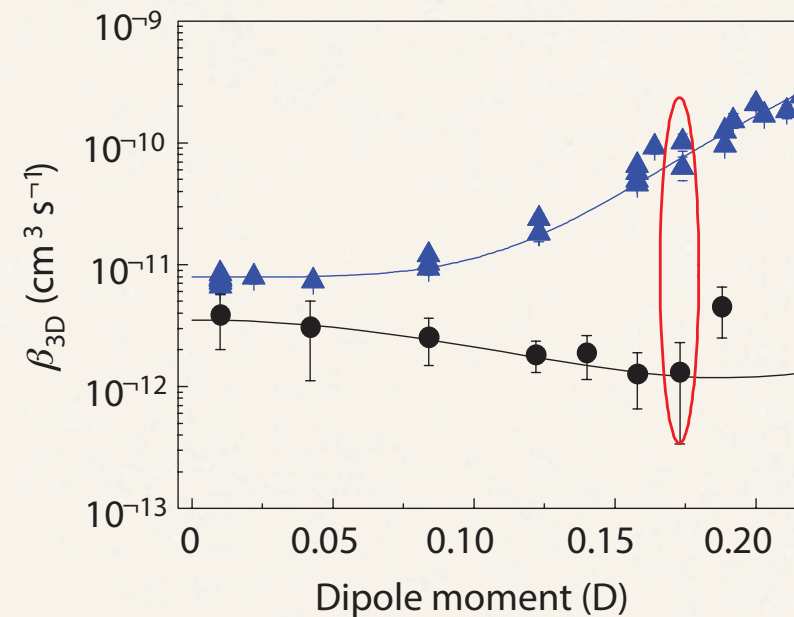
- ❖ Elektrisches Feld und 1D optisches Gitter
- ❖ Teilchendichte  
 $n = 3,4 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$
- ❖ Temperatur variierbar durch Regelung der Atomkonzentrationen im Atomgas  $\rightarrow 500 - 800 \text{ nK}$



Controlling the quantum stereodynamics of ultracold bimolecular reactions  
Nature Phys. 7, 502-507 (2011)



### 4.6 Chemische Reaktionen mit Feld und in 2D



- ❖ Vergleich von Zerfallsrate  $\beta$  in 3D-System (blau) und 2D-System (schwarz)
- ❖ Rot eingekreiste Werte bei Dipolmoment  $d = 0,174$  D

Controlling the quantum stereodynamics of ultracold bimolecular reactions  
Nature Phys. 7, 502-507 (2011)

# Übersicht

---

- ❖ 1. Generelle Eigenschaften von Molekülen
- ❖ 2. Direkte Kühlmethoden von Molekülen
- ❖ 3. Herstellung von ultrakalten Molekülen
- ❖ 4. Stabilität von ultrakalten Molekülen
- ❖ **5. Theoretische Beschreibung von 2D Systemen**



# 5.1 Motivation für theoretische Betrachtung

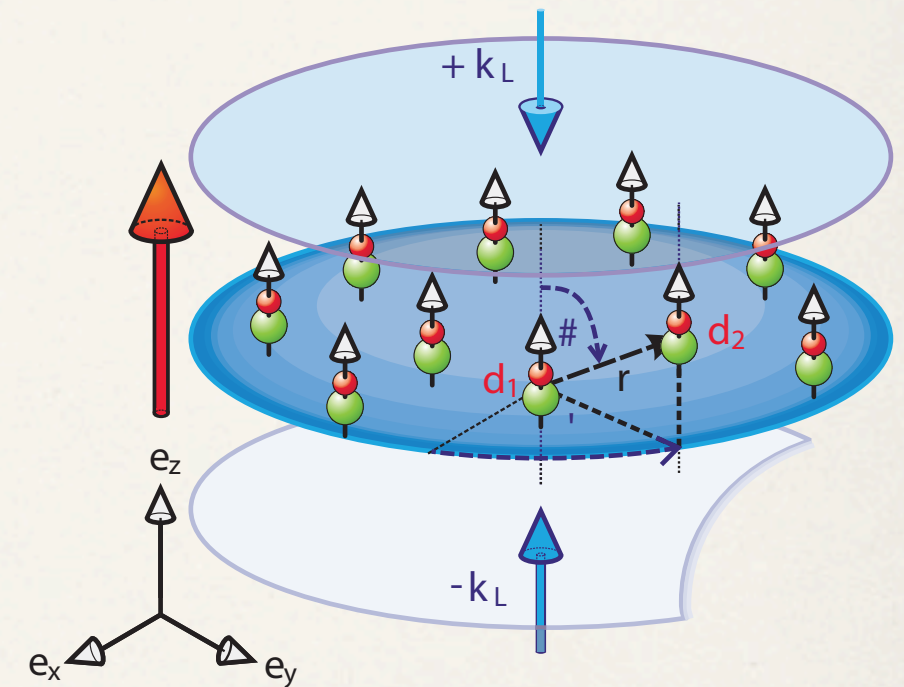
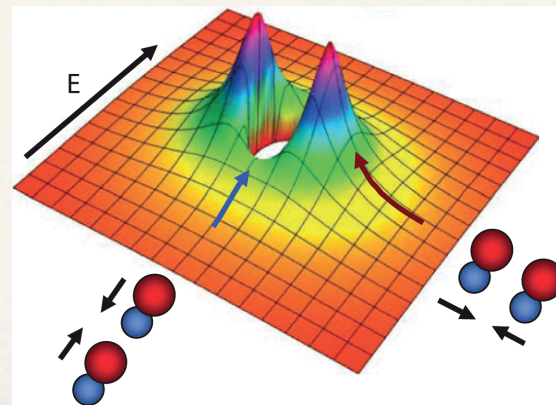
---

- ❖ Theoretisches Verhalten in 2D-System
- ❖ Quantenphasen



# 5.2 Vorbemerkungen

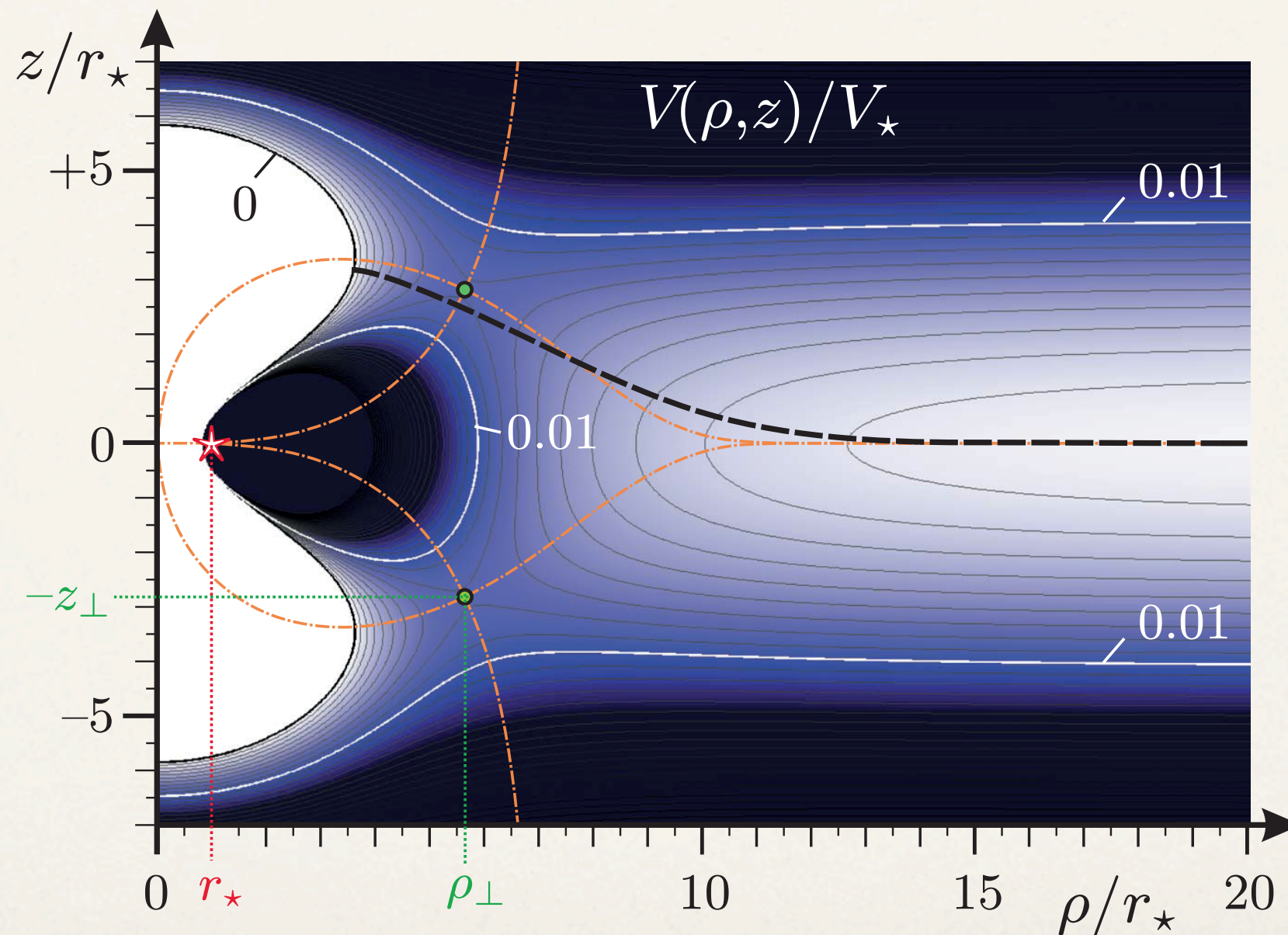
- ❖ Bosonische Moleküle: SrO, RbCs oder LiCs
- ❖ Langreichweitige und repulsive 2D Interaktionen
- ❖ Experimentell bestimmtes Potential



Cold polar molecules in two-dimensional traps:  
Tailoring interactions with external fields for novel quantum phases  
Phys. Rev. A 76, 043604 (2007)



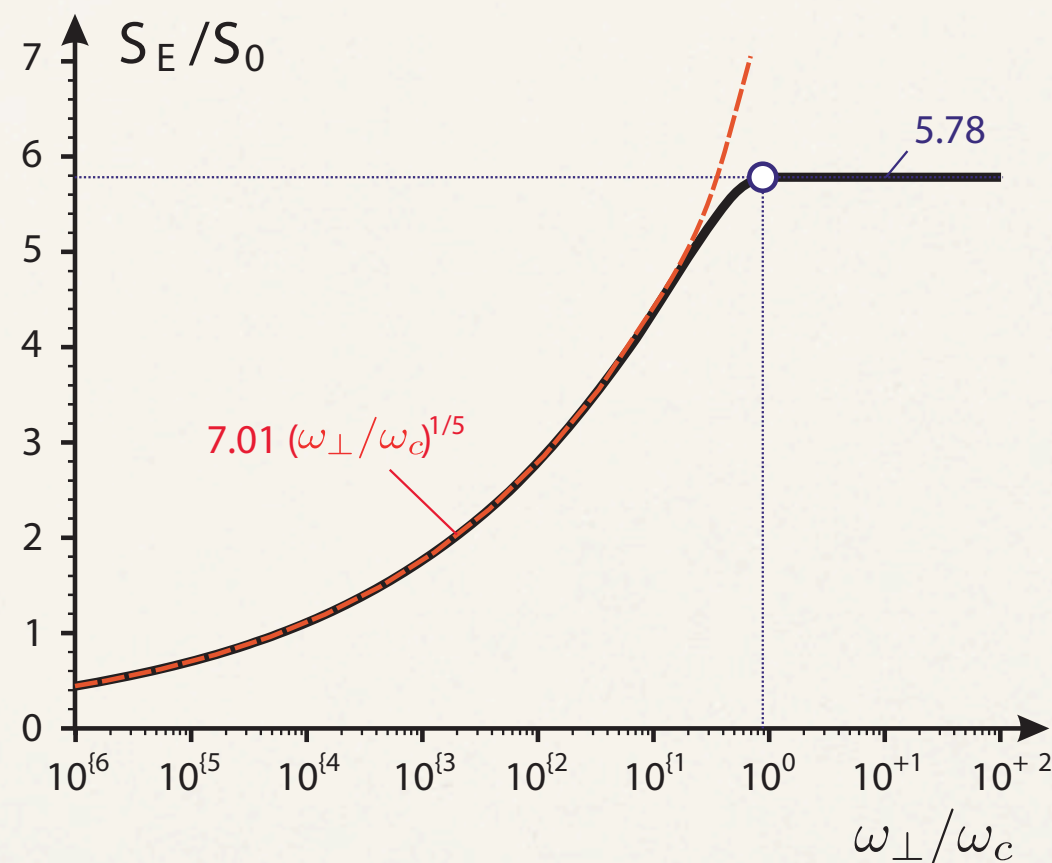
### 5.3 Harmonisches Fallenpotential und angelegtes Feld



Cold polar molecules in two-dimensional traps:  
Tailoring interactions with external fields for novel quantum phases  
Phys. Rev. A 76, 043604 (2007)



# 5.4 Tunnelhäufigkeit



Cold polar molecules in two-dimensional traps:  
Tailoring interactions with external fields for novel quantum phases  
Phys. Rev. A 76, 043604 (2007)



## 5.5 Effektive 2D Interaktionen

- $$V_{\text{eff}}^{2\text{D}}(\rho) \approx V_{\text{eff}}^{3\text{D}}(\rho, 0) = \frac{C_3}{\rho^3} + \frac{C_6}{\rho^6}$$

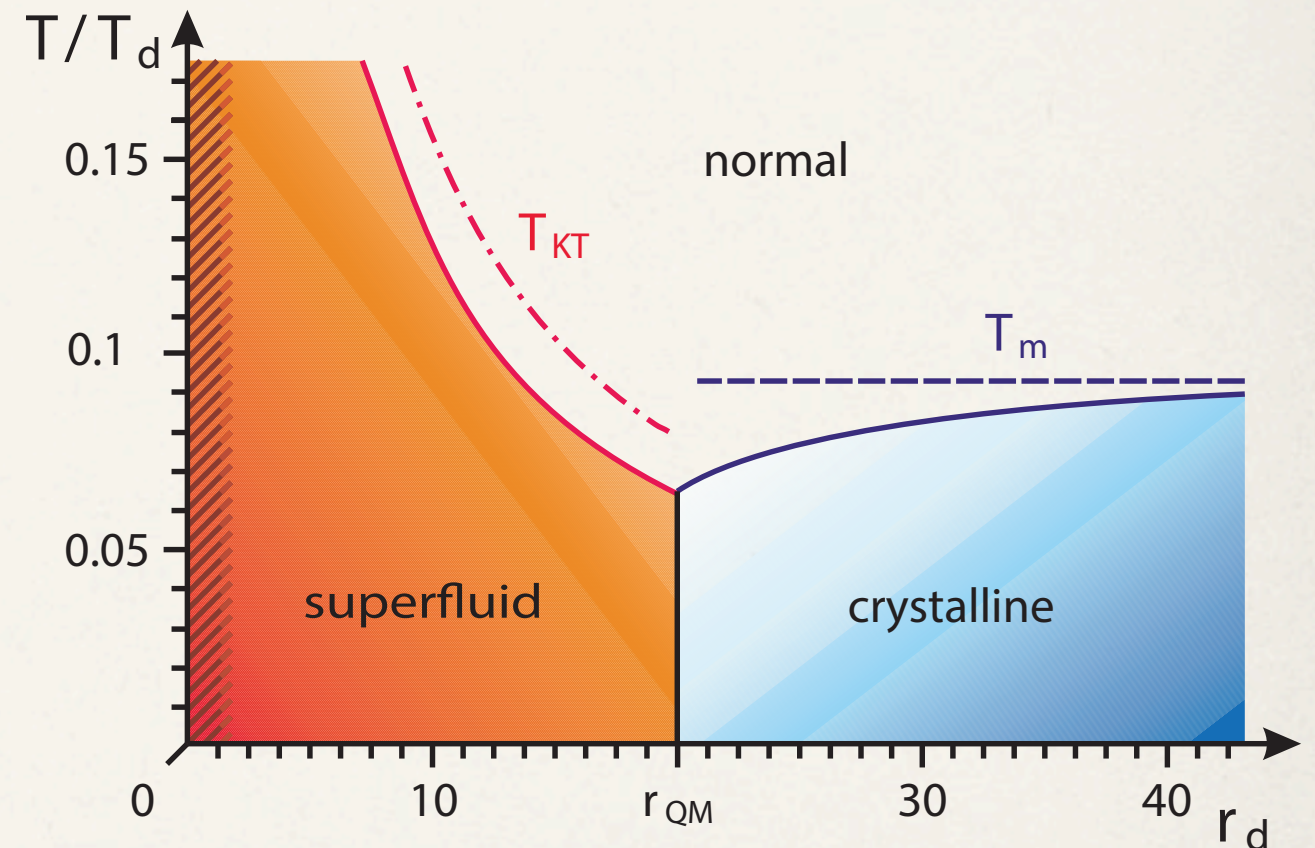
- 2D-Phasendiagramm, mit

$$T_d = \frac{C_3}{k_B a^3}$$

$$r_d = \frac{E_{\text{int}}}{E_{\text{kin}}} = \frac{C_3 m}{\hbar^2 a}$$

$$r_{QM} \approx 18 \pm 4$$

$$T_{KT} = \frac{\pi \hbar^2}{2k_B m a^2}$$



Cold polar molecules in two-dimensional traps:  
Tailoring interactions with external fields for novel quantum phases  
Phys. Rev. A 76, 043604 (2007)



# Ausblick

---

- ❖ Verbesserung der direkten Kühlmethoden

- ❖ „Bessere“ Moleküle  
 $2AB \rightarrow A_2 + B_2$  endotherm

|    | Na      | K         | Rb        | Cs         |
|----|---------|-----------|-----------|------------|
| Li | −328(2) | −533.9(3) | −618(200) | −415.38(2) |
| Na |         | 74.3(3)   | 45.5(5)   | 236.75(20) |
| K  |         |           | −8.7(9)   | 37.81(13)  |
| Rb |         |           |           | 29.1(1.5)  |

- ❖ Quantenentartete Gase

Ultracold Molecules under Control!  
Chemical Reviews 112, 4949 (2012)



---

Vielen Dank für eure  
Aufmerksamkeit.