

# Spektroskopia, tworzenie i zastosowania ultrazimnych mocno polarnych cząsteczek KAg i CsAg: teoria i doświadczenie

## Popularnonaukowe streszczenie projektu

Michał Tomza

### I. MOTYWACJA

Ultrazimne polarne cząsteczki są doskonałą platformą do badania podstaw fizyki i chemii kwantowej. Cząsteczki dwuatomowe posiadające permanentne elektryczne momenty dipolowe (PEDM) zostały już wykorzystane do realizacji pierwszych ultrazimnych kontrolowanych reakcji chemicznych, precyzyjnych pomiarów i kwantowych symulacji dynamiki wielu ciał, podczas gdy perspektywy zastosowania w obliczeniach kwantowych napędzają ostatnie osiągnięcia kontroli pojedynczych cząsteczek za pomocą szczypticznych optycznych. Szybki postęp motywuje coraz większą liczbę grup badawczych na całym świecie do rozpoczęcia badania polarnych cząsteczek w ultraniskich temperaturach. Większość wspomnianych ekscytujących zastosowań opiera się na PEDM, które zapewniają dalekozasięgowe dipolowe oddziaływania międzycząsteczkowe i możliwość kontroli za pomocą zewnętrznego pola elektrycznego.

Niedawno odkryliśmy, że dwuatomowe cząsteczki w stanie podstawowym składające się z atomu srebra oddziałującego z atomem metalu alkalicznego, takie jak KAg i CsAg, mają PEDM osiągające 10 deabajów, podczas gdy najbardziej polarne ultrazimne cząsteczki rozważane wcześniej miały PEDM co najmniej dwa razy mniejszy. W efekcie charakterystyczne długości oddziaływań dipolowych w ultrazimnych gazach cząsteczek KAg i CsAg mogą być o ponad rząd wielkości większe niż w przypadku najbardziej polarnych ultrazimnych cząsteczek badanych do tej pory.

### II. CEL PROWADZONYCH BADAŃ

Bazując na powyższym odkryciu cząsteczek posiadających bezprecedensowo duży PEDM w stanach podstawowych, stworzymy unikalne krajowe konsorcjum teoretyczno-doświadczalne na Uniwersytecie Warszawskim i Instytucie Fizyki PAN w celu zaproponowania, zbadania i zmierzenia cząsteczek KAg i CsAg dla nowej generacji ultrazimnych eksperymentów fizycznych i chemicznych. Połączymy najnowocześniejszą teorię *ab initio* z zaawansowaną spektroskopią cząsteczkową gorących par i nowoczesną spektroskopią ultrazimnej fotoasocjacji, aby zbadać i zrozumieć ich strukturę molekularną, oddziaływania międzycząsteczkowe, kontrolę, dynamikę i schematy tworzenia. Realizacja projektu utoruje drogę do produkcji ultrazimnych gazów z wysoce polarnych cząsteczek KAg i CsAg w stanie podstawowym w przyszłości.

### III. OPIS BADAŃ

Na ścieżce teoretycznej najpierw zastosujemy techniki *ab initio* chemii kwantowej i fizyki molekularnej, aby dokładnie zbadać strukturę elektronową stanów wzbudzonych cząsteczek KAg i CsAg. Obliczymy krzywe energii potencjalnej, elektryczne dipolowe momenty przejścia i sprzężenia spin-orbita. Dane te zostaną wykorzystane do zbadania struktury rowibracyjnej i przewidzenia ścieżek fotoasocjacji oraz stymulowanego adiabaticznego przejścia Ramana (STIRAP) do cząsteczek w stanie podstawowym. Zbadane zostaną również perspektywy magnetycznych rezonansów Feshbacha i magnetoasocjacji. Następnie szczegółowo zbadamy potencjalne zastosowania ultrazimnych silnie polarnych cząsteczek, w tym kontrolowane kwantowo zderzenia i reakcje chemiczne oraz kwantowe symulacje wielociałowej dynamiki.

Równolegle, na gorącej ścieżce doświadczalnej, zbudujemy nowe komórki spektroskopowe do spektroskopii gorących par cząsteczek KAg i CsAg. Ze względu na niezwykle wysoką temperaturę niezbędną do uzyskania odpowiedniej prężności par atomów Ag, zastosowane zostaną zaawansowane materiały i techniki. Widma cząsteczkowe o wysokiej rozdzielczości zostaną zarejestrowane przy użyciu metod spektroskopii fluorescencyjnej indukowanej laserem i znakowania polaryzacyjnego poziomów. Dane te zostaną wykorzystane do udoskonalenia teoretycznych krzywych energii potencjalnej oraz schematów fotoasocjacji i STIRAP.

Wreszcie, na ultrazimnej ścieżce doświadczalnej, zbudujemy nową aparaturę wysokopróżniową z układem laserowym do tworzenia pułapki magnetoptycznej z ultrazimnymi atomami Ag, a następnie dwuskładnikowych pułapek magnetoptycznych z ultrazimnymi mieszaninami K+Ag i Cs+Ag. Zoptymalizujemy i szczegółowo scharakteryzujemy wszystkie konfiguracje. Na koniec wykonamy spektroskopię fotoasocjacyjną ultrazimnych cząsteczek KAg i CsAg we wzbudzonych stanach elektronowych z wykorzystaniem przejść poniżej linii D<sub>2</sub> atomów metali alkalicznych. Zmierzone poziomy wibracji pozwolą nam dalej udoskonalać potencjały molekularne i schemat STIRAP.