

## C.1. POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

„A diatomic molecule is a molecule with one atom too many” – Arthur L. Schawlow, laureat Nagrody Nobla w 1980 r.

W badaniach własności cząsteczek dwuatomowych szczególną uwagę poświęca się dimerom metali alkalicznych. W skrajnym uproszczeniu ich opis teoretyczny nie różni się od opisu najprostszej cząsteczki neutralnej,  $H_2$  – o podstawowych własnościach decydują dwa elektrony walencyjne. Aby jednak przejść do ujęcia ilościowego, trzeba uwzględnić obecność pozostałych elektronów i ich wzajemne oddziaływania. Stwarza to konieczność stosowania zaawansowanych metod teoretycznych. Dimery metali alkalicznych okazują się świetnym polem do rozwijania tych metod – są wystarczająco złożone, aby do obliczeń konieczne były wszystkie techniki wymagane do opisu cząsteczek bardziej skomplikowanych, a jednocześnie na tyle proste, że trudności numeryczne nie przesłaniają istoty fizycznej problemów.

Badania dimerów metali alkalicznych stały się też przedmiotem szczególnego zainteresowania w wyniku rozwoju technik chłodzenia laserowego. Atomy metali alkalicznych były pierwszym obiektem doświadczeń z zakresu zimnej fizyki i nadal pozostają w centrum jej zainteresowania. Jednocześnie były pierwszymi, dla których otrzymano ultrazimne cząsteczek w wyniku syntezy zimnych atomów w procesach fotoasocjacji i magnetoasocjacji (tzn. przez wykorzystanie rezonansów Feshbacha). Potrzeba detekcji zimnych cząsteczek oraz doprowadzenia ich do tzw. absolutnego stanu podstawowego (tzn. bez wzbudzenia elektronowego, oscylacyjnego i rotacyjnego) doprowadziła do rozwoju nowych technik doświadczalnych takich jak STIRAP (ang. *stimulated Raman adiabatic passage*), czy REMPI (ang. *resonance-enhanced multiphoton ionization*). Dla procesów wytworzenia, jak i detekcji zimnych cząsteczek niezbędna jest precyzyjna znajomość ich struktury elektronowej – zarówno stanu podstawowego, jak i stanów wzbudzonych.

Pomimo znacznego rozwoju modeli i metod numerycznych chemii kwantowej nadal najdokładniejszą charakterystykę stanów elektronowych dwuatomowych cząsteczek metali alkalicznych otrzymujemy z eksperymentów.

Celem naukowym obecnego projektu jest doświadczalne zbadanie wzbudzonych stanów elektronowych cząsteczek  $Rb_2$  i  $Cs_2$ . Szereg tych stanów nigdy nie było obserwowanych, a istniejące obliczenia teoretyczne są bardzo niedoskonałe, jeśli porównać ich dokładność z precyzją planowanych eksperymentów. Badania zostaną przeprowadzone wysokorozdzielczą metodą laserowego znakowania poziomów cząsteczkowych (ang. *polarization labelling spectroscopy*). Ta technika w wielu przypadkach pozwala na uzyskanie danych nieosiągalnych innymi metodami spektroskopii laserowej. Planujemy, że na podstawie zmierzonych energii kilku tysięcy poziomów oscylacyjno-rotacyjnych badanych cząsteczek skonstruujemy krzywe energii potencjalnej charakteryzujące oddziaływanie atomów związanych w cząsteczki w różnych konfiguracjach elektronowych. Krzywe energii potencjalnej stanowią najlepszą płaszczyznę porównania teorii z doświadczeniem. Konfrontacja wyników doświadczalnych z przewidywaniami teoretycznymi jest ważną, ale nie główną motywacją do prowadzenia tych prac. Opis stanów elektronowych za pomocą krzywych energii potencjalnej skonstruowanych na podstawie wyników doświadczalnych jest najbardziej uniwersalny, ponieważ umożliwia wyznaczenie (przez numeryczne rozwiązanie odpowiedniego równania Schrödingera) wszystkich charakterystyk danego stanu, np. oscylacyjnych funkcji falowych, energii poziomów oscylacyjno-rotacyjnych, stałych cząsteczkowych, itp. Takie dane są w szczególności niezbędne do zaplanowania doświadczeń z zimnymi cząsteczkami. W ramach projektu planujemy badania stanów, co do których doniesienia z innych laboratoriów wskazują, że są istotne dla projektowanych eksperymentów dotyczących zimnych cząsteczek. Pierwszoplanowym celem badawczym obecnego projektu będą stany elektronowe, dla których obliczenia teoretyczne przewidują krzywe potencjału z dwoma minimami, a nie zostało to dotychczas udokumentowane eksperymentalnie. Taki kształt krzywej potencjału (zwłaszcza obecność drugiej, szerokiej jamy potencjału w obszarze dużych odległości międzyatomowych) predystynuje te stany do udziału w procesie fotoasocjacji, bądź do roli stanu pośredniego w różnych schematach detekcji ultrazimnych cząsteczek lub ich przeniesienia do absolutnego stanu podstawowego. Przy odpowiedniej liczbie danych doświadczalnych rozwinięta przez nas metoda punktowego odwrotnego podejścia perturbacyjnego (ang. *Pointwise Inverted Perturbation Approach*) pozwoli nam na skonstruowanie krzywych energii potencjalnej stanów z podwójnymi minimami z wysoką precyzją, umożliwiającą odtworzenie struktury oscylacyjno-rotacyjnej z dokładnością rzędu 1 GHz. Jest to dokładność, która ze znacznym nadmiarem wystarcza do weryfikacji obliczeń teoretycznych dla tych stanów, a jednocześnie bardzo ułatwia poszukiwanie rezonansów w doświadczeniach fotoasocjacyjnych. Warto tu nadmienić, że doświadczenia z syntezą ultrazimnych dimerów rubidu i cezu są planowane w Instytucie Fizyki PAN i na Wydziale Fizyki UW w perspektywie następnych kilku lat.