

ТЕХНОЛОГИЯ, ОБОРУДОВАНИЕ И ПРОИЗВОДСТВО ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

УДК 535.214:535.274.4

Ю.П. МАЧЕХИН, д-р техн. наук, Л.С. ХОРОЛЕЦ

О ВОЗМОЖНОСТИ ЛАЗЕРНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ МОЛЕКУЛ ЙОДА

Введение

Процесс лазерного охлаждения атомов и ионов [1, 2], при котором на одиночные атомы воздействуют фотоны, обеспечивающие их торможение, исследуется уже четвертое десятилетие [3]. В результате работы по охлаждению и захвату атомов успешно развиваются и создаются частотные реперы, на основе которых разрабатываются оптические стандарты частоты (ОСЧ) [4]. Стабильность и воспроизводимость частоты этих стандартов приближаются к аналогичным характеристикам водородных мазеров, а в некоторых случаях и превосходят их [5]. В то же время, молекулярные реперы, используемые для стабилизации частоты лазеров, пока еще не создавались на основе охлажденных молекул. Уровень развития молекулярных реперов обусловлен отсутствием исчерпывающего теоретического описания условий лазерного охлаждения молекул и качественного экспериментального материала. В отдельных экспериментах удалось реализовать условия охлаждения отдельных видов молекул [6 – 8].

Интерес к охлаждению молекул связан не только со стабилизацией частоты лазеров оптического диапазона, но и с возможностью создания квантовых компьютеров, в основе которых взаимодействие охлажденных молекул [9]. В работах де Милля и коллег обсуждались условия выполнения квантовых расчетов благодаря взаимодействию охлажденных молекул друг с другом [10].

Исследование условий лазерного охлаждения молекул было начато с реализации двухэтапного процесса, когда на первом этапе охлаждали атомы, а на втором этапе атомы объединялись в молекулы [11]. Такой способ охлаждения молекул был опробован на атомах щелочных металлов [12].

Другой способ, развитый в исследованиях Йельского университета [10], заключается в подборе молекул, которые непосредственно охлаждаются. В проведенных экспериментах был использован фторид стронция (SrF).

В лазерном приборостроении особый интерес представляют молекулы йода, поскольку на их основе создаются ОСЧ. В перспективе разработку компактных малогабаритных ОСЧ для прецизионных измерительных систем планируется выполнить с использованием охлажденного йода. Поэтому цель настоящей работы – анализ условий, при которых возможна реализация лазерного охлаждения молекул йода, которые необходимы в качестве частотного репера при стабилизации частоты Nd:YAG/I₂ лазера.

Основные теоретические положения

В молекуле, в отличие от атома, кроме движения электронов существуют движения, в которых участвуют ядра: колебательное движение ядер относительно положения равновесия и вращение молекулы как целого относительно центра масс. Энергии всех этих движений квантуются, что приводит к усложнению схемы энергетических уровней по сравнению с атомом.

Хорошо известно, что, благодаря наличию малого параметра m/M (отношение массы электрона m к массе ядра M) времена, характерные для движения в молекуле ядер и электронов значительно различаются. Электроны и ядра в молекуле образуют соответственно «быструю» и «медленную» подсистемы. С использованием адиабатического приближения последовательно в два этапа рассматривается сначала движение электронов при неподвиж-

ных ядрах, потом рассматривается движение ядер в усредненном поле электронов. При таком подходе энергию молекулы можно представить как сумму энергий трех степеней свободы и энергии взаимного влияния всех степеней свободы: энергия электронной оболочки молекулы $E_{эл}$, энергия колебаний ядер атомов около положения равновесия – $E_{кол}$, энергия вращения молекулы как целого – $E_{вр}$, взаимное влияние электронного и колебательного – $E_{элкол}$, взаимное влияние электронного и вращательного – $E_{элвр}$, взаимное влияние колебательного и вращательного – $E_{колвр}$. В первом приближении отдельные виды молекулярного движения можно считать независимыми, и полная энергия молекулы представляет собой сумму первых трех составляющих $E = E_{кол} + E_{вр} + E_{эл}$. Характерные величины интервалов между электронными, колебательными и вращательными уровнями энергии молекулы:

$$\Delta E_{эл} : \Delta E_{кол} : E_{вр} = 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}.$$

Электронная энергия находится в интервале 1 – 10 эВ.

Расстояние между колебательными уровнями значительно меньше интервала между электронными уровнями и по порядку величины составляет 10^{-2} – 10^{-1} эВ. Чтобы вызвать изменение колебательного состояния молекулы, необходимо сообщить ей энергию того же порядка. При этом минимальная энергия колебательного состояния $1/2h\nu_{кол}$ определяется нулевыми колебаниями.

Вращательный спектр двухатомной молекулы представляет собой серию равноотстоящих линий в энергетическом интервале 10^{-4} – 10^{-3} эВ. Если вращательные спектры могут наблюдаться в чистом виде, то при изменении колебательного состояния появляется колебательно-вращательный спектр. Известно, что вращательный спектр появляется не у всех молекул, а лишь у тех, которые имеют постоянный электрический дипольный момент. При отсутствии постоянного дипольного момента молекулы неактивны и вращательный спектр у них не появляется, например H_2 , Cl_2 , I_2 [14].

Если вращение молекул вокруг своей оси играет основную роль в энергетике молекулы при низкой температуре и отвечает за длинноволновое излучение в дальней ИК области, то колебания ядер молекул связаны со значительно более высокой температурой и излучением в коротковолновой области ИК и длинноволновой области видимого излучения.

Исследования спектральных свойств двухатомных молекул до последнего времени проводились с целью установления энергии диссипации молекулы и величины молекулярных параметров.

Физические принципы охлаждения молекул отличаются от охлаждения атомов и ионов и заключаются в том, что при лазерном воздействии на молекулы возможно перераспределение поглощаемой энергии между внутренними степенями свободы молекулы, такими как вращение молекулы и колебания молекул. Расчет полной энергии молекулы с учетом взаимодействия между различными видами движений возможен только при решении волнового уравнения Шредингера, в котором учитываются все виды движений в молекуле [13].

В связи с поставленной в работе целью – изучить условия лазерного воздействия на молекулы йода, необходимо рассмотреть влияние лазерного излучения на один из поглощающих переходов молекулы. При этом энергия перераспределяется между всеми видами движений в молекуле с учетом энергетической связи между ними. Знания процессов передачи энергии между степенями свободы в молекуле необходимы для эффективного лазерного управления скоростью движения молекул с температурой много меньше одного Кельвина.

Электронные термы двухатомной молекулы имеют качественно простой вид, но их множество обширно. Основное, самое нижнее по энергии электронное состояние X , следующие по энергии состояния A, B, C Поскольку у начального и конечного электронных

состояний молекулы существуют много колебательных и вращательных подуровней, то электронные спектры имеют очень сложную структуру.

Спектральные особенности молекул йода

Спектр поглощения йода исследован очень детально, в связи с чем он используется в качестве частотного репера во многих физических и физико-химических экспериментах.

Спектроскопические исследования молекул йода основываются на анализе структуры электронных термов. Поступательное движение соответствует свободному движению центра массы молекулы и для спектральных исследований не представляет интереса. Однако именно изменение скорости поступательного движения является основной задачей лазерного охлаждения. При поглощении кванта видимого света молекула йода переходит из основного электронного состояния в первое возбужденное состояние. При достаточно низких температурах подавляющая часть молекул находится на нижнем колебательном уровне основного электронного состояния с $n=0$.

Поэтому в условиях лазерного охлаждения молекул йода, которое может осуществляться благодаря процессам поглощения и излучения фотонов, необходимо рассматривать не только процессы взаимодействия лазерного излучения с электронными поглощательными переходами, но и передачей от электронных уровней колебательным и вращательным степеням свободы молекулы.

Молекула йода обладает сильным поглощением в ближней ИК и видимой спектральной области, связанным с переходами между основным $X^1\Sigma_g^+$ уровнем и четырьмя низко лежащими возбужденными состояниями $A'^3\Pi_{2u}$, $A^3\Pi_{1u}$, $^1\Pi_{1u}$, $B^3\Pi_{0u}^+$, поэтому для реализации первого этапа охлаждения молекул необходимо использовать именно эти переходы. Спектр поглощения йода исследован очень детально, в связи с чем он используется в качестве частотного репера во многих физических и физико-химических экспериментах. Наибольшую поглощательную интенсивность имеет переход, $X^1\Sigma_g^+ - B^3\Pi_{0u}^+$. Термы этих переходов представлены на рис.1 [14].

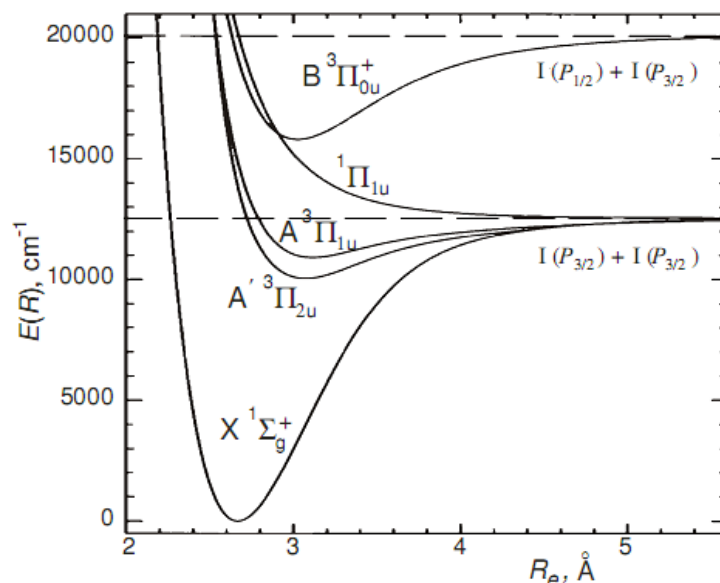


Рис. 1. Потенциальные кривые для X , A , A' , Π и B электронных состояний молекулы йода

Спектр X-B переходов молекулярного йода имеет более чем 20000 поглощающих линий в видимом диапазоне. Практически для всех линий СТС (линии сверхтонкой структуры) в

областях 532 и 633 нм поглощения были проведены измерения частот и возможных частотных сдвигов. Эти исследования проводились с целью установить абсолютные частоты йодных частотных реперов. Поскольку контрастность у всех линий поглощения различная, то для лазерного охлаждения необходимо использовать линии с максимальной контрастностью. Необходимо учесть, что при исследовании выбрать спектральный диапазон либо в области 532 нм либо в области 633 нм, именно в тех областях, в которых детально исследованы линии поглощения и существует ряд лазерных источников.

В области $18787 - 18789 \text{ см}^{-1}$ [15] йод имеет богатый поглощательный спектр с восемью сильными вибрационными переходами между нижним вибрационным уровнем X состояния и вибрационными уровнями 32 – 36 В состоянии, а также некоторые более слабые линии первого и второго вибрационных уровней X состояния и вибрационных уровней 35 – 42 В состоянии.

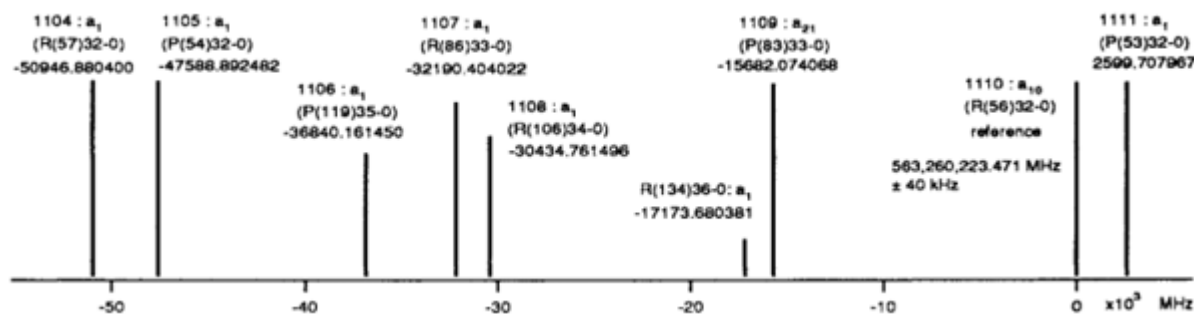


Рис. 2. Схема расположения частотных переходов относительно компоненты a_{10} перехода R(56) 32-0 [15]

Точные частотные интервалы между компонентами a_1 остальных переходов вблизи 532 нм, были в разное время измерены относительно частоты компоненты a_{10} перехода R(56)32-0 и представлены в таблице [15].

Номер линии	Переход x	Компонента y	$f_{xy} = [f(x,y) - f(a_{10}, R(56) 32-0)] / \text{кГц}$	кГц
			f_{xy}	
1111	P(53) 32-0	a_1	2 599 708,0	5,0
1110	P(56) 32-0	a_{10}	0,0	5,0
1109	P(83) 33-0	a_{21}	-15 682 075,2	5,0
	R(134) 36-0	a_1	-17 173 681,7	5,0
1108	R(106) 34-0	a_1	-30 434 763,4	5,0
1107	R(86) 33-0	a_1	-32 190 406,0	5,0
1106	P(119) 35-0	a_1	-36 840 163,0	5,0
1105	P(54) 32-0	a_1	-47 588 897,1	5,0
1104	R(57) 32-0	a_1	-50 946 884,7	5,0
1103	P(132) 36-0	a_1	-73 517 088,1	5,0
1101	R(145) 37-0	a_1	-84 992 177,6	5,0
	R(122) 35-0	a_1	-90 981 724,1	5,0
1100	P(84) 33-0	a_1	-95 929 863,0	5,0
1099	P(104) 34-0	a_1	-98 069 775,0	5,0
	P(55) 32-0	a_1	-98 766 591,0	5,0
1098	R(58) 32-0	a_1	-102 159 978,2	5,0
1097	R(87) 33-0	a_1	-111 935 173,1	5,0

Таким образом, в диапазоне 532 нм существует 18 переходов, каждый из которых можно использовать при лазерном воздействии на молекулы йода. Для осуществления лазерного охлаждения необходимо, чтобы электроны, перешедшие на верхние уровни, диссонируют на нижний переход, что обеспечивает максимальное поглощение оптического излучения.

Для стабилизации частоты Nd:YAG/I₂ лазеров, для которых планируется подготовить охлажденные молекулы йода, достаточно будет охлаждения до одного милликельвина.

Следует отметить, что в последние годы стали проводиться исследования условий воздействия лазерного излучения на колебательные и вибрационные колебания в молекулах [16, 17]. Они направлены на установление условий для проведения вычислений, которые можно использовать в квантовых компьютерах на основе глубоко охлажденных молекулах

Заключение

Охлажденные молекулы представляют собой несомненный интерес, как для оптических стандартов частоты, так и для квантовых компьютеров, в которых процесс вычислений планируется организовать за счет взаимодействия охлажденных молекул между собой.

Поскольку охлаждение молекул отличается от охлаждения атомов и ионов, в первую очередь тем, что у молекул больше внутренних степеней свободы, между которыми распределяется поглощенная энергия, то для реализации процесса охлаждения необходимо так построить этот процесс, чтобы произошел полностью отбор энергии от всех степеней свободы молекулы. Отдельные процессы взаимодействия излучения с колебательными и вращательными степенями свободы уже находятся на этапе исследований, но эти процессы индивидуальны для каждого типа молекул. Кроме того, поскольку спектральные свойства каждого типа молекул индивидуальны, то и подход при разработке процесса охлаждения выбранных молекул также должен быть индивидуальным. Выбор молекул для их охлаждения также определяется поставленными задачами. По последним, приведенным в статье публикациям, понятно, что в настоящее время главный интерес заключается в поиске оптимальных условий охлаждения молекул для квантовых вычислений. В работе рассматривалась возможность охлаждения молекул йода для стабилизации частоты твердотельного чип-лазера. Поскольку охлаждение молекул для ОСЧ до настоящего времени не было реализовано в полном объеме, то в статье были изучены принципиальные вопросы охлаждения молекул йода. В работе был проведен предварительный анализ условий охлаждения молекул йода. Необходимость в получении охлажденных молекул йода связана с созданием твердотельных чип-лазеров со стабилизацией.

Список литературы: 1. В.И. Балыкин, В.С. Летохов, В.Г. Миногин. Охлаждение атомов давлением лазерного излучения // УФН. – 1985. – Т. 147, № 1. – С.117-156. 2. У.Д. Филиппс. Лазерное охлаждение и пленение нейтральных атомов // УФН. – 1999. – Т. 169, № 3. – С.305-322. 3. V.S. Letokhov, V.G.Minogin, B.D. Pavlik. Cooling and capture of atoms and molecules by a resonant light field // Sov. Phys. JETP. – 1977. – Vol. 45, № 4. – P. 698-705. 4. Е.В. Бакланов, П.В. Покасов. Оптические стандарты частоты и фемтосекундные лазеры // Квантовая электроника. – 2003. – Т.33, №5. – С.383-400. 5. Н.Ф. Рэмси. Эксперименты с разнесенными осциллирующими полями и водородными мазерами // УФН. – 1990. – Т.160, №12. – С. 91-108. 6. D. DeMille, D.R. Glenn, J. Petrika. Microwave traps for cold polar molecules // Eur. Phys. – 2004. – Vol. 31. – P. 375-384. 7. J. F. Barry, E. S. Shuman, E. B. Norrgard, and D. DeMille. Laser radiation pressure slowing of a molecular beam // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol.108. – P.202-204. 8. E. S. Shuman, J.F. Barry, and D. DeMille. Laser cooling of a diatomic molecule // Nature. – 2010. – Vol. 467. – P. 820-823. 9. D. DeMille. Quantum computation with trapped polar molecules // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 88. – P. 88-92. 10. R. Côté, S. Yelin, and D. DeMill. Quantum Information Processing with Ultracold Polar Molecules, in Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications // CRC Press. – 2009. – Vol. 12. – P.98-103. 11. Matthieu Viteau, et al. Optical Pumping and Vibrational Cooling of Molecules // Science. – 2008. – Vol. 321. – P. 232-234. 12. L. D. Carr, D. DeMille, R. V. Krems, and J. Ye. Cold and Ultracold Molecules: Science, Technology, and Applications // New J. Phys. – 2009. – Vol. 11. – P. 98-105. 13. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М. : Физ. мат. лит., 1963. – 702 с. 14. М.А. Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: Эдиториал, 2001. – 894 с. 15. Jun Ye, L. Robertsson, S. Picard. Absolute Frequency Atlas of Molecular I₂ Lines at 532 nm // IEEE Trans. Instr. Measur. – 1999. – Vol. 48, № 2. – P.544-549. 16. I.Manai, R.Horchani, H. Lignier. Rovibrational Cooling of Molecules by Optical Pumping // Phys. Rev. Letters. – 2012. – Vol. 109. – P. 183-185. 17. N. Bigelow. Deep Molecular Cooling // Physics. – 2012. – Vol.5, № 121. – P.123-128.

Харьковский национальный
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 07.02.2015