

## 微波场与磁场失配下超冷分子微波屏蔽的稳健性 \*

邓富林<sup>†</sup>

(中国科学院理论物理研究所, 北京 100190)

近年来, 微波屏蔽技术在超冷分子领域取得了重大突破. 通过施加合适的微波场, 超冷分子在碰撞过程中保持稳定, 分子间的相互作用也能得到方便有效的调节. 为实现良好的微波屏蔽, 除了微波场外, 通常还需要施加较强的磁场. 然而, 在当前实验中, 微波场与磁场常常处于失配状态. 本文通过数值求解失配微波场和磁场下的超冷分子行为, 系统论证了这种失配对屏蔽效应的影响极为微弱, 这同时也解释了当前常用的无内态结构的刚性转子模型可靠性的物理起源.

**关键词:** 超冷极性分子, 偶极相互作用, 超冷碰撞

**PACS:** 67.85.-d, 33.80.-b, 34.50.-s

## 1 引言

超冷异核双原子极性分子(超冷分子)具有较大的电偶极矩和丰富的内态, 为量子模拟, 超冷化学, 精密测量等领域提供了新的舞台<sup>[1-13]</sup>. 然而, 超冷分子在高密度下极不稳定, 很容易就会通过两体碰撞损失掉, 严重阻碍了该领域的发展<sup>[14-17]</sup>. 为此, 人们提出了多种屏蔽方案来阻碍分子的靠近, 以便让超冷分子保持稳定<sup>[18-27]</sup>. 近年来, 基于微波屏蔽技术的超冷分子研究取得了巨大突破, 通过施加合适的微波, 超冷分子的碰撞损失被大大压制<sup>[28-31]</sup>. 目前, 微波屏蔽的超冷分子已经可以蒸发冷却到纳开尔文量级, 从而使费米分子<sup>[29]</sup>和玻色分子<sup>[32-34]</sup>到达简并温度以下, 并制备出了超冷四聚体分子<sup>[35]</sup>.

尽管微波屏蔽方案在多年前已经提出<sup>[24]</sup>, 然而精确的理论计算表明<sup>[25]</sup>, 仅仅靠微波场, 是无法将分子良好屏蔽. 这是由于分子存在丰富的超精细结构, 导致非常多的额外损失通道. 因此, 必须同时施加一个足够强的磁场, 才能实现真正的微波屏蔽. 在以往理论研究中, 磁场方向被假设为与微波传播方向平行,

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: sakura@alumni.itp.ac.cn

\* 国家自然科学基金(批准号: 12504313)资助的课题.

并基于此得到了与实验定量符合的结果<sup>[29-31,35]</sup>. 然而, 由于实验的不理想, 两者常常严重不匹配 (例如文献<sup>[35]</sup> 给出的超冷分子实验中, 两者夹角在 10 度左右), 而它的物理效应尚未被仔细探讨.

在这里, 我们研究微波场与磁场失配下的超冷分子行为. 数值计算表明, 这种失配对屏蔽效应的影响极小, 并且不会显著改变分子间的相互作用. 通过分析单个分子的超精细结构, 我们发现其根本原因在于: 在较强磁场下, 分子的核自旋投影受失配角的影响非常微弱, 分子态可近似表示为转动态与特定核自旋投影态的直积. 这意味着, 磁场的主要作用仅仅是锁定超冷分子的超精细结构内态, 为了达到这一目, 不需要磁场与微波场精确匹配. 这一认识也自然地解释了, 为何采用无内态结构的刚性转子模型, 仍能获得与实验定量一致的结果.

## 2 超冷分子理论模型

在极低温下, 单个分子可以视为具有超精细结构的刚性转子, 它的哈密顿量为

$$\hat{h}_0 = \frac{\omega_0}{2} \hat{J}^2 + \hat{h}_{\text{hyperfine}}, \quad (1)$$

其中的第一项,  $\omega_0 \hat{J}^2/2$  是分子的转动项,  $\omega_0 = 2b_{\text{rot}}$ ,  $b_{\text{rot}}$  是转动常数. 由于超冷分子的动能很小, 因此我们只需要考虑转动基态和转动第一激发态.  $\hat{h}_{\text{hyperfine}}$  来自于分子的核磁矩与分子场耦合得到的超精细结构, 具体可以表示为

$$\begin{aligned} \hat{h}_{\text{hyperfine}} = & \sum_{i=1,2} eQq_i \frac{\sqrt{6}}{4I_i(2I_i - 1)} [\hat{\mathbf{I}}_i, \hat{\mathbf{I}}_i]^{(2)} \cdot C^{(2)}(\hat{n}) \\ & + (c_1 \hat{\mathbf{I}}_1 + c_2 \hat{\mathbf{I}}_2) \cdot \hat{\mathbf{J}} - c_3 [\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{I}}_2 - 3(\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}})(\hat{\mathbf{I}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}})] + c_4 \hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{I}}_2, \end{aligned} \quad (2)$$

其中  $\hat{\mathbf{I}}_{i=1,2}$  是原子核的磁矩,  $\hat{n}$  是分子轴的方向算符. 第一项是原子核的电四极矩与分子内部电场梯度的耦合,  $[\hat{\mathbf{I}}_i, \hat{\mathbf{I}}_i]^{(2)}$  是将两个核磁矩合成为二阶张量,  $C^{(2)}(\hat{n})$  是球面分量为 Racah 归一化的球谐函数, 将两者缩并就得到了电四极耦合项. 第二项来自于核磁矩与分子旋转产生的磁矩间的耦合, 第三项来自于两个核磁矩之间的偶极相互作用, 第四项来自于两个核磁矩通过分子内部电子间接形成的有效耦合.

在碱金属超冷分子实验中, 常常是通过磁 Feshbach 共振缔合两个异核原子得到分子, 整个超冷分子气体也置于相应的 Feshbach 共振附近磁场中, 这会产生塞曼劈裂项,

$$\hat{h}_{\text{zeeman}} = -g_r \mu_N \hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{B} - \sum_{i=1,2} g_i \mu_N \hat{\mathbf{I}}_i \cdot \mathbf{B}, \quad (3)$$

第一项是磁场与分子旋转磁矩的耦合, 对于碱金属分子, 它远远小于第二项的磁场与核磁矩的耦合.

最后，我们考虑微波场与分子转动能级的耦合。在这里，只施加一束圆偏振微波，但微波场平面与磁场方向不一定垂直；此时，微波的传播方向与磁场方向存在不为零的夹角，称为失配角  $\vartheta_{\text{mis}}$ 。因此，可以基于磁场定义一套坐标系， $\mathbf{e}_{i=x,y,z}^B$ ，磁场  $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z^B$ ；也可以基于微波场定义坐标系， $\mathbf{e}_{i=x,y,z}^{\text{MW}}$ ，微波传播方向沿着  $\mathbf{e}_z^{\text{MW}}$ 。不失一般性，我们假设微波传播方向在磁场坐标系的  $x^B - z^B$  平面内。在微波场的坐标系中，圆偏振微波场可以表示为

$$\mathbf{E}_{\text{MW}} = E \cos(\omega t) \mathbf{e}_x^{\text{MW}} + E \sin(\omega t) \mathbf{e}_y^{\text{MW}}, \quad (4)$$

其中  $E$  是微波场的强度， $\omega$  是微波的频率。经过简单的坐标变换后，可以得到微波场在磁场坐标系中的形式，

$$\mathbf{E}_{\text{MW}} = E_+ (\cos(\omega t) \mathbf{e}_x^B + \sin(\omega t) \mathbf{e}_y^B) + E_- (-\cos(\omega t) \mathbf{e}_x^B + \sin(\omega t) \mathbf{e}_y^B) - E_0 \cos(\omega t) \mathbf{e}_z^B, \quad (5)$$

其中，我们定义了场强度为

$$E_+ = \frac{E(1 + \cos \vartheta_{\text{mis}})}{2}, \quad E_- = \frac{E(1 - \cos \vartheta_{\text{mis}})}{2}, \quad E_0 = E \sin \vartheta_{\text{mis}},$$

微波场与分子电偶极矩  $\mathbf{d} = d\hat{n}$  耦合，将得到含时的哈密顿量， $\hat{h}_{\text{MW}}(t) = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}$ 。为了得到不含时的哈密顿量，我们需要进入旋转坐标系。通过下面的含时变换，

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \quad (6)$$

我们得到了微波场与分子的耦合，

$$h_{\text{MW}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega_+}{2} & \frac{\Omega_0}{2} & \frac{\Omega_-}{2} \\ \frac{\Omega_+}{2} & -\omega & 0 & 0 \\ \frac{\Omega_0}{2} & 0 & -\omega & 0 \\ \frac{\Omega_-}{2} & 0 & 0 & -\omega \end{pmatrix} \quad (7)$$

其中  $\Omega = 2Ed/\sqrt{6}$  是微波的拉比频率，它与其他几个拉比频率的关系为

$$\Omega_+ = \frac{1 + \cos \vartheta_{\text{mis}}}{2} \Omega, \quad \Omega_- = \frac{1 - \cos \vartheta_{\text{mis}}}{2} \Omega, \quad \Omega_0 = \frac{\sin \vartheta_{\text{mis}}}{\sqrt{2}} \Omega,$$

并满足关系式,  $\Omega^2 = \Omega_+^2 + \Omega_-^2 + \Omega_0^2$ .

单个分子在磁场和微波场中的总哈密顿是上述的几项之和,

$$\hat{h}_{\text{single}} = \hat{h}_0 + \hat{h}_{\text{zeeman}} + \hat{h}_{\text{MW}} \quad (8)$$

当分子不存在超精细结构耦合, 即当  $\hat{h}_{\text{hyperfine}} = 0$  时, 核自旋投影  $M_{1,2}$  是好量子数. 此时, 微波场仅仅影响转动自由度, 并且对于任意的核自旋内态  $|\alpha\rangle \equiv |I_1, M_1; I_2, M_2\rangle$ , 相应的转动部分哈密顿量是一样 (仅仅相差常数能量). 考虑到转动部分的塞曼劈裂能远小于实验中微波的失谐和核磁矩的塞曼劈裂, 扔掉这一项的影响非常小. 在这些条件下, 分子的哈密顿量在固定核自旋投影的空间里将大大简化. 在微波场坐标系中, 分子哈密顿量退化为熟悉的形式

$$h_{\text{single}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\Omega}{2} & \Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta \end{pmatrix} \quad (9)$$

这里我们定义了失谐  $\Delta = \omega_0 - \omega$ . 对角化  $h_{\text{single}}$ , 我们得到四个本征态,  $|+\rangle \equiv u|0,0\rangle + v|1,1\rangle$ ,  $|-\rangle \equiv v|0,0\rangle - u|1,1\rangle$ ,  $|0\rangle \equiv |1,0\rangle$  和  $|-1\rangle \equiv |1,-1\rangle$ , 相应的本征能量为  $E_{\pm} = (\Delta \pm \sqrt{\Omega^2 + \Delta^2})/2$ ,  $E_0 = E_{-1} = \Delta$ , 其中系数  $u = \sqrt{(1 - \Delta/\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2})/2}$ ,  $v = \sqrt{(1 + \Delta/\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2})/2}$ . 如果在磁场坐标系中, 分子态的将不能写成这样的简单形式, 但本征能量不会变, 我们仍然用  $|\pm\rangle$  来标记能量最高 (最低) 的本征态. 为了实现屏蔽, 分子的转动态被制备到了  $|+\rangle$ , 因此, 当  $\hat{h}_{\text{hyperfine}} = 0$  时, 分子的内态是转动态  $|+\rangle$  与核自旋内态  $|\alpha\rangle$  的直积  $|+\rangle \otimes |\alpha\rangle$ . 在考虑超精细结构耦合后, 核自旋投影不再是守恒量, 转动自由度与核自旋自由度将耦合起来, 分子内态也不再是简单的直积形式. 在后续讨论中, 我们将会用  $|+; \alpha\rangle$  来标记分子内态, 其含义是该态的主要成分是  $|+\rangle \otimes |\alpha\rangle$ .

在给出具体数值计算前, 我们注意到, 尽管不同的超冷分子具有不同的偶极矩和超精细结构, 但它们在微波屏蔽下, 表现出了相近的行为: 分子损失率在较强磁场下会接近于无内部结构的刚性转子<sup>[25]</sup>; 分子间的相互作用由普适的有效势描述<sup>[38]</sup>. 因此, 我们将选取其中的代表性分子, 钠铷和钠铯作为例子, 在表格1中给出了分子的参数. 为了降低数值难度, 在相互作用的相关计算中, 将使用玩具模型 (Toy model) ——保持大部分参数为实际分子的物理值, 但将核自旋减少 (详见表格1). 这样一来, 分子超精细结构的主要特性仍然保留, 可以方便的用来阐明其中的物理.

表 1 分子的超精细结构参数. 数据来自于 [32,36,37]

Table 1. The hyperfine structure parameters of molecules. Datas are from Ref. [32,36,37].

|        | $b_{\text{rot}}$ | $d$        | $I_1$ | $I_2$ | $eQq_1$    | $eQq_2$    |
|--------|------------------|------------|-------|-------|------------|------------|
| 钠铷     | 2.0896628 GHz    | 3.2 Debye  | 3/2   | 3/2   | -0.139 MHz | -3.048 MHz |
| 玩具模型 1 | 2.0896628 GHz    | 3.2 Debye  | 0     | 1     | -0.139 MHz | -3.048 MHz |
| 钠铯     | 1.7355 GHz       | 4.75 Debye | 3/2   | 7/2   | -0.097 MHz | 0.150 MHz  |
| 玩具模型 2 | 1.7355 GHz       | 4.75 Debye | 0     | 1     | -0.097 MHz | 0.150 MHz  |

| $c_1$   | $c_2$    | $c_3$    | $c_4$      | $g_r$ | $g_1$ | $g_2$ |
|---------|----------|----------|------------|-------|-------|-------|
| 60.7 Hz | 983.8 Hz | 259.3 Hz | 6.56 kHz   | 0.001 | 1.484 | 1.832 |
| 60.7 Hz | 983.8 Hz | 259.3 Hz | 6.56 kHz   | 0.001 | 1.484 | 1.832 |
| 14.2 Hz | 854.5 Hz | 105.6 Hz | 3.9418 kHz | 0.0   | 1.478 | 0.738 |
| 14.2 Hz | 854.5 Hz | 105.6 Hz | 3.9418 kHz | 0.0   | 1.478 | 0.738 |

### 3 数值结果

#### 3.1 单个分子的超精细结构

我们首先考虑单个分子的内态随着失配角  $\vartheta_{\text{mis}}$  和磁场强度的变化. 在微波屏蔽的超冷分子实验里, 分子的转动态总是被近似制备在  $|+\rangle$ , 以实现良好的屏蔽. 但核自旋态的选取与超精细结构有关, 并依赖于实验的具体制备过程. 在这里, 我们只讨论自旋拉伸态 (其他核自旋态的行为与自旋拉伸态相似 [25,29-31]), 此时核自旋投影接近于最大值. 因此, 在这里我们关注的分子态为  $|+; I_1, I_1; I_2, I_2\rangle$ . 如图1所示, 在较强磁场下, 无论是实际分子还是玩具模型, 分子的核自旋投影 (投影到  $|I_1, I_1; I_2, I_2\rangle$ ) 概率分布几乎不受  $\vartheta_{\text{mis}}$  的影响, 完全的集中于  $|I_1, I_1; I_2, I_2\rangle$ . 这意味着, 此时分子的核自旋投影几乎完全由磁场决定, 微波的影响非常微弱, 分子可以近似为一个直积态  $|+\rangle \otimes |I_1, I_1; I_2, I_2\rangle$ . 同时也可以看到, 在钠铯以及相应的玩具模型 2 中, 核自旋投影概率占比要更高, 这是由于它们的超精细结构耦合弱得多.

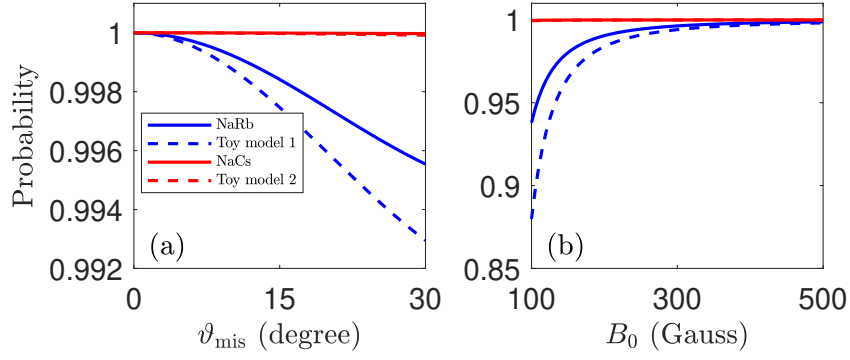


图 1 核自旋投影的概率随着 (a)  $\vartheta_{\text{mis}}$ , (b) 磁场的变化. 在图 (a) 中固定磁场为  $B_0 = 350$  G, 在图 (b) 中固定夹角为  $\vartheta_{\text{mis}} = 20^\circ$ . 在计算中, 微波的拉比频率为  $\Omega = 2\pi \times 15$  MHz, 失谐为  $\Delta = -2\pi \times 12$  MHz

Fig. 1. Probability of nuclear spin projection as a function of (a)  $\vartheta_{\text{mis}}$  and (b) magnetic field. Here, we fix  $B_0 = 350$  G in (a), and fix  $\vartheta_{\text{mis}} = 20^\circ$  in (b). In the calculations, Microwave Rabi frequency is

$$\Omega = 2\pi \times 15 \text{ MHz and detune is } \Delta = -2\pi \times 12 \text{ MHz.}$$

### 3.2 相互作用

我们接下来讨论相互作用的影响. 两个分子相对运动的哈密顿量可以一般的表示为,

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{M} \nabla^2 + \sum_j \hat{h}_{\text{single}}(j) + V_d(\mathbf{r}) \quad (10)$$

式中  $M$  是单个分子的质量,  $\hat{h}_{\text{single}}(j)$  代表第  $j$  个分子的内态哈密顿量. 由于微波屏蔽效应, 分子几乎无法进入短程区域, 相互作用由长程的偶极相互作用  $V_d(\mathbf{r})$  主导,

$$V_d(\mathbf{r}) = \frac{d^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \left[ \hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right] = -\frac{\eta}{r^3} \sum_{m=-2}^2 Y_{2m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \Sigma_{2,m} \quad (11)$$

其中  $\eta = \sqrt{8\pi/15} d^2 / \epsilon_0$ ,  $\epsilon_0$  是真空介电常数,  $\mathbf{r}$  是两个分子的相对距离,  $r = |\mathbf{r}|$ .  $Y_{2m}(\hat{\mathbf{r}})$  球谐函数,  $\Sigma_{2,m}$  是秩为 2 的球张量的分量,  $\Sigma_{2,0} = (\hat{d}_1^+ \hat{d}_2^- + \hat{d}_1^- \hat{d}_2^+ + 2\hat{d}_1^0 \hat{d}_2^0) / \sqrt{6}$ ,  $\Sigma_{2,\pm 1} = (\hat{d}_1^\pm \hat{d}_2^0 + \hat{d}_1^0 \hat{d}_2^\pm) / \sqrt{2}$ , and  $\Sigma_{2,\pm 2} = \hat{d}_1^\pm \hat{d}_2^\pm$ , 以及  $\hat{d}_j^\pm = Y_{1,\pm 1}(\hat{\mathbf{d}}_j)$ ,  $\hat{d}_j^0 = Y_{1,0}(\hat{\mathbf{d}}_j)$ . 在旋转坐标系下,  $\Sigma_{2,m}$  具体形式为

$$\begin{aligned} \Sigma_{2,0} = & \frac{1}{4\pi\sqrt{6}} (2|1,0\rangle\langle 0,0| \otimes |0,0\rangle\langle 1,0| - |1,1\rangle\langle 0,0| \otimes |0,0\rangle\langle 1,1| \\ & - |0,0\rangle\langle 1,-1| \otimes |1,-1\rangle\langle 0,0| + \text{h.c.}) \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{2,1} = & \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} (|1,1\rangle\langle 0,0| \otimes |0,0\rangle\langle 1,0| + |0,0\rangle\langle 1,0| \otimes |1,1\rangle\langle 0,0| \\ & - |0,0\rangle\langle 1,-1| \otimes |1,0\rangle\langle 0,0| - |1,0\rangle\langle 0,0| \otimes |0,0\rangle\langle 1,-1|) \end{aligned} \quad (13)$$

$$\Sigma_{2,2} = -\frac{1}{4\pi} (|1,1\rangle\langle 0,0| \otimes |0,0\rangle\langle 1,-1| + |0,0\rangle\langle 1,-1| \otimes |1,1\rangle\langle 0,0|) \quad (14)$$

虽然10式给出了一个相当复杂的哈密顿量,但在极低温下,分子动能非常小,因此可以利用 Born-Oppenheimer 近似,认为两个碰撞的分子一直处于  $|+; \alpha\rangle|+; \alpha\rangle$  对应的绝热态上,并且分子间有效的相互作用近似由这个绝热势能面来描述. 如果磁场方向和微波传播方向夹角完全匹配,那么体系将具有柱对称性,绝热势能面绕  $\mathbf{e}_z^{\text{MW}}$  保持不变. 而当两者失配时,体系将会失去柱对称性,相应地,绝热势能面将依赖于绕  $\mathbf{e}_z^{\text{MW}}$  的方位角.

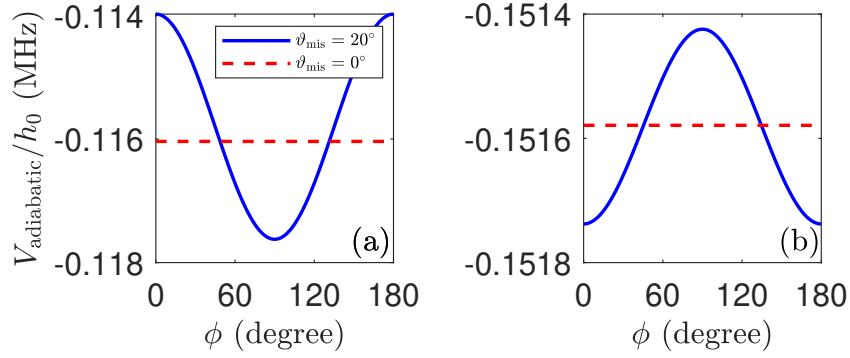


图2 (a) 玩具模型 1 和 (b) 玩具模型 2 的绝热势能曲线随着方位角的变化. 分子间距固定为  $r = 1500 a_0$ , 极角固定  $\theta = 90^\circ$ . 磁场为  $B_0 = 350$  G, 微波的拉比频率为  $\Omega = 2\pi \times 15$  MHz, 失谐为  $\Delta = -2\pi \times 12$  MHz

Fig. 2. Adiabatic curves of (a) toy model 1 and (b) toy model 2, as a function of  $\phi$ , with  $r = 1500 a_0$  and  $\theta = 90^\circ$ . Magnetic field is fixed as  $B_0 = 350$  G, microwave Rabi frequency  $\Omega = 2\pi \times 15$  MHz and detune

$$\Delta = -2\pi \times 12 \text{ MHz}.$$

在图2中展示了被制备在  $|+; I_1, I_1; I_2, I_2\rangle$  的分子的绝热势能曲线 (在微波场定义的坐标系中), 从中可以看到, 非零失配角确实导致体系失去了绕  $\mathbf{e}_z^{\text{MW}}$  的柱对称性, 绝热势的行为接近于在椭圆偏振微波场中的分子绝热势, 存在一个吸引最强的方向. 由于在当前的实验中, 微波总是带有较大椭圆偏度, 微波场与磁场不匹配带来的微弱各向异性, 很容易被微波场自身各向异性带来的效应所淹没.

最后, 我们给出多通道散射结果. 如图3所示, 在较强磁场下, 分子的散射速率几乎不受失配角的影响. 同时可以看到, 非弹性速率远低于弹性散射, 意味着微波屏蔽在失配环境中十分稳健. 在玩具模型 2 中, 无论是弹性还是非弹性散射, 都非常接近于无内态的刚性转子; 而玩具模型 1 给出的非弹性散射, 偏离无内态的刚性转子程度会大很多. 这反映了两者的超精细结构耦合的强度不同, 而非弹性散射对于超精细结构更加敏感. 因此, 对于具有更强的超精细耦合的玩具模型 1, 偏离也会大一些.

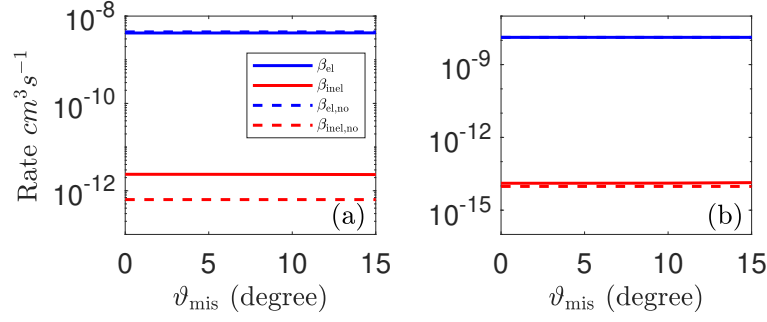


图 3 多通道散射随着方位角的变化, (a) 玩具模型 1 和 (b) 玩具模型 2.  $\beta_{\text{el,inel}}$  表示弹性 (非弹性) 散射速率, 下标 “no” 表示在计算中忽略  $\hat{h}_{\text{hyperfine}}$ . 在这里, 相对运动动能为  $k_B \times 10$  nK, 磁场为  $B_0 = 350$  G, 微波的拉比频率为  $\Omega = 2\pi \times 15$  MHz, 失谐为  $\Delta = -2\pi \times 12$  MHz

Fig. 3. Multi-channel scattering as a function of  $\vartheta_{\text{mis}}$  for (a) toy model 1 and (b) toy model 2.  $\beta_{\text{el,inel}}$  represent elastic (inelastic) rate, and extra subscript ‘no’ means that we neglect  $\hat{h}_{\text{hyperfine}}$  in corresponding calculations. Here, relative kinetic energy  $k_B \times 10$  nK, magnetic field is fixed as  $B_0 = 350$  G, microwave Rabi frequency  $\Omega = 2\pi \times 15$  MHz and detune  $\Delta = -2\pi \times 12$  MHz.

## 4 结论

本文研究表明, 在微波场与磁场失配的环境下, 超冷分子的微波屏蔽效应依然非常稳健——散射速率几乎不受失配角影响, 非弹性碰撞被大大压低. 通过分析失配角对分子超精细结构及两体散射的影响, 我们确认了该稳健性的根源: 磁场主导的核磁部分超精细结构锁定与微波场方向解耦, 使得分子有效态可近似为转动态与核自旋投影态的直积. 此外, 当前超冷分子实验中常用的微波场具有较大椭圆偏度, 可能会掩盖失配角与超精细结构的残余效应<sup>[29-31,35]</sup>. 这恰恰解释了为何在实际实验中, 即便采用无内态结构的刚性转子模型也能获得定量相符的结果.

## 致谢

感谢中国科学院理论物理研究所石卫研究员的讨论.

## 参考文献

- [1] DeMille D 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 067901
- [2] Rabl P, DeMille D, Doyle J M, Lukin M D, Schoelkopf R J, Zoller P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 033003
- [3] Micheli A, Brennen G K, Zoller P 2006 *Nat. Phys.* **2** 341
- [4] Flambaum V V, Kozlov M G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 150801
- [5] Krems R V 2008 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** 4079
- [6] Carr L D, DeMille D, Krems R V, Ye J 2009 *New J. Phys.* **11** 055049
- [7] Isaev T A, Hoekstra S, Berger R 2010 *Phys. Rev. A* **82** 052521
- [8] Hudson J J, Kara D M, Smallman I J, Sauer B E, Tarbutt M R, Hinds E A 2011 *Nature* **473** 493
- [9] Bohn J L, Rey A M, Ye J 2017 *Science* **357** 1002
- [10] Moses S, Covey J, Miecnikowski M, Jin D, Ye J 2017 *Nat. Phys.* **13** 13
- [11] Hu M G, Liu Y, Grimes D D, Lin Y W, Gheorghe A H, Vexiau R, Bouloufa-Maafa N, Dulieu O, Rosenband T, Ni K K 2019 *Science* **366** 1111
- [12] Sawant R, Blackmore J A, Gregory P D, Mur-Petit J, Jaksch D, Aldegunde J, Hutson J M, Tarbutt M R, Cornish S L 2020 *New J. Phys.* **22** 013027
- [13] Altman E, Brown K R, Carleo G, Carr L D, Demler E, Chin C, DeMarco B, Economou S E, Eriksson M A, Fu K M C, Greiner M, Hazzard K R, Hulet R G, Kollár A J, Lev B L, Lukin M D, Ma R, Mi X, Misra S, Monroe C, Murch K, Nazario Z, Ni K K, Potter A C, Roushan P, Saffman M, Schleier-Smith M, Siddiqi I, Simmonds R, Singh M, Spielman I, Temme K, Weiss D S, Vučković J, Vuletić V, Ye J, Zwerlein M 2021 *PRX Quantum* **2** 017003

- [14] Ospelkaus S, Ni K K, Wang D, de Miranda M H G, Neyenhuis B, Quéméner G, Julienne P S, Bohn J L, Jin D S, Ye J 2010 *Science* **327** 853
- [15] Ni K K, Ospelkaus S, Wang D, Quéméner G, Neyenhuis B, de Miranda M H G, Bohn J L, Ye J, Jin D S 2010 *Nature* **464** 1324
- [16] Idziaszek Z, Julienne P S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 113202
- [17] Lu B, Wang D J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 043301 (in Chinses) [鹿博, 王大军 2019 物理学报 **68** 043301]
- [18] Chotia A, Neyenhuis B, Moses S A, Yan B, Covey J P, Foss-Feig M, Rey A M, Jin D S, Ye J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 080405
- [19] Yan B, Moses S A, Gadway B, Covey J P, Hazzard K R A, Rey A M, Jin D S, Ye J 2013 *Nature* **501** 521
- [20] Reichsöllner L, Schindewolf A, Takekoshi T, Grimm R, Nägerl H C 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 073201
- [21] de Miranda M H G, Chotia A, Neyenhuis B, Wang D, Quéméner G, Ospelkaus S, Bohn J L, Ye J, Jin D S 2011 *Nat. Phys.* **7** 502
- [22] Xie T, Lepers M, Vexiau R, Orbán A, Dulieu O, Bouloufa-Maafa N 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 153202
- [23] Karam C, Vexiau R, Bouloufa-Maafa N, Dulieu O, Lepers M, Borgloh M M z A, Ospelkaus S, Karpal L 2023 *Phys. Rev. Res.* **5** 033074
- [24] Gorshkov A V, Rabl P, Pupillo G, Micheli A, Zoller P, Lukin M D, Büchler H P 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 073201
- [25] Karman T, Hutson J M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 163401
- [26] Deng F, Hu X, Jin W J, Yi S, Shi T 2025 *Nat. Commun.* **16** 11219
- [27] Karman T, Bigagli N, Yuan W, Zhang S, Stevenson I, Will S 2025 *PRX Quantum* **6** 020358
- [28] Anderegg L, Burchesky S, Bao Y, Yu S S, Karman T, Chae E, Ni K K, Ketterle W, Doyle J M 2021 *Science* **373** 779

- [29] Schindewolf A, Bause R, Chen X Y, Duda M, Karman T, Bloch I, Luo X Y 2022 *Nature* **607** 677
- [30] Lin J, Chen G, Jin M, Shi Z, Deng F, Zhang W, Quéméner G, Shi T, Yi S, Wang D 2023 *Phys. Rev. X* **13** 031032
- [31] Bigagli N, Warner C, Yuan W, Zhang S, Stevenson I, Karman T, Will S 2023 *Nat. Phys.* **19** 1579
- [32] Bigagli N, Yuan W, Zhang S, Bulatovic B, Karman T, Stevenson I, Will S 2024 *Nature* **631** 289
- [33] Zhang S, Yuan W, Bigagli N, Kwak H, Karman T, Stevenson I, Will S 2026 *Nature* **651** 601
- [34] Shi Z, Huang Z, Deng F, Jin W J, Yi S, Shi T, Wang D 2026 *Nat. Phys.*
- [35] Chen X Y, Biswas S, Eppelt S, Schindewolf A, Deng F, Shi T, Yi S, Hilker T A, Bloch I, Luo X Y 2024 *Nature* **626** 283
- [36] Aldegunde J, Hutson J M 2017 *Phys. Rev. A* **96** 042506
- [37] Guo M, Ye X, He J, Quéméner G, Wang D 2018 *Phys. Rev. A* **97** 020501(R)
- [38] Deng F, Chen X Y, Luo X Y, Zhang W, Yi S, Shi T 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 183001

录用稿件，非最终出版稿

# Robustness of microwave shielding for ultracold molecules under mismatched microwave and magnetic fields\*

DENG Fulin<sup>†</sup>

(*Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

## Abstract

Microwave shielding has recently emerged as a powerful technique for suppressing inelastic collisions and enabling evaporative cooling of ultracold polar molecules. With appropriately applied microwave fields, a repulsive shielding barrier emerges at short range, which prevents molecules from reaching reactive collision distances. So far, both fermionic and bosonic molecular gases can be cooled below the degeneracy temperature through microwave shielding. Moreover, it offers a convenient method to tune molecular interaction. In addition to the microwave field, achieving efficient microwave shielding requires a strong bias magnetic field to define a quantization axis and to suppress processes that involve changes in the internal spin degrees of freedom. In current experimental setups, the polarization or spatial orientation of the microwave field is often not perfectly aligned with the magnetic field, which is referred to as mismatched fields, leaving an important gap between idealized theoretical treatments and practical experiments.

In this work, we theoretically investigate the impact of mismatches between microwave and magnetic fields on the shielding performance. By performing multi-channel scattering calculations together with adiabatic potential analyses for two colliding polar molecules, we systematically vary the mismatch angle and examine the resulting scattering rates. We demonstrate that the shielding effect is highly robust even under significant mismatches: the elastic scattering rate remains essentially unchanged, while the inelastic

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12504313).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: sakura@alumni.itp.ac.cn

loss rate stays efficiently suppressed to a level comparable to the perfectly aligned case. More importantly, we identify the underlying physical mechanism behind this robustness. We find that in a sufficiently strong magnetic field, the projection of the molecular nuclear spin is hardly affected by the mismatch angle. As a result, the molecular state can be accurately approximated as a direct product of a rotational state and a fixed nuclear-spin projection state. This observation reveals that the primary role of the magnetic field is to lock the nuclear-spin projection of the molecule, which does not require precise alignment with the microwave field. Consequently, the microwave shielding effect for ultracold polar molecules is remarkably robust against mismatches between the microwave and magnetic fields.

Our findings also provide a natural explanation for experimental observations reported in earlier works: even a simple rigid-rotor model that completely ignores hyperfine structure can reproduce experimental results quantitatively, regardless of the mismatch. In typical ultracold molecule experiments, the microwave field often has a large ellipticity, which tends to obscure the subtle effects of field mismatches and hyperfine details. Under such conditions, treating the molecule as a structureless rigid rotor becomes fully adequate.

**Keywords:** ultracold polar molecule, dipolar interaction, ultracold collision