

Mg-CO($X^1\Sigma^+$) 体系的冷碰撞动力学

韩玉龙 张侃 凤尔银 黄武英

Collision dynamic behaviors of CO($X^1\Sigma^+$) molecule with Mg atom in cold and ultracold temperatures

Han Yu-Long Zhang Kan Feng Er-Yin Huang Wu-Ying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 103402 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.103402

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.103402>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

H+Li₂: 一个典型的释能反应体系及其含时动力学研究

H + Li₂: a typical exothermic reactive system and its time-dependent dynamics investigation

物理学报.2015, 64(6): 063101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.063101>

U_{1-x}Pu_xO₂ 热膨胀性质分子动力学模拟研究

Molecular dynamic study on thermal expansion of U_{1-x}Pu_xO₂

物理学报.2014, 63(8): 083103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.083103>

Al_n(n=13--32) 团簇熔化行为的分子动力学模拟研究

Molecular dynamical simulations of the melting properties of Al_n(n=13--32) clusters

物理学报.2013, 62(19): 193104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.193104>

UO₂ 晶体中低密勒指数晶面表面能的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of surface energy of low miller index surfaces in UO₂

物理学报.2013, 62(10): 103104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.103104>

Li+HF(v = 0--3, j = 0)?LiF+H 反应的立体动力学理论研究

Stereodynamics study of Li+HF (v = 0--3, j = 0)?LiF+H reaction

物理学报.2013, 62(7): 073105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.073105>

Mg-CO($X^1\Sigma^+$)体系的冷碰撞动力学*韩玉龙¹⁾²⁾ 张侃²⁾ 凤尔银^{1)†} 黄武英¹⁾

1)(安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241000)

2)(安徽工程大学机电学院, 芜湖 241003)

(2014年9月9日收到; 2015年1月3日收到修改稿)

应用量子散射动力学方法, 研究了电场条件下 Mg-CO 体系的冷碰撞动力学性质, 探索了外电场对碰撞体系低场追索态的弹性和非弹性截面的影响, 为碱土金属 Mg 原子感应冷却 CO 分子提供理论预测.

关键词: Mg-CO 体系, 冷碰撞, 感应冷却

PACS: 34.50.-s, 34.50.Cx, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.64.103402

1 引言

原子的玻色-爱因斯坦凝聚的实现, 激励了人们对分子冷却的兴趣. 目前分子冷却方法大致分为直接和间接冷却两种. 直接冷却是利用激光冷却的超冷原子气, 通过光缔合或磁场可调 Feshbach 共振(磁缔合)技术, 实现从超冷原子向超冷分子转变, 但仅限于碱金属原子. 间接冷却主要有缓冲气(He)载带冷却^[1]和时变电/磁场 Stark/Zee-man 减速等^[2]. 间接冷却技术适用的分子种类多, 产生的冷分子数密度较高, 但仅能使分子冷却至 mK 级温度, 要达到超冷温度 (<1 mK) 还要进一步的蒸发冷却或感应冷却. 感应冷却^[3]是使预冷分子与超冷分子/原子气(冷却剂)共处于一个势阱中, 通过热接触使分子达到超冷温度. 这一方法已成功应用于冷却那些散射特性不适宜于蒸发冷却的原子^[4](如 ^{40}K)至超冷温度. 虽然实验表明碱金属原子是目前可以获得的最冷物种, 但由于碱金属原子与分子的相互作用势普遍具有较深的势阱和强的各向异性, 且存在电子态的交叉, 导致大的非弹性弛豫速率, 使用超冷碱金属原子作为冷却剂感应冷却分子

将难以奏效^[5-7].

碱土金属原子由于具有较小的黑体辐射频移、相当丰富的玻色子和费米子同位素原子、存在长寿命亚稳态等特征, 以及相对简单的原子能级结构, 成为继碱金属原子之后重要的冷却原子候选种类. Magno 等^[8]在 2003 年提出了两光子光学黏团方法, 用两束光将 Ca 原子冷却至 123 μK . 2005 年, Malossi 等^[9]采用类似的方法实现了 Mg 原子的冷却. 2008 年, Mehlstäubler 等^[10]采用两束 285 和 881 nm 激光将 Mg 原子冷却到亚多普勒温度 50 μK . 因此, 超冷碱土金属原子的获得在实验上是可能的. 能否用超冷碱土金属原子作为冷却剂感应冷却分子, 最有希望冷却哪些分子, 感应冷却的效率如何, 是值得探索的问题.

2011 年, Blokland 等^[11]在实验上使用斯塔克减速和抽运转移技术, 产生了平动冷的、处于绝对基态的 CO 分子, 使得 Mg 原子与 CO 分子的冷碰撞实验成为可能. 前期工作中^[12], 我们完成了 Mg-CO 体系的相互作用势的构建. 基于以上背景, 本文研究电场条件下碱土金属 Mg 原子与 CO 分子的冷碰撞动力学.

* 国家自然科学基金(批准号: 11374014)和安徽省自然科学基金(批准号: 1208085MA08)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fengbf@mail.ahnu.edu.cn

2 理 论

2.1 Mg-CO体系的Hamiltonian算符

Mg-CO($^1\Sigma^+$)碰撞体系的Hamiltonian在Jacobi坐标(R, θ)下的表示为(原子单位):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} R + \frac{\hat{L}^2}{2\mu R^2} + \hat{H}_{\text{mon}} + V(R, \theta), \quad (1)$$

式中, μ 表示体系的约化质量, \hat{L} 是体系轨道转动角动量, $V(R, \theta)$ 是体系的相互作用势, \hat{H}_{mon} 表示CO($^1\Sigma^+$)单体的Hamiltonian,

$$\hat{H}_{\text{mon}} = b_{\text{CO}} \hat{n}^2 + \hat{H}_{\text{Stark}}, \quad (2)$$

这里, n 是单体分子的转动量子数; $b_{\text{CO}} = 1.92253 \text{ cm}^{-1}$ [13]是CO分子在基振动态的转动常数, 同位素 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ 是不含核自旋的玻色子; \hat{H}_{Stark} 是在外加电场下, CO分子电偶极矩与电场相互作用项,

$$\hat{H}_{\text{Stark}} = -\hat{E} \cdot \hat{d}. \quad (3)$$

CO分子的电偶极矩 $d = 0.1098D$ [14].

2.2 电场条件下散射方程的解

外场的引入有别于零外场的情形: 一是总角动量不再是守恒量, 零外场情形常用的总角动量耦合方案不再适用于存在外场情形的散射方程的求解; 二是散射波函数在无穷远处不趋于零, 零外场常用的散射渐近条件不再成立. 为此, 我们采用非耦合角动量表象方案 $|nm_n\rangle |sm_s\rangle |LM_L\rangle$. s 为自旋量子数, m_n, m_s, M_L 为相应角动量的投影, $\hat{j} = \hat{n} + \hat{s}$, $m_j = m_n + m_s$. 首先, 在非耦合表象 $|nm_n\rangle |sm_s\rangle$ 下对角化单体 \hat{H}_{mon} :

$$[CH_{\text{mon}}C^{-1}]_{\alpha\beta} = \xi_\alpha \delta_{\alpha\beta}, \quad (4)$$

C 为渐近能 ξ_α 的本征矢. 体系的渐近缀饰态 $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i |nm_n\rangle |sm_s\rangle. \quad (5)$$

进一步, 以分子体系的渐近缀饰态 $|\alpha\rangle$ 和转动波函数 $|LM_L\rangle$ 的直积为基底, 展开散射波函数:

$$\Psi = \frac{1}{R} \sum_\alpha \sum_L \sum_{M_L} F_{\alpha LM_L}(R) |LM_L\rangle |\alpha\rangle, \quad (6)$$

得到密耦(close coupling)方程:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} + 2\mu[E - \xi_\alpha] \right] F_{\alpha LM_L}(R) = 2\mu \sum_{\alpha'L'M'_L} [C^T V C]_{\alpha LM_L}^{\alpha'L'M'_L} F_{\alpha'L'M'_L}(R), \quad (7)$$

式中右边的矩阵元可通过角动量耦合的Wigner-Eckart定理得到. 采用Manolopoulos的modified log-derivative传播方法, 匹配 $F_{\alpha LM_L}(R)$ 和径向波函数的渐近解, 进而得到跃迁矩阵元 $S_{\alpha LM_L; \alpha'L'M'_L}$, 以及弹性和非弹性截面:

$$\sigma_{\alpha \rightarrow \alpha'} = \frac{\pi}{k_\alpha^2} \sum_{LM_L} \sum_{L'M'_L} |\delta_{LL'} \delta_{M_L M'_L} \delta_{\alpha\alpha'} - S_{\alpha LM_L; \alpha'L'M'_L}|^2. \quad (8)$$

依据以上理论, 我们编写了包含外场条件的量子散射计算程序 [15,16], 计算了低能碰撞下体系的弹性和非弹性碰撞截面, 并比较它们的相对大小, 对感应冷却的可行性做出理论预期.

3 结果与讨论

图1所示为CO($^1\Sigma^+$)双原子分子的能级随电场的变化关系. 可以看到CO分子 $n=0$ 和 $n=1$ 的转动能级在电场中分裂为三个支能级, 其中能量随着电场强度的增大而减小的态被称为高场追索态, 能量随着电场强度的增大而增大的态被称为低场追索态. 按照作用力与电势能的关系: $\mathbf{F} = -\nabla V$, 处于低场追索态的分子所受的电场力总是指向电势阱的中心, 因此是可能被囚禁的, 也是实验上感兴趣的态, 图1中的 ($n=1, m_j=0$)态即是能量最低的低场追索态. 低场囚禁态 ($n=1, m_j=0$)在能量上高于 ($n=1, m_j=1$), ($n=1,$

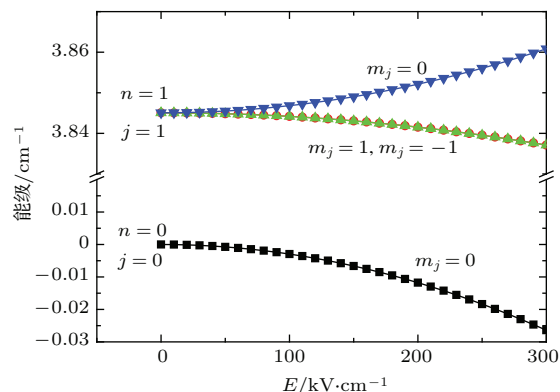


图1 CO($^1\Sigma^+$)双原子分子的本征能级随电场的变化
Fig. 1. Eigenenergies of the CO($^1\Sigma^+$) monomer Hamiltonian as a function of the applied electric field.

$m_j = -1$) 和 $(n = 0, m_j = 0)$ 的态, 到这些低能态的跃迁, 形成了非弹性散射, 而到其自身的散射跃迁则为弹性散射.

图2给出了四个不同电场下弹性截面随碰撞能变化的关系, 碰撞能的变化范围是 $(10^{-6} \text{ cm}^{-1} - 10 \text{ cm}^{-1})$. 不难发现整个区域内大部分的弹性截面与外电场是弱相关的, 不随电场的改变而发生大的变化. 但是当外电场 $E = 10 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ 时, 可以清晰看到在碰撞能 10^{-3} cm^{-1} 附近的位置有一强烈的共振结构, 随着电场强度的增加, 共振结构逐渐消失. 碰撞能小于 10^{-3} cm^{-1} 后碰撞截面趋于常数.

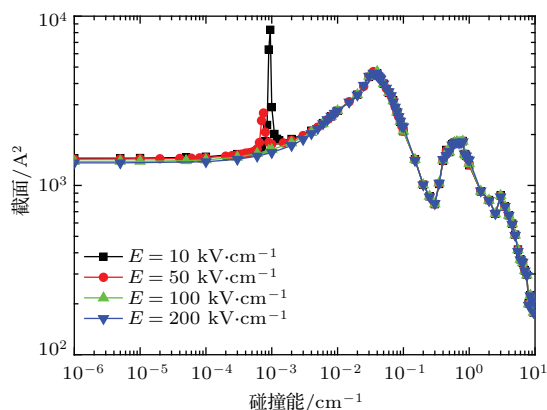


图2 (网刊彩色) 若干电场下 CO ($n = 1, m_j = 0$) 态的弹性截面随碰撞能的变化

Fig. 2. (color online) The elastic cross sections of CO ($n = 1, m_j = 0$) state as a function of collision energy with an applied electric field.

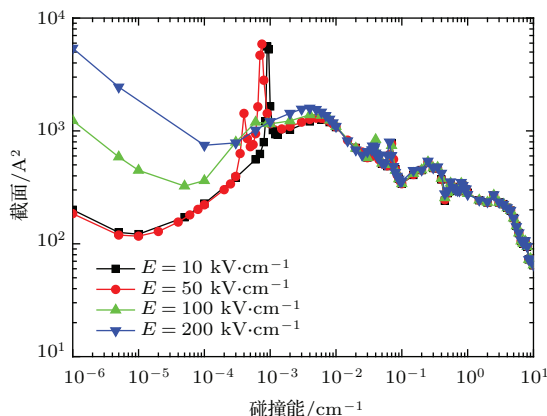


图3 (网刊彩色) 若干电场下 CO ($n = 1, m_j = 0$) 态的非弹性截面随碰撞能的变化

Fig. 3. (color online) The inelastic cross sections of CO ($n = 1, m_j = 0$) state as a function of collision energy with an applied electric field.

非弹性散射包含三个部分, 低场囚禁态 ($n = 1, m_j = 0$) 到三个低能态 ($n = 1, m_j = 1$), ($n = 1,$

$m_j = -1$) 和 $(n = 0, m_j = 0)$ 的散射跃迁, 对三个部分散射截面的求和, 即得到总的非弹性散射截面. 图3给出了 Mg 原子与 CO 分子碰撞体系在外电场下, 总的非弹性散射截面随碰撞能的变化关系. 在低碰撞能区域, 随外场的增加, 非弹性散射截面大体上呈现上扬趋势, 符合 Wigner 定则的预期, 但是在碰撞能较大的区域, 非弹性散射截面随外场的变化不再敏感.

为了更好地预测 Mg-CO 碰撞体系低能碰撞的特性, 图4给出 $10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ 四种碰撞能下, 总的非弹性散射截面随电场 ($E = 0 - 300 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$) 的变化关系. 可以看到, 当碰撞能为 10^{-3} cm^{-1} 时, 非弹性散射截面与外场是弱相关的, 仅在较弱电场 ($< 50 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$) 下略有下降. 随着碰撞能的降低, 非弹性截面随外场发生显著的变化, 在碰撞能为 10^{-6} cm^{-1} 时, 非弹性截面在弱电场 ($< 50 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$) 下略有下降之后, 伴随着电场的增加, 非弹性截面呈现出整体上扬的趋势, 特别在外电场为 $50 - 150 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ 范围内上扬趋势较为明显, 之后便趋于平稳. 总体上, 在外电场略小于 $50 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ 的位置, 非弹性截面处于最小值.

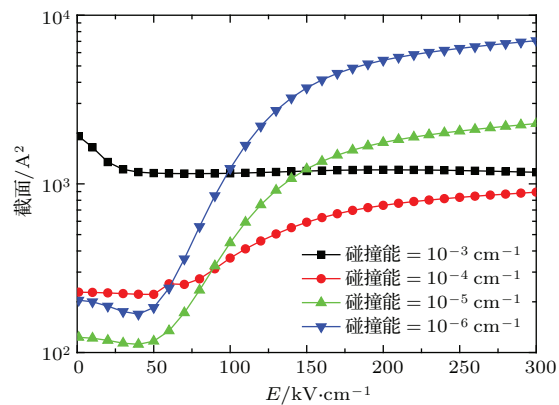


图4 (网刊彩色) 若干低能碰撞下 CO ($n = 1, m_j = 0$) 态的非弹性截面随电场的变化

Fig. 4. (color online) The inelastic cross sections of CO ($n = 1, m_j = 0$) state as a function of the applied electric field with different collision energies.

图5给出了在上述四种低碰撞能下, Mg-CO 碰撞体系弹性截面和非弹性截面的比率随外电场的变化趋势. 可以看到, 在低碰撞能以及低电场的情况下比率的值相对较大, 最大比率处于外电场略小于 $50 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ 的位置, 与图4的描述是对应的, 当外电场 $> 150 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ 时, 比率值并不随外电场的变化而发生明显的变化. 实验上, 感应冷却的顺

利实施一般要求弹性截面应比非弹性截面至少大两个量级. 从图5所示的计算结果看, 利用超冷Mg原子感应冷却预冷CO分子可能难以奏效.

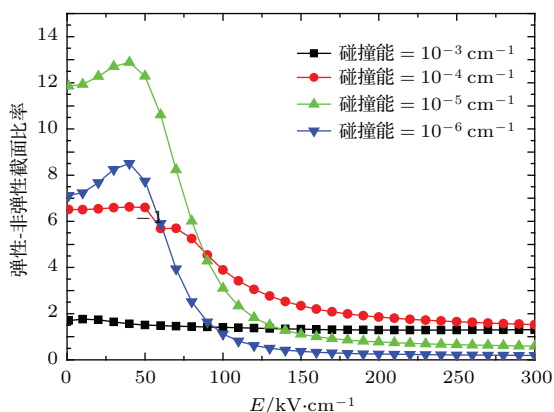


图5 (网刊彩色) 若干低能碰撞下CO ($n = 1, m_j = 0$) 态弹性截面和非弹性截面比率随外电场的变化

Fig. 5. (color online) Ratio of the cross sections for elastic scattering and inelastic relaxation of CO ($n = 1, m_j = 0$) state as a function of the applied electric field with different collision energies.

4 结 论

本文研究了电场条件下Mg-CO ($X^1\Sigma^+$) 体系的冷碰撞动力学性质, 计算了在低碰撞能 (10^{-6} — 10 cm^{-1}) 下, 外电场为0—300 $\text{kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ 范围内, 碰撞体系的弹性和非弹性碰撞截面, 探究了电场和碰撞能对碰撞体系弹性截面与非弹性截面比率的影响. 结果表明, 利用超冷Mg原子感应冷却预冷CO分子可能难以顺利实施. 能否感应冷却实验上已可预冷的开壳层分子, 如NH, CN, CaH等, 以及组合使用电磁场对碰撞过程进行调控, 是我们下一步的工作设想.

参考文献

- [1] Weinstein J D, deCarvalho R, Guillet T, Friedrich B, Doyle J M 1998 *Nature* **395** 148
- [2] van de Meerakker S Y T, Vanhaecke N, Meijer G 2006 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **57** 159
- [3] Tscherbul T V, Yu H G, Dalgarno A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 073201
- [4] Modugno G, Ferrari G, Roati G, Brecha R J, Simoni A, Inguscio M 2001 *Science* **294** 1320
- [5] Tacconi M, Bodo E, Gianturco F A 2007 *Phys. Rev. A* **75** 012708
- [6] Zuchowski P S, Hutson J M 2008 *Phys. Rev. A* **78** 022701
- [7] Hummon M T, Tscherbul T V, Klos J, Lu H I, Tsikata E, Campbell W C, Dalgarno A, Doyle J M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 053201
- [8] Magno W C, Filho R L C, Cruz F C 2003 *Phys. Rev. A* **67** 043407
- [9] Malossi N, Damkjaer S, Hansen P L, Jacobsen L B, Kindt L, Sauge S, Thomsen J W 2005 *Phys. Rev. A* **72** 051403
- [10] Mehlstäubler T E, Moldenhauer K, Riedmann M, Rehbein N, Friebe J, Rasel E M, Ertmer W 2008 *Phys. Rev. A* **77** 021402
- [11] Blokland J H, Riedel J, Putzke S, Sartakov B G, Groenenboom G C, Meijer G 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 114201
- [12] Han Y L, Li Z, Wang J H, Feng E Y, Huang W Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 093101 (in Chinese) [韩玉龙, 李真, 汪江洪, 凤尔银, 黄武英 2013 物理学报 **62** 093101]
- [13] Standard Reference Database is available from <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [14] Muentzer J S 1975 *J. Mol. Spectrosc.* **55** 490
- [15] Feng E Y, Yu C H, Sun C Y, Shao X, Huang W Y 2011 *Phys. Rev. A* **84** 062711
- [16] Xu X T, Shao X, Yu C H, Sun C Y, Huang W Y, Feng E Y 2011 *Eur. J. Phys. D* **65** 383

Collision dynamic behaviors of CO($X^1\Sigma^+$) molecule with Mg atom in cold and ultracold temperatures*

Han Yu-Long¹⁾²⁾ Zhang Kan²⁾ Feng Er-Yin^{1)†} Huang Wu-Ying¹⁾

1) (*College of Physics and Electronics Information, Anhui Normal University, Wuhu 241000, China*)

2) (*Mechanical and Electrical College, Anhui Polytechnic University, Wuhu 241003, China*)

(Received 9 September 2014; revised manuscript received 3 January 2015)

Abstract

Sympathetic cooling is one of the most promising techniques for producing ultracold molecules from precooled molecules. The previous work has shown that it is inadequate to use the ultracold alkali-metal atoms as coolant for sympathetic cooling. Whether the ultracold alkali-earth-metal atoms can be used as coolant deserves to be investigated. In this paper, the cold collision dynamic behaviors for Mg atom and CO molecule are investigated by quantum scattering calculations. The influences of electric field on the elastic and inelastic collision cross sections of low field seeking state within cold and ultracold temperature are explored. The results show that sympathetic cooling CO molecule with ultracold Mg atom might be difficult to perform.

Keywords: Mg-CO complex, cold collision, sympathetic cooling

PACS: 34.50.-s, 34.50.Cx, 31.15.xv

DOI: [10.7498/aps.64.103402](https://doi.org/10.7498/aps.64.103402)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11374014), and the Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant No. 1208085MA08).

† Corresponding author. E-mail: fengbf@mail.ahnu.edu.cn