

# 基于多能级速率方程的 CaH 分子 三维磁光囚禁模型\*

王月洋 尹俊豪 严康 林钦宁 庞仁君  
王泽森 杨涛<sup>†</sup> 印建平<sup>‡</sup>

(华东师范大学, 精密光谱科学与技术国家重点实验室, 上海 200062)

(2022 年 2 月 19 日收到; 2022 年 4 月 4 日收到修改稿)

分子激光冷却与磁光囚禁在超越标准模型的新物理与新机制探索、超冷化学与冷分子碰撞等诸多领域中有着广泛的应用前景. CaH 分子的某些态之间具有高度对角化的弗兰克-康登因子, 因此早在 2004 年就被提出作为激光冷却与磁光囚禁的候选分子之一. 利用速率方程并考虑双频效应的影响, 本文计算了  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  与  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中 CaH 分子磁光阱内阻尼力和囚禁力的大小, 分析了四频率组分和多频率组分激光设置下 CaH 分子磁光囚禁时的冷却和囚禁效果. 结果发现,  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中, CaH 分子在多频率组分激光设置下可获得更大的阻尼力和囚禁力, 从而有利于实现 CaH 分子磁光阱. 以上工作不仅证明了 CaH 分子磁光囚禁的可行性以及为实验探索提供了必要的理论支持, 同时也为超冷分子碰撞、极性冷分子 BEC、基于极性冷分子的精密测量物理 (如电子电偶极矩精密测量) 等奠定了重要的研究基础.

**关键词:** 冷分子, 激光冷却与磁光囚禁, CaH 分子

**PACS:** 37.10.Pq, 37.10.Mn, 32.60.+i

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220304

## 1 引言

近年来, 冷分子在基础物理常数精密测量、天体物理化学、超冷化学等方面都发挥了重要的作用, 成为当今科学研究的重点之一<sup>[1–3]</sup>. 实验上制备冷分子的主要方法分为间接和直接两种. 间接方法是指利用光缔合<sup>[4,5]</sup>或磁缔合方法<sup>[6]</sup>将两种冷原子结合成一种冷分子. 具体而言即是将多组分的超冷原子气体通过外加磁场或光场的方式缔合形成弱束缚态分子, 再用受激拉曼绝热路径 (STIRAP) 方法将分子转移到绝对基态. 通过这一方法得到的冷分子温度可达到 nK 量级, 而且相空间密度很高<sup>[7]</sup>.

但这种方法可以得到的冷分子的种类比较少, 目前只限于双碱分子如 RbCs<sup>[8]</sup>, NaK<sup>[9]</sup>和 KRb<sup>[6]</sup>等. 其中, KRb 冷分子样品最低温度可以达到 350 nK, 空间密度为  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , 对应的相空间密度为 0.1<sup>[6,10]</sup>. 直接方法是将通过各种方法 (激光消融、光解等) 产生的分子直接冷却, 主要包括 Stark 减速<sup>[11]</sup>、激光冷却<sup>[12]</sup>和缓冲气体冷却<sup>[13]</sup>等, 可应用在更多的分子上. 激光冷却方法是利用分子的某些电子态之间存在着较好的弗兰克-康登因子 (Franck-Condon factors, F-C 因子), 进而构造准闭合的跃迁冷却循环, 在近年来取得了重要的发展<sup>[14]</sup>. 而且, 迄今为止, 碱金属双原子分子  $^6\text{Li}_2$  分子<sup>[15]</sup>,  $^{40}\text{K}_2$  分子<sup>[16]</sup>和  $^{55}\text{Cs}_2$  分子<sup>[17]</sup>已经实现了玻色爱因斯坦凝聚

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11834003, 11874151) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: tyang@lps.ecnu.edu.cn

<sup>‡</sup> 通信作者. E-mail: jpyin@phy.ecnu.edu.cn

(BEC), 但上述的分子 BEC 寿命较短, 因此实现化学稳定的极性超冷分子的玻色-爱因斯坦凝聚还有待探索和研究. 激光冷却与磁光囚禁可将分子冷却到超冷温度以下, 由此为分子进一步进行 BEC 提供了条件.

2014 年, DeMille 研究组<sup>[12]</sup>首次实现了温度为 2.5 mK 的 SrF 冷分子三维磁光囚禁, 囚禁的分子数目约为 300 个. 之后两年, 其不断对磁光阱进行改进, 将阱中的分子数目提高到约  $10^4$  个, 温度为 250  $\mu$ K<sup>[18]</sup>. 2015 年, Tarbutt 和 Steimle<sup>[19]</sup>提出用速率方程来模拟分子磁光阱的理论模型, 并计算了 CaF 在磁光阱中的阻尼力与囚禁力. 2017 年, Hinds 研究组<sup>[20]</sup>在三维磁光囚禁的基础上, 把囚禁光切换到蓝失谐并关闭磁场以形成光学粘胶, 将 CaF 温度进一步冷却至 50  $\mu$ K, 从而突破了多普勒冷却极限. 同年, Doyle 研究组<sup>[21]</sup>也实现了 CaF 分子的 RF MOT, 并囚禁了约  $10^5$  个 CaF 分子. 2021 年, DeMille 研究组<sup>[22]</sup>将 SrF 分子装载进光学偶极阱中, 将 SrF 分子的温度降低至 14(1)  $\mu$ K, 囚禁寿命约 1 s. 对于 CaH 分子, 2011 年, Lu 等<sup>[23]</sup>利用缓冲气体冷却系统将 CaH 分子的前向速度减速至 65 m/s 并验证了其装载进磁光阱中的可行性. 2021 年, CaH 分子进行激光冷却的理论方案被提出, 同时也进一步延伸出 CaH 分子进行磁光囚禁的可能性<sup>[24]</sup>. 除了上述分子, YO<sup>[25]</sup>, BaH<sup>[26]</sup>, BaF<sup>[27]</sup>, MgF<sup>[28]</sup>, SrOH<sup>[29]</sup> 和 CaOH<sup>[30]</sup> 等分子也正在被应用在激光冷却与磁光囚禁方面的研究上. CaH, SrH 和 BaH 等碱土金属一氢化物 (alkaline-earth-metal monohydrides, AEMHs) 有着难以忽视的永久电偶极矩, 因此, 囚禁的极性冷分子可以进一步研究其偶极-偶极相互作用机制, 使得基于此机制的分子纠缠与量子计算成为可能<sup>[31]</sup>. 更有意思的是, 目前现有测量电子电偶极矩 (eEDM) 的极性冷分子体系 (ThO, HfF<sup>+</sup>) 无法通过分子激光冷却和磁光囚禁来提升相干测量时间进而提高其统计灵敏度; 而 YbF 等分子虽可被冷却然后用于 eEDM 精密测量, 但其用于测量的相反宇称能级的分裂很大, 实验中很难被完全极化且容易引入磁场相关的系统误差<sup>[32]</sup>. 研究表明, AEMHs 与其对应的碱土金属一氟化物 (alkaline-earth-metal monofluorides, AEMFs) 相比不仅具有类似的电子关联效应 (electron correlation effects), 而且 AEMHs 超精细能级结构相比

AEMFs 更为简单, 也更容易在较低的外电场下极化. 这些特性决定了 AEMHs 很可能是既能够被激光冷却和磁光囚禁, 又能够适合用于 eEDM 精密测量的特殊载体<sup>[31]</sup>.

另一方面, CaH 分子广泛存在于一些天体环境中, 例如太阳黑子、星际介质、星云等, 因此 CaH 分子光谱研究对天文学也具有十分重要的意义, 尤其是 CaH 分子  $A^2\Pi_{1/2}(v'=0) \leftarrow X^2\Sigma^+(v=0)$  跃迁的谱线强度常用于表征引力的大小<sup>[33–36]</sup>, 以及 CaH 低引力光谱可用来分析矮星光谱特征并作为年龄指标参考来研究其剩余寿命上限等等. 此外, CaH 作为一种顺磁分子, 可通过低温缓冲气体 ( $^3\text{He}$ ) 制备且其弱场搜寻态在外磁场限制下进行囚禁<sup>[37]</sup>; 其在缓冲气体  $^4\text{He}$  环境下与 Li 原子的低温化学反应碰撞呈现出无势垒碰撞反应的类似现象 (较大的反应速率等), 可用于揭示冷分子云等低温天体环境下星际分子的冷碰撞形成机制<sup>[38]</sup>.

CaH 分子有着较为简单的基态超精细能级结构, 较短的激发态寿命, 其  $X^2\Sigma^+$  和  $A^2\Pi_{1/2}$  以及  $X^2\Sigma^+$  和  $B^2\Sigma^+$  之间具有高度对角化的 F-C 因子, 具有激光冷却与磁光囚禁的基本特征<sup>[39]</sup>. 另外, 对于  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁, 虽然有一个中间态  $A^2\Pi_{1/2}$ , 但由于 A 态的寿命较短, B 态上的分子跃迁至 A 态后会很快再跃迁至 X 态, X 态的分子被激发可回到 B 态, 构成跃迁循环并且 A 态和 B 态都为正宇称, 存在禁戒跃迁, 发生跃迁的可能性不大, 因此这一中间态并不影响  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  准闭合跃迁循环的建立. 而且, CaH 分子 A 态与 B 态的饱和光强分别为 1.88 mW/cm<sup>2</sup> 与 1.40 mW/cm<sup>2</sup>, 相较于 CaF 分子的 4.87 mW/cm<sup>2</sup> 和 5.59 mW/cm<sup>2</sup>, CaH 的饱和光强更小, 因此其用于磁光囚禁所需要的激光器功率要求就更小. 同时, 与 CaF A 态朗德  $g$  因子 (−0.0211, 朗德  $g$  因子以下称  $g$  因子) 相比<sup>[40]</sup>, CaH 分子的 A 态  $g$  因子为 −0.034<sup>[41]</sup>, B 态  $g$  因子则为 1.000671, 而较高的  $g$  因子更有助于提高对激光束的选择性, 从而获得较大的囚禁力. 另外, 两个跃迁的波长在可见光范围内 (A $\leftarrow$ X 为 692.996 nm, B $\leftarrow$ X 为 635.259 nm), 相应波段的激光器也较易获得, 因此有必要对两个跃迁过程中的磁光囚禁力进行模拟计算. 虽然已有很多工作对 CaH 分子的激光冷却进行了详细的研究, 但在磁光囚禁方面仍缺乏具体的理论探索<sup>[5,24,42,43]</sup>.

本文利用速率方程并考虑双频效应的影响, 计算了  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  与  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中, CaH 分子磁光阱内阻尼力和囚禁力的大小. 在考虑双频效应的情况下, 着重讨论了四频率组分激光的偏振组态、激光功率、激光失谐量对 CaH 分子磁光囚禁的影响, 以及新增一个频率组分时阻尼力和囚禁力的变化. 与 CaF 分子相比, CaH 分子  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中的阻尼力和囚禁力大小亦有一定优势<sup>[19]</sup>, 这在一定程度上证明了 CaH 分子磁光囚禁的可行性. 通过比较  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  和  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  两个跃迁阻尼力和囚禁力, 选择出更适合磁光囚禁的跃迁  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  以及相应的偏振组态、激光功率和失谐量. 以上研究结果不仅有助于对 CaH 磁光囚禁实验的进一步探索, 同时亦可启发 CaH 分子在基础物理常数精密测量、天体物理化学、超冷化学等方面的应用.

## 2 CaH 分子磁光阱模型

文中使用速率方程对 CaH 磁光囚禁这一过程进行模拟<sup>[44–46]</sup>. 在模拟中选择了 CaH 分子的  $X^2\Sigma^+$ ,  $A^2\Pi_{1/2}$  和  $B^2\Sigma^+$  这三个电子态, 上、下态的总角动量分别记为  $F_u$ ,  $F_l$ , 它们沿  $z$  轴分别分裂为  $M_u$ ,  $M_l$ . 同样地, 上、下态的  $g$  因子分别记为  $g_u$ ,  $g_l$ . 磁场是由一对反亥姆霍兹线圈来提供的, 其分布为  $\mathbf{B} = A(x\hat{x}, y\hat{y}, -2z\hat{z})$ ,  $A$  为  $xy$  平面内的磁场梯度, 模拟中设定  $A$  为 20 G/cm. 激光的束腰半径设置为 12 mm, CaH 分子与六束激光相互作用, 即分子在每个坐标轴上都受到传播方向相反、偏振相反的一对光的作用, 其中将分子“推进”磁光阱的中心的这束光为回复光, 对分子的力为回复力; 与之相反的, 将分子“推出”磁光阱的中心的为反回复光, 对分子的力为反回复力. 同时, 模拟中激光束的  $\sigma^\pm$  偏振组态分别激发  $\Delta M_F = \pm 1$  的跃迁.

图 1 给出了 CaH 分子基态  $X^2\Sigma^+$  ( $v=0, N=1$ ) 在磁场作用下的塞曼分裂.  $X^2\Sigma^+$  电子态的角动量耦合方式符合洪特情况 (b) 即电子自旋角动量  $S$  与转动角动量  $N$  耦合形成角动量  $J$ ,  $J$  与核自旋  $I=1/2$  耦合形成总角动量  $F$ . 因此,  $X^2\Sigma^+$  ( $v=0, N=1$ ) 最终分裂为以  $F$  为标记的四个超精细能级. 同时, 在磁场的作用下, 这四个超精细能级会继续分裂为相对应的 12 个磁子能级. 图 1 中括号内

的数字分别对应各个超精细能级的  $g$  因子. 在弱磁场条件下, 塞曼分裂是线性的, 且各磁子能级间也没有交叉. 在本文的模拟过程中, 12 个磁子能级都将被考虑在内.

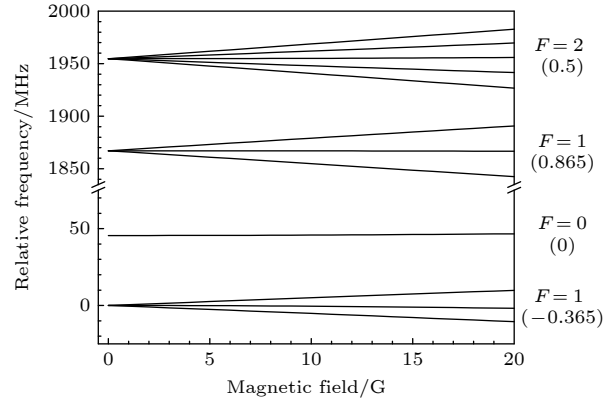


图 1 CaH 分子  $X^2\Sigma^+$  ( $v=0, N=1$ ) 电子态的塞曼分裂示意图.  $F$  表示总角动量, 括号里的数字是每一个超精细能级的  $g$  因子值

Fig. 1. The Zeeman level structure for the  $X^2\Sigma^+$  ( $v=0, N=1$ ) state of the CaH molecule.  $F$  represents the total angular momentum, while numbers in parentheses indicate the  $g$  factor for each hyperfine energy level.

## 3 双频效应

双频效应是指参与跃迁循环的子能级同时被两种偏振态与失谐量均不同的光覆盖, 从而避免出现暗态使光学泵浦停止的情况, 确保光学泵浦始终处在最佳状态. 双频效应对磁光囚禁的结果有着比较大的影响, 因此在模拟过程中需要考虑到双频效应<sup>[46]</sup>.

如图 2(a) 中所示, 考虑一个简单的下态  $F_l=2$ ,  $g_l=0.5$  到上态  $F_u=1$ ,  $g_u=0$  的能级跃迁系统, 被两种偏振相反的光同时作用, 一束光失谐量为  $\delta_1$ , 另一束光失谐量为  $\delta_2$ . 除此之外, 整个计算过程中所用到的波长、质量、自发辐射率和塞曼分裂均按 CaH 分子相关参数来设置. 分子和六束正交光相互作用, 每一束光中都包含了两个频率组分, 将每一种频率组分的光功率设为 40 mW. 计算中, 首先设置  $\delta_1$  的值为  $-F$  不变但改变  $\delta_2$  的值, 进而查看磁光阱的效果.

磁光囚禁力的表示方法为: 计算静止分子在不同位移  $z$  下的加速度, 或者计算处于原点处的分子在不同速度下的加速度. 当速度和位移比较小时, 总体加速度用公式  $a_z = -\omega_z^2 z - \beta v_z$  来表示, 其中,



$\omega_z/2\pi$  是囚禁频率,  $\beta$  是阻尼系数.

图 2(b) 中显示了囚禁频率随着失谐量  $\delta_2$  的变化关系. 从图中可以看出, 当  $\delta_2$  为正, 也即当一束频率分量是红失谐, 另一频率分量是蓝失谐时, 回复力较大, 即当  $M_1$  为正时, 由于塞曼分裂, 分子将更容易和红失谐的光共振, 此时红失谐的光为回复光, 驱动  $\Delta M_F = -1$  的跃迁; 反之, 当  $M_1$  为负时, 由于塞曼分裂, 分子将更容易和蓝失谐的光共振, 此时蓝失谐的光为回复光, 驱动  $\Delta M_F = +1$  跃迁. 由此在两种情况下分子均会优先和回复光相互作用

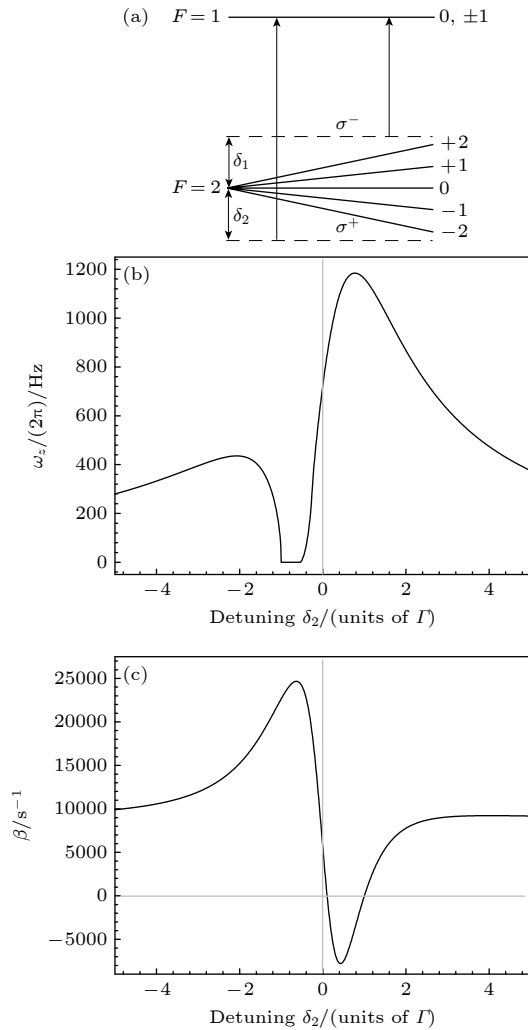


图 2 (a) 双频效应原理图. 基态能级  $F_1 = 2$ ,  $g_1 = 0.5$ , 激发态能级  $F_u = 1$ ,  $g_u = 0$ . 不同偏振的频率分量激发同一能级, 失谐量分别是  $\delta_1$  和  $\delta_2$ . (b) 囚禁频率与失谐量  $\delta_2$  的曲线图; (c) 阻尼系数与失谐量  $\delta_2$  的曲线图

Fig. 2. (a) Illustration of the dual-frequency effect with the ground energy level  $F_1 = 2$ ,  $g_1 = 0.5$  and the excited energy level  $F_u = 1$ ,  $g_u = 0$ . Two transitions with oppositely polarized frequency components were driven, while the detunings are  $\delta_1$  and  $\delta_2$  respectively. (b) Trap frequency versus  $\delta_2$ ; (c) Damping coefficient versus  $\delta_2$ .

用, 呈囚禁效果; 在失谐量  $\delta_2$  约为  $\Gamma$  时, 回复力达到最大. 同时, 在失谐量  $\delta_2$  约为  $-\Gamma$  到  $-0.4\Gamma$  之间时, 系统更倾向于被反回复光驱动, 没有囚禁效果. 而在失谐量  $\delta_2$  小于  $-\Gamma$  时, 有一定大小的回复力, 整体呈现出囚禁效果.

图 2(c) 显示了阻尼系数  $\beta$  关于失谐量  $\delta_2$  的变化关系曲线. 当  $\delta_2$  为负时, 两个频率都是红失谐的, 冷却效果一直存在. 而当  $0.1\Gamma < \delta_2 < \Gamma$  时, 蓝失谐分量相比红失谐分量更加接近共振, 分子被反回复光驱动, 远离阱中心, 此时是加热效果; 当  $\delta_2 > \Gamma$  时, 红失谐分量更加接近共振, 分子再次开始被冷却.

#### 4 磁光阱中的阻尼力与囚禁力

选择  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  和  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  这两个跃迁来模拟 CaH 分子磁光阱.  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  这一跃迁的主要参数包括: 波长  $\lambda = 692.996$  nm, 自发辐射率  $\Gamma = 2\pi \times 4.79$  MHz.  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  这一跃迁的主要参数包括: 波长  $\lambda = 635.259$  nm, 自发辐射率  $\Gamma = 2\pi \times 2.74$  MHz [47]. 在图 3 的跃迁能级结构中, 基态的超精细能级间隔均大于 CaH 分子的自然线宽, 因此, 每一个超精细能级都需要一个频率的激光来覆盖, 如图 3 中  $f_1, f_2, f_3$  和  $f_4$  所示. 由于双频效应的存在, 实际计算中每一个频率的光对所有的能级均有作用. 为了简化计算, 所有的频率组分共用一个失谐量. 同时, A 态的  $F_u = 0$  和  $F_u = 1$  之间的能级间隔为 17 MHz [5], B 态的  $F_u = 0$  和  $F_u = 1$  之间的能级间隔通过文献中的方法计算可得为 9.3 MHz [48,49].

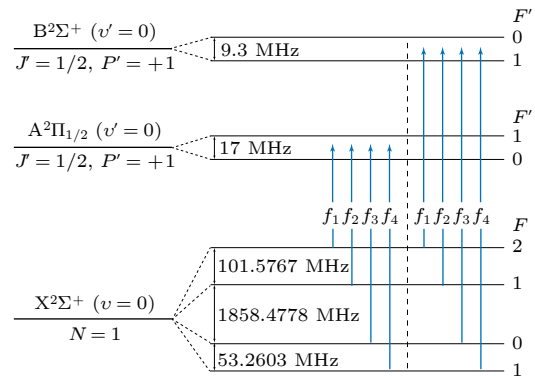


图 3 CaH 分子 MOT 中  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  和  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁的频率分布方案

Fig. 3. Frequency distribution schemes for  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  and  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  transitions in a MOT of CaH.

不同的偏振组态、激光功率和失谐量对于磁光阱的结果影响很大, 根据上述的方法, 本文对于偏振组态、激光功率和失谐量的选择进行了计算. 考虑到实验中激光器功率的限制, 模拟激光功率设置为 5, 15, 40, 80, 100 以及 150 mW. 对于四个频率组分, 总共有 12 种不同的偏振组合, 本文中着重展示效果较好的偏振组态得到的结果. 同时, 为了计算方便, 文中每一束激光频率所对应的  $\sigma^\pm$  偏

振表示为  $(\pm)$ .

#### 4.1 $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$ 跃迁

在四频率组分激光设置下,  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  (0, 0) 跃迁得到的结果如图 4 所示. 图 4(a) 显示了  $(-+++)$ ,  $(-++-)$ ,  $(-+-+)$  和  $(-+--)$  这四种偏振组态所得到的阻尼力都较大, 在 0—30 m/s 速度范围内均呈现出了不同程度的冷却效果. 并且,

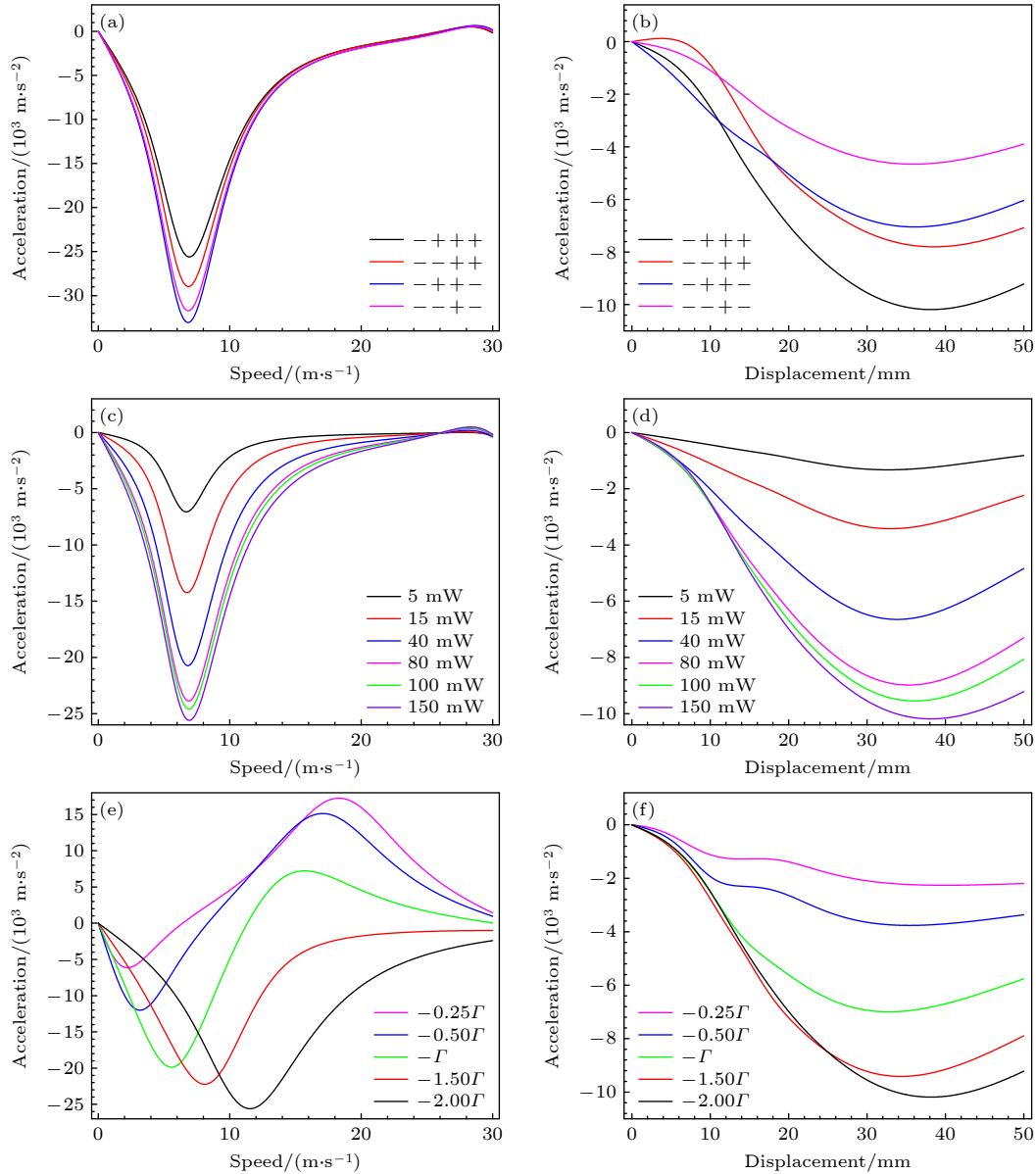


图 4 不同偏振组态下的加速度与 (a) 速度和 (b) 位移的关系图. 其中激光功率均为 150 mW, 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同激光功率下的加速度与 (c) 速度和 (d) 位移关系图. 其中频率组分的偏振组态为  $(-+++)$ , 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同失谐量下的加速度与 (e) 速度和 (f) 位移关系图. 其中激光功率均为 150 mW, 频率组分的偏振组态为  $(-+++)$ .

Fig. 4. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement under different polarization configurations where the power for lasers is set to be 150 mW and the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (c) speed and (d) displacement on different laser powers. The polarization configuration is  $(-+++)$ , while the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (e) speed and (f) displacement on various detunings, where the laser power is set as 150 mW and the polarization configuration is  $(-+++)$ .

随着速度的增大, 阻尼力先增大后减小, 在速度为约 7 m/s 时达到最大. 图 4(b) 中, 四种偏振组态得到的囚禁力整体上逐渐增大, 并在约 35 mm 处时达到最大, 其中,  $(-+++)$  这种偏振组态得到的囚禁力的峰值更大, 更有助于囚禁分子.

图 4(c) 和图 4(d) 中显示了加速度对激光功率的依赖关系. 从图 4(c) 中看出, 随着激光功率的增大, 阻尼力逐渐增大, 在激光功率为 150 mW 时, 阻尼加速度的峰值超过了 25000 m/s<sup>2</sup>, 达到最大. 此外, 从图 4(d) 中可看出, 囚禁力亦随着激光的增大而增大, 而且囚禁加速度都为负, 即受到指向阱中心的力, 有囚禁效果. 当激光功率达到 150 mW 时, 囚禁力峰值达到最大, 约为 10000 m/s<sup>2</sup>, 呈现出更大的囚禁效果.

图 4(e) 和图 4(f) 为激光失谐量对力的影响. 从图 4(e) 可见, 随着激光失谐量的增大, 阻尼力随之增大, 在失谐量为  $-2\Gamma$  时, 阻尼力峰值达到最大. 在失谐量为  $-0.25\Gamma$ ,  $-0.5\Gamma$  和  $-\Gamma$  时, 随着速度的增大, 系统先冷却后加热. 在失谐量为  $-1.5\Gamma$  和  $-2\Gamma$  时, 系统一直呈现出冷却效果. 从图 4(e) 可见, 而对于囚禁力, 随着失谐量的增大, 囚禁力也在不断地增大. 当失谐量为  $-2\Gamma$  时, 囚禁力峰值达到最大.

根据上文内容, 再进一步分析双频效应对于阻尼力与囚禁力的影响. 从图 2 可以看到, 当一个激光频率为红失谐, 另一个激光频率为蓝失谐时, 阻尼力和囚禁力均相对较强. 因此, 可以在四频率组分的基础上, 再加一个频率分量, 构成多频率组分, 并使这个额外的频率分量与原来的频率分量偏振方向相反, 形成一个双频效应的组合, 以期得到更

好的结果. 对于 CaH 分子的四个超精细能级而言,  $F_1 = 0$  这一超精细能级没有塞曼分裂, 即使再加一个频率分量也并不会对结果产生任何增益, 因此并不适合在  $F_1 = 0$  这一超精细能级上再添加一个频率分量. 而其余三个超精细能级都有塞曼分裂, 并且它们与相邻的超精细能级之间的间隔都大于自然线宽, 实验中容易分辨, 较为适合再加一个激光频率, 构成双频效应. 经过计算, 对于偏振组态  $(-+++)$ , 可以在  $F_1 = 2$  这一超精细能级上再额外添加一个失谐量为  $\Gamma$ , 偏振方向为  $\sigma^+$  的激光频率, 构成了  $(-++++)$  这一偏振组态. 图 5 中给出在这一偏振组态下, 当激光功率为 150 mW 时, 阻尼力和囚禁力与速度和位移的关系图. 从图 5 中可以看出, 在  $(-++++)$  这一偏振组态下, 阻尼加速度的峰值可以达到 28000 m/s<sup>2</sup>, 相比  $(-+++)$  这一偏振组态, 阻尼加速度的峰值有一定提升, 囚禁加速度峰值达到 19000 m/s<sup>2</sup>, 这个值比  $(-+++)$  这一偏振组态得到的囚禁加速度的峰值大了近一倍. 由此可见, 对于  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁, 再加一个频率对于囚禁力的提升更大. 另外, 参考 CaF 的 MOT 实验中选取的激光功率<sup>[50]</sup> 以及图 4 的结果, 附图 A1—附图 A4 给出了激光功率为 40 mW 和 80 mW 时阻尼力与囚禁力的详细内容以供参考.

#### 4.2 $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$ 跃迁

在四频率组分激光设置下,  $B^{2+} \leftarrow X^{2+}(0,0)$  这一跃迁的相关计算结果如图 6 所示. 从图 6(a) 可以看出,  $(+++-)$ ,  $(++--)$ ,  $(+---)$  和  $(++++)$

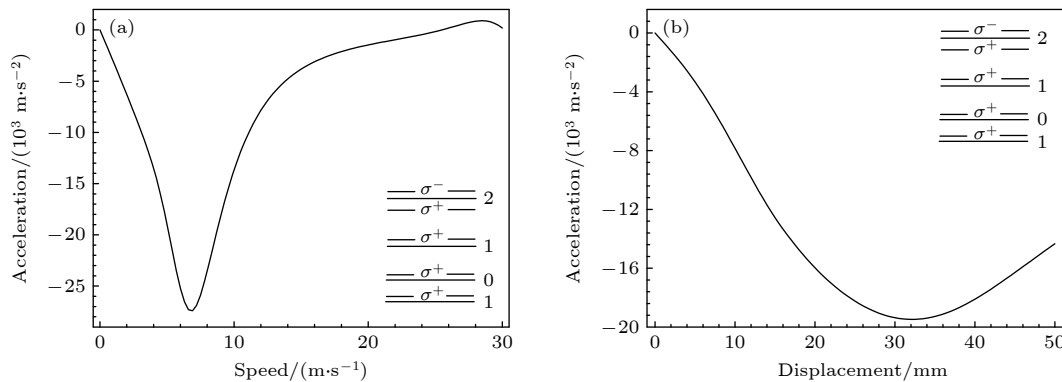


图 5 加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 激光频率偏振设置为插图所示的情况, 其中激光功率均为 150 mW. 除了额外加的频率失谐是  $\Gamma$ , 其他频率分量失谐都是  $-2\Gamma$

Fig. 5. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement using the set of detunings and polarizations illustrated in the inset. Here, the laser power is set to be 150 mW. The detuning is  $-2\Gamma$  apart from the additional component of  $\Gamma$ .

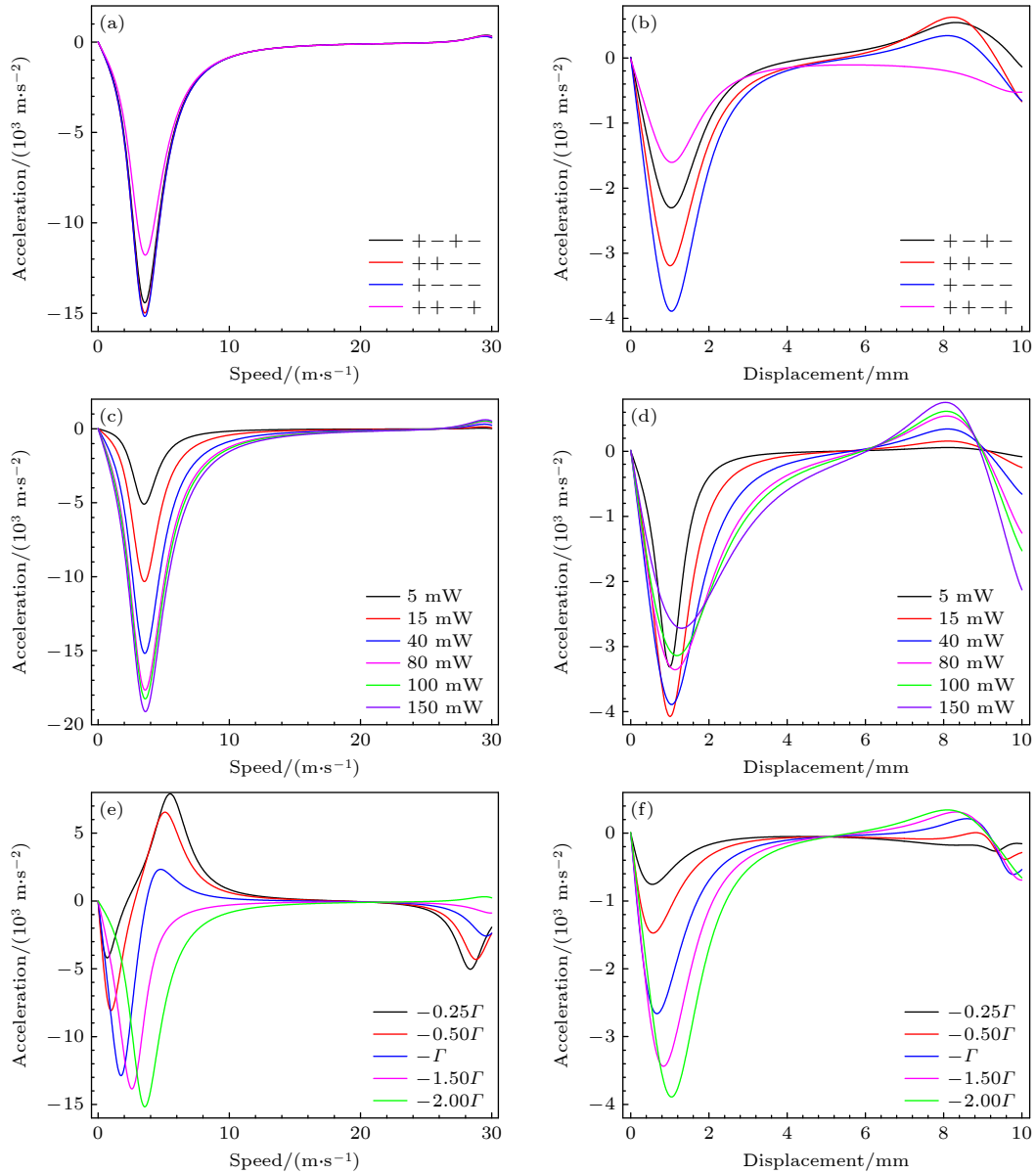


图 6 不同偏振组态下的加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 其中激光功率均为 40 mW, 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同功率下的加速度与 (c) 和速度 (d) 位移关系图. 其中偏振组态为 (+---), 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同失谐量下的加速度与 (e) 速度和 (f) 位移关系图. 其中激光功率均为 40 mW, 偏振组态为 (+---).

Fig. 6. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement under different polarization configurations where the power for lasers is set to be 40 mW and the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (c) speed and (d) displacement on different laser powers. The polarization configuration is (+---), while the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (e) speed and (f) displacement on various detunings, where the laser power is set as 40 mW and the polarization configuration is (+---).

这几种偏振组态所得到的阻尼加速度的峰值超过了  $12,000 \text{ m/s}^2$ , 其中 (+---) 这一偏振组态下的阻尼力峰值最大. 图 6(b) 显示出, 在偏振组态为 (++-), (++-) 和 (+---) 时, 分子位移在 0—5 mm 时囚禁力为负, 分子受到方向指向阱中心的力, 具有囚禁效果; 分子位移在 5—10 mm 时, 分子受到方向指向阱外的力, 没有囚禁效果. 其中 (+---) 这一偏振组态下的囚禁力峰值最大.

图 6(c) 和图 6(d) 中显示了加速度对激光功率的依赖关系. 随着激光功率的增大, 阻尼力也随之增大, 冷却效果更明显. 在激光功率为 150 mW 时, 阻尼力峰值最大. 此外, 激光功率对于囚禁力的大小也有着一定的影响. 随着功率的增大, 囚禁力的变化并不显著. 当激光功率达到 15 mW 时, 囚禁力的峰值达到最大, 囚禁效果相对较好. 综合不同功率下阻尼力与囚禁力的结果, 在四频率组分激光

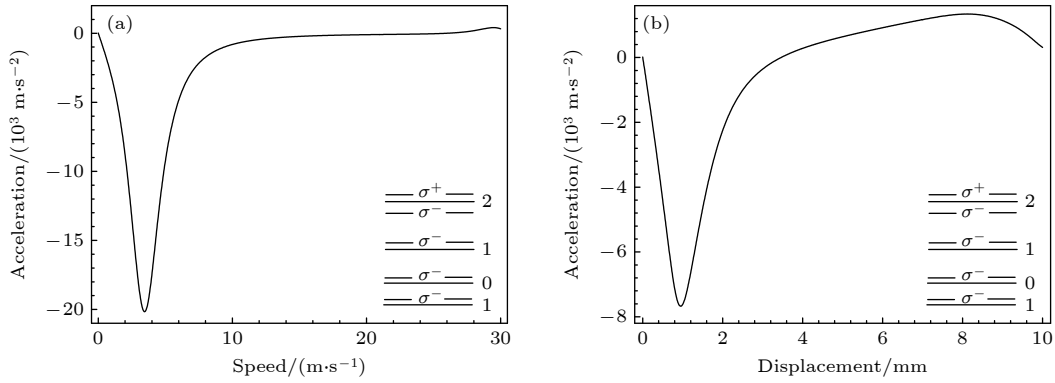


图 7 加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 激光频率偏振设置为插图中所示的情况, 其中激光功率均为 40 mW. 除了额外加的频率失谐是  $1.5\Gamma$ , 其他频率分量失谐都是  $-2\Gamma$

Fig. 7. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement using the set of detunings and polarizations illustrated in the inset. Here, the laser power is set to be 40 mW. The detuning is  $-2\Gamma$  apart from the additional component of  $1.5\Gamma$ .

设置下, 40 mW 同时有较大的阻尼力和囚禁力, 是一个不错的选择.

接着考虑激光失谐量对磁光囚禁力的影响. 图 6(e) 显示了, 随着激光失谐量的增大, 阻尼力的峰值逐渐增大, 阻尼力的峰值对应的速度也随之增大. 当激光失谐量为  $-2\Gamma$  时, 阻尼力的峰值最大, 冷却效果最明显. 图 6(f) 表明, 整体而言, 随着失谐量的增大, 囚禁力的峰值也在不断地增大, 在靠近磁光阱中心处达到最大. 当激光失谐量为  $-2\Gamma$  时, 囚禁力的峰值达到最大, 有较好的囚禁效果.

同样双频效应对  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  这一跃迁的阻尼力与囚禁力也有一定的影响, 经过计算, 对于频率组分 (+——), 可以在  $F_1 = 2$  这一超精细能级上再额外添加一个失谐量为  $1.5\Gamma$ , 偏振方向为  $\sigma^-$  的激光频率, 构成 (+——) 这一偏振组态. 图 7 中给出了在这一偏振组态下, 当激光功率为 40 mW, 失谐量为  $-2\Gamma$  时, 阻尼力和囚禁力的曲线图, 插图为具体的激光频率偏振情况. 从图中可得, 在 (+——) 这一偏振组态下, 阻尼力的峰值增加约  $5000 \text{ m/s}^2$ , 囚禁加速度的峰值相比之前增大了几乎一倍, 达到约  $7900 \text{ m/s}^2$ , 这对于磁光囚禁的提升是非常大的. 可以看出, 再加一个频率的激光, 即偏振组态为 (+——) 可以提供相对较大的阻尼力和囚禁力, 更有利于磁光囚禁的进行. 另外, 参考 CaF 的 MOT 实验中选取的激光功率<sup>[50]</sup> 以及图 6 的结果, 附图 A5—附图 A8 给出了激光功率为 15 mW 和 80 mW 时阻尼力与囚禁力的变化以供参考.

## 5 总 结

本文以 CaH 分子为研究对象进行磁光囚禁的基本模型构建, 并依据速率方程模拟计算了 CaH 分子在  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  和  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  这两种跃迁下的阻尼力与囚禁力. 同时在考虑双频效应的基础上, 讨论了四频率组分和多频率组分激光设置下不同激光偏振组态、激光功率以及激光失谐量对于 CaH 分子磁光囚禁的影响. 并依据四频率组分激光设置下的结果, 计算了两个跃迁下多频率组分激光设置下的阻尼力与囚禁力.  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁下的阻尼力与囚禁力大小均优于  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁, 尤其是  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁下的囚禁力远大于  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁, 并且再加一个频率组分后其阻尼力与囚禁力有较大的提升. 因此, 多频率组分激光设置下的  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  这一跃迁, 更适合用来实现 CaH 分子磁光阱. 同时, 从理论计算上给出的不同条件下 CaH 分子的阻尼力与囚禁力, 对于之后进行 CaH 分子磁光囚禁实验有重要的理论参考作用. 有关 CaH 分子磁光囚禁的理论工作, 也可作为 SrH 和 BaH 分子相关磁光囚禁理论与实验, 以及基于激光冷却与磁光囚禁状态下 AEMH 分子的 eEDM 精密测量提供借鉴, 进一步开拓了实验探索 CP 对称性破缺等超越标准模型外的新物理与新机制的研究思路.

## 附 录



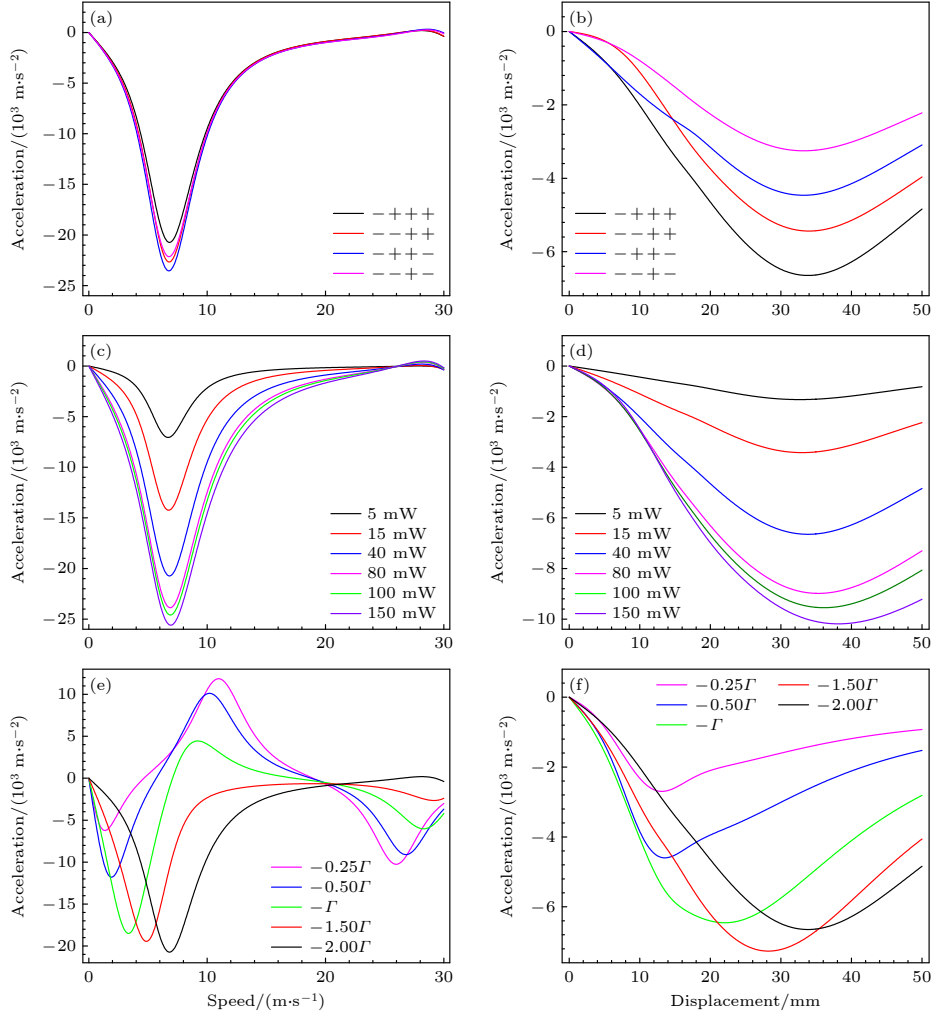


图 A1  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中不同偏振组态下的加速度与 (a) 速度和 (b) 位移的关系图. 其中激光功率均为 40 mW, 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同激光功率下的加速度与 (c) 速度和 (d) 位移关系图. 其中四个频率组分的偏振组态为  $(-+++)$ , 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同失谐量下的加速度与 (e) 速度和 (f) 位移关系图. 其中激光功率均为 40 mW, 频率组分的偏振组态为  $(-+++)$

Fig. A1. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement under different polarization configurations in the  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  transition, where the power for lasers is set to be 40 mW and the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (c) speed and (d) displacement on different laser powers. The polarization configuration is  $(-+++)$ , while the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (e) speed and (f) displacement on various detunings, where the laser power is set as 40 mW and the polarization configuration is  $(-+++)$ .

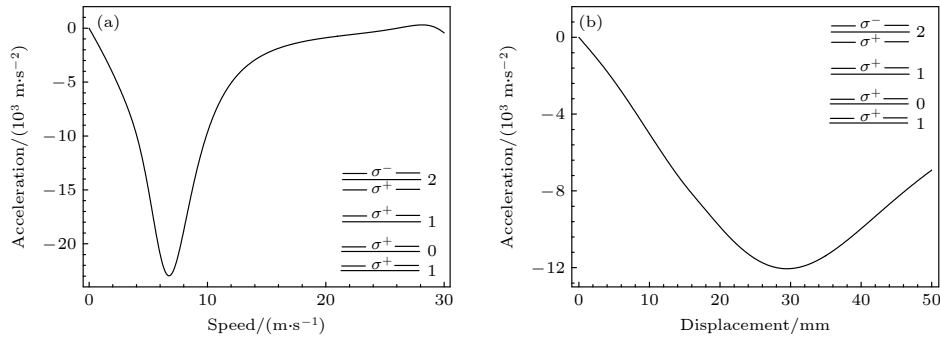


图 A2  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 激光频率偏振设置为插图所示的情况, 其中激光功率均为 40 mW. 除了额外加的频率失谐是  $\Gamma$ , 其他频率分量失谐都是  $-2\Gamma$

Fig. A2. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement in the  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  transition, using the set of detunings and polarizations illustrated in the inset. Here, the laser power is set to be 40 mW. The detuning is  $-2\Gamma$  apart from the additional component of  $\Gamma$ .

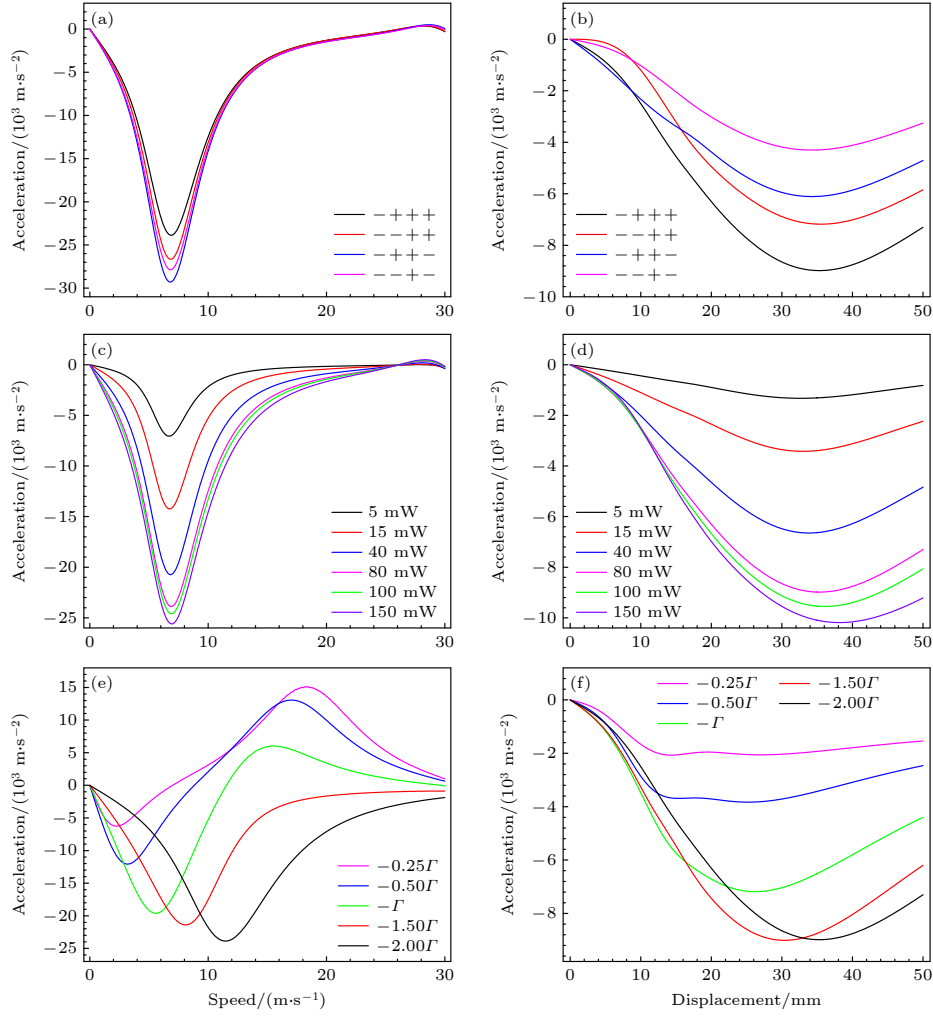


图 A3  $\text{A}^2\Pi_{1/2} \leftarrow \text{X}^2\Sigma^+$  跃迁中不同偏振组态下, 加速度与 (a) 速度和 (b) 位移的关系图. 其中激光功率均为 80 mW, 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同激光功率下的加速度与 (c) 速度和 (d) 位移关系图. 其中频率组分的偏振组态为  $(-+++)$ , 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同失谐量下的加速度与 (e) 速度和 (f) 位移关系图. 其中激光功率均为 80 mW, 频率组分的偏振组态为  $(-+++)$

Fig. A3. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement under different polarization configurations in the  $\text{A}^2\Pi_{1/2} \leftarrow \text{X}^2\Sigma^+$  transition, where the power for lasers is set to be 80 mW and the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (c) speed and (d) displacement on different laser powers. The polarization configuration is  $(-+++)$ , while the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (e) speed and (f) displacement on various detunings, where the laser power is set as 80 mW and the polarization configuration is  $(-+++)$ .

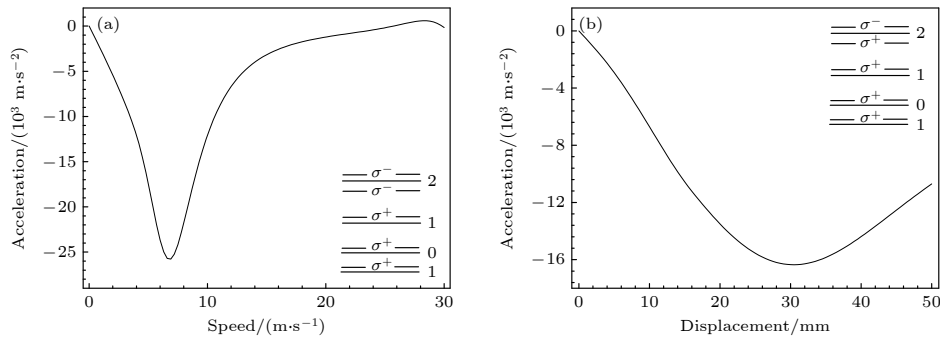


图 A4  $\text{A}^2\Pi_{1/2} \leftarrow \text{X}^2\Sigma^+$  跃迁中加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 激光频率偏振设置为插图中所示的情况, 其中激光功率均为 80 mW. 除了额外加的频率失谐是  $\Gamma$ , 其他频率分量失谐都是  $-2\Gamma$

Fig. A4. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement in the  $\text{A}^2\Pi_{1/2} \leftarrow \text{X}^2\Sigma^+$  transition, using the set of detunings and polarizations illustrated in the inset. Here, the laser power is set to be 80 mW. The detuning is  $-2\Gamma$  apart from the additional component of  $\Gamma$ .

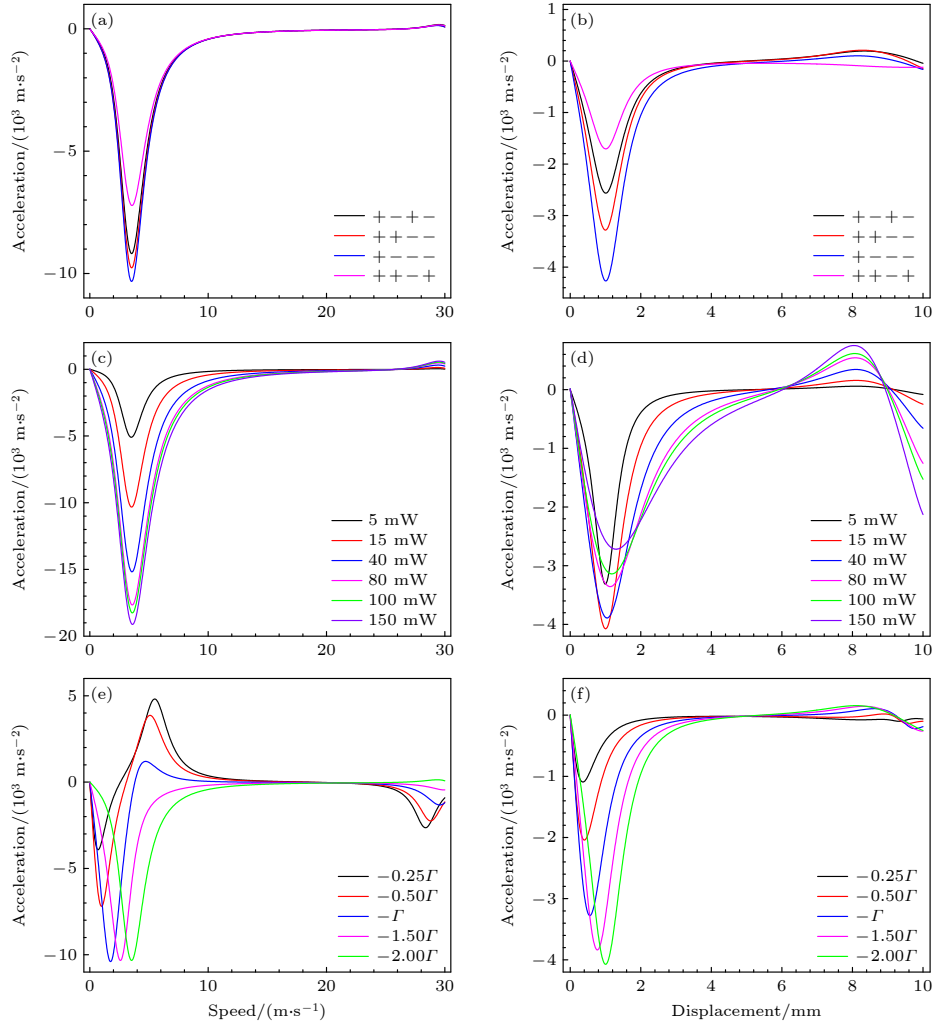


图 A5  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中不同偏振组态下的加速度与 (a) 速度和 (b) 位移的关系图. 其中激光功率均为 15 mW, 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同激光功率下的加速度与 (c) 速度和 (d) 位移关系图. 其中频率组分的偏振组态为 (+---), 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同失谐量下的加速度与 (e) 速度和 (f) 位移关系图. 其中激光功率均为 15 mW, 频率组分的偏振组态为 (+---)

Fig. A5. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement under different polarization configurations in the  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  transition, where the power for lasers is set to be 15 mW and the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (c) speed and (d) displacement on different laser powers. The polarization configuration is (+---), while the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (e) speed and (f) displacement on various detunings, where the laser power is set as 15 mW and the polarization configuration is (+---).

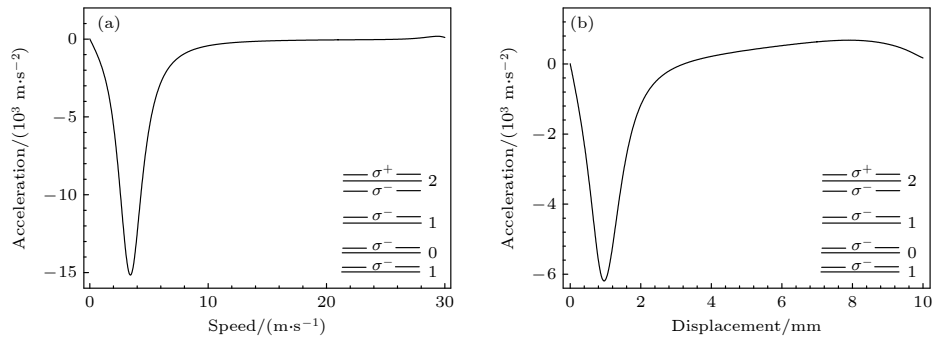


图 A6  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 激光频率偏振设置为插图中所示的情况, 其中激光功率均为 15 mW. 除了额外加的频率失谐是  $1.5\Gamma$ , 其他频率分量失谐都是  $-2\Gamma$

Fig. A6. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement in the  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  transition, using the set of detunings and polarizations illustrated in the inset. Here, the laser power is set to be 15 mW. The detuning is  $-2\Gamma$  apart from the additional component of  $1.5\Gamma$ .

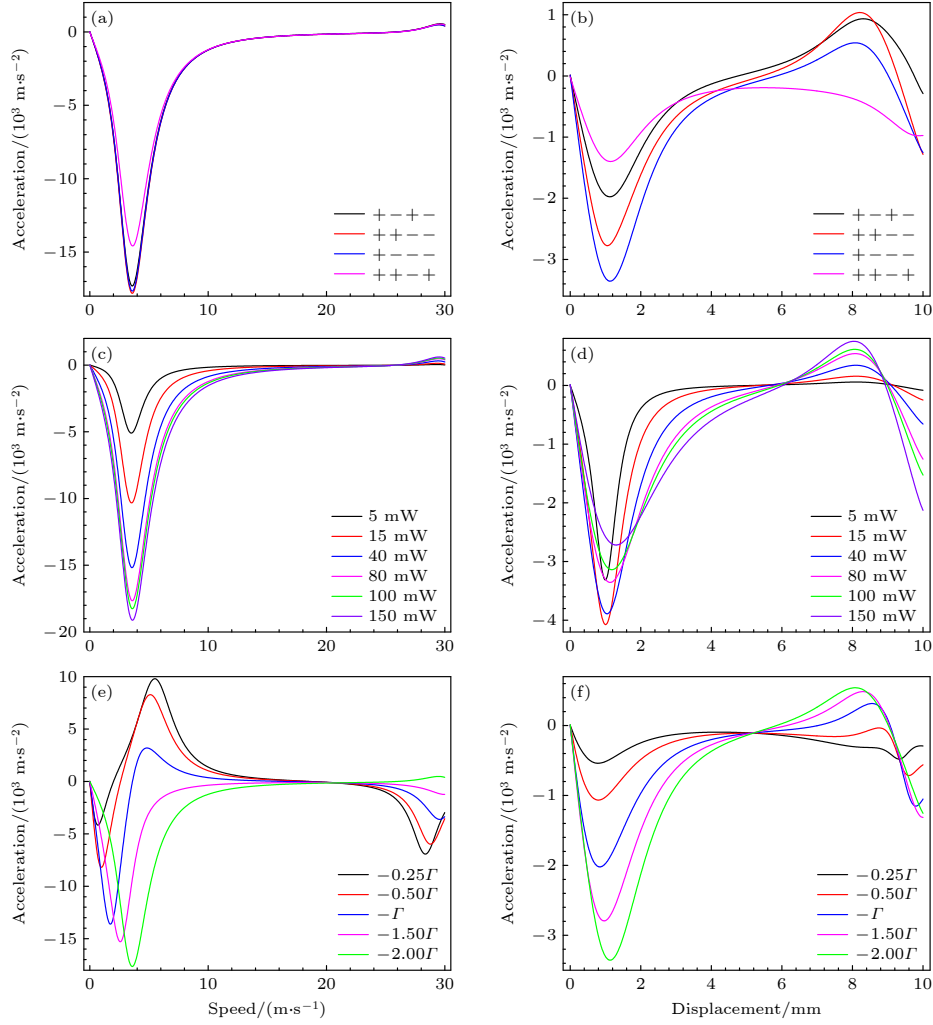


图 A7  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中不同偏振组态下的加速度与 (a) 速度和 (b) 位移的关系图. 其中激光功率均为 80 mW, 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同激光功率下的加速度与 (c) 速度和 (d) 位移关系图. 其中频率组分的偏振组态为 (+---), 失谐为  $-2\Gamma$ . 不同失谐量下的加速度与 (e) 速度和 (f) 位移关系图. 其中激光功率均为 80 mW, 频率组分的偏振组态为 (+---)

Fig. A7. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement under different polarization configurations in the  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  transition, where the power for lasers is set to be 80 mW and the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (c) speed and (d) displacement on different laser powers. The polarization configuration is (+---), while the detuning is  $-2\Gamma$ . Acceleration versus (e) speed and (f) displacement on various detunings, where the laser power is set as 80 mW and the polarization configuration is (+---).

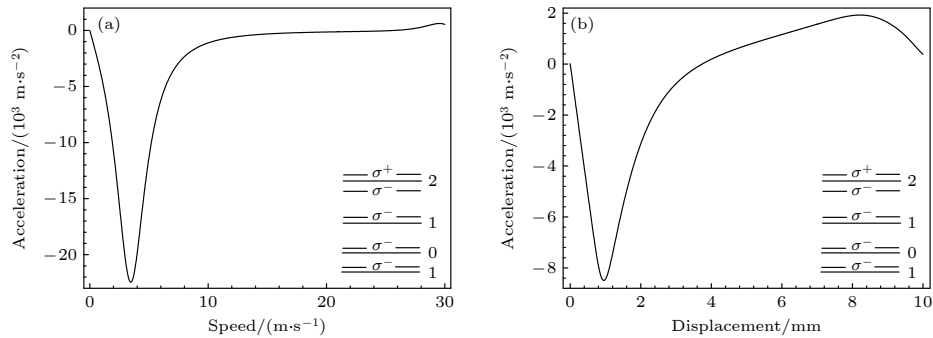


图 A8  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  跃迁中加速度与 (a) 速度和 (b) 位移关系图. 激光频率偏振设置为插图所示的情况, 其中激光功率均为 80 mW. 除了额外加的频率失谐是  $1.5\Gamma$ , 其他频率分量失谐都是  $-2\Gamma$

Fig. A8. Acceleration versus (a) speed and (b) displacement in the  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$  transition, using the set of detunings and polarizations illustrated in the inset. Here, the laser power is set to be 80 mW. The detuning is  $-2\Gamma$  apart from the additional component of  $1.5\Gamma$ .



## 参考文献

- [1] Hudson E R, Lewandowski H, Sawyer B C, Ye J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 143004
- [2] Liu L, Hood J, Yu Y, Zhang J, Hutzler N, Rosenband T, Ni K K 2018 *Science* **360** 900
- [3] Yang T, Thomas A M, Dangi B B, Kaiser R I, Mebel A M, Millar T J 2018 *Nat. Commun.* **9** 1
- [4] Kerman A J, Sage J M, Sainis S, Bergeman T, DeMille D 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 153001
- [5] Wang D, Qi J, Stone M, Nikolayeva O, Wang H, Hattaway B, Gensemer S, Gould P, Eyler E, Stwalley W 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 243005
- [6] Ni K K, Ospelkaus S, De Miranda M, Pe'er A, Neyenhuis B, Zirbel J, Kotochigova S, Julienne P, Jin D, Ye J 2008 *Science* **322** 231
- [7] Chen T, Yan B 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 043701 (in Chinese) [陈涛, 颜波 2019 物理学报 **68** 043701]
- [8] Bruzewicz C, Gustavsson M, Shimasaki T, DeMille D 2014 *New. J. Phys.* **16** 023018
- [9] Wu C H, Park J W, Ahmadi P, Will S, Zwierlein M W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 085301
- [10] Jin D S, Ye J 2011 *Phys. Today* **64** 27
- [11] Bethlem H L, Berden G, Meijer G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1558
- [12] Barry J, McCarron D, Norrgard E, Steinecker M, DeMille D 2014 *Nature* **512** 286
- [13] Weinstein J D, Decarvalho R, Amar K, Boca A, Odom B C, Friedrich B, Doyle J M 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 2656
- [14] Xia Y, Wang H L, Xu L, Yin J P 2018 *Acta Phys. Sin.* **47** 24 (in Chinese) [夏勇, 汪海玲, 许亮, 印建平 2018 物理学报 **47** 24]
- [15] Jochim S, Bartenstein M, Altmeyer A, Hendl G, Riedl S, Chin C, Hecker Denschlag J, Grimm R 2003 *Science* **302** 2101
- [16] Greiner M, Regal C A, Jin D S 2003 *Nature* **426** 537
- [17] Zhang Z, Chen L, Yao K X, Chin C 2021 *Nature* **592** 708
- [18] Steinecker M H, McCarron D J, Zhu Y, DeMille D 2016 *ChemPhysChem* **17** 3664
- [19] Tarbutt M, Steimle T 2015 *Phys. Rev. A* **92** 053401
- [20] Truppe S, Williams H, Hambach M, Caldwell L, Fitch N, Hinds E, Sauer B, Tarbutt M 2017 *Nat. Phys.* **13** 1173
- [21] Anderegg L, Augenbraun B L, Chae E, Hemmerling B, Hutzler N R, Ravi A, Collopy A, Ye J, Ketterle W, Doyle J M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 103201
- [22] Langin T K, Jorapur V, Zhu Y, Wang Q, DeMille D 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 163201
- [23] Lu H I, Rasmussen J, Wright M J, Patterson D, Doyle J M 2011 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 18986
- [24] Yin J H, Yang T, Yin J P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 163302 (in Chinese) [尹俊豪, 杨涛, 印建平 2021 物理学报 **70** 163302]
- [25] Collopy A L, Ding S, Wu Y, Finneran I A, Anderegg L, Augenbraun B L, Doyle J M, Ye J 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 213201
- [26] Iwata G, McNally R, Zelevinsky T 2017 *Phys. Rev. A* **96** 022509
- [27] Chen T, Bu W, Yan B 2017 *Phys. Rev. A* **96** 053401
- [28] Gu R, Xia M, Yan K, Wu D, Wei J, Xu L, Xia Y, Yin J 2022 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **278** 108015
- [29] Kozyryev I, Baum L, Matsuda K, Augenbraun B L, Anderegg L, Sedlack A P, Doyle J M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 173201
- [30] Baum L, Vilas N B, Hallas C, Augenbraun B L, Raval S, Mitra D, Doyle J M 2021 *Phys. Rev. A* **103** 043111
- [31] Fazil N, Prasanna V, Latha K, Abe M, Das B 2018 *Phys. Rev. A* **98** 032511
- [32] Kozyryev I, Hutzler N R 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 133002
- [33] Barbay B, Schiavon R, Gregorio-Hetem J, Singh P, Batalha C 1993 *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **101** 409
- [34] Lépine S, Rich R M, Shara M M 2003 *Astrophys. J.* **591** L49
- [35] Barclay Jr W, Anderson M, Ziurys L M 1993 *Astrophys. J.* **408** L65
- [36] Steimle T, Chen J, Gengler J 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 829
- [37] Weinstein J D, DeCarvalho R, Guillet T, Friedrich B, Doyle J M 1998 *Nature* **395** 148
- [38] Singh V, Hardman K S, Tariq N, Lu M J, Ellis A, Morrison M J, Weinstein J D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 203201
- [39] Ramanaiah M, Lakshman S 1982 *Physica* **113C** 263
- [40] Nakagawa J, Domaille P J, Steimle T C, Harris D O 1978 *J. Mol. Spectrosc.* **70** 374
- [41] Shayesteh A, Ram R S, Bernath P F 2013 *J. Mol. Spectrosc.* **288** 46
- [42] Gao Y, Gao T 2014 *Phys. Rev. A* **90** 052506
- [43] Chen J, Gengler J, Steimle T, Brown J M 2006 *Phys. Rev. A* **73** 012502
- [44] Barry J F, McCarron D J, Norrgard E B, Steinecker M H, DeMille D 2014 *Nature* **512** 286
- [45] Xu S, Xia M, Gu R, Yin Y, Xu L, Xia Y, Yin J 2019 *Phys. Rev. A* **99** 033408
- [46] Tarbutt M 2015 *New. J. Phys.* **17** 015007
- [47] Liu M, Pauchard T, Sjödin M, Launila O, van der Meulen P, Berg L E 2009 *J. Mol. Spectrosc.* **257** 105
- [48] Xu L, Yin Y, Wei B, Xia Y, Yin J 2016 *Phys. Rev. A* **93** 013408
- [49] Steimle T C, Meyer T P, Al-Ramadin Y, Bernath P 1987 *J. Mol. Spectrosc.* **125** 225
- [50] Williams H, Truppe S, Hambach M, Caldwell L, Fitch N, Hinds E, Sauer B, Tarbutt M 2017 *New. J. Phys.* **19** 113035

# Three-dimensional magneto-optical trapping model of CaH molecule based on multi-energy-level rate equation<sup>\*</sup>

Wang Yue-Yang   Yin Jun-Hao   Yan Kang   Lin Qin-Ning   Pang Ren-Jun

Wang Ze-Sen   Yang Tao<sup>†</sup>   Yin Jian-Ping<sup>‡</sup>

(State Key Laboratory of Precision Spectroscopy, East China Normal University, Shanghai 200062, China)

(Received 19 February 2022; revised manuscript received 4 April 2022)

## Abstract

Laser cooling and magneto-optical trapping of molecules is regarded as one of the state-of-the-art research fields in physics, which possesses broad applications in exploring fundamental physics beyond the Standard Model, quantum many-body physics, cold/ultracold chemistry and collision studies and so forth. Owing to the characteristic of highly diagonal Franck-Condon factors, lower saturation irradiance and larger scattering rate, the CaH molecule has been proposed as a promising candidate for laser cooling and magneto-optical trapping ever since 2004. Taking advantage of the multi-energy-level rate equation as well as the dual frequency effect, we evaluate the damping and trapping forces contained in the optical transitions of  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$  and  $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Sigma^+$ , analyze the cooling and trapping performance for different laser polarization sets, power values and detunings of four laser components, and determine the variations in the damping and trapping forces due to an additional frequency component. It is discovered that if the laser polarization is set to be  $\sigma^-\sigma^+\sigma^+\sigma^+$ , the detuning for the second laser component is  $\Gamma$  while the detuning of other components are set to be  $-2\Gamma$ , and the laser power is set to be 150 mW, one can obtain a damping acceleration of 28000 m/s<sup>2</sup>, and a trapping acceleration of 19000 m/s<sup>2</sup> for the transition of  $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Sigma^+$ , both of which reach the optimal values under the current scope of the research and exhibit better performance than the CaF molecule. Our results, on one hand, not only offer an ideal method to comprehend the CaH MOT in theory but also help design the CaH MOT experiment or even achieve the Bose-Einstein condensation (BEC) of cold diatomic molecules. On the other hand, alkaline-earth-metal monohydrides (AEMHs) such as CaH, SrH and BaH are well-known for their permanent electric dipole moment, therefore these trapped diatomic molecules can be utilized to untangle the mechanism of dipole-dipole interaction, thus paving the way to realizing the molecular entanglement and quantum computing. More interestingly, current experimental systems for the non-zero measurement of the electron's electric dipole moment (eEDM), including ThO, YbF and HfF<sup>+</sup>, still cannot be conducted simultaneously under the laser cooling and magneto-optical trapping technique while maintaining the ease of full polarization and internal co-magnetometry, all of which undoubtedly can increase the coherent measurement time and hence the statistical sensitivity, as well as the immunity to the systematic sensitivity. Previous studies reported that AEMHs share some similar characters with alkaline-earth-metal monofluorides (AEMFs) such as in electron correlation effects, however, the hyperfine energy level structures of AEMHs are relatively simpler than those of AEMFs, and AEMHs are prone to being polarized under the externally applied electric field. All of these lead to the trend that AEMHs may possess the dual character that it can be not only laser cooled and trapped in a MOT but also adopted as an candidate to measure the eEDM. Therefore, our work lays a substantial foundation for the theoretical and experimental study of SrH and BaH that inevitably will contribute to the exploration of the CP violation and new physics beyond the Standard Model on a scientific platform based on cold polar molecules, which is obviously different from large facilities such as the Large Hadron Collider.

**Keywords:** cold molecules, laser cooling and magneto-optical trapping, CaH molecule

**PACS:** 37.10.Pq, 37.10.Mn, 32.60.+i

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220304

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11834003, 11874151).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [tyang@lps.ecnu.edu.cn](mailto:tyang@lps.ecnu.edu.cn)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [jpyin@phy.ecnu.edu.cn](mailto:jpyin@phy.ecnu.edu.cn)

## 基于多能级速率方程的CaH分子三维磁光囚禁模型

王月洋 尹俊豪 严康 林钦宁 庞仁君 王泽森 杨涛 印建平

## Three-dimensional magneto-optical trapping model of CaH molecule based on multi-energy-level rate equation

Wang Yue-Yang Yin Jun-Hao Yan Kang Lin Qin-Ning Pang Ren-Jun Wang Ze-Sen Yang Tao  
Yin Jian-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 163701 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220304

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220304>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 基于跃迁的CaH分子激光冷却光谱理论研究

Theoretical investigation into spectrum of transition for CaH molecule toward laser cooling

物理学报. 2021, 70(16): 163302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210522>

#### 极性分子的激光冷却及囚禁技术

Laser cooling and trapping of polar molecules

物理学报. 2019, 68(4): 043701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181655>

#### 基于调制光晶格的中性分子束光学Stark减速与囚禁的理论研究

Theoretical research on optical Stark deceleration and trapping of neutral molecular beams based on modulated optical lattices

物理学报. 2018, 67(20): 203702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181348>

#### 一种可控的Ioffe型冷分子表面微电阱

Chip-based controllable Ioffe-typed electrostatic microtrap for cold molecules

物理学报. 2018, 67(11): 113701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180206>

#### 超透镜聚焦光环的产生及其在冷分子光学囚禁中的应用

Generation of focusing ring of metalens and its application in optical trapping of cold molecules

物理学报. 2021, 70(16): 167802 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210443>

#### 基于磁光阱中 $^6\text{Li}$ 冷原子的真空度测量

Vacuum pressure measurement based on  $^6\text{Li}$  cold atoms in a magneto-optical trap

物理学报. 2022, 71(9): 094204 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212204>