

Prosjektbeskrivelse: Ultrakalde molekyler

Gjennom hele 80-tallet og gjennom første halvdel av 90-tallet foregikk en rivende utvikling med laseravkjøling av atomer. Dette gjorde det mulig å effektivt avkjøle atomer til temperaturer ned mot $1\mu\text{K}$, ved hjelp av lasere med riktig frekvens. William Phillips, Claude Cohen-Tannoudji og Steven Chu sto i fremste rekke under utviklingen av disse metodene (både teoretisk og eksperimentelt), og ble belønnet med Nobelprisen i 1997 for sine bidrag.

Da det første Bose-Einstein kondensat (BEC) ble observert i 1995 (Nobelpris 2001), var dette mulig på grunn av utviklingen av de nye metodene for laseravkjøling sammen med såkalt fordampningsavkjøling (evaporative cooling). Siden den gang har BEC vært gjenstand for omfattende studier, og i 2003 lyktes man i å fremstille et molekylært BEC.

Molekylære BEC er relativt kompliserte å fremstille da det viser seg at laseravkjøling ikke fungerer for molekyler. Dette er et hinder man nå langt på vei er i ferd med å overvinne, noe som gjør det mulig å studere også molekyler ved svært lave temperaturer. Dette doktorgrads-prosjektet er tenkt å dreie seg om dynamikken til disse kalde molekylene. Mer konkret er det to retninger som det nå synes spesielt aktuelt å studere.

1. Ultrakalde polare molekyler(UPM):

Polare molekyler, dvs. molekyler med et permanent dipolmoment, er interessante i flere sammenhenger. Fordi molekylene er polare gir det økte muligheter for å kontrollere vekselvirkningene mellom dem ved hjelp av ytre felter (både elektriske og magnetiske felter). Denne type kontroll vil være nødvendig i en eventuell kvantedatamaskin. Det er imidlertid utfordringer knyttet både til produksjonen og beskrivelsen av ultrakalde polare molekyler. Som for ikke polare molekyler finnes det for polare molekyler en skare av ulike metoder for avkjøling til ultrakalde temperaturer. Produksjon ved hjelp av såkalt fotoassosiasjon (egentlig en noe utvidet variant av denne metoden) har nylig blitt demonstrert med suksess for RbCs. For å kunne benytte fotoassosiasjon til fremstilling av ultrakalde molekyler kreves det en hel del informasjon om molekylet, en aktuell problemstilling er derfor om det ved (numerisk) regning kunne være mulig å finne heteronukleære polare molekyler som er spesielt egnet for fotoassosiasjonsmetoder.

Vi vil også forsøke å undersøke hvordan eksterne feltene kan nyttes for å kontrollere kollisjoner blant polare molekyler. Motivasjonen for å ønske å kontrollere kollisjonene er blant annet å begrense antallet inelastiske kollisjoner til fordel for elastiske kollisjoner. Dette er viktig for å kunne oppnå virkelig lave temperaturer, da inelastiske kollisjoner er svært uheldige i en slik sammenheng. Her vil det være aktuelt å nytte allerede eksisterende programmer (utviklet ved teorigruppa) til beregningene, samtidig som det også kan være aktuelt å utvikle ny programvare.

2. BCS-BEC overgang:

Et av de mest spennende lavtemperatursystemene å undersøke synes i dag å være tynne Fermi gasser bestående f. eks av ^4K og ^6Li . Gassene avkjøles til ekstreme temperaturer $T < T_F$, hvor $k_B T_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ er Fermi energien og k_F er Fermi bølgevektoren. Ved så lave temperaturer er kvantestatistikk viktig, og både Fermi- og Bose gasser studeres aktivt ved disse temperaturene. Fermigasser har imidlertid muligheten til å undergå en svært spesiell overgang. Denne overgangen er knyttet opp mot såkalte Feshbach resonanser. Feshbach-resonanser er koblinger via hyperfin vekselvirkningen mellom en svakt bundet

molekylær tilstand og en kontinuumtilstand. Energien til den bundne molekylære tilstanden kan varieres ved et eksternt magnetfelt, ved resonans er energien den samme i den bundne tilstanden som for de frie atomene (kontinuumstilstander). Effekten av å variere B -feltstyrken og posisjonen til den bundne molekylære tilstanden, er beskrevet ved den elastiske spredningslengden a , som ved lave temperaturer fullstendig karakteriserer vekselvirkningene i gassen. For at den elastiske spredningslengden a skal gi en riktig beskrivelse av systemet er det viktig at gassen består av fermioner i ulik spinntilstand (vanligvis en 50% blanding). Avhengig av fortegnet på a kan da tre regimer undersøkes:

- $a > 0$. Sterke vekselvirkninger i gassen. To fermioner kan i dette regimet bindes til et toatomig molekyl som et sammensatt boson. Disse bosonene kan danne molekylært Bose-Einstein kondensat (BEC) hvis temperaturen er tilstrekkelig lav.
- $a < 0$. Svake, attraktive vekselvirkninger mellom fermionene som kan gi opphav til Cooper par av atomer. Ved svært lave temperaturer kan gassen gå inn i en superfluid fase, til dels beskrevet ved den såkalte BCS-teorien (Bardeen, Cooper, Schrieffer, 1957). Dette er kun mulig for fermioner.
- $a \rightarrow \pm\infty$. I overgangen mellom $a > 0$ og $a < 0$ divergerer spredningslengden til $\pm\infty$. I dette området befinner gassen seg i et overgangsregime hvor vekselvirkningene *ikke* er bestemt direkte av a .

Vi vil forsøke å simulere en Fermigass og spesielt overgangen mellom de ulike regimene ved å benytte kvante-Monte-Carlo metoder. Hvis dette lykkes vil vi være spesielt interessant i å:

- Sammenholde resultatene med standard BCS teori og med publiserte resultater fra ulike simuleringer gjort av grupper rundt om i verden.
- Når spredningslengden a blir stor, er det ikke lenger tilstrekkelig å beskrive vekselvirkningene ved a . Vekselvirkningene i dette "cross-over" regimet vil bli studert, og sammenholdt med ulike teoretiske modeller fremsatt de senere årene. Dette er også knyttet opp mot mekanismer for dannelse av de såkalte Cooper-parene.
- Studier av Fermi-gasser hvor det ikke er en 50-50 blanding av fermioner i to ulike spinn tilstandene, studeres nå med tanke på å bedre forstå BCS-BEC overgangen. Dette kan også være aktuelt.

Disse to retningene vil danne utgangspunktet for arbeidet med doktorgraden. Underveis vil det dukke opp muligheter og problemer som sammen kan komme til å endre prosjektet noe. Punktene ovenfor må derfor sees som et utgangspunkt for et arbeid omkring ultrakalde molekyler med spesiell vekt på de to temaene beskrevet her.