

# Condensado de Moléculas

Rafael Polisele Teles

16 de novembro de 2012

## Resumo

Neste conciso trabalho temos o objetivo de descrever as características de moléculas diatômicas para que possamos entender a criação de um condensado de Bose-Einstein molecular. Conseqüentemente, apontamos dois trabalhos cuja diferença está na maneira de criar o condensado de Bose-Einstein de moléculas: o primeiro utilizando a transição de fase de isolante de Mott e superfluido em uma rede óptica, e o segundo que utilizar uma armadilha de dipolo e modula o comprimento de espalhamento através do campo magnético para formar as moléculas.

## Introdução

Após o primeiro experimento com um condensado de Bose-Einstein feito de um gás atômico ultra frio, surgiu o interesse em condensação de objetos mais complexos, o que é o caso de moléculas. Com isso, surgem novas linhas de pesquisa, uma vez que, esse sistema mais complexo apresenta maior grau de liberdade. A criação de condensados moleculares permite um avanço na espectroscopia molecular, além do estudo de colisões, e teste de precisão das simetrias fundamentais[2, 3, 6].

Moléculas são produzidas a partir de átomos ultra frios próximos à ressonância de Feshbach, onde o estado molecular é ressonante com o estado atômico podendo formar moléculas sem liberação de calor. Estas moléculas por terem uma energia de vibração alta, normalmente sofrem um decaimento rápido, ou seja, seu tempo de vida é baixo. No entanto, se estas moléculas são formadas por átomos fermiônicos, seu tempo de vida é bem mais longo. Isso é devido ao acoplamento entre o estado molecular fracamente ligado e um mais fortemente ligado mais baixo contendo estados vibracionais[6].

Em sua maioria, os condensados de moléculas são feitos de  ${}^6\text{Li}$ , quando resfriado em um campo magnético constante cria uma mistura de átomos e moléculas em equilíbrio térmico, e neste caso os átomos e moléculas estão acoplados por uma interação de 3-corpos, semelhante a aproximação de Bohr-Oppenheimer.

Na seqüência será apresentado um resumo teórico de moléculas diatômicas mostrando a relação entre a energia de interação do estado fracamente ligado e o comprimento de espalhamento, para assim descrevermos as propriedades das moléculas na presença de uma ressonância de Feshbach[5]. E por fim comentar dois diferentes artigos.

## Moléculas diatômicas

Vamos tratar o problema do movimento relativo entre dois átomos, em dois estados internos diferentes, interagindo via um potencial esférico (espalhamento por esfera dura). Desprezando, momentaneamente, o fato que a interação geralmente acopla diferentes estados hiperfinos, então usaremos a equação de Schrödinger para o estado de onda-s:

$$-\frac{\hbar^2}{2M_r} \frac{d^2 f}{dr^2} + U(r) f = E f, \quad (1)$$

onde  $M_r$  é a massa reduzida,  $U(r)$  a interação entre os átomos e  $E$  o autovalor da energia; enquanto  $f = rR(r)$ . Para um estado molecular fracamente ligado, consideramos que o alcance do potencial é finito de  $d$ , assim, para distancias maiores que  $d$  o potencial desaparece. Seguindo os passos da teoria de espalhamento descrita em [4], obtemos que a função de onda no zero de energia é dada por  $f \propto r - a_s$ , onde  $a_s$  é o comprimento de espalhamento. Se  $a_s \gg d$ ,

$$k = \sqrt{\frac{2M_r(-E_M)}{\hbar^2}} \simeq \frac{1}{a_s} \text{ e } E_M \simeq -\frac{\hbar^2}{2M_r a_s^2}, \quad (2)$$

resultado, somente, para  $a_s > 0$ . Caso contrario, a função de onda não pode ser combinada com um decaimento exponencial. Para uma energia de ligação baixa, a probabilidade de encontrar os átomos em  $r < d$  vai à zero.

## Modelo simples de two-channel

A suposição da função de onda, à distancias maiores que  $d$ , satisfazer da equação de Schrödinger para um single channel, pode ser aplicada também no acoplamento entre canais. Assim, podemos escrever um Hamiltoniano que descreva um modelo de two-channel, i.e., adotamos um modelo esquemático de duas espécies atômicas  $a$  e  $b$ , que interagem para formar uma molécula diatômica  $c$ , cuja massa é  $M = m_a + m_b$ , que é um channel hiperfino diferente, chamado assim de closed channel. Como estamos interessados em moléculas fracamente ligadas podemos usar uma descrição simplificada para um Hamiltoniano efetivo para baixas energias, onde a única interação que aparece são dos estados atômicos dentro do cut-off dos momentos com valor de  $2p_c$ , sendo esse Hamiltoniano dado por:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{q}} \left( E_d + \frac{q^2}{2M} \right) \hat{d}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{p}} \left( \frac{p^2}{2m_a} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{p^2}{2m_b} \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \right) \\ & + \frac{g}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}', |\mathbf{p}-\mathbf{p}'| < 2p_c} \left( \hat{d}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}'} + \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{d}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}'} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

onde os operadores  $\hat{d}^\dagger$  e  $\hat{d}$  cria e destrói uma molécula vestida por um par de átomos com uma diferença no momento maior que  $2p_c$ . Seguindo os cálculos de teoria de campos descrito em [5] obtemos a relação de como a energia de uma molécula é modificada pela interação com os átomos, está é

$$E_M - \sqrt{|E_M| E_g - E_{reg}} = 0, \quad (4)$$

onde  $E_g = (g^4/16\pi^2) (2m_r/\hbar^2)^3$  é uma escala de energia que caracteriza o acoplamento entre átomo e molécula, e  $E_{reg} \equiv E_d - g^2 m_r p_c / \pi^2 \hbar^3$  é a contribuição para energia da molécula, cujo segundo termo representa o shift de energia devido ao acoplamento do par de átomos com baixa energia. A solução geral de (4) é

$$|E_M| = -E_{reg} + \frac{1}{2} E_g - \sqrt{E_g \left( \frac{1}{4} E_g - E_{reg} \right)}, \quad (5)$$

a qual expandido até segunda ordem em  $E_{reg}$  é o resultado que foi demonstrado experimentalmente para uma ressonância de Feshbach no  $^{85}\text{Rb}$ [1].

## Momento magnético de uma molécula

O momento magnético de um sistema é calculado como  $\mu = -\partial E / \partial B$ , onde  $E$  é a energia do sistema e  $B$  o campo magnético. Nesse caso a molécula tem uma energia dada por  $E_{mol} = E_M + E_a + E_b$ , e assim o momento magnético será:

$$\begin{aligned} \mu_{mol} = & -\frac{\partial E_M}{\partial B} + \mu_a + \mu_b \\ = & z \left[ -\frac{\partial}{\partial B} (E_{reg} + E_a + E_b) \right] + (1-z) (\mu_a + \mu_b), \end{aligned} \quad (6)$$

onde

$$z^{-1} = 1 + \frac{g^2}{V} \sum_{\mathbf{p}, p < p_c} \left( \frac{1}{E_M - p^2/2m_r} \right)^2. \quad (7)$$

Segundo a teoria de campos, o temo  $z$  é um fator de renormalização da função de onde, cuja sua quantidade representa a probabilidade de uma molécula-d ser encontrada no atual estado molecular (que contem o par de átomos de baixa energia em adição à molécula-d). Assim a expressão (6) representa que o momento magnético da molécula vestida é uma média dos momentos magnéticos da molécula-d e dos pares de átomos, pesado de acordo com as probabilidade com que os dois tipos de estados ocorrem no estado molecular vestido. Fora da ressonância o momento magnético será igual ao momento magnético da molécula-d. Para uma compreensão mais ampla da quantidade  $z$ , consideraremos o estado da molécula na presença o acoplamento do par atômico

$$|M\rangle = z^{\frac{1}{2}} \left( |d\rangle + \frac{g}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mathbf{p}, p < p_c} \frac{1}{E_M - p^2/2m_r} |a, \mathbf{p}; b, -\mathbf{p}\rangle \right), \quad (8)$$

onde  $z^{-1}$  é a normalização do estado. O que mostra que a probabilidade  $|\langle d|M\rangle| = z$ , ou seja, a probabilidade do estado molecular vestido ser uma molécula-d.

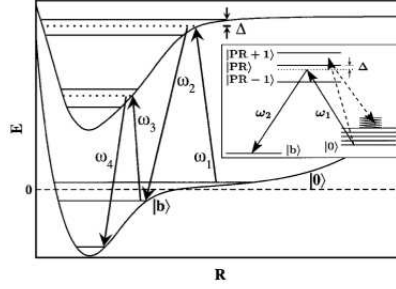


Figura 1: Produção de moléculas no estado fundamental, usando duas transições Raman. A figura ilustra a primeira transição (linha contínua) e o processo onde  $\omega_2$  antes que  $\omega_1$  (linha tracejada). Para  $^{87}\text{Rb}$  e uma frequência de armadilha  $\nu = 1$  MHz,  $E_0 \approx 2$  MHz e  $R_{TP} \approx 500a_0$  ( $a_0 = 0.0529$  nm). Para o singlete,  $E_b \approx -32\text{GHz}$  e  $R_{TP} \approx 32a_0$ . Imagem original de [2].

## Ressonância de Feshbach

Quando a energia molecular é menor que a de dois átomos, então a molécula pode ser formada, e assim o sistema consiste quase que completamente de moléculas diatômicas, as quais formarão o condensado de Bose-Einstein. Para sintonizar a interação entre átomos é usada uma ressonância de Feshbach.

Na presença de um campo magnético  $B$  o comprimento de espalhamento é dado por

$$a = a_0 \left( 1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (9)$$

onde  $a_0$  é o comprimento de espalhamento não ressonante, e

$$a_0 \Delta = \frac{g^2 m_r}{2\pi \hbar^2 (\mu_a + \mu_b - \mu_{reg})}. \quad (10)$$

Caso (9) seja grande, então dizemos que a região de ressonância é ampla, o qual é empregada no caso de condensado com forte interação atômica.

## Dois diferentes métodos experimentais e suas medidas

Nesta seção será descrito dois dos primeiros experimentos feitos com condensado de moléculas, sendo o primeiro feito a partir de uma rede óptica[2] e o segundo feito numa armadilha óptica de dipolo com uma mistura de fermions[3].

### Criação de um condensado molecular na rede óptica[2]

No seguinte trabalho é proposto a criação de um condensado de moléculas seguindo o modelo de Bose-Hubbard de uma rede óptica de bosons,

$$H_{BH} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (11)$$

onde  $a_i$  ( $a_i^\dagger$ ) é o operador de destruição (criação) de bosons em um determinado sitio  $i$ ,  $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$  é o operador número de partículas e  $\epsilon_i$  é a energia devido um potencial externo. O processo descrito aqui consiste em carregar um condensado em uma rede óptica e dirigi-la para um estado de isolante de Mott com exatamente dois átomos por sitio. Assim as moléculas, no estado de isolante de Mott, são então criadas sob condições bem definidas de fotoassociação (Figura 1). Finalmente, o isolante de Mott é desfeito e um estado superfluido de moléculas é criado. Este método, além de ser eficiente para converter átomos em moléculas e criar um estado condensado molecular, pode ser generalizado para molecular heteronucleares, ou outros objetos mais complexos.

Note que na figura 1 está representado as curvas de potenciais para o movimento relativo de dois átomos na armadilha, sendo que para pequenas distancias  $R$  temos um potencial semelhante ao de Bohr-Oppenheimer, enquanto o comportamento em grande  $R$  é dominado pela armadilha de confinamento.

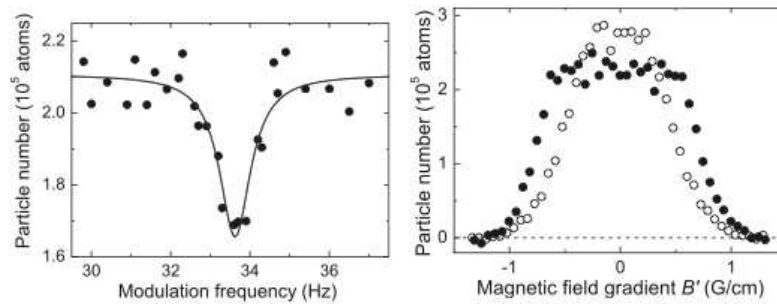


Figura 2: O gráfico à esquerda caracteriza a frequência de ressonância em  $\sqrt{5/2}\omega_z$  das excitações coletivas. À direita tem-se o número de partícula de acordo com o gradiente do campo magnético.

## Condensado de moléculas numa armadilha óptica de dipolo[3]

Neste trabalho foi reportado a criação de um condensado de Bose-Einstein com mais de  $10^5$  moléculas de  $Li_2$  em uma armadilha óptica de dipolo partindo de uma mistura de spins fermionicos de átomos de lítio. Durante o processo de resfriamento evaporativo, as moléculas são formadas pelo processo de recombinação de 3-corpos próximo à uma ressonância de Feshbach e finalmente condensado num estado de equilíbrio térmico. Usando a modulação do campo magnéticos foi estudado os modos coletivos do condensado molecular. Para uma amostra no limite de Thomas-Fermi com formato de charuto, foi obtido o valor da frequência de uma oscilação quadrupolar à  $\sqrt{5/2}\omega_z = 2\pi \times 33.8$  Hz (Figura 2). Tendo esse trabalho como perspectiva, uma vez que conseguem controlar as interações no cenário de um condensado formado por um par de fermions, a possibilidade de se resfriar um gás fermiônico abaixo da temperatura de Fermi, e assim estudar novos regimes de superfluidez.

## Conclusão

Em conclusão, vimos que para criar um condensado de moléculas é necessário termos que o estado molecular tenha uma energia mais baixa que a energia dos átomos utilizado. Uma vez que o movimento relativo dos átomos é descrito por um espalhamento de onda-s, a modulação do campo se torna um fator importante para a criação de um estado molecular com energia mais baixa e com isso controlar a criação de moléculas na amostra.

## Referências

- [1] N. R. Claussen, S. J. J. M. F. Kokkelmans, S. T. Thompson, E. A. Donley, E. Hodby, and C. E. Wieman. Very-high-precision bound-state spectroscopy near a 85rb feshbach resonance. *Physical Review A*, 67(6):060701, 2003.
- [2] D. Jaksch, V. Venturi, J. I. Cirac, C. J. Williams, and P. Zoller. Creation of a molecular condensate by dynamically melting a mott insulator. *Physical Review Letter*, 89(4):040402–1, July 2002.
- [3] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, S. Riedl, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm. Bose-einstein condensation of molecules. *Science*, 302:2101, December 2003.
- [4] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley, third edition, 1998.
- [5] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge, second edition, 2008.
- [6] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle. Observation of bose-einstein condensation of molecules. *Physical Review Letter*, 91(25):250401–1, December 2003.