

MOLEKÜLPHYSIK

Ultrakalte Moleküle in Reih und Glied

Chemische Reaktionen können stattfinden, wenn Atome oder Moleküle miteinander stoßen. Die Reaktionsdynamik ist dabei abhängig von verschiedenen Parametern, insbesondere auch der relativen Orientierung der Kollisionspartner zueinander. Vor kurzem ist es an der Universität Ulm gelungen, ultrakalte Moleküle innerhalb eines optischen Gitters durch Rotationsanregung auszurichten und diese Ausrichtung mit einer neuartigen Methode zu vermessen [1]. Dies ermöglicht zukünftig die Untersuchung von stereochemischen Reaktionsprozessen bei Temperaturen von unter 1 μK in einem Modellsystem, das sich durch ein Höchstmaß an Kontrolle auszeichnet.

Ein homonukleares, zweiatomiges Molekül ähnelt einer Hantel, deren Achse im Raum rotieren kann. Für solch einen Rotator sind die Energieeigenzustände durch die Quantenzahlen des Drehimpulses R und m_R festgelegt. Die dazugehörige Wellenfunktion, die Kugelflächenfunktion $Y_{R,m_R}(\vartheta, \varphi)$, beschreibt die Winkelverteilung der Hantelachse. Abbildung 1a zeigt Polardiagramme von $|Y_{R,m_R}(\vartheta, \varphi)|^2$ für zwei Rotationseigenfunktionen. Im Fall von $R = 0$ und $m_R = 0$ erhält man eine isotrope Verteilung, das heißt die Molekülachse zeigt zufällig in eine beliebige Richtung des Raumes. Hingegen ist für $R = 2$, $m_R = 0$ das Molekül hauptsächlich entlang der z -Achse ausgerichtet.

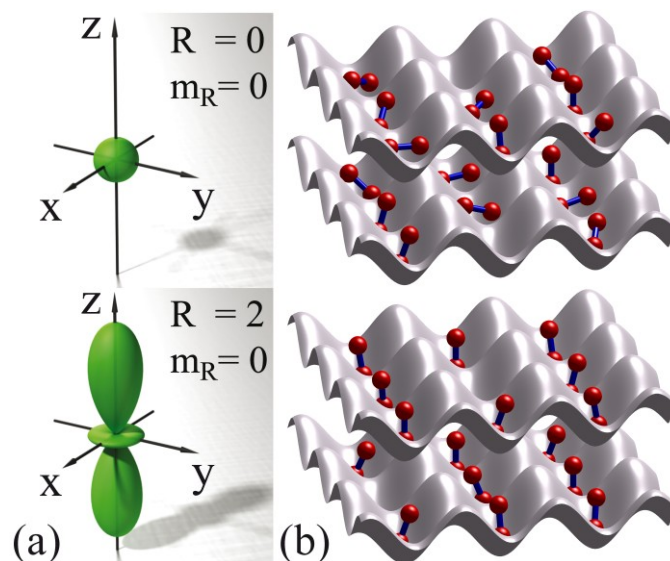


ABB. 1 MOLEKÜLAUSRICHTUNG

a) Polare Darstellung des Betragsquadrats der Rotationswellenfunktionen für $R = 0$ und $m_R = 0$ (oben) und $R = 2$, $m_R = 0$ (unten). Je weiter ein Punkt auf der Kurvenoberfläche vom Koordinatenursprung entfernt ist, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Molekülachse vom Ursprung ausgehend dorthin zeigt. b) Verteilung der Moleküle innerhalb des dreidimensionalen optischen Gitters. Für $R = 2$, $m_R = 0$ (unten) erhält man im Mittel eine teilweise Ausrichtung entlang der z -Achse, während im Fall von $R = 0$, $m_R = 0$ (oben) die Richtungen der Molekülachsen gleichverteilt sind.

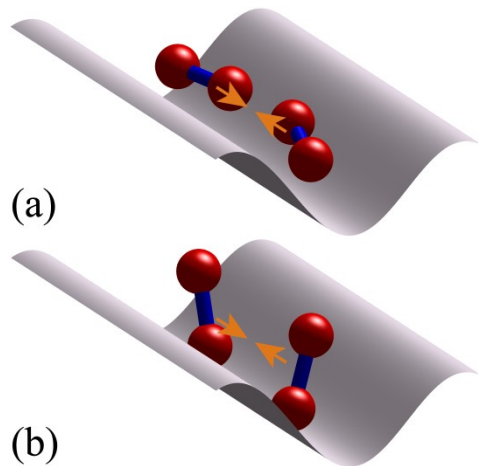


ABB. 2 STEREOCHEMIE

Kollision zweier Moleküle in einer eindimensionalen Potentialröhre für verschiedene relative Ausrichtungen (a) und (b) der Molekülachsen.

Im Experiment [1] werden zunächst aus Atomen ultrakalte Rb_2 -Moleküle erzeugt [2], die keine Rotation aufweisen, das heißt $R = 0$. Mit Hilfe eines stimulierten Zwei-Photon-Übergangs auf der Basis zweier Laserpulse kann man nun sehr effizient beispielsweise den Zustand $R = 2$, $m_R = 0$ präparieren. Der dazu nötige Drehimpuls stammt aus dem Eigendrehimpuls der Photonen. Ein Magnetfeld in z-Richtung definiert die Quantisierungsachse und stabilisiert den Rotationszustand der Moleküle sowie die Ausrichtung ihrer Achse.

Die Moleküle sind in einem dreidimensionalen optischen Gitter gefangen, das durch stehende Lichtwellen in allen drei Raumrichtungen mit zueinander orthogonalen Polarisierungen generiert wird. Daraus resultiert eine periodische Potentialstruktur, eine Art Eierkarton in 3D, wobei in unserem Fall jeder Gitterplatz mit höchstens einem Molekül besetzt wird (Abbildung 1b). Wie lässt sich nun die Ausrichtung der Moleküle messen?

Die Tiefe der Potentialmulde, die von einer stehenden Lichtwelle hervorgerufen wird, hängt vom relativen Winkel zwischen der Polarisierung des Lichtfeldes und der Molekülachse ab. Es werden nun die Gittertiefen für die Polarisierungen in x-, y- und z-Richtung gemessen. Im Fall des kugelsymmetrischen Molekülzustands $R = 0$ finden wir gleiche Gittertiefen, unabhängig von der Polarisationsrichtung. Verwenden wir jedoch den Zustand $R = 2$, $m_R = 0$, so ist das Gitter für Polarisierung in z-Richtung fast doppelt so tief wie für Polarisierungen orthogonal dazu.

Zur Bestimmung der Potentialtiefe wird diese moduliert. Eine resonante Modulation erzeugt eine Anregung des Bewegungszustandes des Moleküls, wodurch es aus dem Gitter verloren geht. Der Grund dafür ist, dass Moleküle in einem optischen Gitter, ähnlich wie Elektronen im Festkörper, eine Energie-Bandstruktur aufweisen, die von der Gittertiefe abhängt. Da die Bandstruktur genau bekannt ist, kann man aus den beobachteten Resonanzfrequenzen auf die Gittertiefe rückschließen und somit die relative Orientierung der Moleküle zur verwendeten Polarisationsrichtung ermitteln.

Diese Methode ermöglicht interessante Kollisionsexperimente mit den teilweise ausgerichteten, ultrakalten Molekülen. Wie anfangs erwähnt, sollten Reaktionsprozesse von Molekülen abhängig davon sein, wie ihre Achsen zueinander stehen. Folglich könnten etwa Reaktionen zwischen Molekülen mit $R = 0$ beziehungsweise $R = 2$ verschiedene Raten aufweisen oder gar unterschiedliche Produkte erzeugen.

In unserem Aufbau sind solche Experimente einfach zu realisieren. Nach der Präparation der Moleküle im dreidimensionalen optischen Gitter kann beispielsweise eine der drei stehenden Wellen ausgeschaltet werden. Das Gitter verwandelt sich dann in ein System von parallelen Potentialröhren, in denen sich die ausgerichteten Moleküle frei bewegen und kollidieren können (Abbildung 2). Solche Experimente werden zu einem tieferen Verständnis fundamentaler chemischer Prozesse führen.

Literatur

- [1] M. Deiß, B. Drews, B. Deissler, J. Hecker Denschlag, Phys. Rev. Lett. **2014**, *113*, 233004.
- [2] G. Rempe, Physik in unserer Zeit **2007**, *38* (1), 6.

Markus Deiß, Johannes Hecker Denschlag, Universität Ulm