

# Ultradźwiękowe molekuly - gorący temat

**Monika Musiał**

*Instytut Chemii*

Uniwersytet Śląski w Katowicach

## Robert Boyle (1627-1691)

Poszukiwanie „*primum frigidum*”.

## Guillaume Amontons (1663-1705)

Prowadząc badania nad tzw. termometrem powietrznym wydedukował, że musi istnieć **dolna granica temperatury** i oszacował ją na **-240°C**.

## Bezwzględna skala temperatury = skala Kelvina

### Lord Kelvin (Wiliam Thomson (1824-1907))

Na podstawie rozważań termodynamicznych (prace Sadi Carnota) ocenił (niemal bezbłędnie)

**temperaturę zera bezwzględnego na  $-273^{\circ}\text{C}$ .**

W roku 1848 zaproponował utworzenie bezwzględnej skali temperatur, nazwaną skalą Kelvina.

# Poszukiwanie najniższych temperatur związane jest z pracami nad skraplaniem gazów

Milowy krok: **Michael Faraday**

- 1845 - osiągnął temperaturę  $-110^{\circ}\text{C}$  (około 163 K) skroplił wszystkie znane w owym czasie gazy z wyjątkiem sześciu (wodoru, tlenu, azotu, tlenku węgla, tlenku azotu oraz metanu).

## Gazy permanentne?

**Thomas Andrews** (a także **Johannes van der Waals**) - istnienie temperatury krytycznej (tzn. takiej, powyżej której skroplenie gazu nie jest możliwe).

## Przełom w pracach nad skraplaniem gazów nastąpił w roku 1883

**Karol Olszewski, Zygmunt Wróblewski**

skroplili tlen i azot osiągając rekordowo niskie temperatury: tlen (temp. wrzenia  $-183^{\circ}\text{C}$  (około 90 K)), azot (temp. wrzenia  $-196^{\circ}\text{C}$  (około 77 K)).

Kilka lat później Szkot **James Dewar** skroplił wodór osiągając temperaturę  $-240^{\circ}\text{C}$  (około 33 K).

W roku 1908 Holender **Heike**

**Kammerlingh-Onnes** skroplił najtrudniejszy gaz: hel uzyskując temperaturę  $-269^{\circ}\text{C}$  (około 4 K).

**(Nagroda Nobla z fizyki - 1913 r.)**

# Ludwig Boltzmann (1844-1906)

## Teoria kinetyczna gazów

Dla gazu doskonałego (najlepszym przybliżeniem gazu doskonałego są gazy szlachetne np. hel)

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T$$

$E_{\text{kin}}$  - średnia energia kinetyczna gazu     $m$  - masa  
(zależna od kwadratu prędkości ( $v$ ))

$k_B$  - stała Boltzmannna     $T$  - temperatura bezwzględna

## Wniosek z teorii kinetycznej gazów

**Aby uzyskać temperaturę zera bezwzględnego należałoby zatrzymać ruch wszystkich atomów.**

Kompletne unieruchomienie atomów nie jest możliwe, ale obniżanie temperatury poprzez zmniejszanie ich prędkości - to jest dobry kierunek działania.



## Chemia (fizyka) zimnych atomów lub cząsteczek

Temperatura rzędu  $\sim \text{mK}$   
( $\text{mK} = \text{milikelwin} = 0.001 \text{ K}$ )

## Ultrazimne atomy lub molekuły

Temperatura rzędu  $\sim \mu\text{K}$   
( $\mu\text{K} = \text{mikrokelwin} = 0.000001 \text{ K}$ )

## Temperatura molekuł amoniaku ( $\text{NH}_3$ ) vs. prędkość ruchu

300 K -  $600 \frac{\text{m}}{\text{s}}$  (pokojowa)

3 K -  $60 \frac{\text{m}}{\text{s}}$

0.03 K (30 mK) -  $6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$  (niska)

0.000003 K (3  $\mu\text{K}$ ) -  $6 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$  (ultraniska)

# Dalsze oziębienie materii napotykało na trudności

Problem oddziaływania chłodzonej  
substancji ze ściankami naczynia.

**Wynalezienie lasera pozwoliło na  
skonstruowanie „naczynia” idealnego  
do przechowywania ultrazimnej  
substancji.**

# **Pułapka magnetyczno-optyczna** **(Magneto-Optical Trap - MOT)**

**William Phillips** (NIST), **Steven Chu** (Stanford University), **Claude Cohen-Tannoudji** (Ecole Normale Supérieure)

W roku 1988 osiągnęli rekordowo niską temperaturę 40 mikrokelwinów, czyli 0.000040 K.

**(Nagroda Nobla z fizyki - 1997 r.)**

# Co jest takiego fascynującego w niskich temperaturach?

## Dygresja nr 1

Lata dwudzieste ubiegłego wieku

### **Korpuskularno-falowa teoria światła**

*(promienie światła raz zachowują się jak fala,  
innym razem jak cząstka).*

**Louis de Broglie**  
**(1892-1987)**

**(Nagroda Nobla z fizyki  
1929 r.)**



## Hipoteza de Broglie'a

Każdy **obiekt materialny** może być opisywany na dwa sposoby: jako **cząstka (korpuskuła)** lub jako **fala**.

Relacja de Broglie'a określa długość fali przypisywanej cząstce:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \sim \frac{1}{\sqrt{mT}}$$

$\lambda$  - długość fali

$h$  - stała Plancka

$m$  - masa cząstki

$v$  - prędkość poruszania się cząstki

$T$  - temperatura bezwzględna

Długość fali de Broglie'a tym większa im mniejsza jest prędkość cząstki, a tym samym im niższa jest temperatura.

## Długość fali de Broglie'a vs. temperatura (hel)

<b>T</b>	<b><math>\lambda</math></b>
<b>300 K</b>	<b><math>\lambda = 0.73 \text{ \AA}</math></b>
<b>0.03 K</b>	<b><math>\lambda = 73 \text{ \AA}</math></b>
<b>0.000003 K</b>	<b><math>\lambda = 7300 \text{ \AA}</math></b>

## Dygresja nr 2

### **Kondensat Bosego-Einsteina (BE)**

**Satyendra Bose (1894 - 1974)**

**Albert Einstein (1879 -1955)**

Wszystkie cząstki znajdują się w tym samym stanie kwantowym.

## Dygresja nr 3

### Bozony - Fermiony

Dwie podstawowe klasy cząstek: bozony i fermiony  
(ściśła definicja)

**bozony**

fermiony

**spin całkowity**

spin połówkowy

**foton**

atomy - parzysta l.  
neutronów

jądra atomowe  
parzysta l. nukleonów  
(protony + neutrony)

**elektron**

atomy - nieparzysta l.  
neutronów

jądra atomowe  
nieparzysta l. nukleonów  
(protony + neutrony)

# Kondensat Bosego-Einsteina

## Nowy stan materii

**Laser:** fotony w tym samym stanie kwantowym

**Kondensat BE:** atomy lub molekuły w tym samym stanie kwantowym

## Kondensat BE

5 czerwca 1995 r. **Eric Cornell** i **Carl Wieman** z Uniwersytetu Kolorado w Boulder otrzymali kondensat BE dla około 2000 **atomów rubidu** (izotop 87) oziębionych do **170 nK** (0.000000170 K).

## Kondensat BE

Dwa miesiące później **Wolfgang Ketterle** z MIT uzyskał kondensat BE dla **atomu sodu** (izotop 23)

liczba atomów  $\sim 100$  razy większa  
(czyli dla 200000 atomów)

## Kondensat BE

Nagroda Nobla z fizyki za osiągnięcia  
w zakresie kondensacji Bosego-Einsteina  
atomów metali alkalicznych i za  
fundamentalne badania nad właściwościami  
kondensatu.



# Atomy dla których udało się osiągnąć kondensat BE

## Polski kondensat BE

2 marca 2007 r. w laboratorium Fizyki Atomowej,  
Molekularnej i Optycznej w Toruniu dla  $^{87}\text{Rb}$ .

# Ultrazimne molekuly

Molekuly - bardzo skomplikowane  
obiekty

*Najprostsza dwuatomowa molekula*

**Cztery formy energii:** energia translacyjna,  
wibracyjna, rotacyjna oraz oddziaływania magnesów  
(poprawniej: spinów) jądrowych.

# Ultrazimne molekuly

*Nowe formy energii*

# Jak otrzymać ultrazimne molekuly

## Dwie podstawowe metody

- 1 *bezpośrednia*: najpierw zsyntetyzować molekulę, np.  $\text{Rb} + \text{Rb} \rightarrow \text{Rb}_2$ , a potem schłodzić molekulę  $\text{Rb}_2$  do ultraniskiej temperatury
- 2 *pośrednia*: schłodzić do ultraniskiej temperatury atomy np.  $\text{Rb}$ , a potem przeprowadzić reakcję,  $\text{Rb} + \text{Rb} \rightarrow \text{Rb}_2$

## Ultrazimne molekuly

- *metoda pośrednia*
  - **fotoasocjacja**
  - magnetoasocjacja

Przy tych metodach produkcji ultrazimnych molekuly przydaje sie **chemia kwantowa!**

## Chemia kwantowa

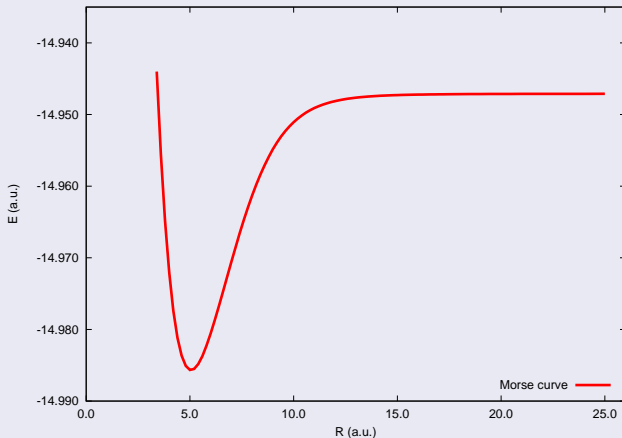
Zastosowanie praw mechaniki kwantowej, teorii powstałej w latach dwudziestych ubiegłego stulecia, do opisu atomów i molekuł.

Stosując równania mechaniki kwantowej do opisu atomów i molekuł możemy uzyskać te same informacje jakie dostarczają badania w laboratorium.

# Chemia kwantowa w badaniach ultrazimnych molekuł

Bardzo dokładne wyznaczenie zależności energii molekuly od długości wiązania  
(wyznaczanie tzw.  
krzywych energii potencjalnej)

**Krzywa Morse'a:** zależność energii cząsteczki dwuatomowej ( $E$ ) od odległości między atomami ( $R$ ).





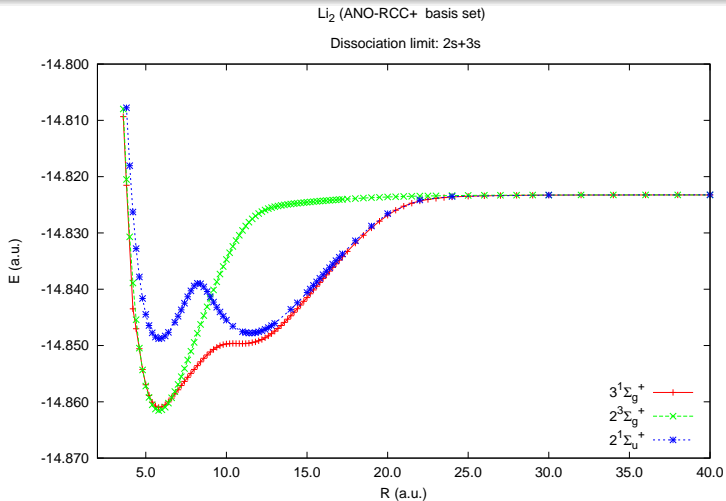
W Uniwersytecie Śląskim opracowano  
bardzo dokładną metodę wyznaczania  
zależności energii od długości  
wiązania.

**E vs. R**

[1] M. Musiał, *J. Chem. Phys.*, **136**, 134111 (2012).

# Li<sub>2</sub> - krzywe energii potencjalnej

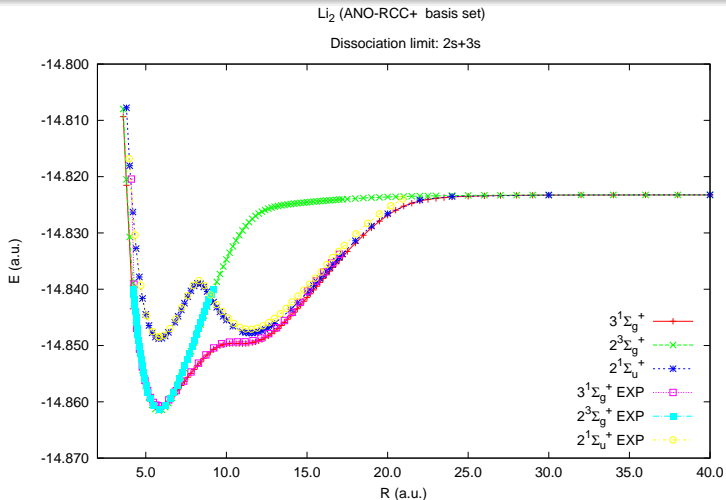
## Granica dysocjacji 2S+3S



M. Musiał, et al., *J. Chem. Theory Comput.*, **10**, 1200 (2014).

# Li<sub>2</sub> - krzywe energii potencjalnej

Granica dysocjacji 2S+3S – porównanie z eksperymentem



M. Musiał, et al., *J. Chem. Theory Comput.*, **10**, 1200, 2014.

# Ultracold Rb<sub>2</sub>

M. Tomza, M. H. Goertz,  
M. Musiał, R. Moszynski,  
Ch. P. Koch,  
"Optimized production of  
ultracold ground-state  
molecules",  
*Phys. Rev. A*, **86**, 043424  
(2012).

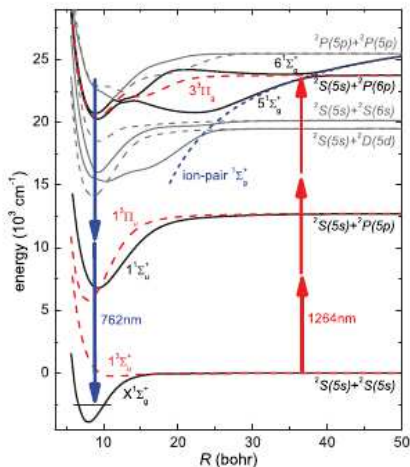


FIG. 1. (Color online) Proposed scheme for multiphoton photoassociation and subsequent stabilization producing ultracold Rb<sub>2</sub> molecules in their electronic ground state.

**Ultrazimne molekuly - gorący temat**

**Otwierają przed fizyką i chemią nowe  
możliwości niezwykłych badań.**

# Ultrazimne molekuly

## Fizyka:

- pomiary spektroskopowe o niespotykanej dokładności; możliwość badania efektów związanych z oddziaływaniami nadsubtelnymi oraz generowanych przez elektrodynamikę kwantową
- komputery kwantowe (plasowanie polarnych molekuly w sieciach optycznych)

# Ultrazimne molekuly

## Fizyka cd.:

- **superdokładne wyznaczanie fundamentalnych stałych w fizyce, np.:**
  - $\frac{m_p}{m_e}$  (stosunek masy protonu do masy elektronu)  
H. L. Bethlem (Free University of Amsterdam)
  - stała struktury subtelnej  $\alpha$   
P. Cladé (University of Paris IV)
  - elektryczny moment dipolowy elektronu  
JILA Group (NIST, University of Colorado)
  - stany splątane, testowanie nierówności Bella  
J. Schmiedmayer Group (Vienna University of Technology)

## Chemia: Ultrazimne molekuly

- kontrolowanie przebiegu reakcji chemicznej na poziomie kwantowym
- sterowanie reakcją chemiczną nie tylko dla otrzymania konkretnego produktu ale nawet produktu w określonym stanie kwantowym.

Zimna chemia: badanie reakcji chemicznych w ultraniskich temperaturach!



## Ultrazimne molekuly

- stworzenie miniaturowych tranzystorów a w dalszej perspektywie miniaturyzacja całej elektroniki
- zwiększenie dokładności zegarów atomowych
- wzorce czasu takie jak zegar optyczny stanowiący budulec symulatorów kwantowych.

*DZIĘKUJĘ ZA UWAGĘ*