

**Projekta**

**„Atomāro un nepārtrauktās vides tehnoloģisko fizikālo procesu modelēšana, matemātisko metožu pilnveide un kvalitatīvā izpēte”**

**Nr.2009/0223/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/008**

**Tehniskā atskaite aktivitātē**

**4.1. Atomāro un molekulāro procesu matemātiskā modelēšana**

**Apstiprinu:**

**Projekta padomes priekšsēdētājs:**

\_\_\_\_\_ **Jānis Mencis**

**Apstiprinu:**

**LU Zinātņu prorektors:**

\_\_\_\_\_ **Indriķis Muižnieks**

## **Pētījuma apakšaktivitāte**

### **4.1.1. Atomu un molekulu koherenta mijiedarbība ar lāzera starojumu**

*Aktivitātes vadītājs: profesors Mārcis Auziņš*

## 1. Koherentas atomu mijiedarbības ar lāzera starojumu modelēšanas pamatprincipi

Atomu (šeit un turpmāk šis vārds attiecas gan uz atomiem, gan molekulām) koherentā stāvokļa pierakstam tiek izmantota atomārā blīvuma matrica  $\rho$ , kuras izmaiņas laikā apraksta Liuvila jeb optiskie Bloha vienādojumi:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho] + i\hbar \hat{R}\rho, \quad (1)$$

kur  $\hat{H}$  ir sistēmas Hamiltona operators, kuru atomiem vienlaicīgi mijiedarbojoties ar elektromagnētisko (lāzera) starojumu un ārēju magnētisko lauku, veido trīs daļas:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_B - \vec{d} \cdot \vec{E}(t). \quad (2)$$

Pirmais saskaitāmais izteiksmē (2) apraksta neperturbēta atoma enerģētiskos stāvokļus, kas ir atkarīgi no atoma iekšējās struktūras, otrais apraksta atoma mijiedarbību ar ārējo lauku, bet trešais – atoma mijiedarbību ar elektromagnētisko starojumu dipola tuvinājumā.

Operators  $\hat{R}$  izteiksmē (1) apraksta atomu relaksāciju gan spontānās sabrukšanas (koherenta relaksācija), gan atomiem fiziski izlidojot/ielidojot mijiedarbības apgabalā (nekoherenta relaksācija).

Pielietojot rotējošā viļņa aproksimāciju, stohastisku, no laika atkarīgu, vienādojumu dekorelāciju, kā arī stohastiskā fāzes mainīgā formālu vidējošanu laikā, izmantojot fāzes lēcieni vai difūzijas modeli, no optiskajiem Bloha vienādojumiem ir iespējams iegūt blīvuma matricas  $Z$  ēmana koherenču daļas dinamikas vienādojumus [Phys. Rev. A 69, 063806 (2004)]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{g_i g_j}}{\partial t} = & \left( \Xi_{g_i e_m} + \Xi_{e_k g_j}^* \right) \sum_{e_k, e_m} d_{g_i e_k}^* d_{e_m g_j} \rho_{e_k e_m} - \sum_{e_k, g_m} \left( \Xi_{e_k g_j}^* d_{g_i e_k}^* d_{e_k g_m} \rho_{g_m g_j} + \right. \\ & \left. + \Xi_{g_i e_k} d_{g_m e_k}^* d_{e_k g_j} \rho_{g_i g_m} \right) - i\omega \rho_{g_i g_j} + \sum_{e_k e_l} \Gamma_{g_i g_j}^{e_k e_l} \rho_{e_k e_l} - \gamma_g \rho_{g_i g_j} + \lambda \delta(g_i, g_j) \end{aligned} \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{e_i e_j}}{\partial t} = & \left( \Xi_{e_i g_m}^* + \Xi_{g_k e_j} \right) \sum_{g_k, g_m} d_{e_i g_k} d_{g_m e_j}^* \rho_{g_k g_m} - \sum_{g_k, e_m} \left( \Xi_{g_k e_j} d_{e_i g_k} d_{g_k e_m}^* \rho_{e_m e_j} + \right. \\ & \left. + \Xi_{e_i g_k}^* d_{e_m g_k} d_{g_k e_j}^* \rho_{e_i e_m} \right) - i\omega \rho_{e_i e_j} - (\Gamma + \gamma_e) \rho_{e_i e_j}. \end{aligned} \quad (3b)$$

Vienādojumi (3) ir spēcīgā stacionāras ierosmes gadījumam, kad ir iespējams iegūt to skaitlisku atrisinājumu, kas apraksta kvantu superpozīcijas stāvokli, kādā ārējie lauki (elektromagnētiskais un magnētiskais) sagatavo atomus. No šiem rezultātiem ir iespējams tiešā veidā aprēķināt fluorescences signālu, kas ir eksperimentāli novērojams lielums. Tipiski tiek modelēta noteiktas polarizācijas fluorescences signāla atkarība no ārējā magnētiskā lauka, kā arī citiem ierosmes parametriem, piemēram, ierosinošā elektromagnētiskā starojuma intensitātes, ierosinošā starojuma kūļa diametra vai temperatūras atomāro tvaiku šūnā. Vienādojumu (3) skaitliskais atrisinājums ir atomārā stāvokļa blīvuma matrica, kuru ir iespējams analizēt arī tiešā veidā, piemēram, attēlojot to kā leņķiskā momenta varbūtību sadalījuma virsmu (<http://budker.berkeley.edu/ADM/>).

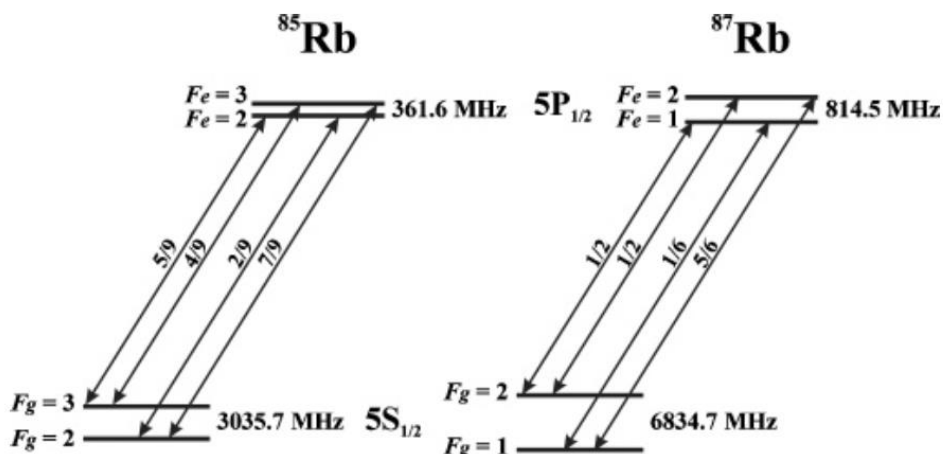
Vienādojumu sistēma (3) apraksta blīvuma matricu vienai noteiktai atomu ātruma grupai, kura Doplera efekta rezultātā sajūt EM starojuma ar frekvenci

$$if = f_0 + \Delta f, \quad (4)$$

kur  $f_0$  ir lāzera starojuma frekvence laboratorijas atskaites sistēmā, bet  $\Delta f = f_0 v_x$  – Doplera nobīde atomiem, kas kustās ar ātrumu  $v_x$  lāzera stara izplatīšanās virzienā. Lai ņemtu vērā Doplera efektu, sistēma (3) tiek atrisināta visām ātruma grupām kādā noteiktā apgabalā ap vidējo vērtību  $\overline{v_x} = 0$  (tipiska izvēle apgabalam ir  $\pm 2\sigma$ ) un tiek iegūta atrisinājumu svērtā vidējā vērtība, ņemot vērā katras ātruma grupas statistisko svaru. Vienādojumu sistēmas skaitliska risināšana ir realizēta datorprogrammās *steady* (skat. Programmas *steady* dokumentāciju), kuras ir uzrakstītas programmēšanas valodā C++ un izmanto tādas atvērtā koda bibliotēkas kā *GSL* (*GNU Scientific Library*), *UMFPACK* (*Unsymmetric Multifrontal sparse lu Factorization PACKage*) un *BLAS* (*Basic Linear Algebra Subprograms*). Programmas *steady* modifikācijas ir piemērojamas dažādām fizikālajām sistēmām un ir darbināmas datoros ar *Linux* operētājsistēmu.

## 2. Koherentas ierosmes modelēšana īpaši plānā atomāro tvaiku šūnā

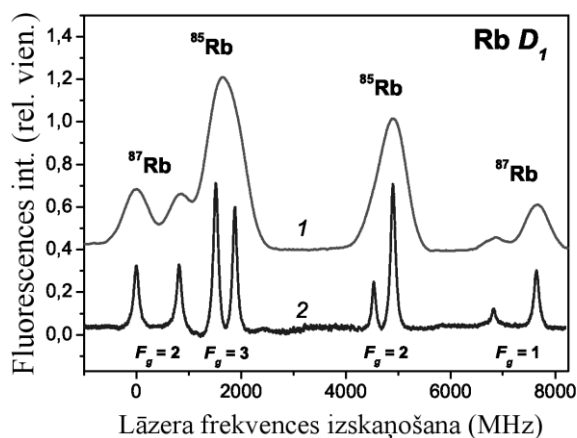
Aprakstītā teorētiskā modeļa darbība jau iepriekš bija labi pārbaudīta sārnu metālu  $D_1$  līnijas (att. 1.) ierosmē „normālā” atomāro tvaiku šūnā [Phys. Rev. A 78, 013417 (2008), Phys. Rev. A 79, 053404 (2009)]. Īpaši plānā šūnā, atšķirībā no „normālās”, atomiem ir daudz mazāka iespēja pārvietoties lāzera kūlim paralēlā virzienā, šādā veidā ievērojami tiek samazināts Doplera efekts [Opt. Comm 200, 201 (2001)], tai pat laikā ievērojami palielinās nekoherentās relaksācijas ātrums, parādās arī papildus ierosinātā stāvokļa relaksācija, jo visi atomi atrodas tuvu šūnas sienām un, mijiedarbojoties ar to, notiek atomu relaksācija.



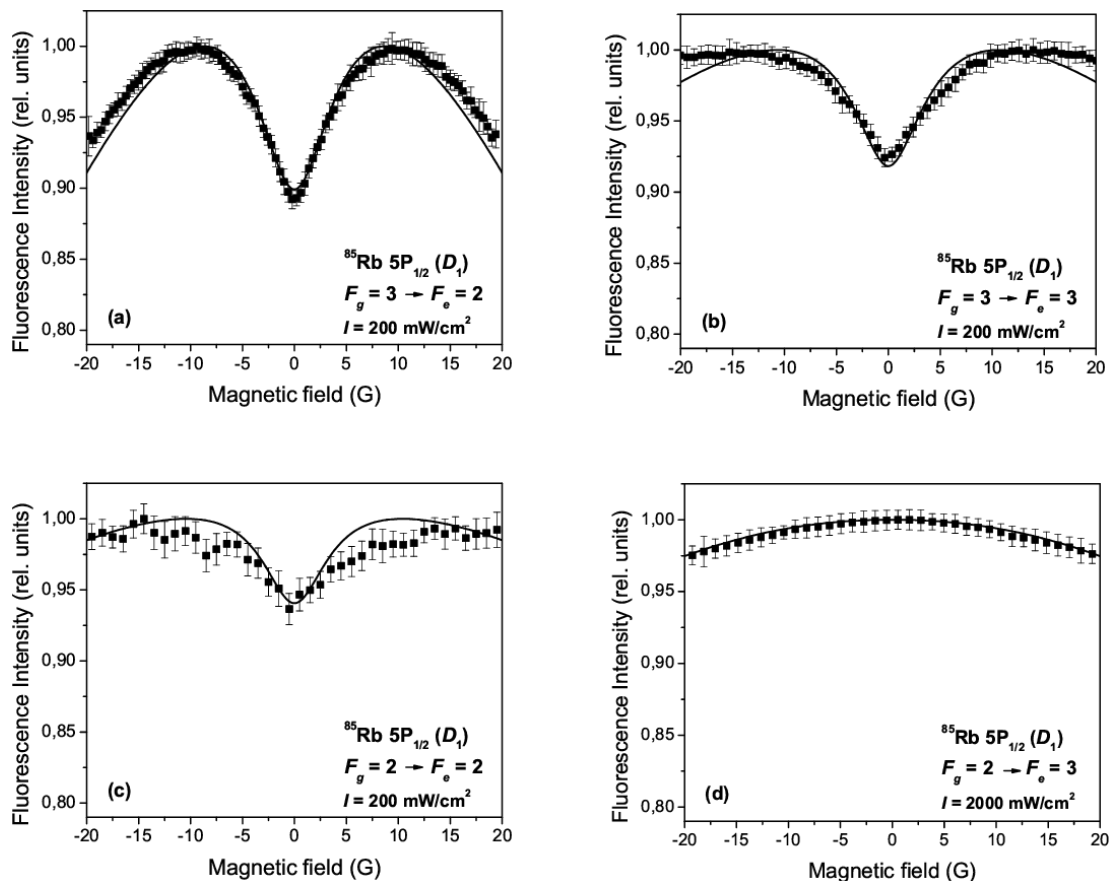
Attēls 1. Rubīdija  $D_1$  spektrālās līnijas struktūra

Lai izprastu un novērtētu šo procesu ietekmi uz atomu un elektromagnētiskā starojuma mijiedarbību ārēja magnētiskā lauka klātbūtnē, tika veikts eksperiments, kura rezultāti tika salīdzināti ar teorētiskās modelēšanas rezultātiem. Eksperimentā tika veikta īpaši plānā šūnā ieslēgtu rubīdija atomu  $D_1$  spektrālās līnijas dažādās supersīkstruktūras pārejās novērojamo magneto-optisko rezonansu reģistrēšana. Par magneto-optisko rezonansi sauc fluorescences, kas reģistrēta kā funkcija no magnētiskā lauka ekstrēmu ar rezonanses tipa izmaiņām fluorescences intensitātē. Magneto-optiskās rezonanses var novērot tādām magnētiskā lauka vērtībām, pie kurām divi vai vairāki atoma enerģētiskie līmeņi ir deģenerēti. Vienkāršākajā gadījumā tas realizējas pie magnētiskā lauka  $B = 0$ , kad veidojas t.s. *nulles rezonanses*, kuras tika pētītas īpaši plānajā šūnā.

Teorētiskā modeļa neskaidro parametru novērtēšana (nekoherentās relaksācijas ātrumu) tika veikta empīriski, analizējot eksperimentāli iegūtus spektrus, kuros tika reģistrēts fluorescences signāls atkarībā no ierosmes frekvences (att. 2.)



Attēls 2. Fluorescences ierosmes spektrs normālā (1) un īpaši plānā šūnā (2)

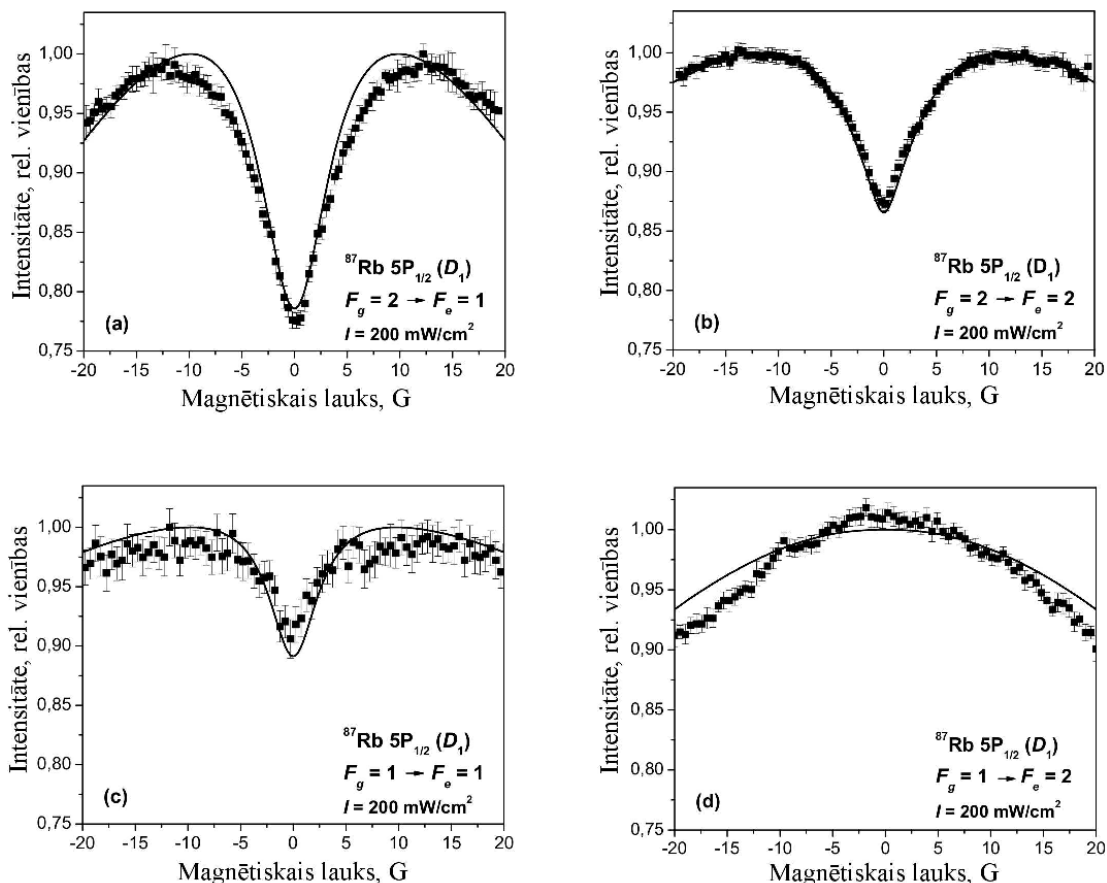


Attēls 3.  $^{85}\text{Rb}$  izotopa  $D_1$  līnijas 4 supersīkstukturās komponentēs eksperimentāli reģistrētie un teorētiski modelētie magneto-optisko rezonansu profili

Šādā spektrā katru spektrālīniju apraksta Voigta sadalījums, kura Gausa daļu nosaka spektrālīnijas Doplera paplašinājums, bet Lorenca daļu – līnijas dabiskais platums, sadursmju paplašinājums un atomu sienīņu mijiedarbība. Tā kā spektrālīniju dabiskais platums aplūkotajai sistēmai ir ļoti zināms un sadursmju paplašinājumu ir iespējams samērā labi novērtēt, tad, izmantojot ierosmes spektru (att. 2.), ir iespējams novērtēt arī relaksāciju, kas

notiek atomiem mijiedarbojoties ar šūnas sienām. Sīkākas detaļas par novērtēšanas procedūru un iegūtajām vērtībām ir aprakstītas publikācijā [1].

Izmantojot novērtētos teorētiskā modeļa parametrus, tika iegūti skaitliskās modelēšanas rezultāti, kas plašā ierosmes jaudas blīvumu apgabalā dažādām supersīkstruktūras pārejām un atšķirīgiem rubīdija izotopiem labi apraksta eksperimentālos rezultātus plašā magnētiskā lauka apgabalā ( $\pm 30$  G) (att. 3., 4. [1]).

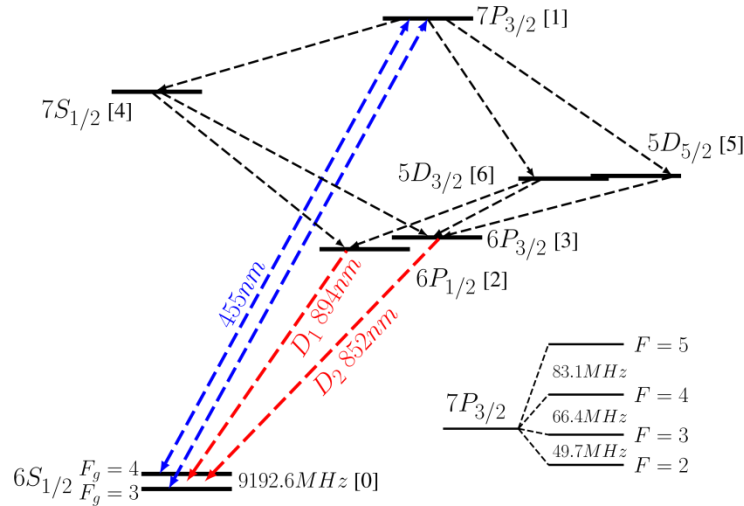


Attēls 4.  $^{87}\text{Rb}$  izotopa  $D_1$  līnijas 4 supersīkstruktūras komponentēs eksperimentāli reģistrētie un teorētiski modelētie magneto-optisko rezonansu profili

Magneto-optiskās rezonanses ir piemērotas augstas precizitātes magnētiskā lauka mērīšanai. Īpaši plānā šūnā šīs rezonanses atbilst ļoti šaurā telpas apgabalā esošam magnētiskajam laukam, paverot iespēju magnētiskā lauka gradienta mērīšanai ar telpisko precizitāti līdz  $1 \mu\text{m}$ .

### 3. Koherentas ierosmes un koherenču pārnese modelēšana kaskāžu tipa atomārās pārejās

Kaskādes tipa pārejā atomi tiek ierosināti uz tādu stāvokli, starp kuru un pamatstāvokli sastopami vēl vairāki enerģijas līmeņi, un atoms var atgriezties pamatstāvoklī pa dažādiem ceļiem (att. 5.)



Attēls 5. Kaskādes tipa pārejas no cēzija  $7P_{3/2}$  ierosinātā stāvokļa

Aplūkotajā sistēmā cēzija atomi no pamatstāvokļa  $6S_{1/2}$  tiek ierosināti uz stāvokli  $7P_{3/2}$ , no kura tie sabrūkot pa dažādiem ceļiem atgriežas pamatstāvoklī. Eksperiments tiek reģistrēta gan tiešā (455 nm), gan netiešā (852 un 894 nm) fluorescences un tās atkarība no magnētiskā lauka.

Veidojot matemātisko modeli šādai fizikālai sistēmai, jāņem vērā, ka atšķirībā no sistēmas (3) ir nevis 2 bet gan 7 stāvokļi, kas jāņem vērā, līdz ar to risināmā vienādojumu sistēma izskatās šāda [2]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{g_i g_j}^{[0]}}{\partial t} = & -i\omega_{g_i g_j} \rho_{g_i g_j}^{[0]} - \gamma \rho_{g_i g_j}^{[0]} + \left( \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[0]g_i g_j}^{[1]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[1]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[0]g_i g_j}^{[2]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[2]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[0]g_i g_j}^{[3]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[3]} \right) \\
 & + \frac{|\varepsilon_{\bar{\omega}}|^2}{\hbar^2} \sum_{e_k, e_m} \left( \frac{1}{\Gamma_R + i\Delta_{e_m g_i}} + \frac{1}{\Gamma_R - i\Delta_{e_k g_j}} \right) d_{g_i e_k}^* d_{e_m g_j} \rho_{e_k e_m}^{[1]} \\
 & - \frac{|\varepsilon_{\bar{\omega}}|^2}{\hbar^2} \sum_{e_k, g_m} \left( \frac{1}{\Gamma_R - i\Delta_{e_k g_j}} d_{g_i e_k}^* d_{e_k g_m} \rho_{g_m g_j}^{[0]} + \frac{1}{\Gamma_R + i\Delta_{e_k g_i}} d_{g_m e_k}^* d_{e_k g_j} \rho_{g_i g_m}^{[0]} \right) \\
 & + \lambda \delta(g_i, g_j)
 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{e_i e_j}^{[1]}}{\partial t} = & -i\omega_{e_i e_j} \rho_{e_i e_j}^{[1]} - (\gamma + \Gamma^{[1]}) \rho_{e_i e_j}^{[1]} + (0) \\ & + \frac{|\varepsilon_{\bar{\omega}}|^2}{\hbar^2} \sum_{g_k, g_m} \left( \frac{1}{\Gamma_R - i\Delta_{e_i g_m}} + \frac{1}{\Gamma_R + i\Delta_{e_j g_k}} \right) d_{e_i g_k} d_{g_m e_j}^* \rho_{g_k g_m}^{[0]} \\ & - \frac{|\varepsilon_{\bar{\omega}}|^2}{\hbar^2} \sum_{g_k, e_m} \left( \frac{1}{\Gamma_R + i\Delta_{e_j g_k}} d_{e_i g_k} d_{g_k e_m}^* \rho_{e_m e_j}^{[1]} + \frac{1}{\Gamma_R - i\Delta_{e_i g_k}} d_{e_m g_k} d_{g_k e_j}^* \rho_{e_i e_m}^{[1]} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{f_i f_j}^{[2]}}{\partial t} = & -i\omega_{f_i f_j} \rho_{f_i f_j}^{[2]} - (\gamma + \Gamma^{[2]}) \rho_{f_i f_j}^{[2]} \\ & + \left( \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[2]f_i f_j}^{[4]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[4]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[2]f_i f_j}^{[6]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[6]} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{f_i f_j}^{[3]}}{\partial t} = & -i\omega_{f_i f_j} \rho_{f_i f_j}^{[3]} - (\gamma + \Gamma^{[3]}) \rho_{f_i f_j}^{[3]} \\ & + \left( \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[3]f_i f_j}^{[4]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[4]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[3]f_i f_j}^{[5]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[5]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[3]f_i f_j}^{[6]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[6]} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

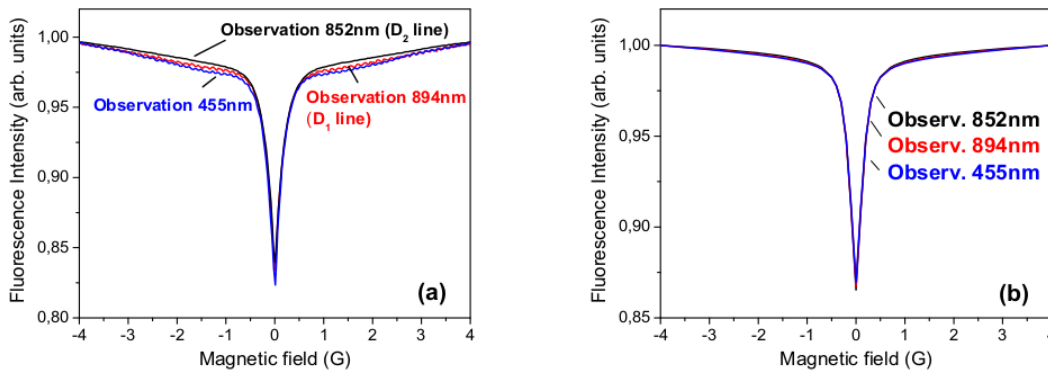
$$\frac{\partial \rho_{f_i f_j}^{[4]}}{\partial t} = -i\omega_{f_i f_j} \rho_{f_i f_j}^{[4]} - (\gamma + \Gamma^{[4]}) \rho_{f_i f_j}^{[4]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[4]f_i f_j}^{[1]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[1]}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho_{f_i f_j}^{[5]}}{\partial t} = -i\omega_{f_i f_j} \rho_{f_i f_j}^{[5]} - (\gamma + \Gamma^{[5]}) \rho_{f_i f_j}^{[5]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[5]f_i f_j}^{[1]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[1]}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho_{f_i f_j}^{[6]}}{\partial t} = -i\omega_{f_i f_j} \rho_{f_i f_j}^{[6]} - (\gamma + \Gamma^{[6]}) \rho_{f_i f_j}^{[6]} + \sum_{e_k e_m} \Gamma_{[6]f_i f_j}^{[1]e_k e_m} \rho_{e_k e_m}^{[1]}. \quad (11)$$

Katrs no vienādojumiem (5-11) apraksta kāda no attēlā 5. parādīto atomāro stāvokļu attīstību laikā, visi vienādojumu kopā veido lineāru diferenciālvienādojumu sistēmu, kura ir atrisināma stacionāram stāvoklim, visu vienādojumu kreisās puses pielīdzinot nullei.

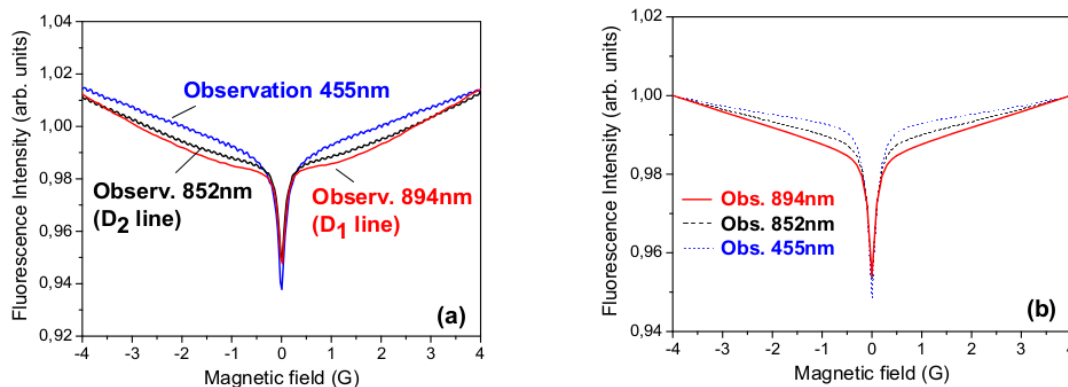
Sistēmas (5)-(11) skaitliskā atrisināšana ir ļoti resursietilpīga, tāpēc bija ļoti svarīgi izvēlēties optimālu sākotnējo parametru novērtējumu. Līdzīgi kā sistēmai (3) arī šai sistēmai tika veikta vidējošana Doplera profilā.



**Attēls 6.** Cs  $6P_{1/2}$  ( $F_g = 3$ )  $\rightarrow$   $7P_{3/2}$  ierosmē novēroto kaskāžu pāreju fluorescences trim komponentēm. Eksperimentālie (pa kreisi) un teorētiskā modeļa (pa labi) rezultāti [2]

No atšķirīgiem pamatstāvokļa supersīkstruktūras līmeņiem ierosināto kaskāžu pāreju fluorescences signāli trim novērojamiem viļņu garumiem ir redzami attēlos 6. un 7.





Attēls 7. Cs  $6P_{1/2}$  ( $F_g = 4$ )  $\rightarrow$   $7P_{3/2}$  ierosmē novēroto kaskāžu pāreju fluorescence trim komponentēm. Eksperimentālie (pa kreisi) un teorētiskā modeļa (pa labi) rezultāti [2]

Kaskāžu pāreju pētījumi liecina, ka ar lāzera starojumu inducētās koherences ierosinātajos stāvokļos tiek efektīvi pārnestas uz zemāk esošiem stāvokļiem, kas tiešā veidā nemijiedarbojas ar ierosinošo starojumu. Šādā veidā ir iespējams optiski polarizēt izolētus atomāros stāvokļus un izvairīties no dažādiem nevēlamiem blakusefektiem polarizācijas procesā. Teorētiskās modelēšanas rezultāti liecina, ka arī ļoti sarežģītām fizikālām sistēmām teorētiskais modelis sniedz apmierinošu aprakstu, pat neskatoties uz to, ka nav iespējams veikt parametru pieskaņošanu ierobežoto datorresursu dēļ.

#### 4. Koherentas ierosmes modelēšana molekulās lielu leņķiskā momenta kvantu skaitli

Divu (un vairāku) atomu molekulu enerģētiskā struktūra ir krietni sarežģītāka nekā atsevišķiem atomiem. Molekulu enerģētisko struktūru iedala trīs līmeņos:

1. Elektroniskie enerģijas līmeņi;
2. Svārstību enerģijas līmeņi;
3. Rotācijas enerģijas līmeņi.

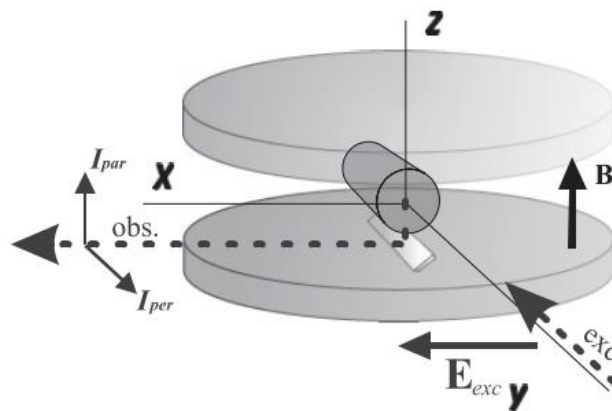
Katrai nākamajai grupai raksturīgie attālumi starp atšķirīgiem enerģijas līmeņiem ir vismaz par vienu lieluma kārtu mazāki – katrs elektroniskais līmenis satur lielu skaitu svārstību līmeņu, un katrs no svārstību līmeņiem – lielu skaitu rotācijas līmeņu. Atomu enerģija savukārt ir aprakstāma tikai ar elektroniskajiem enerģijas līmeņiem, jo tajos nevar notikt starpkodolu saišu svārstības vai rotācija ap simetrijas centriem. Elektroniskos līmeņus aprakstoši orbitālā un pilnā elektronu vai atoma leņķiskā momenta kvantu skaitļi tipiskā gadījumā ir samērā mazi ( $< 10$ ), savukārt ar svārstību un rotāciju kvantu skaitļi var sasniegt ievērojami lielākas vērtības. Ņemot vērā visu iepriekš teikto, var secināt, ka molekulām enerģētisko līmeņu un tajās notiekošo koherento procesu matemātiskais apraksts ir ievērojami sarežģītāks nekā atomu gadījumā.

Tāpēc veicot pētījumus par koherentiem procesiem molekulās cenšas izmantot sistēmas, kas fizikāli ir vienkāršākas – raksturīgi ir pētījumi par sārnu metālu divatomu molekulām. Matemātiskajā modelēšanā tiek rūpīgi izsvērts, kādas molekulu enerģētiskās struktūras īpašības ir nepieciešams ņemt vērē un kādas var atstāt, nezaudējot spēju aprakstīt reālo fizikālo sistēmu.

Šī projekta ietvaros tika veikts pētījums par  $K_2$  molekulās novērojamām magneto-optiskām rezonansēm, enerģijas stāvokļiem ar lielām rotācijas kvantu skaitļa vērtībām. Kā pētījuma

fizikālā sistēma tika izvēlēta  $K_2$  molekulu pāreja starp elektroniskajiem līmeņiem  $X_1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Pi_u$ , novērojot polarizāciju uz to pašu elektronisko līmeni, kā svārstību pamatstāvoklis tika izvēlēts  $v''=0$ , ierosinātais  $v'=0$ , bet fluorescenci novēroja uz līmeni  $v_1''=3$ . Rotācijas kvantu skaitļi tika izvēlēti  $J''=99 \rightarrow J'=99 \rightarrow J_1''=99$  (Q pāreja) un  $J''=105 \rightarrow J'=106 \rightarrow J_1''=107$  (R pāreja). Veidojot matemātisko modeli tika pieņemts, ka blakus esošie rotācijas līmeņi atrodas pietiekami tālu, lai tie neietekmētu izvēlētajā pārejas ne Doplera efekta rezultātā, ne arī līmeņu sajaukšanās rezultātā, kas uz rotācijas līmeņiem neattiecas. Ņemot vērā šos apsvērumus, divatomu molekulas bija iespējams aprakstīt bāzē  $|\xi, J_i, m_j\rangle$ , kur  $J_i$  ir pamata vai ierosinātā stāvokļa rotācijas kvantu skaitlis un  $m_j$  – tam atbilstošais magnētiskais kvantu skaitlis jeb rotācijas momenta projekcija uz kvantēšanās ass, bet ar  $\xi$  ir aprakstīti visi pārējie kvantu skaitļi, kas izvēlētajā pārejas ietvaros paliek nemainīgi. Aprakstot molekulāro sistēmu šādā bāzē uz to ir iespējams attiecināt diferenciālvienādojumu sistēmu (3), kuru var transformēt lineāru vienādojumu sistēmā, pieņemot, ka ierosmē ir iestājies stacionārs stāvoklis un blīvuma matricu atvasinājumus pēc laika var pielīdzināt nullei.

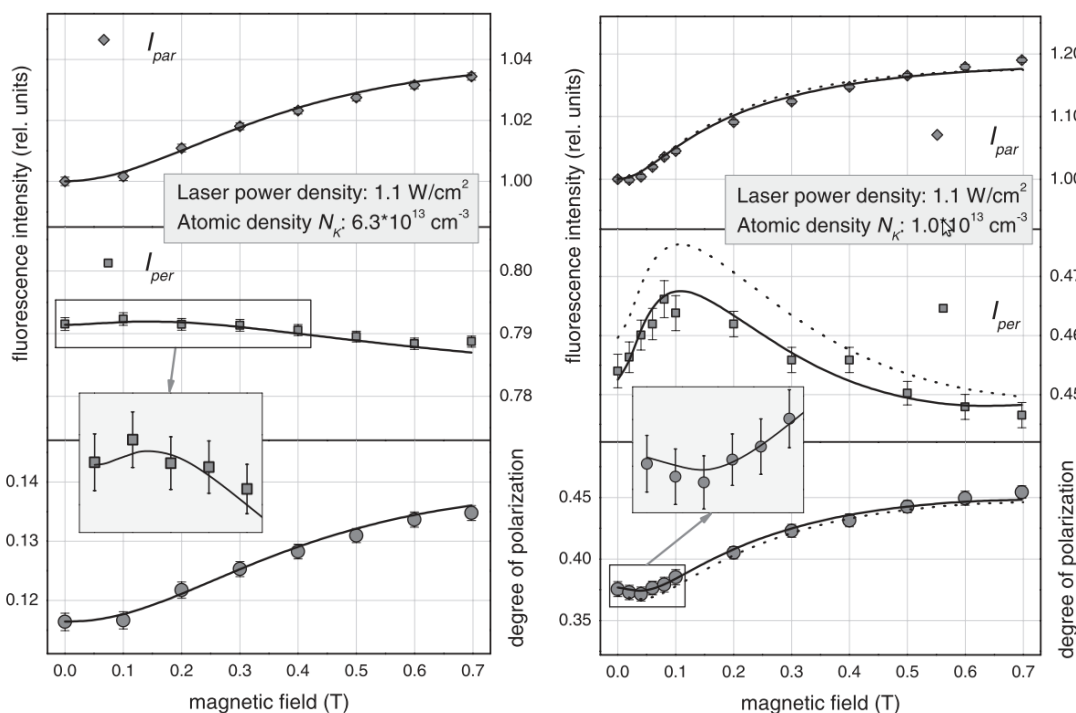
Uzdevums atrisināt šo lineāro vienādojumu sistēmu tomēr nav īpaši vienkāršs, jo sistēmu kopā veido  $(2*J'' + 1)(2*J' + 1)$  vienādojumi, kas kopumā veido aptuveni 40 000 vienādojumus izvēlētajā fizikālās sistēmas aprakstam. Ņemot vērā, ka vienādojumu atrisinājumi ir kompleksi skaitļi, reālais nezināmo lielumu skaits ir vēl 2 reizes lielāks. Tiešā veidā šādu sistēmu risināšana prasa ļoti jaudīgus datorus un ir laikietilpīga. Skaitlisko uzdevumu var vienkāršot, ņemot vērā, ka lineārajai vienādojumu sistēmai atbilstošajā koeficientu matricā lielākā daļa elementu ir vienāda ar nulli – aprakstītajai fizikālajai sistēmai nenulles elementu proporcija matricā ir aptuveni  $10^{-4}$ . Operācijām ar šādām, daļēji aizpildītām matricām, ir iespējams izmantot īpašus algoritmus, kas ņem vērā tikai no nulles atšķirīgos elementus.



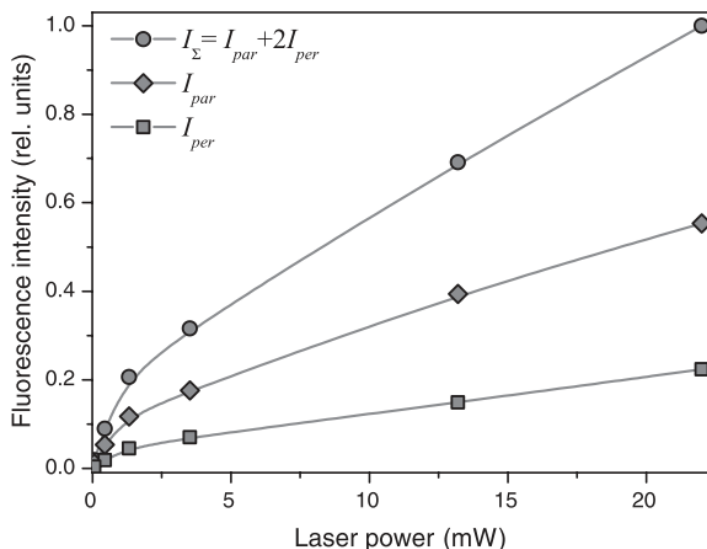
Attēls 8. Ierosmes un novērošanas ģeometrija, novērojot magneto-optiskās rezonances  $K_2$  molekulā [3]

Pirmkārt matrica jāpieraksta īpašā formā, norādot no nulles atšķirīgo elementu indeksus un vērtības, nevis visas vērtības pēc kārtas, šādā veidā viena (no nulles atšķirīga) elementa saglabāšanai tiek izmantots trīs reizes lielāks atmiņas apjoms, tomēr, ņemot vērā matricas aizpildījumu apskatāmajā uzdevumā, tiek aizņemta  $3*10^{-4}$  no tās atmiņas, ko aizņemtu koeficientu matrica tradicionālā formā. Darbam ar šīm matricām tiek izmantota brīvpieejas C++ bibliotēka *UMFPACK (Unsymmetric Multifrontal sparse lu Factorization PACKage)* [ACMTrans.Math. Softw. 30, 165 (2004)]. Risinot lineāru vienādojumu sistēmu, kas pierakstīta formā  $Ax = b$ , ir nepieciešams diagonalizēt matricu A, kas ir iepriekš aprakstīta, daļēji aizpildītā koeficientu matrica. Skaitliskajā modelēšanā izmantotā bibliotēka šo matricu sadala apakšmatricās, kas ir izvietotas uz galvenās diagonāles, katrā nākamajā solī šo darbību veicot ar iepriekš izveidotajām apakšmatricām līdz to izmērs samazinās līdz vienam

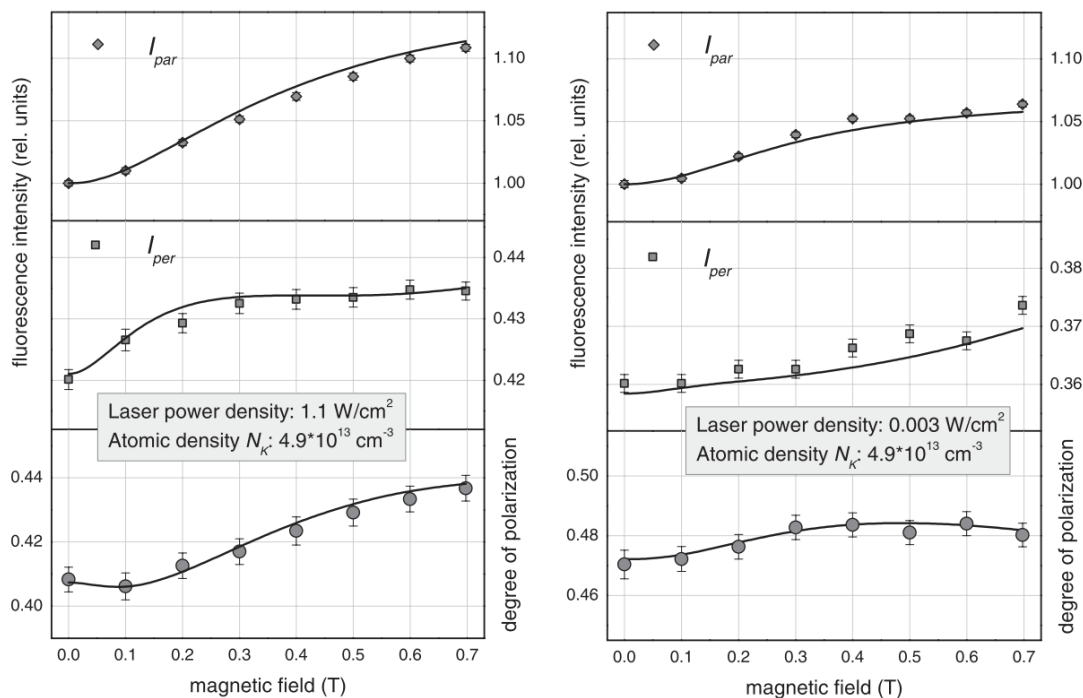
elementam un sākotnējā matrica ir diagonalizēta. Strādājot ar skaitļiskajiem modeļiem tika konstatēts, ka UMFPACK algoritma izmantošana kļūst attaisnojama (ātrāka kā pilnas matricas diagonalizēšana) tad, kad matricas aizpildījums ir aptuveni  $10^{-1}$ , kas izpildās pie  $J \approx 10$ . Līdz ar to skaitļiskā modelēšana tika veikta diagonalizējot lineārās vienādojumu sistēmas koeficientu matricu, izmantojot UMFPACK algoritmu. Šādi realizēts skaitļiskais modelis ļāva ar parastiem datoriem realizēt nepieciešamos aprēķinus, lai modelētu eksperimentālos rezultātus. Eksperimentos tika novērotas magneto-optiskās rezonanses magnētiskā lauka  $B = 0$  apkārtnē mainot lauku no 0 līdz 10 000 gaušu robežās. Iegūtie modelēšanas rezultāti ir labi atbilstoši eksperimentā reģistrētajiem, tiek novērota tumšā rezonanse ar raksturīgo platumu dažī simti gaušu gan atsevišķās fluorescences komponentēs ar ortogonālu polarizāciju (skat. att. 8.), gan arī fluorescences polarizācijas (att. 9. un 11.).



Attēls 9.  $K_2$  molekulā reģistrētās (punkti) un modelētās magneto-optiskās rezonanses. Pa kreisi - R pāreja, pa labi - R pāreja [3]



Attēls 10. Pilnās fluorescences atkarība no ierosinošā starojuma jaudas blīvuma, eksperimentālie dati.



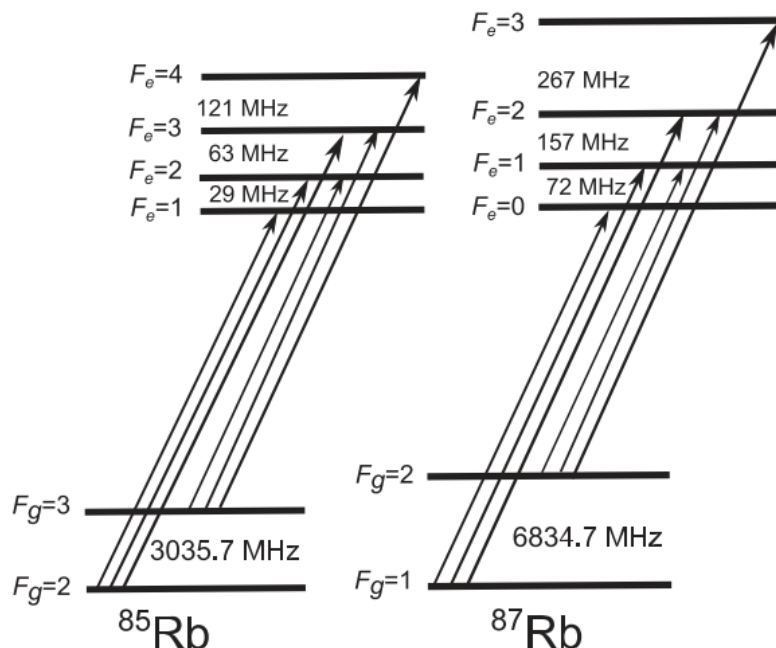
Attēls 11. K2 molekulā reģistrētās (punkti) un modelētās magneto-optiskās rezonances. Q pāreja, zemāka atomu koncentrācija nekā 8. attēlā. Pa kreisi - augsts ierosmes jaudas blīvums, pa labi - zems ierosmes jaudas blīvums [3]

Redzams, ka teorētiskais modelis sniedz ļoti labu eksperimentālo rezultātu aprakstu un ir veiksmīgi piemērojams sistēmu ar lielu leņķisko momentu aprakstam.

Jāpiebilst, ka modelēšanas procesā, strādājot ar magneto-optiskajām rezonansēm, kas ir iegūtas pie atšķirīgiem ierosinošā starojuma jaudas blīvumiem, ir jāpielieto Rabi frekvences, kas tiek iegūtas pēc atšķirīgiem algoritmiem, ko ilustrē 10. attēls, tajā redzams, ka palielinot ierosmes jaudas blīvumu, fluorescence pie mazām jaudām aug pēc vienas lineāras sakarības, bet pie lielām jaudām – pēc citas, liecinot, ka iestājas zināms fluorescences piesātinājums un arvien lielāka nozīme ir relatīvi zemas jaudas apgabaliem lāzera kūļa malās. Šī problēma tiks aplūkota šīs apakšaktivitātes atskaites 7. punktā.

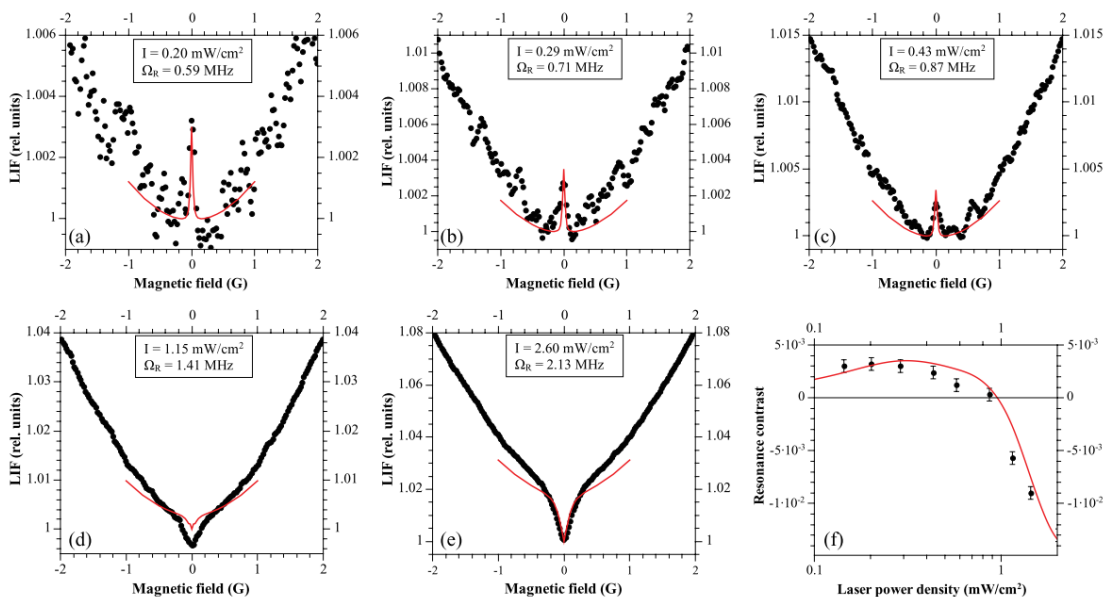
## 5. Koherentās ierosmes matemātiskā modeļa pārbaude augstas jutības atomāros procesos

Magneto-optisko rezonansu tipiskajā pielietojumā magnētiskā lauka mērīšanā jeb magnetometrijā būtiskākas ir tādas rezonances, kas ir šauras un ar lielu kontrastu, kas parasti ir raksturīgs tumšajām rezonansēm. Gaišās rezonances, kam ir mazs kontrasts, tiek uzskatītas par interesantu parādību, taču tām šobrīd nav praktiska pielietojuma. Taču tas nenozīmē, ka šīs vājās gaišās rezonances ir nenozīmīgas pētnieciskajā procesā, tieši šādi – vāji izteikti un pret apkārtējiem apstākļiem jutīgi procesi ir īpaši būtiski teorētiskā modeļa pārbaudes procesā, jo var viennozīmīgi parādīt modeļa spēju veikt kvantitatīvu fizikālās realitātes aprakstu.

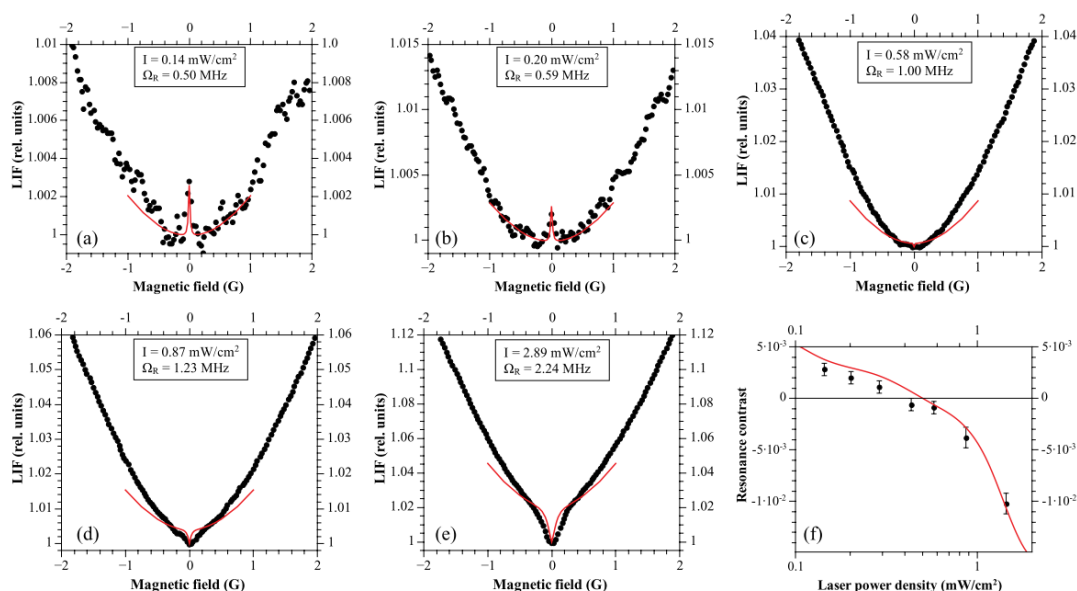


Attēls 12. Rubīdija  $D_2$  līnijas struktūra

Interesants šādu gaišo rezonansu piemērs ir novērojams rubīdija atomu  $D_2$  spektrālās līnijas (att. 12.)  $F_g = 2 \rightarrow F_e = 3$  (I;  $^{87}\text{Rb}$ ) vai  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 4$  (II;  $^{85}\text{Rb}$ ) supersīkstruktūras komponentēs. Šīs pārejas pēc savas vispārējās struktūras  $F_g \rightarrow F_e = F_g + 1$  atbilst gaišajām rezonansēm, tomēr pētot tās atomāro tvaiku šūnā, šīs konkrētās pārejas Doplera efekta rezultātā ietekmē citas, netālu esošas supersīkstruktūras pārejas, kuras ir tumšas un ar lielāku kontrastu. Tāpēc pārejas (I) un (II) ir ļoti vāji izteiktas un jutīgas pret tādiem apstākļiem, kā nelielas ierosinošā lāzera starojuma frekvences izmaiņas, kā arī ierosmes jaudas blīvuma izmaiņas. Paralēli veicot teorētisko modelēšanu, izmantojot teorētisko modeli, kuru apraksta sistēma (3), un eksperimentālo minētajās pārejās novērojamo magneto-optisko rezonansu izpēti, modelēšanas rezultāti liecināja, ka pie zemiem ierosmes jaudas blīvumiem abās pārejās ir paredzama gaišā rezonanse ar mazu ( $< 0,1\%$ ) kontrastu, kas, palielinot jaudas blīvumu, pārvēršas tumšā rezonansē. Sākotnēji eksperimentālie rezultāti neliecināja par šīm gaišajām rezonansēm. Tomēr strādājot ar eksperimentālo iekārtu, tajā tika konstatētas nepilnības, kuras novēršot, tika reģistrētas teorētiskā modeļa paredzētās gaišās rezonanses. Turklāt tika detalizēti novērota rezonanses zīmes maiņa (no gaišas uz tumšu), palielinot ierosinošā starojuma jaudas blīvumu, pilnībā apstiprinot teorētiskā modeļa rezultātus (attēli 13. un 14.).



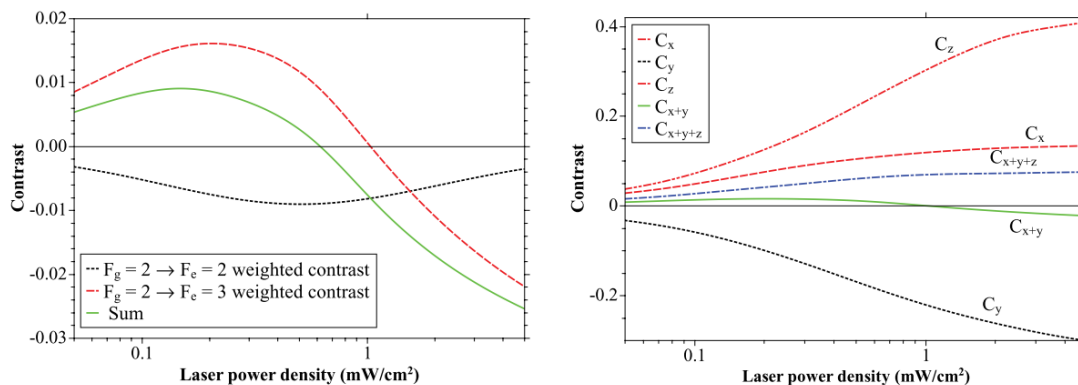
Attēls 13.  $^{85}\text{Rb}$  D2 līnijas  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 4$  supersīkstruktūras pārejā novēroto magneto-optisko rezonansu atkarība no ierosinošā starojuma jaudas blīvumu (a-e) un kontrasta atkarība no jaudas blīvuma (f) [4]



Attēls 14.  $^{87}\text{Rb}$  D2 līnijas  $F_g = 2 \rightarrow F_e = 3$  supersīkstruktūras pārejā novēroto magneto-optisko rezonansu atkarība no ierosinošā starojuma jaudas blīvumu (a-e) un kontrasta atkarība no jaudas blīvuma (f) [4]

Turpmākajā pētījumā gaitā teorētiskā modeļa informācija par atoma koherentajiem stāvokļiem tika izmantota, lai izpētītu, kas ir pamatā rezonanses zīmes maiņai. Sākotnējo hipotēzi par Doplera efekta radītu supersīkstruktūras pāreju pārklāšanos modeļa rezultāti noraidīja (attēls 15., pa kreisi). Tika konstatēts, ka efekts ir ģeometriskā rakstura – rezonansi novērojot pilnā fluorescencē, ko veido trīs ortogonālu komponentu summa ( $I_x + I_y + I_z$ ), modelis neparedz rezonanses zīmes maiņu, taču eksperimentāli realizējamajā fluorescences novērošanā vienā virzienā, to veido divas komponentes ( $I_x + I_y$ ) un šai summai ir novērojama rezonanses zīmes maiņa (attēls 15., pa labi), liecinot, ka magnētiskā lauka ietekmē notiek leņķiskā momenta precesija ierosinātajā stāvoklī.





Attēls 15. <sup>87</sup>Rb D2 līnijas F<sub>g</sub> = 2 → F<sub>e</sub> = 3 supersīkstruktūras pārejā novēroto magneto-optisko rezonansu kontrastu atkarība no ierosmes jaudas blīvuma. Dažādām ātruma grupām novērojams kontrasts (pa kreisi); dažādās fluorescences komponentēs novērojams kontrasts (pa labi) [ 4]

Šie rezultāti apliecina atomu koherentas ierosmes matemātiskā modeļa iespējas ne tikai kvantitatīvi aprakstīt fizikālo realitāti, bet arī sniegt viegli saprotamu skaidrojumu procesiem, kas notiek atomārajā vidē.

## 6. Līmeņu krustošanās signālu modelēšana pie no nulles atšķirīga magnētiskā lauka rubīdija atomāro tvaiku šūnā, D<sub>2</sub> ierosmē

Iepriekš aprakstītās magneto-optiskās rezonanses visos gadījumos bija tā sauktās nulles rezonanses, kurās tika novēroti rezonanses signāli pie nulles magnētiskā lauka, kad deģenerēti ir magnētiskie apakšlīmeņi ar vienādu pilno atoma leņķisko momentu  $F$  vai  $J$ . Enerģijas struktūras izmaiņas magnētiskajā laukā apraksta operators  $\hat{H}_B$  izteiksmē (3), kuru var izrakstīt kā

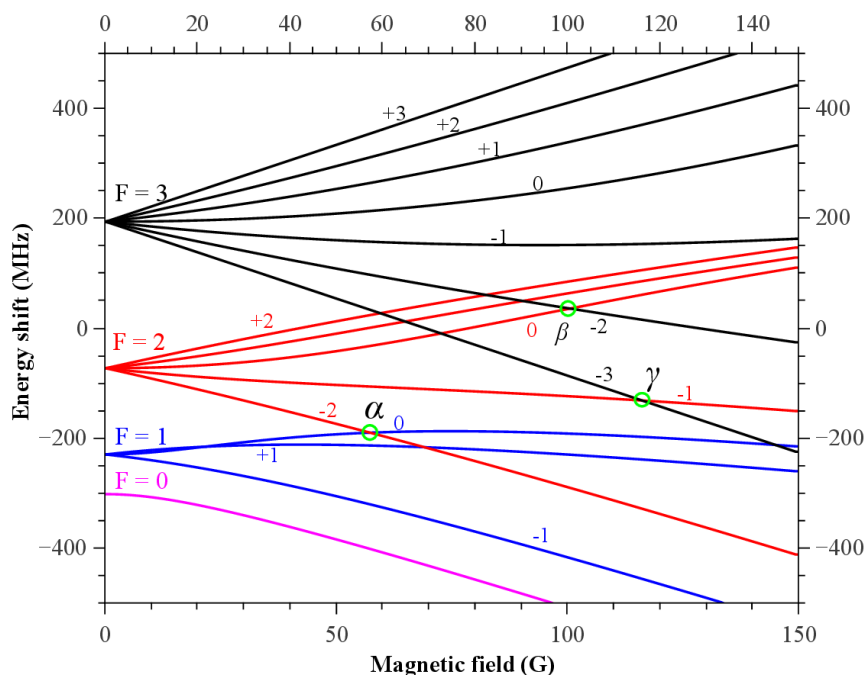
$$H_B = \frac{\mu_B}{\hbar} (g_J \mathbf{J} + g_I \mathbf{I}) \cdot \mathbf{B}, \quad (12)$$

kur  $\mu_B$  ir Bora magnetons, bet  $\mathbf{J}$  un  $\mathbf{I}$  – attiecīgi pilnais elektronu leņķiskais moments un kodola spins, kurus saskaitot iegūst pilno atoma leņķisko momentu  $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$ ,  $g_J$  un  $g_I$  ir atbilstošie Landē faktori. Hamiltona operators (12) sastāv no mijiedarbības matricām fiksētām leņķiskā momenta projekcijām uz kvantēšanās ass  $m_F = m_J + m_I$ , to var izrakstīt, izmantojot Vīgnera  $3j$  un  $6j$  simbolus:

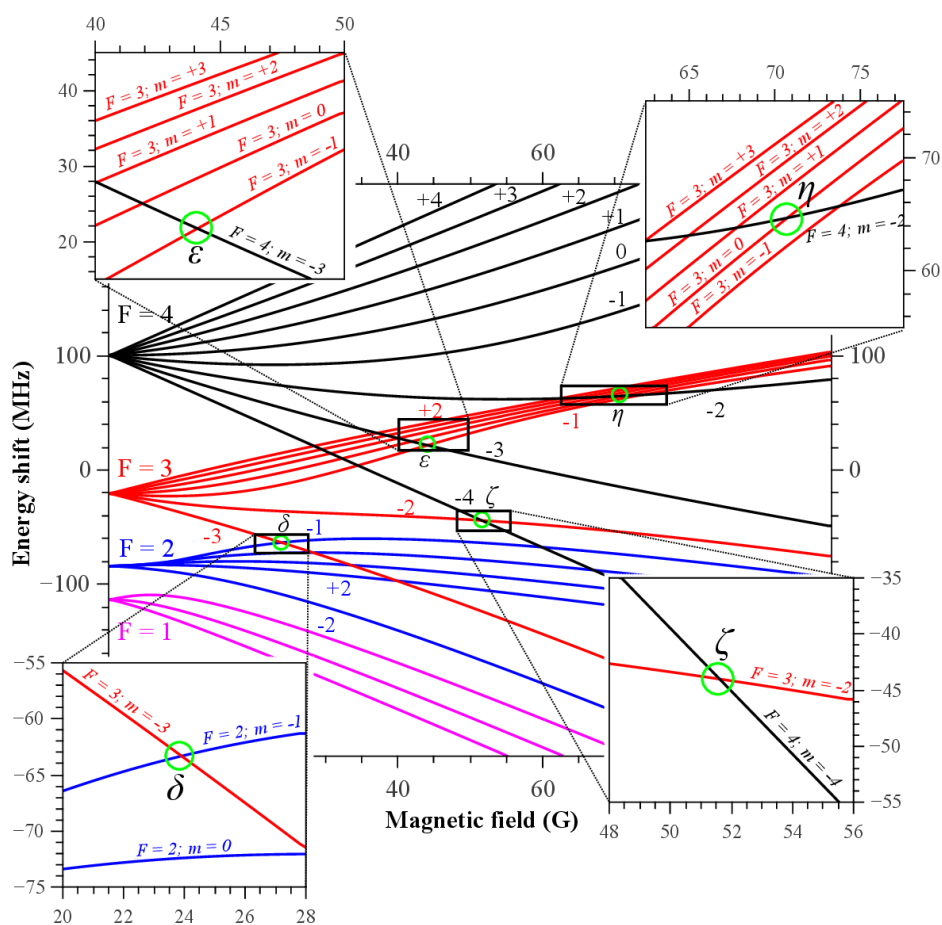
$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{B} = (-1)^{J+I+F_i+F_k-m_F+1} \sqrt{(2F_i+1)(2F_k+1)J(J+1)(2J+1)} \cdot \begin{pmatrix} F_i & 1 & F_k \\ -m_f & 0 & m_f \end{pmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} J & F_i & I \\ -F_k & J & 1 \end{Bmatrix}, \quad (13)$$

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{B} = (-1)^{J+I+F_i+F_k-m_F+1} \sqrt{(2F_i+1)(2F_k+1)I(I+1)(2I+1)} \cdot \begin{pmatrix} F_i & 1 & F_k \\ -m_f & 0 & m_f \end{pmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} I & F_i & L \\ -F_k & I & 1 \end{Bmatrix}, \quad (14)$$

kur  $\begin{pmatrix} . & . & . \end{pmatrix}$  ir  $3j$ , bet  $\begin{Bmatrix} . & . & . \end{Bmatrix}$  –  $6j$  simbols, savukārt  $L$  ir elektronu orbitālā leņķiskā momenta kvantu skaitlis. Izrakstot magnētiskā lauka un atoma iekšējās enerģijas mijiedarbības Hamiltona operatoru (12), kā matricu, saskaņā ar (12) un (13) un iegūtajai matricai atrisinot īpašvērtību problēmu, iegūtas īpašvērtības atbilst magnētisko apakšlīmeņu enerģijām (attēli 15. un 16.). Redzams, ka ir samērā daudz tādu magnētiskā lauka vērtību, pie kurām sakrīt dažādu magnētisko apakšlīmeņu enerģijas.



Attēls 16. Supersīkstruktūras līmeņu sašķelšanās  $^{87}\text{Rb } 5P_{3/2}$  stāvoklī.



Attēls 17. Supersīkstruktūras līmeņu sašķelšanās  $^{85}\text{Rb } 5P_{3/2}$  stāvoklī.

Tomēr ne visos no šiem krustpunktiem ir novērojami līmeņu krustošanās signāli, pamatnosacījums, lai tas notiktu ir tāds, lai ierosinošā elektromagnētiskā starojuma viens



fotons spētu šos abus apakšlīmeņus saistīt ar vienu un to pašu pamatstāvokļa līmeni, tas ir iespējams tad, ja izpildās nosacījums

$$\Delta m \leq 2. \quad (15)$$

Tādējādi visus krustpunktus, kuriem var novērot līmeņu krustošanās rezonances signālus, varam iedalīt 3 grupās:

1.  $\Delta m = 0$ : šādi krustpunkti nav iespējami;
2.  $\Delta m = 1$ : šādi krustpunkti novērojami ierosmes ģeometrijā, kurā leņķis starp ierosinošā starojuma polarizācijas virzienu un magnētisko lauka indukcijas vektoru nav  $0^\circ$  vai  $90^\circ$ ;
3.  $\Delta m = 2$ : šādi krustpunkti novērojami ģeometrijā, kurā leņķis starp ierosinošā starojuma polarizācijas virzienu un magnētiskā lauka indukcijas vektoru ir  $90^\circ$ ;

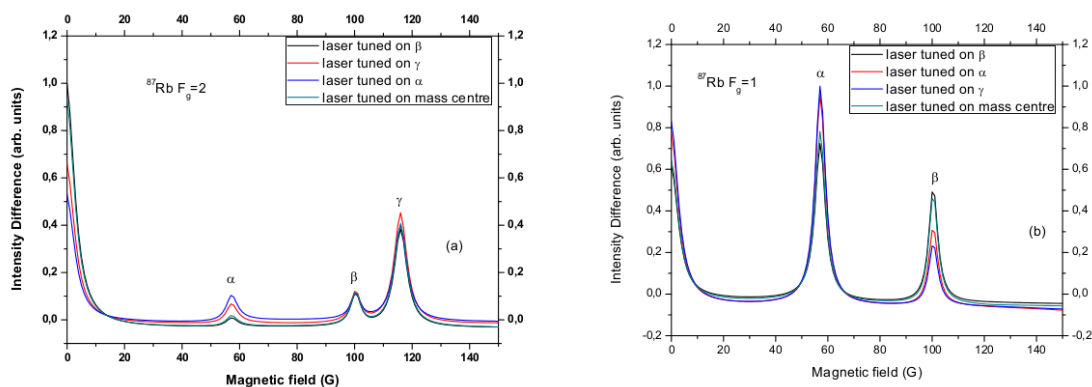
Visizteiktākās rezonances ir novērojamas 3. veida krustpunktiem, kuras arī ir tika izvēlētas pētīšanai LU Lāzeru centra eksperimentos. Šie krustpunkti 13. un 14. attēlā ir atzīmēti ar grieķu alfabēta burtiem. Šo rezonanšu pozīcijas magnētiskajā laukā nosaka supersīkstruktūras sašķelšanās un līdzīgas rezonances vēsturiski ir izmantotas atomāro konstanšu noteikšanai. Savukārt, ja ir zināma precīza informācija par atoma enerģijas struktūru, tad šīs rezonances ir iespējams izmantot magnētiskā lauka kalibrēšanai, kā lauka vērtību atzīmes, mērot lauku dažu desmitu Gausu apgabalā. Šādai procedūrai ir nozīmīgi, lai rezonances būtu pēc iespējas izteismīgākas, galvenokārt, lai to kontrasts būtu pēc iespējas lielāks.

Šāda tipa rezonances visērtāk ir novērot fluorescences polarizācijā, novērojot divas ortogonālas lineāri polarizētas fluorescences komponentes, no kurām vienai polarizācija ir paralēla ierosinošā starojuma polarizācijai, savukārt novērošana tiek veikta gar magnētiskā lauka indukcijas vektora virzienu.

Reģistrējot signālu ir būtiski pēc iespējas precīzāk iestatīt ierosinošā starojuma frekvenci, lai pie attiecīgā krustošanās signāla tiktu pēc iespējas efektīvāk inducēta koherenču veidošanās līmeņu krustpunktā. Tas ir īpaši būtiski strādājot ar  $^{87}\text{Rb}$  izotopiem, kam ir lielākas supersīkstruktūras līmeņu sašķelšanās vērtības.

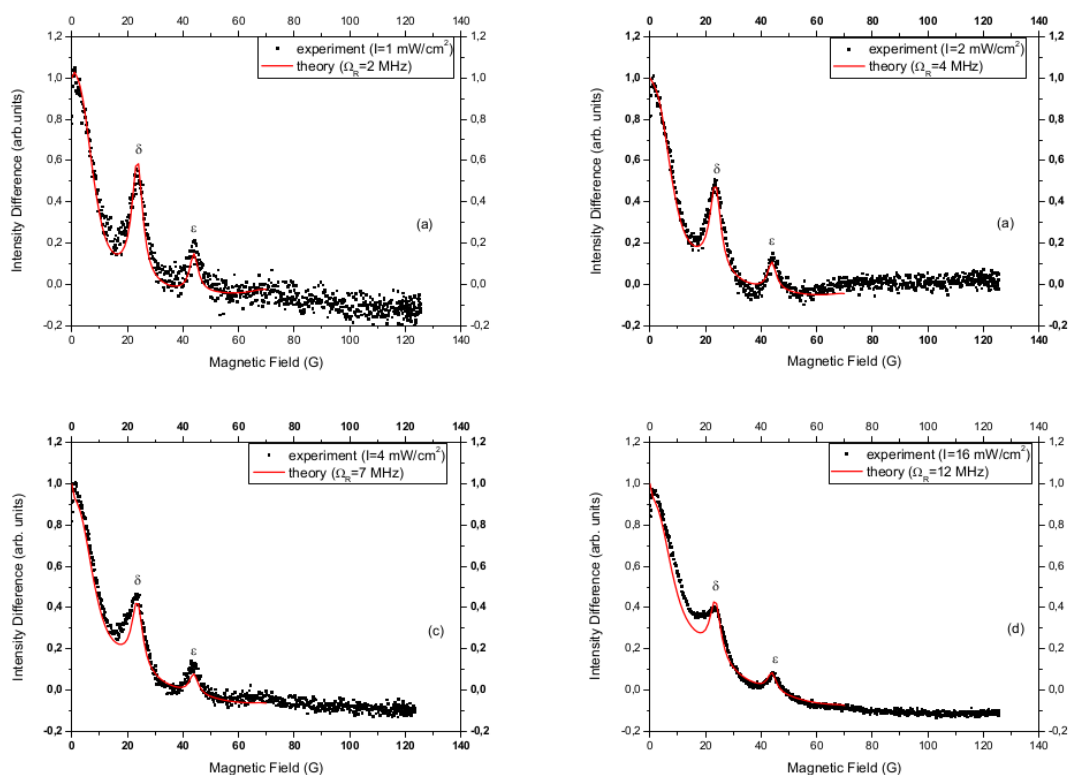
Līdz ar to kā pētījuma mērķis tika izvirzīta līmeņu krustošanās signālu rezonances kontrasta maksimizēšana, precīzi pieskaņojot ierosinošā starojuma frekvenci uz līmeņu krustošanās enerģijai, kā arī demonstrēt uz optiskajiem Bloha vienādojumiem balstītā teorētiskā modeļa iespējas kvantitatīvi aprakstīt šos līmeņu krustošanās efektus.

Pētnieciskajā darbā vispirms tika veikta teorētiskā modelēšana, lai noskaidrotu precīzas krustpunktu pozīcijas, kā arī rezonanšu kontrastus pie dažādām ierosinošā starojuma frekvencēm, šādas modelēšanas rezultātu piemērs  $^{87}\text{Rb}$  izotopam ir redzams 18. attēlā. Krustpunkta  $\alpha$  kontrasts atkarībā no lāzera frekvences, ierosmē no  $F_g = 2$  pamatstāvokļa var mainīties pat četras reizes, bet ierosmē no  $F_g = 1$ , kur tas veido visintensīvāko rezonansi visā pētāmajā sistēmā – gandrīz divas reizes. Tātad saskaņā ar teorētiskās modelēšanas rezultātiem, ir iespējams nozīmīgi uzlabot rezonanšu novērošanas iespējas, izvēloties atbilstošu ierosinošā starojuma frekvenci.



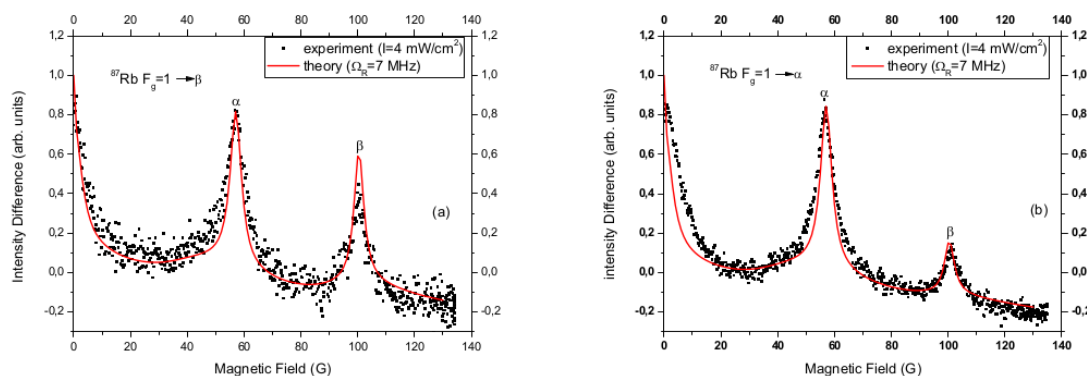
Attēls 18.  $^{87}\text{Rb}$   $D_2$  pārejā novērojamo līmeņu krustošanās rezonanšu profili atkarībā no ierosinošā starojuma frekvences

Eksperimentālie rezultāti tika reģistrēti pēc kārtas novērojot fluorescenci pie ierosmes frekvencēm, kas atbilst ikvienam no 16. un 17. attēlā atzīmētajiem krustpunktiem, kā arī pie dažādiem ierosinošā starojuma jaudas blīvumiem, šādu rezultātu piemērs ir parādīts 19. attēlā, kurā ir redzams, ka teorētiskais modelis ļoti labi apraksta eksperimentālo signāli pie zemiem jaudas blīvumiem, bet nedaudz sliktāk – pie lielākiem jaudas blīvumiem.



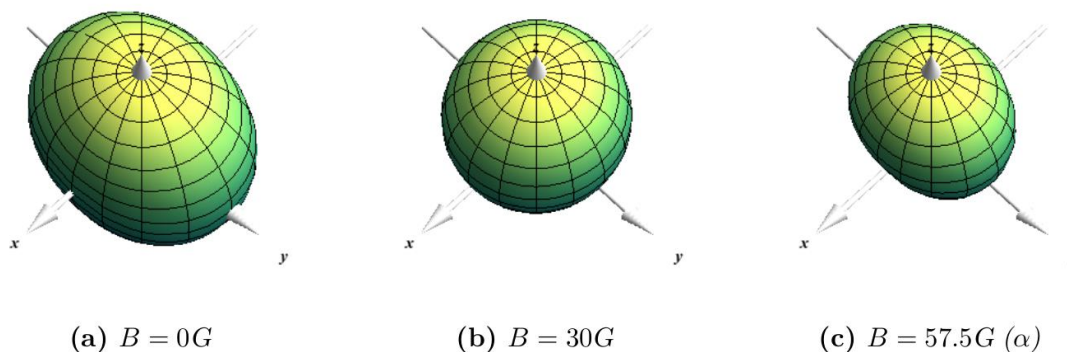
Attēls 19. Līmeņu krustošanās rezonanšu atkarība no jaudas  $^{85}\text{Rb}$   $D_2$  ierosmē

20. attēlā redzamā rezonanšu signālu atkarība no ierosinošā starojuma frekvences  $^{87}\text{Rb}$  atomos, liecina, ka arī eksperimentāli ir apstiprināti teorētiskā modeļa rezultāti par būtisko ierosmes frekvences ietekmi uz signāla kontrastu tieši šajās pārejās.



Attēls 20. Līmeņu krustošanās signālu atkarība no ierosinošā starojuma frekvences  $^{87}\text{Rb } D_2$  pārejā

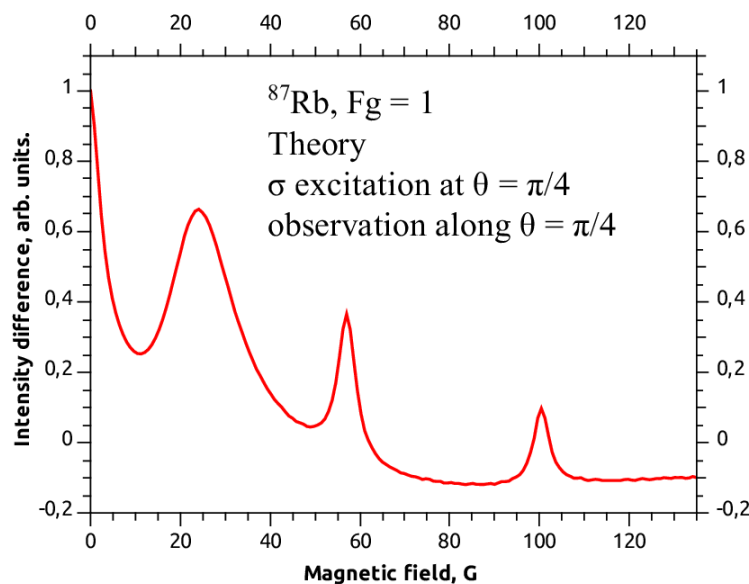
Visbeidzot pētot līmeņu krustošanās signālus, tika izmantota iespēja vizualizēt no teorētiskā modeļa iegūstamās ierosinātā stāvokļa blīvuma matricas (att. 21.). Šajos attēlos redzams, ka polarizētu fluorescences starojumu emitē atomi, kuru leņķiskā momenta varbūtību sadalījums ir asimetrisks novērošanas ( $xy$ ) plaknē (21. attēls (a) un (c)), savukārt izotropiskam fluorescences signālam atbilst izotropisks leņķiskā momenta sadalījums (21. attēls (b)).



Attēls 21. Blīvuma matricu vizualizācija  $^{87}\text{Rb } D_2$  līnijas ierosmei pie dažādām ārējā magnētiskā lauka vērtībām

$\Delta m = 2$  līmeņu krustošanās signālu pētījumu rezultāti patlaban tiek apkopoti zinātniskās publikācijas manuskriptā [5].

Ir uzsākts darbs arī pie  $\Delta m = 1$  līmeņu krustošanās signālu izpētes. Šajā izpētes procesā ir veikta teorētiskā modelēšana, uz kuras rezultātiem balstoties tiek veikta eksperimenta plānošana un reģistrēti eksperimentālie rezultāti. Teorētiskās modelēšanas interesantākie rezultāti ir tādi, kas liecina par iespēju vienlaicīgi reģistrēt gan  $\Delta m = 1$ , gan  $\Delta m = 2$  rezonanses, tādējādi iegūstot papildus atskaites punktu magnētiskā lauka kalibrēšanai. Šādu novērojumu modelēšanas rezultāti ir parādīt 22. attēlā. Jāatzīst gan, ka pagaidām šādus rezultātus vēl nav izdevies iegūt eksperimentā, jo ir tehniski sarežģīti izveidot nepieciešamo ierosmes ģeometriju.



Attēls 22. Līmeņu krustošanās signāls, kurā vienlaikus novērojamas  $\Delta m = 1$  un  $\Delta m = 2$  rezonanses

## 7. Citi pētījumu virzieni

### 7.1. Spina saspiešana

Spina saspiešana ir efekts, kurā atoms, kas, optiski polarizējot, ir sagatavots minimālās nenoteiktības stāvoklī, kurā ir atoma leņķiskā projekcija kādā noteiktā virzienā (piemēram, gar  $z$  asi) ir maksimāla, savukārt gar pārējām divām asīm ( $xy$  plaknē) tā ir minimāla un nenoteiktība šajā plaknē ir ar minimālo iespējamo vērtību pēc Heizenberga nenoteiktības sakarības, pie tam nenoteiktība plaknē  $xy$  ir sadalīta izotropi. Šādā situācijā atomu ievietojot ārējā elektriskā laukā, notiek spina „saspiešana”  $xy$  plaknē – kādā noteiktā, no elektriskā lauka un mijiedarbības lauka atkarīgā virzienā nenoteiktība samazinās, bet tam perpendikulārā – palielinās, šo procesu var salīdzināt ar riņķa līnijas saspiešanu elipsē [Phy. Rev. A, **85** 022125]. Rezultātā tiek iegūts virziens telpā, kurā atoma spins ir noteikts vēl precīzāk kā sākotnējā minimālās nenoteiktības stāvoklī. Izmantojot atomus magnētiskā lauka mērīšanai ir būtiski, lai būtu pēc iespējas precīzāk zināms to stāvoklis un šādā veidā ir iespējams palielināt mērīšanas precizitāti.

Nemot vērā, ka aprakstītais efekts palielinās, palielinoties leņķiskajam momentam, piemērota fizikālā sistēma, kurā to varētu realizēt ir divatomu molekula, kurā iespējamas ļoti lielas rotācijas momenta vērtības. Tika nolemts veikt šādu eksperimentu stacionārā NaRb molekulu ierosmē. Lai veiksmīgāk plānotu eksperimentu, tika izveidots vienkāršs teorētiskais modelis, kas apraksta sagaidāmos rezultātus. Modelī tiek pieņemts, ka atomi tiek sagatavoti minimālās nenoteiktības stāvoklī:

$$\rho'_{m,m'}^{(P)} = \delta(m, m')\delta(m, J), \quad (16)$$

kur  $m$  ir magnētiskais kvantu skaitlis, bet  $J$  – leņķiskā momenta kvantu skaitlis. Blīvuma matricai (16) tiek veikta rotācija par  $-\pi/2$  ap  $y$  asi, lai jaunā kvantēšanās ass un ārējais elektriskais lauks būtu perpendikulāri maksimālās leņķiskā momenta projekcijas virzienam. Tiek pieņemts, ka blīvuma matrica mainās laikā pēc optiskajiem Bloha vienādojumiem (1), kur Hamiltona operatoru veido atoma iekšējais Hamiltoniāns un mijiedarbība ar elektrisko lauku kā kvadrātiskais Štarka efekts:

$$E_m = \frac{d^2 E^2}{\hbar B_J} \cdot \frac{J(J+1) - 3m^2}{2J(J+1)(2J-1)(2J+3)} \quad (17)$$

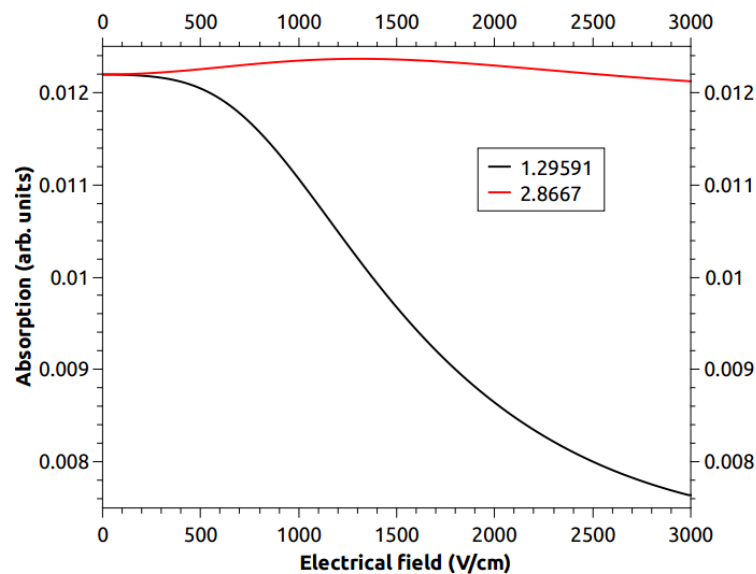
kur  $d$  ir pastāvīgais dipola moments,  $E$  – elektriskā lauka intensitāte, bet  $B_J$  – rotācijas konstante. Uzskatot, ka atoma relaksācijas operators Bloha vienādojumiem ir uzrakstāms kā

$$\hat{R}\rho = \Omega \rho^{(P)} - \gamma \rho, \quad (18)$$

notiekot optiskajai pumpēšanai saskaņā ar (16) un ar ātrumu  $\Omega$ , vienādojumu (1) atrisinājumu stacionāram stāvoklim iegūstam šādu:

$$\rho_{m,m'} = \frac{\Omega \rho^{(P)}}{\gamma + i\Delta E_{m,m'}} \quad (19)$$

Šādā veidā iegūstamās blīvuma matricas var tieši izmantot, lai aprēķinātu absorbcijas atkarību no elektriskā lauka, šādu aprēķinu piemērs ir dots 23. attēlā.



Attēls 23. Absorbcijas signāls divām ortogonālām komponentēm, atkarībā no elektriskā lauka, modelējot spina saspiešanas signālu

Rezultātos redzams, ka vienai no ortogonālām komponentēm palielinās absorbcija, liecinot par spina saspiešanas efektu, otras komponentes absorbcijas samazināšanās savukārt notiek tāpēc, ka elektriskais lauks izskaņo to no rezonanses. Šobrīd LU Lāzeru centrā tiek gatavots eksperiments, kurā būs iespējams pārbaudīt, kā šī modeļa rezultāti atbilst fizikālajai realitātei.

## 7.2. NV optiskie centri

Projekta gaitā ir izveidotas iestrādnes, lai varētu uzsākt pētījumus par slāpekļa – vakances (*Nitrogen – Vacancy*) optiskajiem centriem, kas ir sastopami ar slāpekli dopētos dimanta kristālos. Šie optiskie centri veido sistēmu ar diskrētiem enerģijas līmeņiem, kuru īpašības ir lielā mērā salīdzināma ar izolētu atomu optiskajām īpašībām. NV optisko centru īpašā vērtība slēpjas faktā, ka tie atrodas cietvielā, līdz ar to ir daudz piemērotāki industriālam pielietojumam salīdzinājumā ar atomārajiem tvaikiem. Tai pat laikā to stingri diskrētā enerģijas struktūra un nelielais enerģijas līmeņu skaits ļauj tos aprakstīt ar metodēm, kas tiek izmantotas un ir labi pārbaudītas darbā ar atomiem gāzveida stāvoklī.

Šobrīd tiek organizēti regulāri pētnieciskās grupas semināri, kuros tiek analizēta zinātniskā literatūra par līdzšinējiem pētījumiem NV centros. Tāpat tiek plānota pētnieciskā laboratorija, kurā tiks iegūti eksperimentālie rezultāti, apkopojot informāciju par nepieciešamo ekipējumu.

### Zinātniskās publikācijas.

1. **Auzinsh, M., Ferber, R., Gahbauer, F., Jarmola, A., Kalvans, L., Papoyan, A., & Sarkisyan, D.** (2010). *Nonlinear magneto-optical resonances at  $D_1$  excitation of  $^{85}\text{Rb}$  and  $^{87}\text{Rb}$  in an extremely thin cell.* Physical Review A, **81**, 033408. doi:10.1103/PhysRevA.81.033408
2. **Auzinsh, M., Ferber, R., Gahbauer, F., Jarmola, A., Kalvans, L., & Atvars, A.** (2011). *Cascade coherence transfer and magneto-optical resonances at 455 nm excitation of Cesium.* Optics Communications, **284**, 2863–2871. doi:10.1016/j.optcom.2011.01.088
3. **Auzinsh, M., Ferber, R., Fescenko, I., Kalvans, L., & Tamanis, M.** (2012). *Nonlinear magneto-optical resonances for systems with  $J \sim 100$  observed in  $K_2$  molecules.* Physical Review A, **85**, 013421. doi:10.1103/PhysRevA.85.013421
4. **Auzinsh, M., Berzins, A., Ferber, R., Gahbauer, F., Kalvans, L., Mozers, A., & Opalevs, D.** (2012). *Conversion of bright magneto-optical resonances into dark resonances at fixed laser frequency for  $D_2$  excitation of atomic rubidium.* Physical Review A, **85**, 033418. doi:10.1103/PhysRevA.85.033418
5. **M.Auzinsh, A.Berzinsh, R.Ferber, F.Gahbauer, L.Kalvans, A.Mozers, A. Spiss.** (2012). *Enhancement of Level-Crossing Resonances by Frequency Control of the Exciting Radiation Field*, manuskripts, nepublicēts.

### Konferenču tēzes

- C1. **I.Fescenko, M.Auzinsh, R.Ferber, L.Kalvans, M.Tamanis**, *Studies of coherent population trapping in diatomic molecules*, 10th European conference on atoms molecules and photons ECAMP X, Spain, Salamanca, July 4-9, 2010
- C2. **L. Kalvans, M. Auzinsh, A. Atvars, R. Ferber, F. Gahbauer, A. Jarmola**, *Coherence transfer via cascades at caesium  $7P_{3/2}$  excitation*, 10th European Conference on Atoms Molecules and Photons ECAMP X, Spain, Salamanca, July 4-9, 2010
- C3. **L. Kalvans, M. Auzinsh, R.Ferber, I. Fescenko, F.Gahbauer, A. Jarmola, A.Papoyan, D. Sarkisyan**, *Magneto-optical resonances in atomic rubidium at  $D_2$  excitation*, 10th European Conference on Atoms Molecules and Photons ECAMP X, Spain, Salamanca, July 4-9, 2010
- C4. **L. Kalvāns**, *Sārmu metālu  $D_1$  ierosmē novērojamo tumšo magneto-optisko rezonanšu piesātināšanās*, LU 69. Konference, Rīga, 2011. gada februāris.
- C5. **A. Bērziņš**,  *$^{85}\text{Rb}$  un  $^{87}\text{Rb}$  nelineārās magneto-optiskās rezonanses pie  $D_2$  ierosmes*, LU 69. Konference, Rīga, 2011. gada februāris.
- C6. **A. Berzins, M. Auzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, L. Kalvans, A. Mozers, and D. Opalevs**, *Influence of laser power density on bright and dark magneto-optical resonances*, 43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS), University of Fribourg, Fribourg, Switzerland June 28 - July 2, 2011
- C7. **Linards Kalvans, M. Auzinsh, A. Berzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, A. Mozers, D. Opalevs**, *Conversion of dark magneto-optical resonances to bright by controlled changes in the excitation parameters of the Rb  $D_2$  line at linearly polarized excitation*, Photonica 2011, Belgrade, Serbia August 29 – September 2, 2011



C8. **L.Kalvans, M.Auzinsh, A.Berzinsh, R.Ferber, F.Gahbauer, A.Mozers, A. Spiss**, *Non-zero magnetic field level-crossing spectroscopy at  $D_2$  excitation of atomic Rubidium*”, *V 'Rio de la Plata' Workshop on Laser Dynamics and Nonlinear Photonics*, Colonia del Sacramento, Uruguay, December 6 – 9, 2011

C9. **M. Auzinsh, A. Berzins, R. Ferber, F. Gahbauer, L. Kalvans, A. Mozers, and A. Spiss**, *Level-crossing spectroscopy of atomic rubidium at  $D_2$  excitation in the presence of a non zero magnetic field*, the 23rd International Conference on Atomic Physics ICAP 2012, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France, July 23 – 27, 2012

## Pētījuma apakšaktivitāte

### 4.1.2. Divatomu molekulu Furjē transformācijas spektroskopija un struktūras noteikšana

*Aktivitātes vadītājs: profesors Ruvins Ferbers*



## Rezultātu apkopojums par projekta periodu.

Divatomu molekulu spektroskopijā mūsdienās molekulāros stāvokļus ir pieņemts raksturot ar potenciālās enerģijas līknēm ( PEL ). Precīza PEL zināšana ļauj kontrolēt ķīmisko reakciju gaitu, paver iespējas izotopu atdalīšanā, superaukstu molekulu iegūšanai no aukstiem atomiem utt. Līdz šīm attīstītās PEL aprēķinu metodes „no pirmiem principiem” nedot tādu precizitāti, kāda ir vajadzīga, lai efektīvi īstenotu minētos eksperimentus, un līdz ar to precīzi dati par eksperimentā iegūtām PEL ir ļoti nepieciešami. Lai konstruētu eksperimentā bāzētu divatomu molekulu PEL  $U(r)$ , tradicionāli tā analītisko formu iekļauj stacionārā Šrēdingera vienādojumā, lai vienkāršotu tā atrisinājumu un iegūtu īpašvērtības, kuras var izmērīt eksperimentā. Bez tam ļoti aktuāli ir arī precīzi un pēc iespējas ātrāk risināt Šrēdingera vienādojumu mijiedarbojošiem potenciāliem. Atsevišķa, sarežģīta problēma ir potenciāla  $U(r)$  konstruēšana tuvu disociācijas robežai.

### 1. Skaitlisko metožu pilnveidošana (sadarbībā ar matemātiķiem)

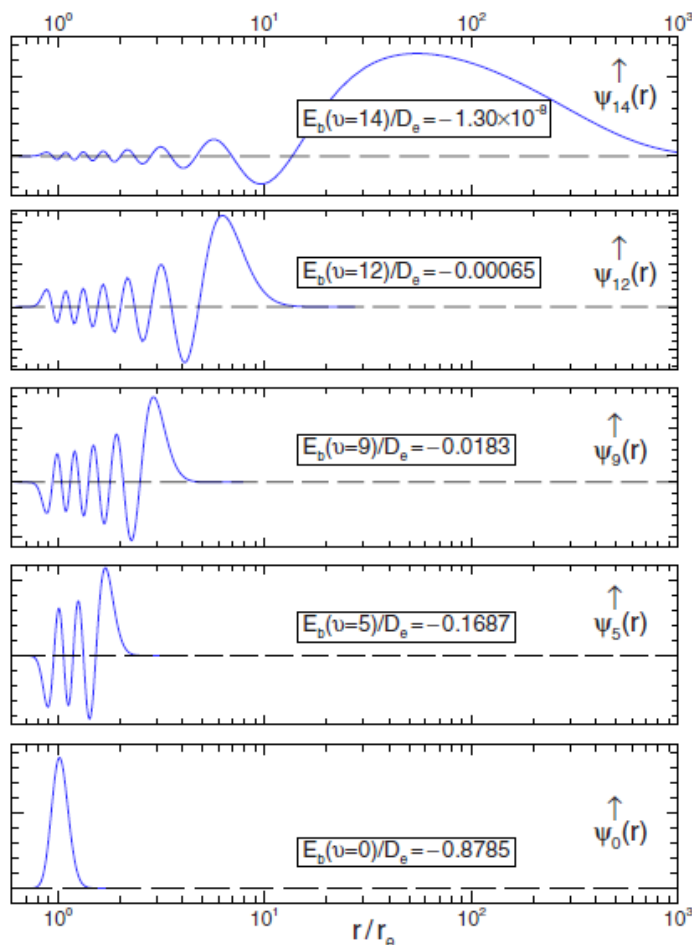
#### 1.2. Radiālā Šrēdingera vienādojuma risināšanas optimizācija

Lai efektīvi risinātu molekulu spektroskopijas pamatuzdevumu, proti, konstruētu divatomu molekulas potenciālās enerģijas līkni (PEL) balstoties uz liela eksperimentālo enerģiju vērtību klāstu, ir nepieciešams izstrādāt un pārbaudīt precizētu efektīvu matemātisko metodi radiālās kustības vienādojumu risināšanai, kas nozīmē izstrādāt un realizēt ātrus algoritmus viendimensionālā radiālā Šrēdingera vienādojuma atrisināšanai.

Šī uzdevuma izpildes gaitā ir izstrādāta un aprobēta jauna metode Šrēdingera vienādojuma atrisināšanai, kuras būtība ir parastā integrēšanas mainīgā lieluma  $r \in [0, \infty)$  aizvietošana ar reducēto mainīgo lielumu  $y \equiv y(r; \bar{\alpha})$ , kurš ir analītiski definēts intervālā  $y \in [a, b]$  un pārveido parasto radiālo Šrēdingera vienādojumu ekvivalentā formā, kurā tuvu disociācijas robežai enerģijas līmeņu aprēķins ir tik pat efektīvs kā stipri saistīto līmeņu aprēķins.

Apskatīsim parasto radiālo jeb efektīvo viendimensionālo Šrēdingera vienādojumu, kas ir definēts bezgalīgā intervālā  $r \in [0, \infty)$ :

$$\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} = -Q(E; r) \psi(r) \equiv - \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)] \right\} \psi(r) \quad . \quad (1)$$



1. attēls. Radiālās viļņu funkcijas  $\psi(r)$  dažādiem svārstību līmeņiem, sākot ar  $v = 0$  (stipri saistīts līmenis) līdz tuvu disociācijas līmenim.

Tāda vienādojuma atrisināšanas problēma parādās, kad ir nepieciešams nomodelēt un nosimulēt spektrus vai noteikt izkliedes garumu, kas nosaka ultraauksto molekulu veidošanās efektivitāti. Jau esošie radiālo Šrēdingera vienādojuma skaitliskās atrisināšanas algoritmi ļauj ātri un efektīgi atrisināt šo vienādojumu tad, kad līmeņa enerģija ir daudz zemāka (vairāk nekā par  $50\text{-}100\text{ cm}^{-1}$ ) par potenciāla  $U(r)$  disociācijas enerģiju. Problēmas rodas tad, kad līmeņa enerģija ir tuva disociācijas enerģijai, jo tad  $r$  apgabals, kurā viļņu funkcija ir atšķirīga no nulles, tuvojās bezgalībai. Problēmas būtība ir ilustrēta 1. attēlā.

Lai atrisinātu tāda tipa problēmu, ievēdīsim jaunu radiālās koordinātes funkciju  $y(r)$ , kura ir gluda un monotoni augoša funkcija atkarībā no  $r$ . Tad sākotnējais Šrēdingera vienādojums (1) izskatīsies šādi:

$$\left[ \frac{d^2}{dy^2} - \left( \frac{g'}{g} \right) \frac{d}{dy} + g^2 Q \right] \psi = 0, \quad (2)$$

kur  $g(y) \equiv \frac{dr(y)}{dy} = 1$ ,  $\frac{dy(r)}{dr} > 0$  un funkcija  $r(y)$  ir definēta intervālā  $y \in [a, b]$  kā apgrieztā funkcijai  $y(r)$ , bet  $(\prime)$  nozīmē diferencēšanu pēc jauna mainīgā  $y$ . Tad substitūcija  $\psi(r) = \sqrt{g} \phi(y)$  transformē vienādojumu (2) uz pieņemto formu:

$$\frac{d^2 \phi}{dy^2} = -\tilde{Q}(E, y) \phi(y) \quad (3)$$

kurā  $\tilde{Q}(E, y) \equiv g^2(y) Q(E, r(y)) + F(y)$  un saskaitāmais loceklis

$F(y) = \frac{g''}{2g} - \frac{3}{4} \left( \frac{g'}{g} \right)^2$  ir atkarīgs tikai no jaunās radiālās koordinātes definīcijas.

Vienādojumu (3) var pārrakstīt arī sekojošā formā:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dy^2} + g^2 \tilde{U} \right] \phi = g^2 E \phi \quad (4)$$

kur  $\tilde{U} \equiv U - \frac{\hbar^2 F(y)}{2\mu g(y)^2}$  ir efektīvais potenciāls.

Izvēlētā substitūcija ir laba ar to, ka tā ļauj izmantot jau esošus kodus Šrēdingera vienādojuma atrisināšanai (piemēram, ar Numerova metodi), vienkārši aizvietojojot tajos  $Q(E, r)$  ar  $\tilde{Q}(E, y)$  un attiecīgi transformējot arī normēšanas nosacījumus.

Lai realizētu augstāk minēto substitūciju, ir nepieciešams arī uzdot kartēšanas funkciju tiešā veidā. Izrādās, ka visērtāk ir tam izmantot divu parametru Šurkusa mainīgo

$$y(r; \alpha, \bar{r} > 0) = \frac{(r/\bar{r})^\alpha - 1}{(r/\bar{r})^\alpha + 1}; \quad y \in [-1, 1].$$

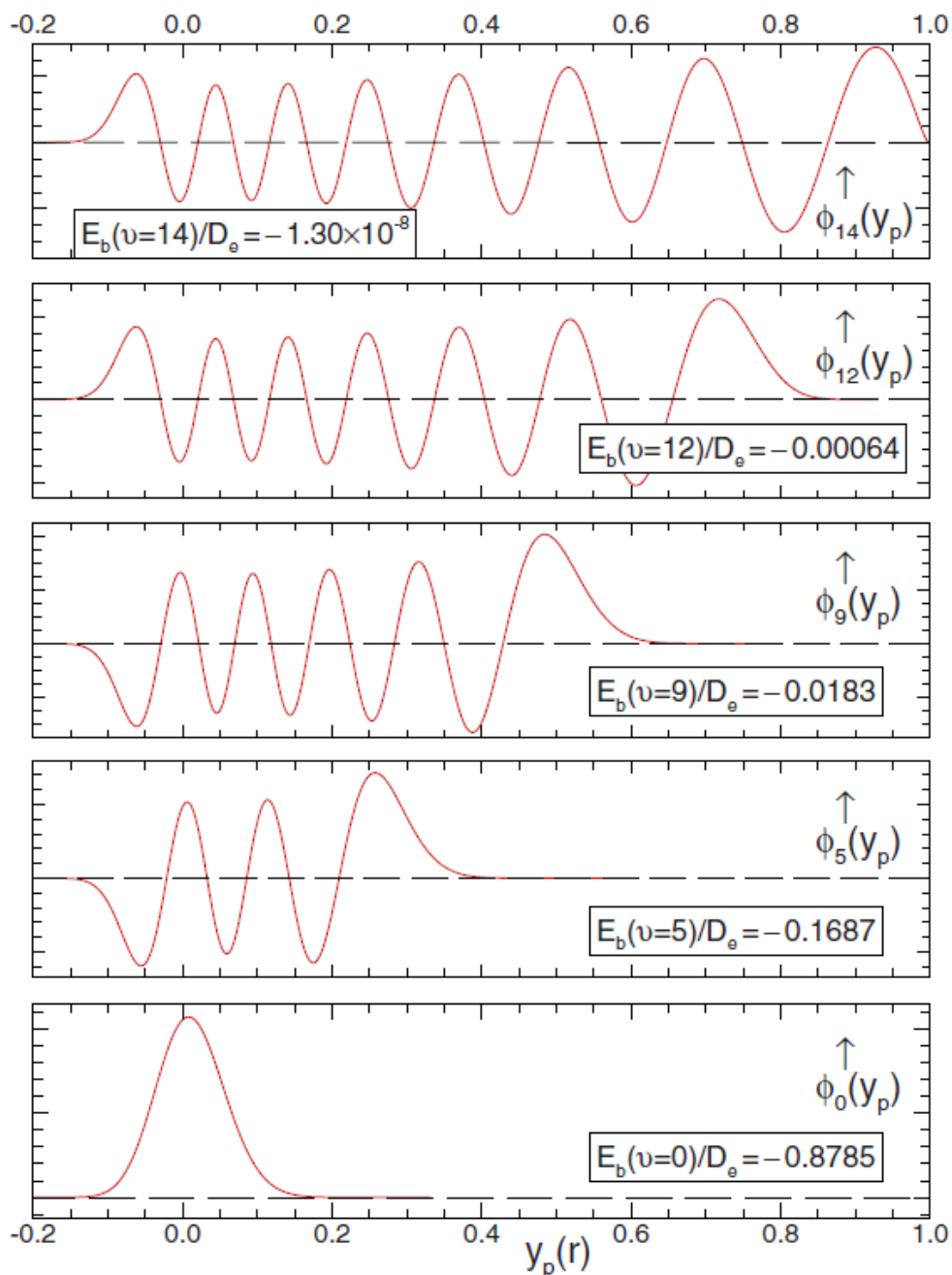
Tad

$$r(y) = \bar{r} \left( \frac{1+y}{1-y} \right)^{1/\alpha}.$$

Šajā gadījumā  $g(y) \equiv \frac{dr(y)}{dy} = \frac{2\bar{r}}{\alpha} \frac{(1+y)^{1/\alpha-1}}{(1-y)^{1/\alpha+1}} = \frac{(r^\alpha + \bar{r}^{-\alpha})^2}{2\alpha \bar{r}^{-\alpha} r^{\alpha-1}}$ , un funkcija  $F(y)$  pieņem

$$\text{veidu } F(y) = \frac{1 - 1/\alpha^2}{(1 - y^2)^2}.$$

Lai ilustrētu, cik stipri mainās integrācijas robežas viļņu funkcijām pēc mainīgā substitūcijas, tās pašas viļņu funkcijas, kas ir dotas 1. attēlā, ir uzzīmētas arī 2. attēlā, bet jau atkarībā no mainīgā  $y(r)$ .

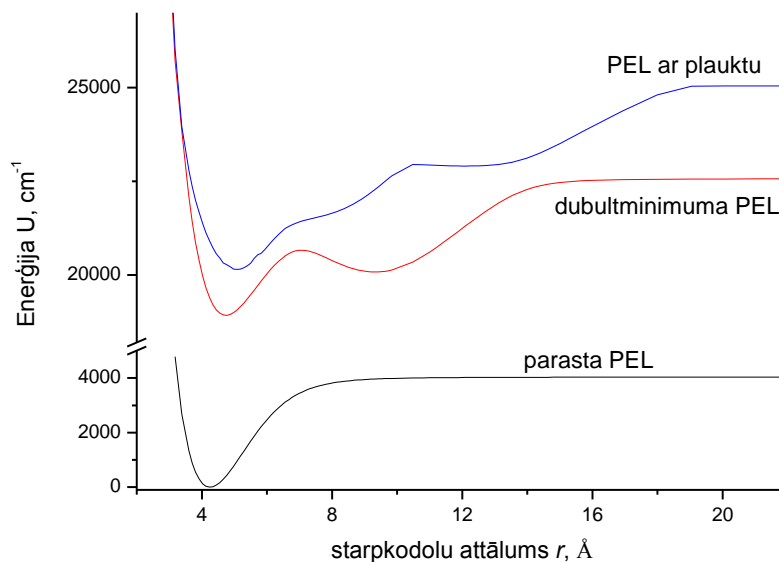


2. attēls. Radiālās īpašfunkcijas  $\phi(y)$  tiem pašiem pieciem līmeņiem, tajā pašā potenciālā, kas dots 1. attēlā.

Augstāk aprakstītā metode ir pielietota viļņu funkciju iegūšanai rakstā [1].

## 2.2. PEL aproksimācijas pilnveidošana.

Eksperimentā mēs iegūstam enerģijas atsevišķiem svārstību-rotāciju līmeņiem  $E(v, J)$ , un bija izvirzīts uzdevums izmantojot matemātiskās metodes, restaurēt potenciālās enerģijas līkni. Pie tam, ideālā gadījumā no ierobežota eksperimentālo datu masīva mums jāamāk iegūt tādu PEL, lai visi dati būtu aprakstāmi ar eksperimentālo precizitāti, lai nav pārāk augstas prasības sākuma PEL, lai no iegūtās PEL var ar uzdoto augstu precizitāti (parasti eksperimentālo datu precizitāte) izrēķināt enerģiju jebkuram svārstību rotāciju līmenim ārpus datu lauka, t.i., lai PEL piemīt labas ekstrapolācijas īpašības. Mūsdienu pielietojumiem (piem. auksto molekulu eksperimentiem) ir svarīgi, lai PEL pareizi apraksta arī asimptotiskas molekulu īpašības pie  $r \rightarrow \infty$ . Līdz šim ir attīstītas vairākas metodes, kā panākt PEL aprakstu, bet neviens no tiem nav ideāls.



3. attēls. Dažādas formas PEL piemēri.

Vēsturiski pirmā metode ir noteikt Morzes tipa potenciāla  $U(r) = D_e [1 - e^{-\alpha(r-r_e)}]^2$  mainīgos lielumus, proti disociācijas enerģiju  $D_e$ , līdzsvara starpkodolu attālumu  $r_e$ , kā arī anharmonisko parametru  $\alpha$ . Ar Morzes potenciālu Šredingera vienādojumu var atrisināt precīzi, bet gadījumā ja ir nepieciešams aprakstīt plašu svārstību līmeņu diapazonu, tad ar šo metodi to nevar izdarīt ar eksperimentālo precizitāti. Arī iegūt pareizo asimptotisku uzvedību nav iespējams. Bez tam Morzes PEL ir analītiski noteikta forma, un PEL ar „plauktu” vai dubult minimumu tas nespēj aprakstīt.

Cita pieeja ir aprakstīt pieejamos eksperimentālos datus ar Danhema koeficientiem  $Y_{ik}$ , proti  $E(v, J) = \sum_{i,k} Y_{ik} (v + 1/2)^i [J(J + 1) - \Lambda^2]^k$ , kur  $E(v, J)$  ir svārstību-rotāciju līmeņu enerģija,  $v$  – svārstību kvantu skaitlis,  $J$  – rotācijas kvantu skaitlis,  $\Lambda$  – kopēja elektronu čaulas leņķiskā momenta projekcija uz starpkodolu asi. Kad Danhema koeficienti ir iegūti, var ar Ridberga-Kleina-Reesa metodi restaurēt pašu PEL. Bet, par cik Danhema koeficienti pēc būtības apraksta polinomu, PEL ekstrapolācija ar labu kvalitāti nav iespējama.

Ir vēl iespēja aprakstīt PEL ar atsevišķiem punktiem, interpolējot funkciju starp tiem ar kubiskiem splainiem. Šim aprakstam piemīt ļoti liela elastība, un līdz ar to ar šo metodi ir iespējams aprakstīt jebkuras formas PEL. Bet šī apraksta trūkums izriet no pārlietu lielās elastības: var aprakstīt un aprēķināt ar nepieciešamo precizitāti tikai datus, kas atrodas fītēto svārstību un rotācijas kvantu skaitļu diapazonā, tātad nav ekstrapolācijas iespējas.

Nesen ieviestās Morzes un Lennarda-Džonsa (MLR) modifikācijas, savukārt, nodrošina labas ekstrapolācijas īpašības un pareizu asimptotisko uzvedību pie  $r \rightarrow \infty$ , bet ir absolūti neelastīgas un nespēj aprakstīt „plaukta” vai dubult minimuma PEL.

Rakstā [9] ir piedāvāta metode, kā panākt visas vēlamās īpašības. Metode ir aprakstīta zemāk.

Mēs definēsim modelēšanas potenciālu  $U(r)$  intervālā  $r \in [r_{\min}, +\infty)$  ar analītisku nepārtrauktu funkciju

$$U(r) = D_e - \frac{\sum_{k=0}^m c_k T_k(y_p)}{(r/r_{ref})^n + 1}$$

kur  $T_k(y)$  ir pirmā tipa Čebiševa polinomi, kas ir atkarīgi no reducēta radiālā mainīga  $y_p$ . Tas vienmēr atrodas intervālā  $y_p(r) \in [-1, 1]$  un ir atkarīgs no  $r$  sekojoši:

$$y_p(r; r_{\min}; r_{ref}) = \frac{r^p - r_{ref}^p}{r^p + r_{ref}^p - 2r_{\min}^p}.$$

Šeit  $p \in [1, 2, \dots]$  ir mazs naturāls skaitlis un  $r_{ref}$  ir references starpkodolu attālums, pie kam  $r_{ref} > r_{\min} \geq 0$ . Ieviestajai PEL ir arī pareiza asimptotiskā uzvedība pie  $r \rightarrow \infty$ , proti

$U(r \rightarrow \infty) \rightarrow D_e - \frac{C_n}{r^n} + \dots$ , kur vadošais dispersijas koeficients  $C_n$  ir tieši atkarīgs no

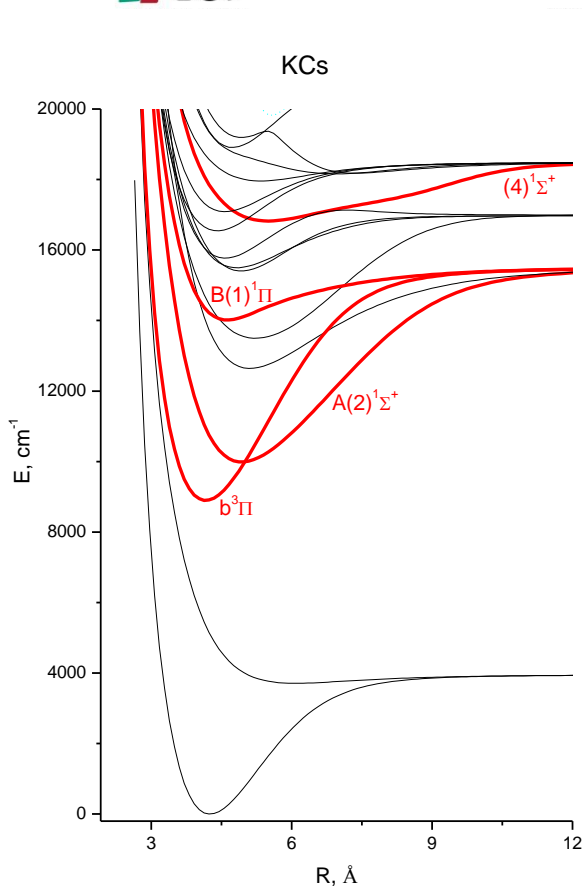
koeficientiem  $c_k$  kā  $C_n = r_{ref}^n \sum_{k=0}^m c_k$ . Piedāvātā modelī stāvokļa disociācijas enerģija  $D_e$ ,

vadošā pakāpe asimptotiskai rindai  $n$ , kā arī reducētā mainīgā pakāpe  $p$  ir fiksēti (nemainīgie) parametri. Līdz ar to, izņemot references distanci  $r_{ref}$ , mainīgie ir tikai Čebiševa izvīzījuma koeficienti  $c_k$ , un attiecībā pret tiem mūsu PEL funkcija ir lineāra. Ir zināms, kā Čebiševa polinomiālais izvīzījums ir tieši saistīts ar parasto polinomiālo izvīzījumu. Toties, atšķirībā no „parastiem” polinomiem, Čebiševa ortogonālās polinomu bāzes funkcijas nodrošina ļoti labas konverģences īpašības, kas samazina kopējo aprakstam nepieciešamo polinomu skaitu  $m$ , kā arī nodrošina izvīzījuma koeficientu  $|c_k|$  samazināšanu  $k$  vērtībai pieaugot.

Izklāstītā metode ir pielietota PEL iegūšanai rakstos [4, 9]

## 2. Eksperimentālo PEL iegūšana.

Sakarā ar izvīzītiem uzdevumiem tika iegūti un interpretēti supraugstas izšķiršanas Furjē transformācijas spektri KCs un RbCs molekulās. Izmantojot iegūtos datus tika rekonstruētas PEL ar iespējam reproducēt eksperimentālus spektrus gan pilnīgi „sajauktiem” stāvokļiem, gan stāvokļiem ar lokālām perturbācijām; izveidotās PEL atļāva testēt kvantu ķīmijas aprēķinu precizitāti; balstoties uz iegūtiem PEL tika modelēti un optimizēti optiskie cikli

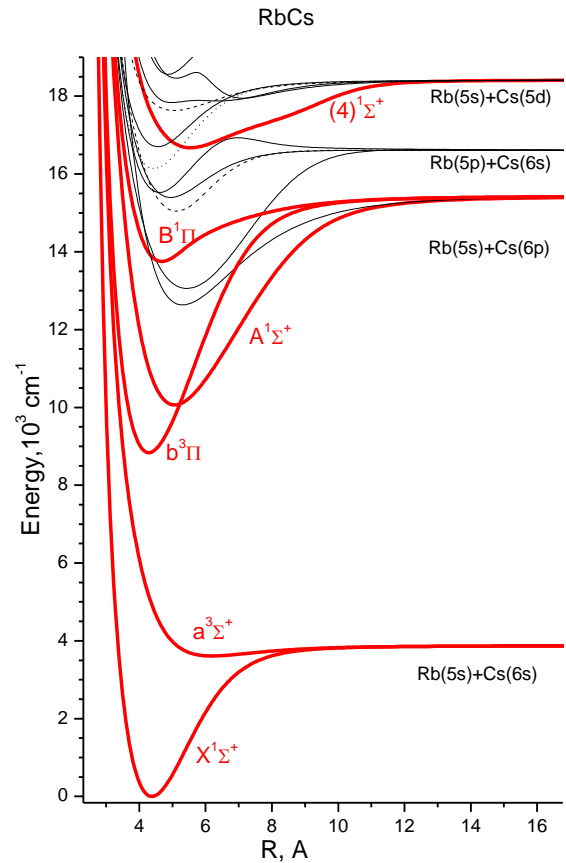


4. attēls. Elektroniskie stāvokļi KCs molekulā. Stāvokļi, kuru PEL bija konstruēti šī projekta ietvaros ir izdalīti ar sarkano krāsu.

superaukstu molekulu iegūšanai; pilnīgi sajaukto  $A^1\Sigma^+ - b^3\Pi$  stāvokļu pētījumi atļāva modelēt spina-orbitālās mijiedarbības efektus.

4. un 5. attēlos ir parādīti elektroniskie stāvokļi, kas ir izpētīti šī projekta ietvaros KCs (4. att) un RbCs (5. att) molekulās

Projekta ietvaros paveiktie pētījumi detalizētāk izklāstīti zemāk.



5. attēls. Elektroniskie stāvokļi RbCs molekulā. Stāvokļi, kuri bija izpētīti šī projekta ietvaros ir izdalīti ar sarkano krasu.

### 2.1. $X^1\Sigma^+ \sim a^3\Sigma^+$ stāvokļu pētījumi RbCs molekulā

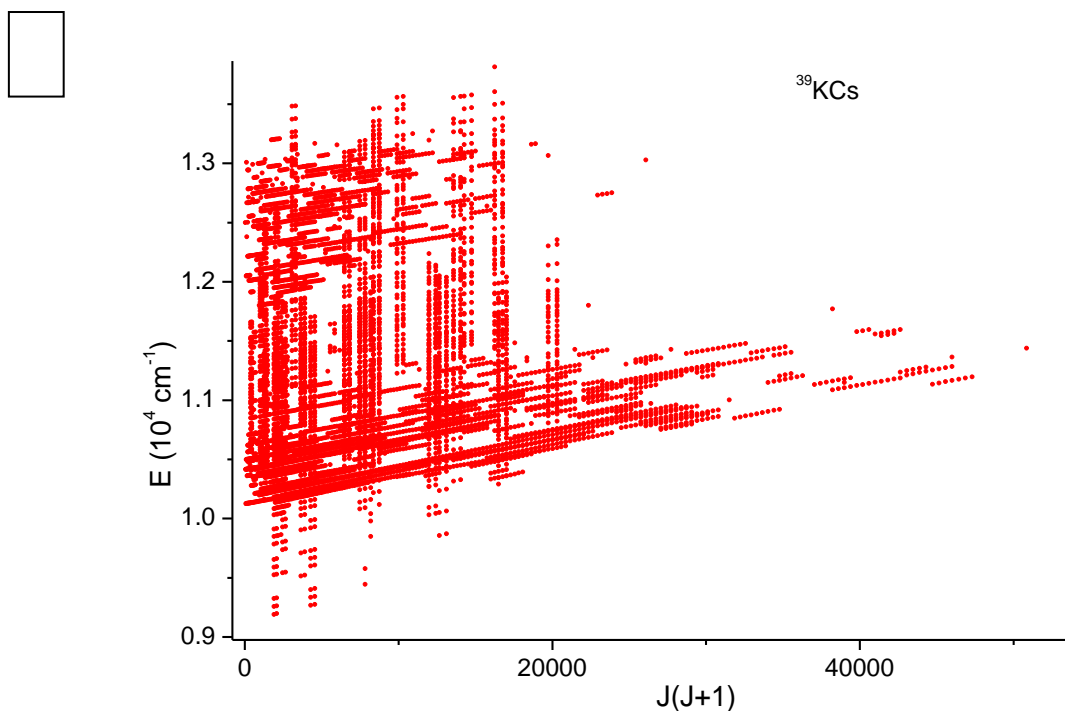
Ir būtiski uzlabotas un paplašinātas uz lielākiem starpkodola attālumiem PELs  $X^1\Sigma^+$  un  $a^3\Sigma^+$  pamatstāvokļiem RbCs molekulā. Kopumā bija iegūtas 15709 jaunas pārejas uz  $X^1\Sigma^+$  stāvokli un 4549 pārejas uz  $a^3\Sigma^+$  stāvokli. Jāatzīmē, ka  $a^3\Sigma^+$  stāvoklis pirmo reizi tika eksperimentāli novērots šajā pētījumā. Abu stāvokļu PEL iegūšanai bija izmantota saistīto kanālu piedzīšanas procedūra. Tā bija nepieciešama tādēļ, ka tuvojoties pamatstāvokļa disociācijas enerģijai ( $3836.373 \text{ cm}^{-1}$ ) būtisku lomu sāk spēlēt supersīkstruktūras inducēta sajaukšanās starp pētāmiem stāvokļiem un vairs nav iespējams reproducēt svārstību-rotācijas līmeņa enerģiju izmantojot tikai vienu PEL. Iegūtās PEL ļauj reproducēt eksperimentāli iegūtās enerģijas ar standartnovirzi  $0.006 \text{ cm}^{-1}$ . Precīza PEL zināšana paver iespēju izrēķināt Fešbaha rezonansu, kuras izmanto superaukstu molekulu iegūšanai, pozīcijas un platumus.

Darba rezultāti ir nopublicēti rakstā [6] un bija prezentēti 10. Eiropas konferencē par atomiem, molekulām un fotoniem (10th ECAMP) 2010. gadā.

## 2.2. $A^1\Sigma^+ \sim b^3\Pi$ kompleksa pētījumi:

### 2.2.1. KCs molekulā.

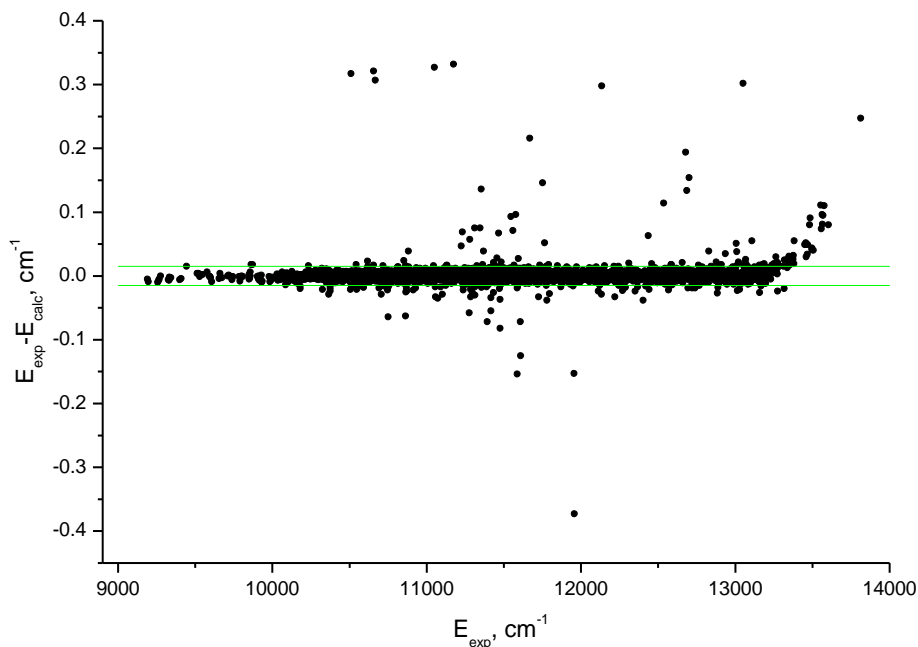
Ir paveikts darbs pie modeļa testēšanas un uzlabošanas stipri sajaukto  $A^1\Sigma^+$  un  $b^3\Pi$  stāvokļu aprakstam. Lai būtiski paplašinātu KCs molekulas  $A^1\Sigma^+ \sim b^3\Pi$  kompleksa pētāmo termu enerģijas diapazonu, tika nopirkts jauns termoelektriski dzesējams supraaugstas izšķiršanas Furjē spektrometra ISF-125HR InGaAs detektors. Tika veikta detektora testēšana un tika realizēta eksperimentu sērija KCs molekulas A-b kompleksa izpētei novērojot fluorescenci no  $4^1\Sigma^+$  elektroniskā stāvokļa uz A-b kompleksu. būtiski paplašinot iepriekšējos rezultātus. Jaunais eksperimentālo datu lauks satur ap 5800 punktu un ir parādīts 6. attēlā.



6. attēls. Eksperimentālo datu lauks KCs  $A^1\Sigma^+ \sim b^3\Pi$  kompleksam.



Visiem 5802 termiem, kas ir redzami 6. attēlā, ir aprēķinātas enerģijas, izmantojot saistīto kanālu pieeju, kas ietver 4 mijiedarbojošos kanālus, proti:  $A^1\Sigma^+$  stāvokli un visas trīs  $b^3\Pi$  stāvokļa komponentes. Iegūtie dati tika izmantoti, lai piedzītu sekojošus parametrus:  $A^1\Sigma^+$ ,  $b^3\Pi_0$ ,  $b^3\Pi_1$ ,  $b^3\Pi_2$  stāvokļu PEL, kā arī šo stāvokļu spin-orbitālas mijiedarbības līknes.



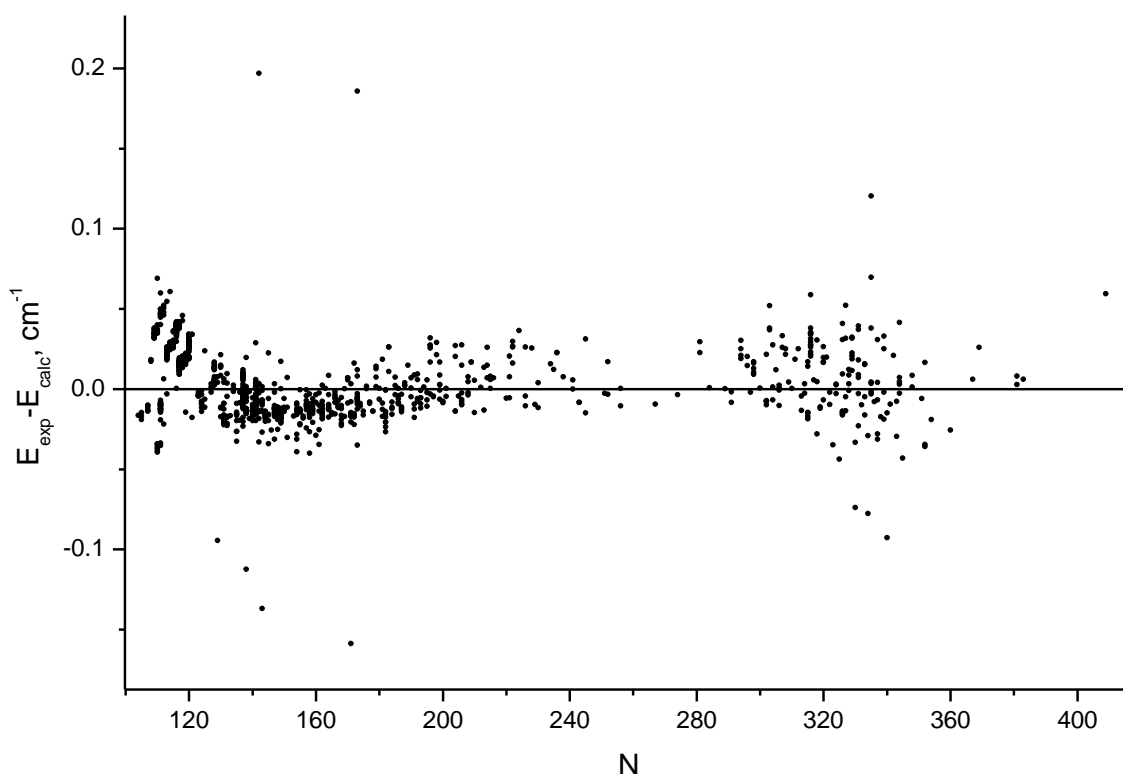
7. attēls. Starpība starp eksperimentālajām un no modeļa aprēķinātajām enerģijām KCs molekulai. Zaļās horizontālās līnijas iezīmē eksperimentālo nenoteiktību  $\pm 0.015 \text{ cm}^{-1}$ .

Starpība starp eksperimentālo un aprēķināto, no piedzītiem parametriem, enerģiju visiem punktiem ir parādīta 7. attēlā.

No 7. attēla redzams, ka, pāri par 90% punktu aprakstās ar precizitāti  $0.015 \text{ cm}^{-1}$  (eksperimentālā nenoteiktība), vai labāk, tomēr modeli vēl nepieciešams uzlabot, lai labāk aprakstītu datus pie enerģijām, kas pārsniedz  $13\,200 \text{ cm}^{-1}$ . Tādēļ, visticamāk, būs jāpalielina kanālu skaits aprēķinā, iekļaujot tajā  $c^3\Sigma^+$  stāvokļa komponentes. Enerģiju aprakstam virs  $14\,000 \text{ cm}^{-1}$  būs jāņem vērā arī  $B^1\Pi$  stāvoklis un tā mijiedarbība ar  $b^3\Pi$  un  $c^3\Sigma^+$  stāvokli. Daļa no iegūtiem datiem ir nopublicēta rakstā [9], parējos ir plānots nopublicēt tuvākajā laikā, tiklīdz būs uzlabots apraksta modelis. Projekta ietvarā iegūtie rezultāti bija prezentēti 43. Eiropas atomāro sistēmu grupas konferencē (43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS)), kā arī 22. kolokvijā par augstas izšķiršanas molekulāro spektroskopiju (22<sup>nd</sup> Colloquium HRMS).

### 2.2.2. Cs<sub>2</sub> molekulā.

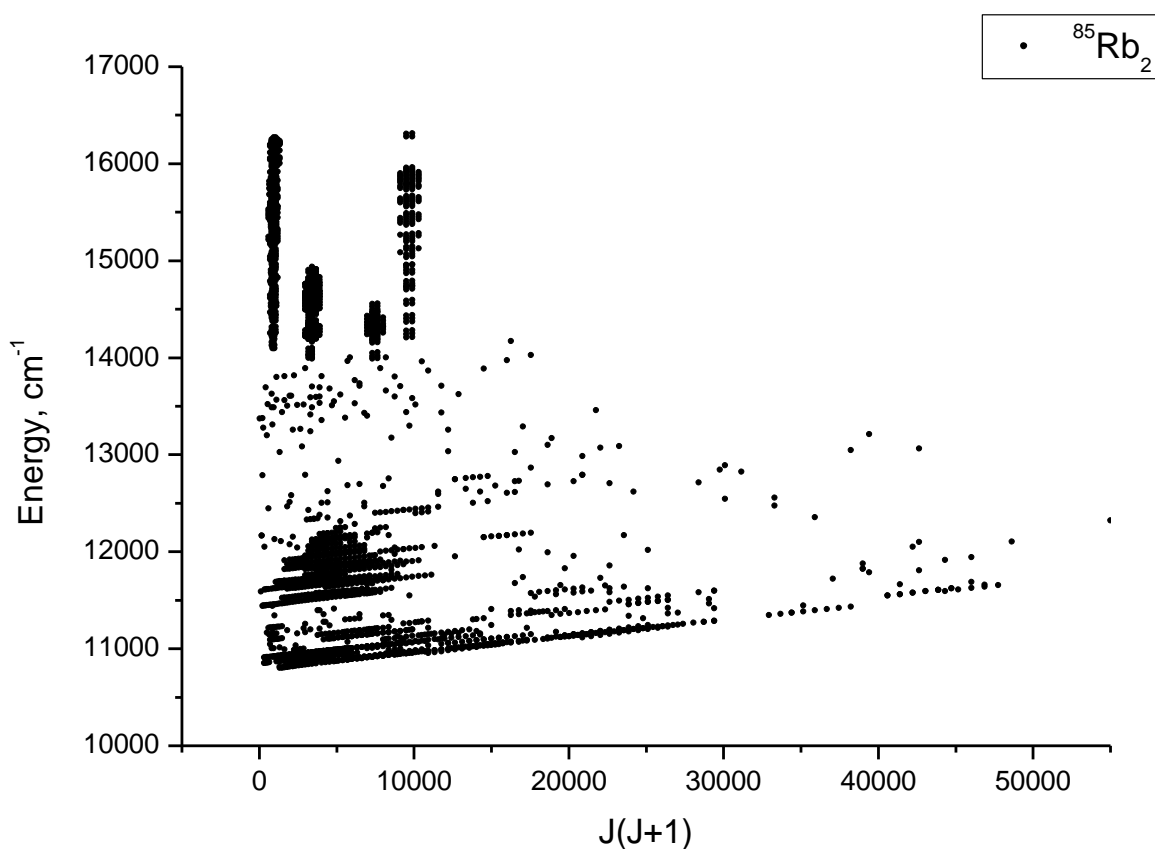
Projekta ietvaros bija veikti arī pētījumi ar mērķi uzlabot esošo  $A^1\Sigma_u^+ \sim b^3\Pi_u$  kompleksa aprakstu. Šim nolūkam tika veikti lāzera inducētas fluorescences mērījumi no pētāmā kompleksa uz pamatstāvokli izmantojot augstas izšķirtspējas Furje spektrometru. Daļa no Cs<sub>2</sub> datiem bija iegūta no Cs<sub>2</sub> spektriem, kas kā piemaisījums parādās KCs un RbCs pētījumos uzņemtajos spektros. Bez tam bija veikta eksperimentālās iekārtas sagatavošana, lai varētu veikt mērījumus izmantojot Cs stikla cauruli. Eksperimenti tikai Cs<sub>2</sub> tvaikos stikla caurulē ļāva iegūt „tīrus”, t.i. bez citu molekulu līniju klātbūtnes Cs<sub>2</sub> spektrus. Kopā iegūtas 2066 enerģijas vērtības. Apmēram 70 punkti no iegūtiem datiem tika izmantoti rakstā [7] kopā ar citu grupu datiem, lai piedzītu sekojošus parametrus:  $A^1\Sigma^+$ ,  $b^3\Pi_0$ ,  $b^3\Pi_1$ ,  $b^3\Pi_2$  stāvokļu PEL, kā arī šo stāvokļu spin-orbitālās mijiedarbības funkcijas. Rezultāti ir nopublicēti rakstā [7]. 8. attēlā ir parādītas starpības starp projekta ietvaros iegūtiem datiem un aprēķinātiem pēc modeļa no raksta [7] enerģijām atkarībā no kompleksa svārstību līmeņa kārtas numura. No 8. attēla var redzēt, ka starpībām nav gadījuma rakstura, bet līdz kārtas numuram 130 starpības pārsvarā ir pozitīvas, kamēr starp 130 un 170 kārtas numuriem starpības negatīvas. Tas norāda uz sistemātisku aprēķina [7] novirzi no eksperimenta, kas aktualizē nepieciešamību vēl uzlabot modeli.



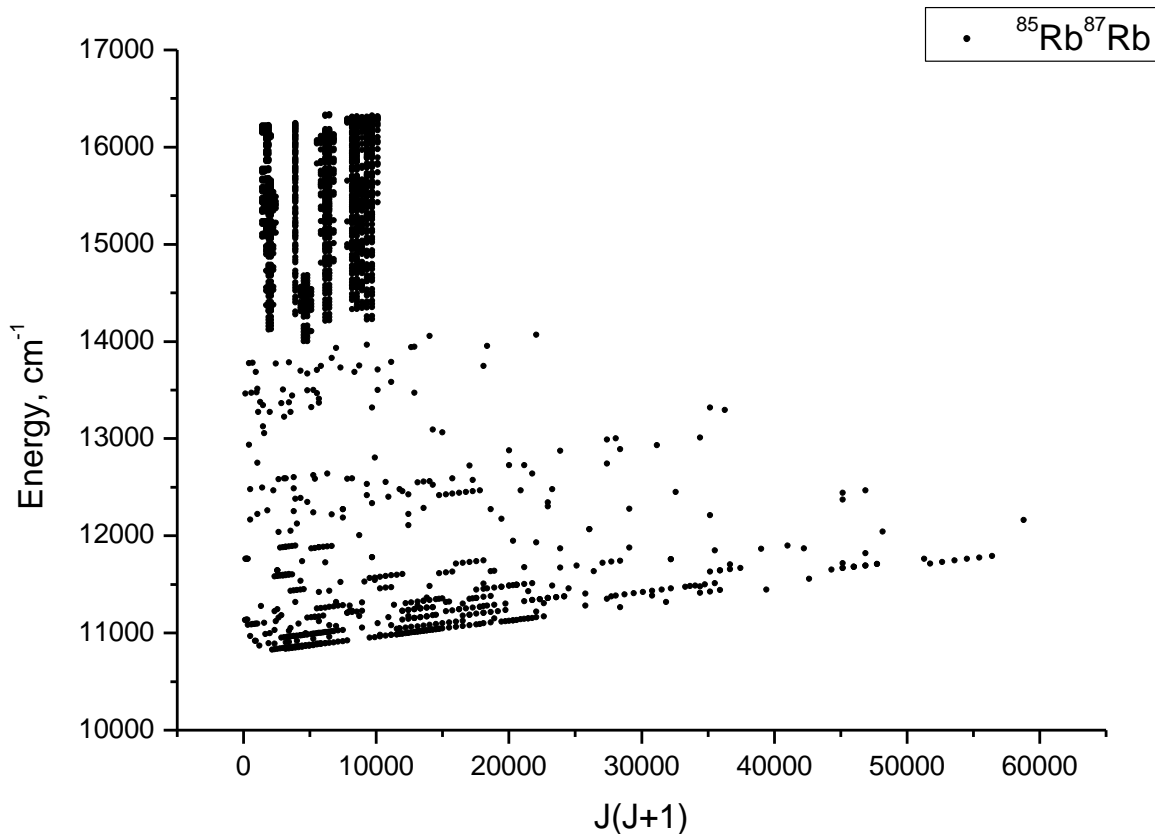
8. attēls. Eksperimentālo un aprēķināto enerģiju starpība Cs<sub>2</sub> molekulas  $A^1\Sigma_u^+ - b^3\Pi_u$  kompleksam atkarībā no kompleksa svārstību līmeņa kārtas numura.

#### 2.2.4. Rb<sub>2</sub> molekulā.

Bija veikti arī A-b kompleksa pētījumi Rb<sub>2</sub> molekulā. Rb<sub>2</sub> molekulas LIF bija reģistrēta reizē ar RbCs LIF, veicot RbCs A-b kompleksa pētījumus. Iegūtie dati, kopā ar datiem, ko ieguva sadarbības partneri no Maskavas no Lionā veiktiem eksperimentiem, tika izmantoti kopā ar citu grupu datiem lai piedzītu sekojošus parametrus: A<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>, b<sup>3</sup>Π<sub>0</sub>, b<sup>3</sup>Π<sub>1</sub>, b<sup>3</sup>Π<sub>2</sub> stāvokļu PEL, kā arī šo stāvokļu spin-orbitālas mijiedarbības funkcijas. Veikts iegūto eksperimentālo un modelēšanas datu salīdzinājums, pārbaude un korekcijas. Visas iegūtas termu enerģijas <sup>85</sup>Rb<sub>2</sub> un <sup>85</sup>Rb<sup>87</sup>Rb izotopiem atkarībā no J(J+1) ir parādītas 9. un 10. attēlos, attiecīgi.



9. attēls. Iegūtās <sup>85</sup>Rb<sub>2</sub> izotopa termu enerģijas atkarībā no J (J+1).



10. attēls. Iegūtās  $^{85}\text{Rb}^{87}\text{Rb}$  izotopa termu enerģijas atkarībā no  $J(J+1)$

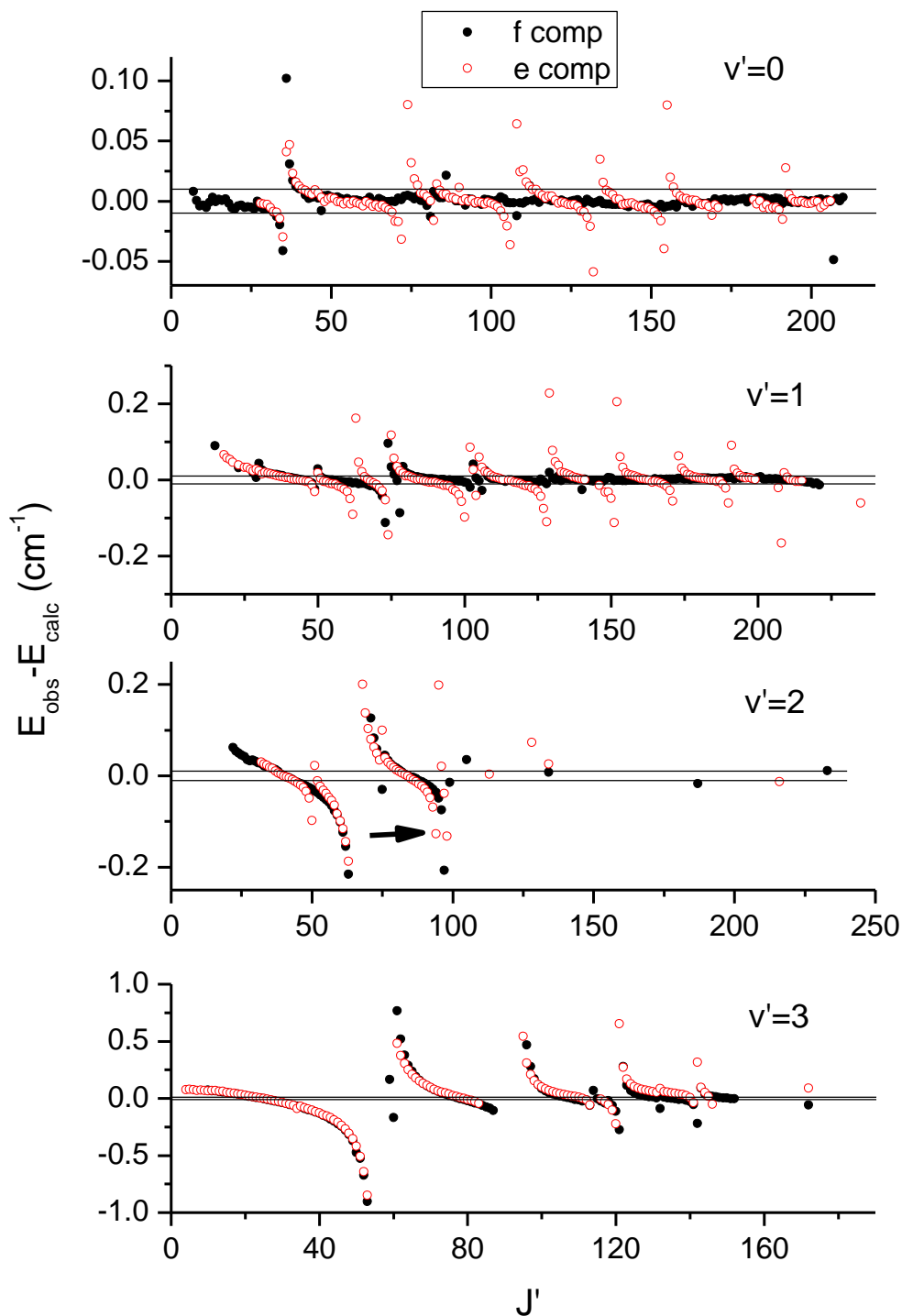
### 2.2.3. RbCs un KRb molekulās.

Uzstādīta un notestēta jauna siltuma caurule, kas satur K un Rb metālus. Pirmo reizi tika veikti augstas izšķiršanas Furjē spektru mērījumi KRb molekulas A-b kompleksam un iegūti pirmie oriģinālie rezultāti par šī stāvokļa termu enerģijām. Iegūtie dati ir svarīgi KRb molekulu iegūšanai pie superzemām temperatūrām un to stabilizācijai.

Sagatavota eksperimentāla iekārta KRb molekulas  $A^1\Sigma^+-b^3\Pi$  elektronisko stāvokļu izpētei, un veiktas vairākas eksperimentu sērijas spektroskopisko datu iegūšanai. Iegūti pirmie oriģinālie rezultāti par šī stāvokļa termu enerģijām. Primārā datu analīze ļāva secināt, ka šajos eksperimentos ir iegūti viszemākie svārstību līmeņi ar kvantu skaitli  $\nu = 0$ ,  $\nu = 1$  un  $\nu = 2$ , kas ir nepieciešams datu identifikācijai un potenciālās līknes iegūšanai.

Veikta eksperimentālās iekārtas sagatavošana un realizēta eksperimentu sērija RbCs molekulas A-b kompleksa augstu esošo svārstību līmeņu pētīšanai. Tam nolūkam tika veikts darbs pie metodikas uzlabošanas: testēta TE-InGaAs detektora pielietojamība RbCs molekulas izpētē. Veikta eksperimentu sērija spektru iegūšanai RbCs molekulai pārejā no  $4^1\Sigma^+$  uz A-b kompleksu. Apstrādājot iegūtos spektrus, secināts, ka, lai iegūtu datus par vēl nepētītu enerģētisko apgabalu A-b kompleksā, jāierosina 60-70 svārstību līmenis  $4^1\Sigma^+$  elektroniskajā stāvoklī. Pēc dziļākas izpētes nolemts precizēt iepriekšējā publikācijā par RbCs

A-b kompleksu iekļautās termu vērtības, lai gala rezultātā iegūtais datu lauks būtu iegūts, izmantojot vienādu metodi.



11. attēls. Starpības starp eksperimentāli novērotajām enerģijas vērtībām ( $E_{\text{obs}}$ ) un tām, kuras iegūtas izmantojot mūsu potenciālās enerģijas līkni un q-faktorus ( $E_{\text{calc}}$ ) atkarībā no rotācijas kvantu skaitļa  $J'$   $^{39}\text{K}^{133}\text{Cs}$  izotopam.

2.3.  
B<sup>i</sup>  
Π  
stā  
vok  
ļa  
pēti  
jum  
i

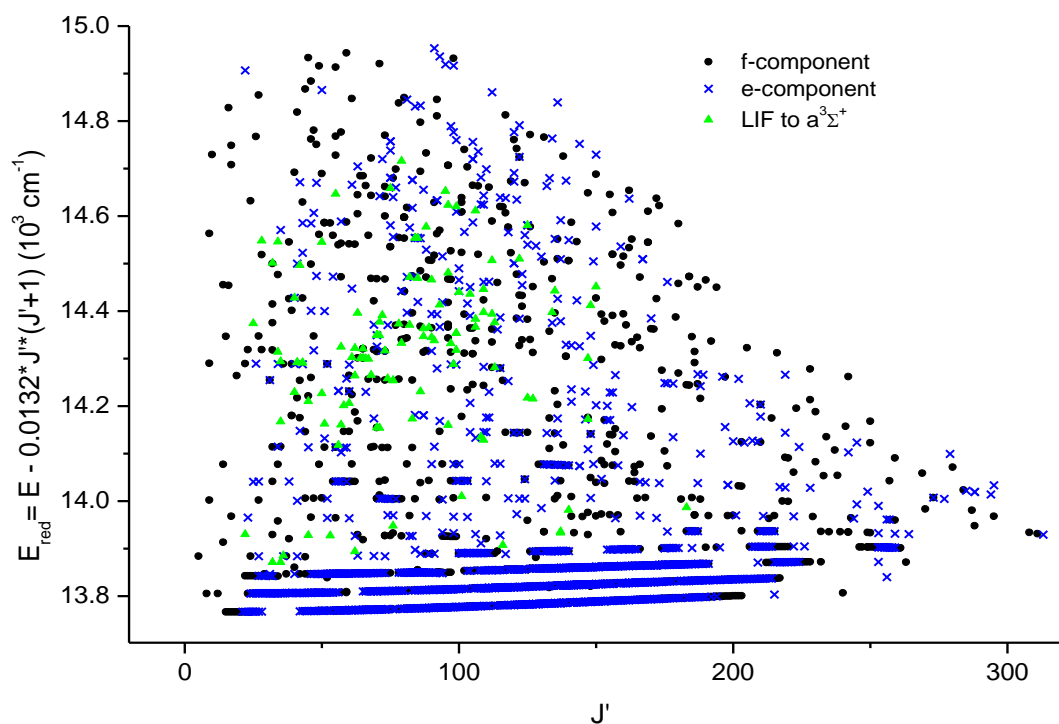
2.3.  
1.  
KC  
s  
mol  
eku  
la

P  
irm  
o  
reiz  
i  
tika  
vei  
kti  
KC  
s  
LIF  
mē  
rīju  
mi  
no  
B<sup>1</sup>  
Π  
stā  
vok  
ļa  
uz  
pa  
mat  
stā  
vok  
li.  
Ieg  
ūtā

s  $^{39}\text{K}^{133}\text{Cs}$   $B^1\Pi$  stāvokļa enerģijas izmantotas, lai konstruētu potenciālās enerģijas līkni izmantot IPA ( Inverted Perturbation Approach) metodi. No rotācijas konstantes grafikiem, tiek noteikti punkti, kuri varētu būt perturbēti mijiedarbībā ar  $C^1\Sigma^+$  stāvokli, kā arī ar  $b^3\Pi$  un  $c^3\Sigma^+$  stāvokļiem. PEL iegūšanai tika izmantoti 520 neperturbēti datu punkti svārstību līmeņiem  $v' \in [0; 3]$  un rotācijas līmeņiem  $J' \in [7; 233]$ . Iegūtā potenciālās enerģijas līkne sastāv no 23 punktiem un nodrošina eksperimentālo punktu aprakstu ar standartnovirzi  $0.02 \text{ cm}^{-1}$ . Izmantojot to pašu pašam datu lauku aprēķināti arī Danhema koeficienti. Svārstību līmeņiem no 0 līdz 3 ir iegūti q-faktori. Lai pārbaudītu iegūtās potenciālās līknes un aprēķināto q-faktoru korektumu, tika salīdzinātas izrēķinātās no iegūtās PEL termu enerģijas un 17 eksperimentāli izmērītās  $^{41}\text{K}^{133}\text{Cs}$  izotopam. 11. attēlā ir parādītas aprēķinātās starpības starp eksperimentāli novērotajām enerģijas vērtībām ( $E_{\text{obs}}$ ) un tām, kuras iegūtas izmantojot mūsu potenciālās enerģijas līkni ( $E_{\text{calc}}$ ) atkarībā no rotācijas kvantu skaitļa  $J'$  pirmajiem četriem ( $v' \in [0; 3]$ ) svārstību līmeņiem  $^{39}\text{K}^{133}\text{Cs}$  izotopam. Aprēķinātas arī molekulārās konstantes no mūsu iegūtās potenciālās enerģijas līknes. Bija iegūtas arī molekulārās konstantes ( $E_v$ ,  $B_v$ ) dažiem  $C^1\Sigma^+$  stāvokļa svārstību līmeņiem. Visi iegūtie dati ir nopublicēti rakstā [2]. Par rezultātiem arī tika ziņots 43. Eiropas atomāro sistēmu grupas konferencē (43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS)), kā arī 22. kolokvijā par augstas izšķiršanas molekulāro spektroskopiju (22<sup>nd</sup> Colloquium HRMS).

### 2.3.2. RbCs molekulā

Pabeigts darbs pie RbCs  $B(1)^1\Pi$  stāvokļa potenciāla modelēšanas, kas balstās uz termu



12. attēls. Eksperimentā iegūtās  $^{85}\text{Rb}^{133}\text{Cs}$   $B^1\Pi$  stāvokļa enerģijas atkarībā no  $J'$ .

enerģiju datiem no Furjē spektriem svārstību līmeņiem  $v = 0, 1$  un  $2$ . Kopumā uzņemti un apstrādāti 160 spektri RbCs  $B^1\Pi$  stāvoklim, kuros apstrādātas arī 98 rotācijas relaksācijas ainas. Visi dati attēloti kopējā datu laukā (12. attēls), kas parāda enerģijas atkarību no  $J'$ . No esošajiem datiem izrēķinātas  $q$ -faktora un rotācijas konstantes  $B_v$  vērtības svārstību līmeņiem  $v = 0, 1, 2$  un  $3$  un izdarīti secinājumi par apgabaliem, kuri iespējams ir brīvi no perturbācijām un izmantojami tālākos aprēķinos. Izmantot IPA metodi no šiem neperturbētiem datiem tika iegūta  $B^1\Pi$  stāvokļa potenciālās enerģijas līkne  $^{85}\text{RbCs}$  izotopam. PEL iegūšanai bija izmantoti 358 neperturbēti datu punkti svārstību līmeņiem  $v' \in [0; 2]$  un rotācijas līmeņiem  $J' \in [6; 313]$ . Šo līmeņu aprakstam iegūtā potenciālās enerģijas līkne sastāv no 27 punktiem un eksperimentālo datu standartnovirze no aprēķina ir  $0.07 \text{ cm}^{-1}$ . Paralēli IPA aprēķinam veikts arī Danhema koeficientu aprēķins izraudzītajam datu apgabalam kopumā un arī katram svārstību līmenim atsevišķi; izdarīti secinājumi, ka svārstību līmenis  $v' = 2$  ir stipri perturbēts, jo manāma sistemātiska visa šī līmeņa nobīde. Lai pārbaudītu iegūtās potenciālās līknes korektumu, tika apstrādātas 15 rotācijas relaksācijas  $^{87}\text{RbCs}$  izotopam. Aprēķinātas starpības starp eksperimentāli novērotajām enerģijas vērtībām ( $E_{\text{exp}}$ ) un tām, kuras iegūtas izmantojot mūsu potenciālās enerģijas līkni ( $E_{\text{apr}}$ ), pirmajiem trīs ( $v' \in [0; 2]$ ) svārstību līmeņiem  $^{85}\text{RbCs}$  un  $^{87}\text{RbCs}$ . Sagatavots publikāciju apkopojums par RbCs molekulas  $B^1\Pi$  stāvokli un tā perturbējošajiem stāvokļiem. No rotācijas konstantes grafikiem, tiek noteikti punkti, kuri varētu būt perturbēti mijiedarbībā ar  $C^1\Sigma$  stāvokli. Sagatavota un aizstāvēta prezentācija "High resolution spectroscopy and description of low-lying energy levels of RbCs  $B^1\Pi$  state" DOC-2012 konferencē. Par rezultātiem arī tika ziņots 44. Eiropas atomāro sistēmu grupas konferencē (44th Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS)), kā arī 22. starptautiskā konferencē par augstas izšķiršanas molekulāro spektroskopiju. Par RbCs  $B^1\Pi$  stāvokli ir uzrakstīts un iesniegts publicēšanai raksts [3].

## 2.4. $(4)^1\Sigma^+$ stāvokļa pētījumi

### 2.4.1. KCs molekula

Pirmo reizi tika veikti KCs LIF mērījumi no  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokļa uz pamatstāvokli izmantojot krāsvielu lāzera ierosmi. Kopā tika iegūtas 1650  $^{39}\text{K}^{133}\text{Cs}$   $(4)^1\Sigma^+$  stāvokļa termu enerģijas, kas pieder termiem ar kvantu skaitļiem diapazonā no 2 līdz 74 svārstības kvantu skaitlim un no 1 līdz 188 rotācijas kvantu skaitlim. Minētās termu enerģijas tika izmantotas, lai konstruētu potenciālās enerģijas līkni izmantojot gan IPA, gan Čebiševa rindu metodes. Iegūtā PEL reproducē eksperimentālas termu enerģijas ar standartnovirzi  $0.005 \text{ cm}^{-1}$ . KCs  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokļa potenciālai līknei ir specifiska „plauktveida” forma (sk. 4. att.), kā arī tika konstatēts, ka tie paši  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokļa līmeņi, kas dod fluorescenci uz pamatstāvokli ( $X^1\Sigma^+$ ) dod arī fluorescenci uz tripleta pamatstāvokli ( $a^1\Sigma^+$ ) (sk. 13. att.). Fluorescence uz tripleta stāvokli nozīmē, ka  $(4)^1\Sigma^+$  stāvoklim ir kāda tripleta stāvokļa piejaukums. Bet, neraugoties uz to, izdevās panākt precīzu eksperimentālo datu aprakstu ar vienu PEL. Iegūtā PEL nopublicēta rakstā [8]. No otras puses, tripleta piejaukuma dēļ ir atļautas pārejas no tripleta  $a^1\Sigma^+$  stāvokļa uz pārsvarā singleta  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokli un pēc tam uz singleta pamatstāvokli. Šāda iespēja ir īpaši svarīga superauksto molekulu iegūšanai singleta viszemākajā pamatstāvoklī. Tika veiktas skaitliskās

simulācijas ar nolūku noskaidrot uz kādu svārstību līmeni ir visizdevīgāk ierosināt aukstas molekulas, kas atrodas  $a^1\Sigma^+$  stāvoklī tuvu disociācijas līmenim, lai dabūtu maksimālo molekulu skaitu singleta pamatstāvoklī ar  $v = 0$ . Simulāciju rezultāti ir nopublicēti rakstā [1]. KCs  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokļa pētījuma rezultāti tika ziņoti arī 10. Eiropas konferencē par atomiem, molekulām un fotoniem (10th ECAMP).

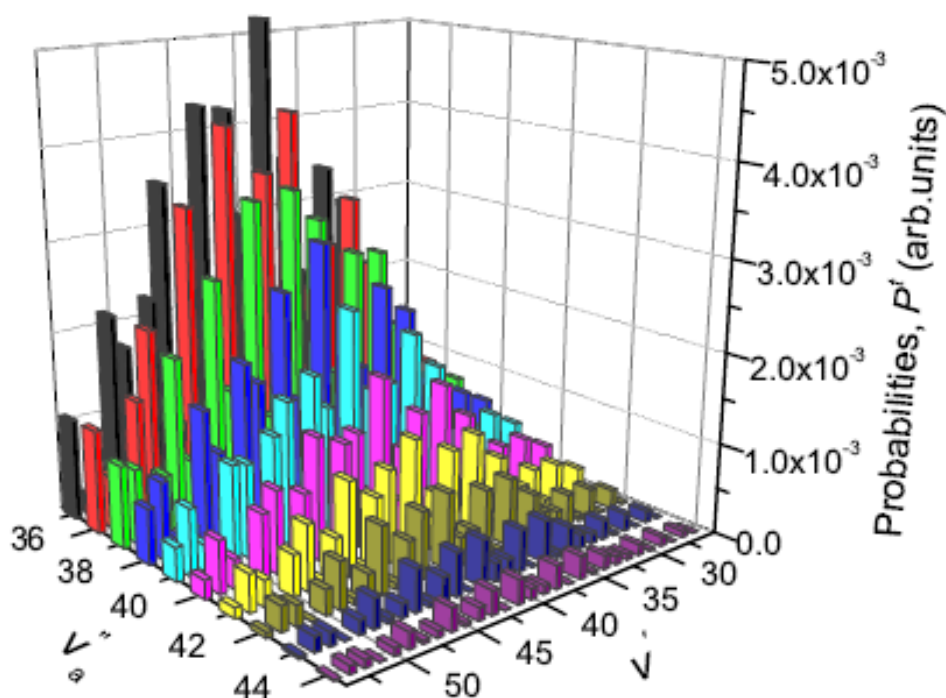


## 2.4.2. RbCs molekula.

Tika veikti eksperimenti, lai iegūtu augstas izšķiršanas spektrus RbCs molekulas  $(4)^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  pārejā, kuru rezultātā izdevās būtiski paplašināt datu klāstu par RbCs molekulas  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokli augstiem svārstību līmeņiem ( $v > 83$ ), kā arī par zemākiem līmeņiem ( $v < 5$ ) un līdz ar to būtiski precizēt potenciālās enerģijas līkni, kas tika konstruēta izmantojot Čebiševa rindu metodi. PEL bija iegūta izmantojot 2317 termu enerģijas, un eksperimentālo datu aprakstam ar iegūto PEL ir  $0.005 \text{ cm}^{-1}$  standartnovirze. Līdzīgi kā KCs molekulā, RbCs  $(4)^1\Sigma^+$  stāvoklim ir tripleta piejaukums, kas ļāva veikt skaitliskās simulācijas  $a^3\Sigma^+ \rightarrow (4)^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+(v=0)$  ciklam. Simulāciju piemērs ir parādīts 14. attēlā. Visi iegūtie rezultāti ir apkopoti rakstā, kas sagatavots publicēšanai [4].

## 2.5. KCs pamatstāvokļu pētījumi tuvu disociācijas robežai.

Informācija par pamatstāvokļu PEL tuvu disociācijas robežai ir ārkārtīgi svarīga ultraauksto molekulu iegūšanas eksperimentos, izmantojot Fešbaha rezonanses. Jo tieši PEL gaita tuvu disociācijas robežai un PEL dziļums nosaka Fešbaha rezonansu pozīcijas un platumu. Pa cik veicot  $(4)^1\Sigma^+$  stāvokļa pētījumus mēs konstatējam, ka šis stāvoklis dod LIF uz svārstību līmeņiem, kas atrodas dažu  $\text{cm}^{-1}$  attālumā no disociācijas robežas, bija veikta iekārtas uzlabošana (pirkti jaunie filtri) signāla/troksni attiecības palielināšanai. Veicot vairāku stundu



14. attēls. Kopējā varbūtība  $a^3\Sigma^+(v'', J''=0) \rightarrow (4)^1\Sigma^+(v', J'=1) \rightarrow X^1\Sigma^+(v=0, J=0)$  ciklam sākot no  $a^3\Sigma^+$  stāvokļa augsti ierosinātiem svārstību līmeņiem RbCs molekulā.

ilgu spektru krāšanu un izmantojot šauras caurlaidības joslas filtrus izdevās būtiski uzlabot signāla/trokšņa attiecību un novērot LIF uz līmeņiem ar saites enerģiju (attālumu līdz disociācijas robežai) tikai apm.  $0.3 \text{ cm}^{-1}$ . Tāda spektra piemērs ir parādīts 15. attēlā. Izmantojot šos jaunus datus izdevās palielināt starpkodola attālumu, kurā PEL ir aprakstīts no eksperimentāliem datiem līdz  $20 \text{ \AA}$ . Pašreiz notiek rezultātu sagatavošana publicēšanai.

## 2.6. Citas aktivitātes projekta ietvaros.

Veikts darbs pie  $\text{Rb}_2$  molekulas  $A^1\Sigma^+ - b^3\Pi$  stāvokļu kompleksa pētījumiem, jo, pētot  $\text{RbCs}$  A-b kompleksu bieži tiek reģistrēti arī  $\text{Rb}_2$  spektri. Attiecīgie spektri, kuros parādās  $\text{Rb}_2$  LIF ir apstrādāti un ir iegūtas termu vērtības, kas kopā ar literatūras datiem atļaus detalizēti aprakstīt  $\text{Rb}_2$  molekulas A – b kompleksu. Veikts iegūto eksperimentālo un modelēšanas datu salīdzinājums, pārbaude un korekcijas.

Ir reģistrēti La, Nb, V atomu augstas izšķiršanas Furje spektri izlādē dobā katoda lampā ar mērķi noteikt supersīkstruktūras (HFS) konstantes jauniem atomāriem līmeņiem. Ir uzņemti La V, Nb atomāro pāreju spektri plašā apgabalā, tai skaitā, pirmoreiz infrasarkanajā spektra diapazonā līdz  $1600 \text{ nm}$ . Vanādija spektru apstrāde ir pabeigta un rezultāti ir nopublicēti rakstā [5].

## Žurnālos publicētie raksti.

1. **I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, E. A. Pazyuk, and A. V. Stolyarov**, Modeling of the  $X^1\Sigma^+; a^3\Sigma^+ \rightarrow E(4)^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+(v=0; J=0)$  optical cycle for ultracold KCs molecule production, *Phys. Rev. A* **85**, 062520 (2012).
2. **I. Birzniece, O. Nikolayeva, M. Tamanis, and R. Ferber**,  $B(1)^1\Pi$  state of KCs: High-resolution spectroscopy and description of low-lying energy levels, *J. Chem. Phys.* **136**, 064304 (2012).
3. **I. Birzniece, O. Docenko, O. Nikolayeva, M. Tamanis, and R. Ferber**,  $B(1)^1\Pi$  state of RbCs: high resolution spectroscopy and description of low-lying energy levels, *submitted to J. Chem. Phys.*
4. **V. Zutens, O. Docenko, M. Tamanis, and R. Ferber**, Spectroscopic studies of the  $(4)^1\Sigma^+$  state in RbCs and modeling optical cycle, *in preparation*.
5. **F. Guzelcimen, G. Basar, I. K. Ozturk, S. Kroeger, R. Ferber, A. Jarmola, M. Tamanis, G. Basar**, Hyperfine structure of the  $3d(3)4s4p(6)G$  multiplet of atomic vanadium, *J. Chem. Phys.* **44**, 215001 (2011).

6. **O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, H. Knöckel, E. Tiemann**, Singlet and triplet potentials of the ground-state atom pair Rb+Cs studied by Fourier-transform spectroscopy, *Phys. Rev. A* **83**, 052519 (2011).
7. **J. Bai, E. H. Ahmed, B. Beser, Y. Guan, S. Kotochigova, A. M. Lyyra, S. Ashman, C. M. Wolfe, J. Huennekens, F. Xie, D. Li, L. Li, M. Tamanis, R. Ferber, A. Drozdova, E. A. Pazyuk, J. G. Danzl, H.-C. Nägerl, N. Boloufa, O. Dulieu, C. Amiot, H. Salami, T. Bergeman**, Global analysis of data on the spin-orbit-coupled  $A^1\Sigma^+_u$  and  $b^3\Pi_u$  states of  $\text{Cs}_2$ , *Phys. Rev. A* **83**, 032514 (2011).
8. **L. Busevica, I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, V.V. Meshkov, E.A. Pazyuk, and A.V. Stolyarov**, Fourier transform spectroscopy and direct potential fit of a shelflike state: Application to  $E(4)^1\Sigma^+$  KCs, *J. Chem. Phys.* **134** 104307 (2011).
9. **M. Tamanis, I. Klincare, A. Kruzins, O. Nikolayeva, and R. Ferber, E. A. Pazyuk and A. V. Stolyarov**, Direct excitation of the “dark”  $b^3\Pi$  state predicted by perturbation analysis of the  $A^1\Sigma^+-b^3\Pi$  complex in KCs, *Phys. Rev. A* **82**, 032506 (2010).
10. **P. Zabawa, A. Wakim, A. Neukirch, C. Haimberger, N. P. Bigelow, A. V. Stolyarov, E. A. Pazyuk, M. Tamanis, and R. Ferber**, Near-dissociation photoassociative production of deeply bound NaCs molecules, *Phys. Rev. A* **82**, 040501 (2010).

### Konferenču tēzes.

1. **Artis Kruzins, Kalvis Alps, Olga Docenko, Ilze Klincare, Maris Tamanis, Ruvin Ferber, Andrei V. Stolyarov** “High Resolution Spectroscopic Study of the  $A^1\Sigma^+-b^3\Pi$  Complex in RbCs Molecule”, *The 23rd International Conference on Atomic Physics (ICAP) 2012*, July 23-27, 2012 Ecole Polytechnique, Palaiseau, France, Book of Abstracts, p.299.
2. **Inese Birzniece, Olga Docenko, Olga Nikolayeva, Maris Tamanis, and Ruvin Ferber**, "High resolution spectroscopy and description of low-lying energy levels of  $B(1)^1\Pi$  state in RbCs", *The 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy*, September 4 – 8, 2012 Prague, Czech Republic.
3. **I. Birzniece, O. Docenko, O. Nikolayeva, M. Tamanis, and R. Ferber**, „Fourier Transform Spectroscopy of  $B^1\Pi$  State in RbCs”, *44th Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS)*, July 9 - 13, 2012, University of Gothenburg, Gothenburg, Sweden, Europhysics Conference Abstracts, **36C**, p.157.
4. **I. Birzniece, O. Nikolayeva, M. Tamanis, and R. Ferber** "Fourier transform spectroscopy and potential construction for low vibrational levels of  $B^1\Pi$  state in KCs”, *43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS)* University of Fribourg, Fribourg, Switzerland, June 28 - July 2, 2011, Europhysics Conference Abstracts, **35C**, p.165.

5. **A. Kruzins, I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, E.A. Pazyuk, and A.V. Stolyarov** „Novel study of the  $A^1\Sigma^+ \sim B^3\Pi$  complex in KCs and refinement of deperturbation analysis”, 43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS), University of Fribourg, Fribourg, Switzerland June 28 - July 2, 2011, Europhysics Conference Abstracts, **35C**, p.172.
6. **V. I. Pupyshev, E. A. Pazyuk, A. V. Stolyarov, O. Nikolayeva, I. Klincare, M. Tamanis, R. Ferber** „Insight into nodal structure of non-adiabatic diatomic states”, *22<sup>nd</sup> Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*, Dijon, France, August 29 – September 2, 2011, Program and Abstracts, p.260.
7. **I. Birzniece, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber** „Fourier Transform Spectroscopy and Molecular Constants for Low Vibrational Levels of  $B^1\Pi$  State in KCs”, *22<sup>nd</sup> Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*, Dijon, France, August 29 – September 2, 2011, Program and Abstracts, p.234.
8. **O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber** „KCs Ground State Revisited: Observation of Vibrational Levels Close to Atomic Asymptote Through  $(4)^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$  Transition”, *22<sup>nd</sup> Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*, Dijon, France, August 29 – September 2, 2011, Program and Abstracts, p.261.
9. **M. Tamanis, L. Busevica, R. Ferber, I. Klincare, V. V. Meshkov, O. Nikolayeva, E. A. Pazyuk, A. V. Stolyarov** „[Potential energy curve construction of the  \$\(4\)^1\Sigma^+\$  state of KCs based on  \$\(4\)^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+\$  transition study](#)”, *10<sup>th</sup> European conference on atoms molecules and photons (ECAMP X)*, Spain, Salamanca, July 4-9, 2010, Conference Abstracts.
10. **M. Tamanis, O. Docenko, R. Ferber, H. Knockel, E. Tiemann** „[Fourier transform spectroscopy of the  \$a^3\Sigma^+\$  and  \$X^1\Sigma^+\$  states in RbCs](#)”, *10<sup>th</sup> European conference on atoms molecules and photons (ECAMP X)*, Spain, Salamanca, July 4-9, 2010, Conference Abstracts.
11. **A. Stolyarov, E. Pazyuk, M. Tamanis, L. Busevica, R. Ferber, I. Klincare, O. Nikolayeva** „[Experimental and computational study of the spin-orbital coupling effect in  \$\(2\)^1\Pi\$  KCs](#)”, *10<sup>th</sup> European conference on atoms molecules and photons (ECAMP X)*, Spain, Salamanca, July 4-9, 2010, Conference Abstracts.

## Pētījuma apakšaktivitāte

### 4.1.3. Ridberga kvantu stāvokļu lāzeru manipulācija

*Aktivitātes vadītājs: lektors Aigars Ekers*

Pētījuma apakšaktivitāte nr. 4.1.3 „Ridberga kvantu stāvokļu lāzeru manipulācija” īstenota Latvijas Universitātes Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā. Atbilstoši projekta pieteikumā izvirzītajiem darba uzdevumiem un laboratorijas zinātniskajām iestrādņēm, pētnieciskā darbība tika vērsta uz atdzēsētu atomāru sistēmu ierosināto stāvokļu īpašību un dinamikas izpēti un manipulācijas iespējām, kuras perspektīvā ir iespējams pielietot efektīvai koherentai ilgi dzīvojošu Ridberga kvantu stāvokļu apdzīvotību kontrolei un elementāro reakciju kontrolei. Projekta ietvaros izveidots matemātiskais aparāts ģeometriski atdzēsētu atomu virsskaņas kūļa kolimējošās apertūras formas ietekmei uz atomu emisijas spektra spektrālīniju formu. Pētot ar lāzeru ietērpto stāvokļu veidošanos sistēmās ar supersīkstruktūras mijiedarbību, izveidots matemātiskais modelis, kas apraksta ietērpto stāvokļu sašķelšanos supersīkstruktūrā dažādos eksperimentālos apstākļos. Pētot Ridberga kvantu stāvokļu apdzīvotību evolūciju, attīstītas metodes augsti ierosinātu kvantu stāvokļu izstarošanas konstanšu noteikšanai 3 līmeņu ierosmes shēmās.

Projekta ietvaros pētījuma apakšaktivitātē „Ridberga kvantu stāvokļu lāzeru manipulācija” nodarbināti divi doktorantūras studenti – Mārtiņš Brūvelis (01.10.2010-31.05.2011 un 01.06.2011-30.09.2011) un Artūrs Ciniņš (01.10.2011 – 30.11.2012). Abi studenti doktorantūras studijas sākuši šī projekta ietvaros un pēc projekta beigām turpinās darbu LU Lāzeru centrā. Projekta ietvaros vadīts Silvas Mežinskas bakalaura darbs „Atomu izstarošanas konstanšu mērījumi virsskaņas nātrija atomu kūlī, izmantojot nepārtrauktu lāzera starojuma ierosmi”.

Paralēli zinātniskajai darbībai regulāri veikta laboratorijas aprīkojuma profilaktiskā aprūpe un tehnoloģisko iespēju uzlabošana, lai uzturētu un paaugstinātu eksperimentālu zinātnisku pētījumu kvalitāti un kapacitāti.

### **Ģeometriski dzesētu virsskaņas atomu/molekulu kūļu ģeometrijas ietekme uz absorbcijas spektrālīniju formu**

Daudzos atomu un molekulu pētījumos augstāko spektrālo izšķirtspēju ierobežo Doplera efekts. Doplera efekts ietekmē atomu un molekulu ierosmi ar lāzera starojumu, paplašinot absorbcijas un emisijas spektrālīnijas. Augstas precizitātes mērījumu veikšanai atomi iespējami ilgi jāierobežo novērojamā telpas apgabalā, kam jābūt brīvam no apkārtējās vides ietekmes. Viena no plaši lietotām metodēm Doplera ietekmes mazināšanai ir divās dimensijās atdzēsētu virsskaņas atomāro/molekulāro kūļu izmantošana. LU Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā atomu/molekulu virsskaņas kūlis tiek dzesēts, izmantojot ģeometrisku dzesēšanu. Plānotie un aktuālie pētījumi Molekulāro kūļu laboratorijā ietver tādas parādības kā koherentas kvantu stāvokļu kontroles iespējas izmantojot ietērpto stāvokļu interferenci un Autler-Townes efekta izmantošana molekulāro enerģijas līmeņu hipersīkstruktūras izšķiršanai. Plānojot eksperimentālus novērojumus minētajiem efektiem, nepieciešams izvēlēties iespējami labāko eksperimenta konfigurāciju konkrēta efekta novērošanai. Tādēļ nepieciešams ļoti precīzi pārzināt visus iekārtā norisošos fizikālos mehānismus, kuri ietekmē pētāmo daļiņu absorbcijas un emisijas spektrālīniju platumu un formu. Šāds mehānisms ir, piemēram, iepriekš laboratorijā pētītā caurlidošanas laika izraisītā spektrālīnijas paplašināšanās. Šis paplašinājums rodas pateicoties ļoti ierobežotam daļiņu un lāzera starojuma mijiedarbības laikam (~20ns). Pētījuma apakšaktivitātes ietvaros tika pētīta kolimētu (ģeometriski dzesētu) virsskaņas kūļu ģeometrijas ietekme uz atomu/molekulu absorbcijas spektrālīniju formu.

Vienkāršoti kūļa ģeometriskā dzesēšana skaidrojama sekojoši. Tuvu kūļa daļiņu avota izejai jeb sprauslai sadursmes starp daļiņām notiek intensīvi, uzturot termisku līdzsvaru starp kūlim



paralēlo un perpendikulāro ātrumu komponentēm. Daļiņu gāze strauji izplešas, tādējādi pazeminās tās temperatūra. Attālinoties no avota sprauslas daļiņu sadursmju skaits strauji krītas, un enerģijas apmaiņa starp daļiņām notiekošo sadursmju rezultātā kļūst neefektīva. Noteiktā attālumā no sprauslas, ko sauc par sasalšanas punktu, sadursmju skaits kļūst neievērojams. Aiz šī punkta, var uzskatīt, ka daļiņu trajektorijas kūlī ir taisnvirziena, kūļa asij paralēlā virzienā daļiņu ātrumu sadalījums kļūst nemainīgs, jeb „iesaldēts” savukārt daļiņas ar lielu kūļa asij perpendikulāro ātruma komponentei strauji attālinās no kūļa ass. Aiz sasalšanas punkta netiek nodrošināts termodinamisks līdzsvars starp kūlim perpendikulāro un paralēlo ātrumu komponentēm, tādēļ kūļa temperatūras raksturošanai nepieciešams izmantot divas temperatūras vērtības – temperatūru kūļa asij paralēlā un perpendikulārā virzienā. Aplūkojot perpendikulārās ātruma komponentes sadalījumu laukuma vienībā atkarībā no attāluma līdz kūļa avotam, redzams, ka ātrumu sadalījums kļūst šaurāks un vidējais daļiņu ātrums samazinās, tām attālinoties no sprauslas. Šis efekts tiek saukts par ģeometrisko kūļa dzesēšanu. Ekvivalenta ģeometriskā dzesēšana notiek arī gadījumā, ja pie fiksēta attāluma no sprauslas tiek samazināts kūlī kolimējošās apertūras izmērs, t.i., kūlī viedo tikai tās daļiņas, kurām kūlim perpendikulārā ātruma komponente ir pietiekami maza, lai daļiņa attālinoties no kūļa ass netiktu nobloķēta ar kolimējošās apertūras palīdzību.

No fizikāliem kūļu iekārtas uzbūves un darbības apsvērumiem var pieņemt, ka:

1. No virsskaņas kūļa izejas sprauslas  $s'$  daļiņas (atomi vai molekulas) izlido izotropiski;
2. Virsskaņas atomu/molekulu kūlī sadursmju skaits apgabalā starp sprauslu un kolimējošo apertūru  $s$  ir neievērojams;
3. Atomu/molekulu lāzertiesmes virziens sakrīt ar izvēlētajā koordinātu sistēmas vienības vektora  $e_x$  virzienu.

Šādā gadījumā Doplera efekta radīto spektrālīnijas paplašinājumu patvaļīgas formas kolimējošajai apertūrai, neņemot vērā citus spektrālīnijas paplašināšanās efektus, iespējams aprakstīt, izmantojot izteiksmi:

$$P_D(\nu) = P(\Delta\nu) = \frac{1}{S' \times S} \iint_{S'} dy' dx' \iint_S dy dx \int_0^\infty dv F(v) \times \delta\left(\Delta\nu - \frac{(x-x')v}{L\lambda}\right)$$

Šeit  $\Delta\nu$  - lāzera ierosmes starojuma frekvences nobīde no divlīmeņu ierosmes shēmas rezonanses pārejas frekvences,  $\iint_{S'} dx' dy'$  - integrālis pa kūļa sprauslas laukumu,  $\iint_S dx dy$  -

integrālis pa kūļa kolimējošās apertūras laukumu,  $L$  - attālums starp kolimējošo apertūru un sprauslu,  $\lambda$  - divlīmeņu ierosmes shēmas rezonanses pārejas viļņa garums,  $v$  - absolūtais atoma/molekulas ātrums kūlī,  $F(v)$  - atomu/molekulu ātrumu sadalījuma funkcija kūlī.

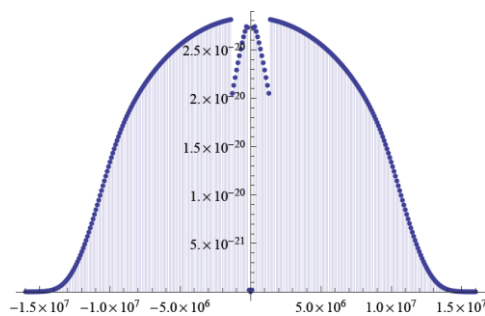
Aprēķini tika veikti speciālgadījumiem ar cirkulāru un ar kvadrātisku kolimējošo apertūru. Integrālā formula cirkulāras apertūras gadījumā ir:

$$P_{circ} = \int_{-r_1}^{r_1} \int_{-\sqrt{r_1^2-(x')^2}}^{\sqrt{r_1^2-(x')^2}} \int_{-r_2}^{r_2} \int_{-\sqrt{r_2^2-(x)^2}}^{\sqrt{r_2^2-(x)^2}} \int_{-\infty}^{\infty} F(v) \times \delta\left(\nu - \frac{(x-x')^2}{L\lambda}\right) dv dy dx dy' dx'$$

Savukārt kvadrātiskai apertūrai:

$$P_{kvadr}(\nu) = \int_{-r_1}^{r_1} \int_{-\sqrt{r_1^2-(x')^2}}^{\sqrt{r_1^2-(x')^2}} \int_{-r_2}^{r_2} \int_{-r_2}^{r_2} \int_{-\infty}^{\infty} F(v) \times \delta\left(\nu - \frac{(x-x')^2}{L\lambda}\right) dv dy dx dy' dx'$$

Šo formulu skaitliskajiem aprēķiniem ir nepieciešamas lielas skaitļošanas jaudas, pie tam pie mazām  $\Delta\nu$  vērtībām aprēķinu rezultātu nozīmīgi ietekmē izvēlētajā skaitliskās risināšanas precizitāte (att. 1). No nestabilitātēm iespējams izvairīties, palielinot skaitļošanas precizitāti, kas savukārt ievērojami palielina metodes skaitļošanas resursu prasības. Tādēļ noteiktos tuvinājumos tika meklēti iespējamie spektrālīnijas profila analītiskie atrisinājumi.



Att. 1. Doplera profila un Lorencas profila konvolūcijas skaitliska simulācija. Mazām  $\Delta \nu$  vērtībām skaitliskā simulācija nedod pareizu rezultātu.

Pieņemot, ka kūļa sprausla ir ļoti maza, un, ka daļiņu ātrumu sadalījumu kūrī apraksta Diraka Delta funkcija, cirkulāras kolimējošās apertūras gadījumā tika iegūta Doplera absorbcijas profila kodola analītiska izteiksme:

$$\tilde{P}(\Delta \nu) = \frac{2}{\Delta \nu_K \pi} \sqrt{1 - \frac{\Delta \nu^2}{\Delta \nu_K^2}}$$

Šeit  $\Delta \nu_k$  ir raksturīgais šķērseniskā Doplera profila platumš. Salīdzinot analītiskās izteiksmes rezultātu ar skaitliskajiem aprēķiniem cirkulāras un kvadrātiskas apertūras gadījumā (att. 2), izrādās, ka analītiskais tuvinājums slikti apraksta Doplera profilu cirkulāras apertūras gadījumā, pie tam tā platums pie puses no maksimālās vērtības labāk atbilst Doplera profilam kvadrātiskas apertūras gadījumā.

Tā kā aprēķinos nepieciešams ņemt vērā divpakāju ierosmes shēmas rezonanses līnijas dabīgo platumu, kā arī lāzera ierosmes līnijas platumu, kurus labi apraksta Lorencas kontūrs, tika meklēts analītisks atrisinājums Doplera profila kodola konvolūcijai ar Lorencas kontūru,

$$J_L(\nu) = \frac{2\Delta \nu_l}{\pi \times \Delta \nu_l^2 + 4\pi \times \nu^2}$$

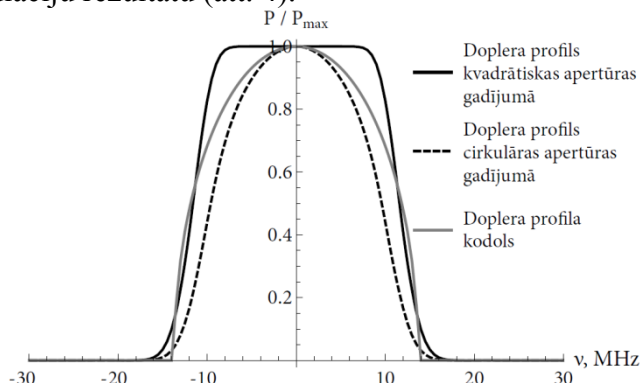
Analītiska atrisinājuma meklēšanu motivē arī fakts, ka Doplera profila un Lorencas kontūra skaitliskas konvolūcijas aprēķināšanai (att. 3) no precīzajām izteiksmēm nepieciešami lieli skaitļošanas resursi.

Tuvināti tika iegūta analītiska izteiksme kombinētās Doplera profila un dabīgā paplašinājuma ietekmes uz līnijas profilu aprēķināšanai,

$$J_L(\nu) = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{\sqrt{(x_r^2 - a^2 - 1)^2 + 4x_r^2 a^2} + 1 - x_r^2 + a^2} - \frac{2a}{\pi}$$

Šeit  $a = \frac{\Delta \nu_{\text{lazera}}}{2\Delta \nu_k}$ ,  $x_r = \frac{\Delta \nu_{\text{lazera}}}{\Delta \nu_k}$ ,  $\Delta \nu_{\text{lazera}} = \nu_{\text{rezonanses}} - \nu_{\text{lazera}}$ . Iegūtā analītiskā izteiksme labi

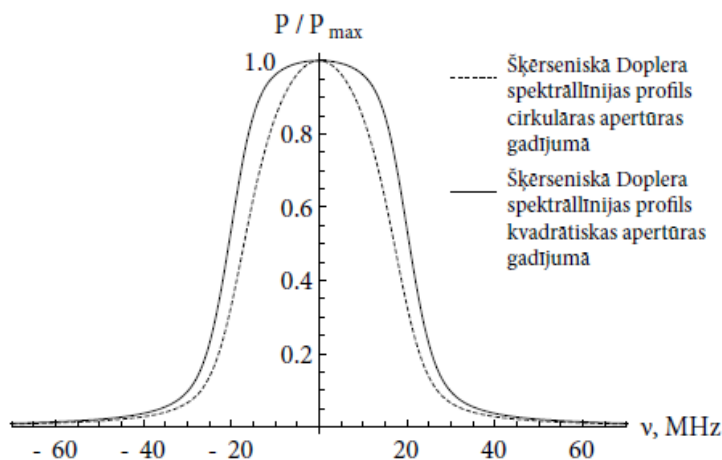
sakrīt ar skaitlisko simulāciju rezultātu (att. 4).



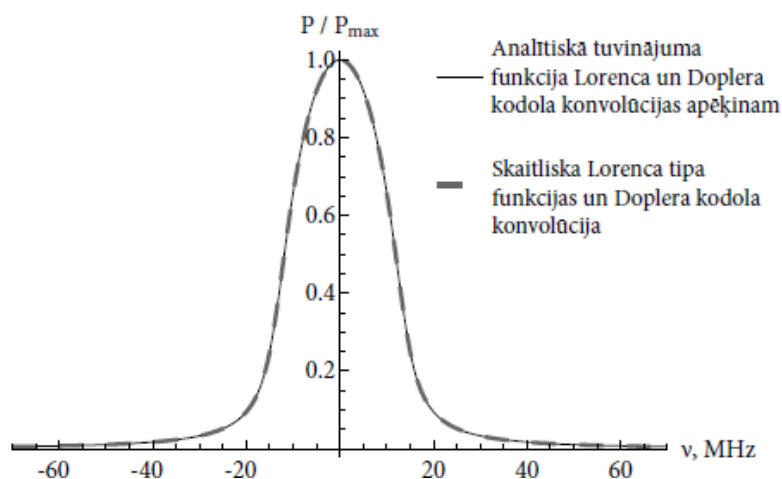
Att. 2. Uz maksimumu 1 normalizētu šķērsenisko Doplera profilu skaitliskā aprēķina rezultāti cirkulāras un kvadrātiskas apertūras gadījumā un salīdzinājums ar analītisko



tuvinājumu cirkulāras apertūras gadījumā (t.s. Doplera profila kodols). Aprēķinos izmantoti eksperimentālās iekārtas raksturīgie parametri.



Att. 3. Skaitliski aprēķināta Doplera profila un Lorencas profila konvolūcija cirkulāras un kvadrātiskas kolimējošās apertūras gadījumā. Aprēķinos izmantoti eksperimentālās iekārtas raksturīgie parametri.



Att. 4. Skaitliski iegūtās Doplera profila kodola un Lorencas kontūra konvolūcijas salīdzinājums ar analītiskās izteiksmes rezultātu. Aprēķinos izmantoti eksperimentālās iekārtas raksturīgie parametri.

Priekšrocības analītiskās konvolūcijas formulas izmantošanai ir iespēja veikt ātrus profila formas aprēķinus. Tā kā eksperimentālajai konfigurācijai šķērseniskā Doplera profila kodols uzskatāmi atšķiras no skaitliski aprēķinātā, sagaidāmas divas atšķirības:

1. Konvolūcija ar Lorencas profilu vidusdaļā būs platāka par skaitliski aprēķināto, jo arī Doplera profila kodolam ir šāda īpatnība;
2. Analītiskajam tuvinājumam ir mazāk izteikti spārni (vērtības pie lieliem  $|\nu|$ ), kas izriet no konstantu ātrumu tuvinājuma, iegūstot Doplera profila kodola izteiksmi.

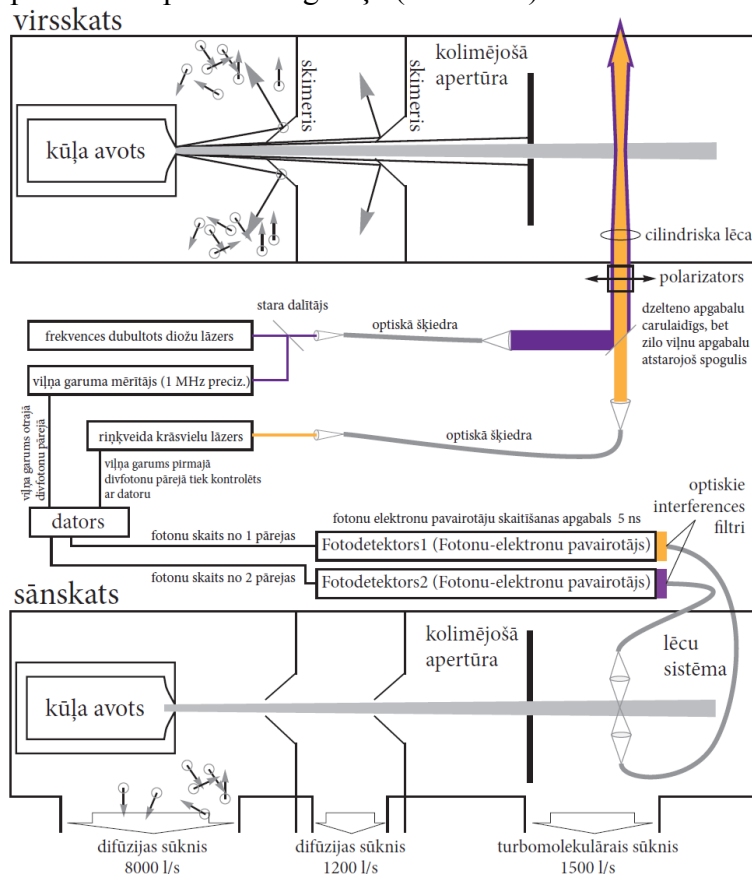
Lai verificētu izveidoto matemātisko medeli, tika veiktas eksperimentu sērijas, iegūstot datus par šķērsenisko Doplera spektrālīniju profilu formu. Eksperimenta shēma parādīta attēlā 5. Kā lāzera starojuma avoti tika izmantotas divas lāzeru sistēmas - riņķveida krāsvielu lāzers *Coherent 699-21* un dubultotās frekvences augstas jaudas lāzeru sistēma *Topica TA-SGH110*. Lāzera līniju tipiskie platumi ir attiecīgi *1MHz* un *2MHz*.

Tā kā analītisko izteiksmju iegūšanā izmantots pieņēmums, ka lāzera līnijas un atomu spektrālīnijas apraksta delta funkcija, šī rezultāta verificēšanai nepieciešams novērot fluorescenci no atoma ierosinātā stāvokļa ar ilgu dzīveslaiku. Tādēļ eksperimentos tika

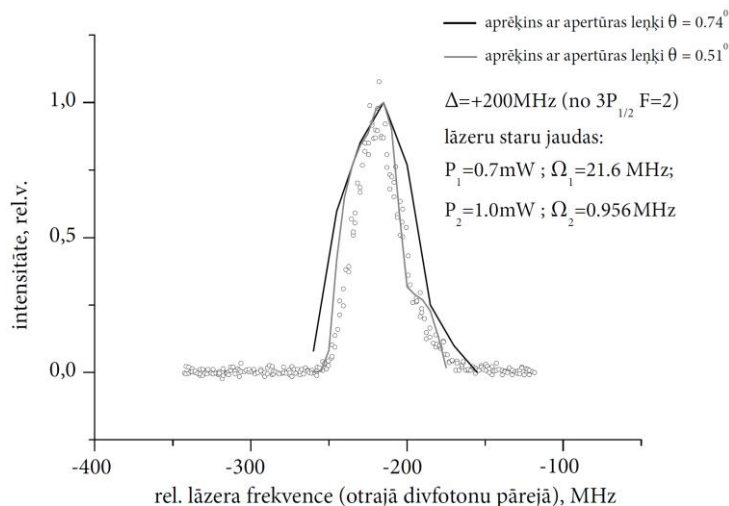
izmantotas nātrija atomu divpakāpju ierosmes shēmas  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2} \rightarrow 8S_{1/2}$  un  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2} \rightarrow 7D_{3/2}$ , kuru dzīveslaiki ir attiecīgi  $405,94 \text{ ns}$  un  $312,43 \text{ ns}$ .

Attēlā 6 parādīts tipisku eksperimenta datu salīdzinājums ar skaitliskās simulācijas rezultātu. Tā kā skaitliskām simulācijām nepieciešami ļoti lieli skaitļošanas resursi, pirms analītiskā modeļa izstrādes, simulācijas tika veiktas ar ļoti mazu izšķirtspēju, savukārt projekta ietvaros izstrādātais analītiskais modelis ļauj veikt skaitliskas simulācijas ar daudz lielāku telpisko izšķirtspēju. Analizējot eksperimentālos datus, tika konstatēts, ka eksperimentālo punktu izvietojumu vislabāk apraksta izteiksme kombinētās Doplera profila un dabīgā paplašinājuma ietekmes uz līnijas profilu aprēķināšanai.

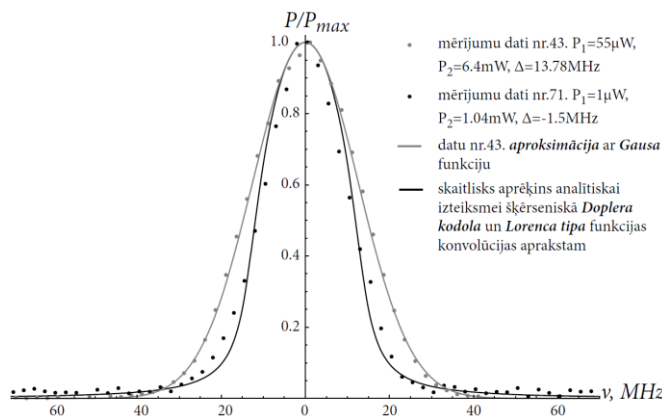
Kā redzams attēlā 7, eksperimentālos datus dažos gadījumos labi apraksta arī Gausa funkcija. Tika secināts, ka cirkulāras kolimējošās apertūras gadījumā teorētiskā modeļa aprakstītie fizikālie efekti ir necīgi, un ir nepieciešams veikt eksperimentālus mērījumus citādas formas apertūrām, lai eksperimentāli pierādītu apertūras formas ietekmi uz šķērseniskā Doplera spektrālīnijas profila formu. Tādēļ LU Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā tiek plānots veikt šķērsenisko Doplera profila mērījumus, izmantojot kvadrātisku un taisnstūrveida kolimējošo apertūru. Projekta ietvaros izstrādātais matemātiskais modelis paredz, ka, izvēloties kvadrātisku kolimējošo apertūru, šķērseniskajam Doplera profilam jābūt ar maz izteiktiem spārniem un plakanu augšdaļu (skat att. 2).



Att. 5. Eksperimenta shēma šķērseniskā Doplera spektrālīnijas profila mērīšanai virsskaņas atomāro/molekulāro kūļu iekārtā. Diferenciāla vakuuma kameru atsūkņēšanas shēma ļauj sasniegt augstāku vakuumu ierosmes kamerā. Lāzera ierosmes zonas tuvumā atrodas lēcu sistēma, kas savāc emisijas starojumu un pa optisko šķiedru kūli nogādā to uz fotodetektoru signāla reģistrēšanai.



Att. 6: Normalizēti šķērseniskā Doplera spektrālīniju profila mērījumi divfotonu pārejas shēmā  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2} \rightarrow 8S_{1/2}$  lāzera staru jaudām  $P_1$  un  $P_2$  attiecīgi pirmajā un otrajā divfotonu pārejā pie nobīdes no rezonanses  $\Delta$ .



Att. 7: Divi normalizēti šķērseniskā Doplera spektrālīniju profila mērījumi divfotonu pārejas shēmā  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2} \rightarrow 7D_{3/2}$  lāzera staru jaudām  $P_1$  un  $P_2$  attiecīgi pirmajā un otrajā divfotonu pārejā pie nobīdes no rezonanses  $\Delta$ .

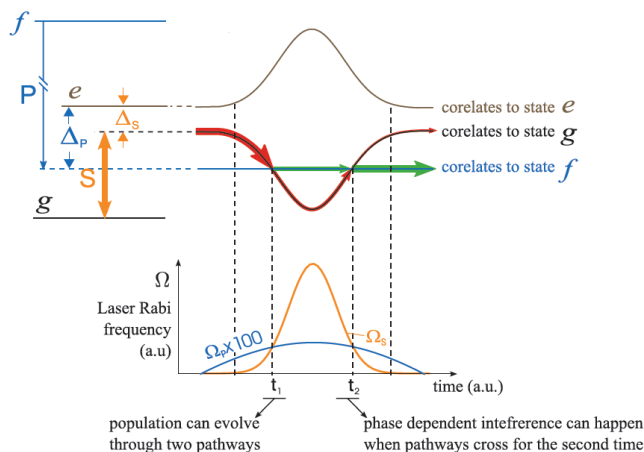
Pētnieciskā darba gaitā ticis formulēts matemātiskais modelis vispārējas formas kolimējošās apertūras šķērseniskā Doplera apraksts. Precīzu skaitlisku aprēķinu metodes sniegtas gan cirkulāras, gan kvadrātiskas apertūras formas gadījumiem un tuvinātu metožu aprēķini pasniegti cirkulāras apertūras gadījumam. Darba gaitā kopumā sekmīgi iegūti aptuveni 140 spektrālo Doplera profila mērījumi Na  $8S_{1/2}$  un  $7D_{3/2}$  stāvokļu divfotonu ierosmē ar kolineāriem lāzera stariem. Veiktā eksperimentālo datu validēšanā noskaidrots, ka  $8S_{1/2}$  stāvokļu hipersīkstruktūras sašķelšanās ir salīdzināma ar šķērseniskā Doplera profila platumu, tādēļ tuvinātu metožu aprēķini nav izmantojami šķērseniskā Doplera profila aprakstam. Apskatot  $7D_{3/2}$  stāvokļa divfotonu ierosmi, noskaidrots, ka pie relatīvi lielām jaudām, spektrālā profila veidošanās nosaka nevis šķērseniskais Doplera spektrālīnijas profils, bet gan tipiski lietotā Gausa funkcija. Taču samazinot lāzera jaudas tika novērots, ka profila forma mainījās un tuvināti tika aprakstīta ar analītisko šķērseniskā Doplera profila kodola un Lorenca tipa funkcijas konvolūciju. Tā kā šķērseniskā Doplera spektrālīniju profila forma ir atkarīga no apertūras un sprauslas integrācijas laukumu formas, tad nav iespējams izvest vienotu analītisku šķērseniskā Doplera spektrālīnijas aprakstu. Līdz šim plaši lietotais šķērseniskais Doplera profila apraksts virsskaņas kūļu iekārtās aprobežojas tikai ar profila platumu novērtējumu no eksperimentāliem mērījumiem, izmantojot Gausa vai Foigta tipa funkcijas profila formas aprakstam. Tādējādi gadījumos, kad Doplera efekta radītais spektrālīnijas paplašinājums ir samērojams ar citu efektu radīto spektrālīniju paplašinājumu

vai pētāmā enerģijas līmeņa dabīgo spektrālīnijas platumu, nav iespējams kvalitatīvi un kvantitatīvi aprakstīt Doplera efekta radīto ieguldījumu spektrālīnijas formā. Piemēram, kvadrātiskas apertūras izmantošana var novest pie īpatnējas formas spektrālīnijas profila izveidošanās, kas nav aprakstāma ar Gausa un Voigta tipa funkciju konvolūcijas palīdzību. Pētījumā iegūtā šķērseniskā Doplera spektrālīnijas profila kvalitatīva un kvantitatīva apraksta izmantošana sniedz iespēju jaunu pētniecisku pielietojumu izveidei virsskaņas kūļu iekārtās, kā piemēram, izmantojot piedāvāto spektrālīniju profilu apraksta matemātisko modeli un spektrālīniju mērījumus kolimētā virsskaņas kūlī, iespējams noteikt ierosmes lāzera starojumu summāro spektrālo platumu. Paņēmiens balstās uz to, ka eksperimentāli iegūtais spektrālīnijas profils ir šķērseniskā Doplera spektrālīnijas profila konvolūcija ar lāzera starojuma profilu un dabīgo atoma enerģijas līnijas profilu. Ja atoma dabīgais enerģijas līmeņa profils ir zināms, tad veicot konvolūcijai pretējo darbību iespējams noteikt nezināmo lāzera līnijas profila platumu vai pat formu. Šajā pētījumā iegūtās šķērseniskā Doplera spektrālīniju profila aprēķina izteiksmes derīgas tikai virsskaņas kūļiem, jo pretējā gadījumā pieņēmums, ka daļiņas kūlī lido pa taisnām trajektorijām būs aplams, novedot pie tā, ka kūļa ģeometrija nav noteicošais faktors Doplera šķērseniskā profila izveidei.

Pētījuma starprezultāti prezentēti Doktorantūras skolas „Atomāro un nepārtrauktas vides fizikālo procesu pētīšanas, modelēšanas un matemātisko metožu pilnveidošanas skola” seminārā 2010. gada 10. novembrī: M. Brūvelis „*Residual Doppler Profile in Supersonic Molecular Beam*”. Prezentējot pētījuma rezultātus, veikta dalība konferencē EGAS 43 Friburgā (Šveicē) [1], kā arī konferencē 21st International Conference on Spectral Line Shapes, Sanktpēterburgā (Krievijā) [2]. Pētnieciskās darbības rezultāti apkopoti, sagatavojot vēl npublicēta zinātniskā raksta [3] teorijas daļu.

### Ar lāzera ietērpito stāvokļu supersīkstruktūra

Par supersīkstruktūras mijiedarbību sauc atoma elektronu mākoņa un kodola radīto elektrisko un magnētisko multipolu lauku savstarpēju mijiedarbību, kura noved pie atoma sīkstruktūras enerģijas līmeņu sašķelšanās vēl smalkākā struktūrā, jeb t.s. supersīkstruktūrā. Liela nozīme līmeņu supersīkstruktūrai ir pētījumos, kuros krustojoties vairākiem enerģijas līmeņiem, apdzīvotību pārdalīšanos starp līmeņiem nosaka interferences efekti. Kā piemēru var minēt Lāzera centrā pētīto metodi efektīvai enerģijas līmeņu apdzīvotības pārslēgšanai starp dažādiem ierosinātiem stāvokļiem [N. N. Bezuglov, R. Garcia-Fernandez, A. Ekers, K. Miculis, L. P. Yatsenko, K. Bergmann, Phys. Rev. A 78, 053804 (2008)]. Ar šīs metodes palīdzību tiek panākta divu kvantu sistēmas enerģijas īpašstāvokļu krustošanās divos laika momentos, tādējādi izveidojot savdabīgu Maha-Zendera interferometru (att. 8). Neparedzēta vai nepareizi novērtēta izvēlēto stāvokļu sašķelšanās supersīkstruktūrā var novest pie neprognozējama interferences rezultāta, dramatiski samazinot minētās metodes efektivitāti. Tādēļ rodas nepieciešamība pēc teorētiska modeļa kvantu sistēmas supersīkstruktūras aprakstam gadījumā, kad sistēma spēcīgi mijiedarbojas ar lāzera starojumu.



Att. 8. Metode augstu ierosināta kvantu stāvokļa apdzīvotības koherentai pārslēgšanai. Interferences rezultāts otrajā līmeņu krustpunktā nosaka stāvokļu apdzīvotību pēc atomu izlidošanas caur diviem koaksiāliem lāzera stariem.

Veicot pētījuma apakšaktivitātes pieteikumā izvirzītā uzdevuma „izpētīt ar lāzeru ietērpto stāvokļu veidošanos enerģijas līmeņu sistēmās ar izšķirtu un neizšķirtu supersīkstruktūru” izpildi, tika konstatēts, ka līdz šim pasaules zinātnē nav ticis izveidots vienots teorētisks modelis, kas aplūkotu ar lāzeru ietērpto stāvokļu veidošanos atomārās sistēmās ar supersīkstruktūras mijiedarbības klātbūtni. Kvantu sistēmai spēcīgi mijiedarbojoties ar lāzera starojumu, notiek ievērojamas izmaiņas elektronu telpiskajā konfigurācijā, tādēļ ir paredzams, ka jaunās konfigurācijas (ietērpto stāvokļu) mijiedarbība ar kodolu izraisa enerģijas līmeņu sašķelšanos supersīkstruktūrā, kas kvalitatīvi atšķiras no izolēta atoma supersīkstruktūras. Tādēļ sadarbībā ar LU Fizikas un matemātikas fakultātes lektoru Vjačeslavu Kaščejevu tika veikts darbs pie teorētiskā modeļa izveides ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras aprakstam.

Izolēta atoma viļņu funkcijas evolūciju laikā nosaka stacionārs Hamiltona operators  $\hat{H}_0$ , kuru veido elektronu mākoņa enerģiju, kodola enerģiju un supersīkstruktūras mijiedarbības enerģiju raksturojošas daļas attiecīgi  $\hat{H}_{el}$ ,  $\hat{H}_N$ ,  $\hat{V}_{hf}$ . Optiskās spektroskopijas mērījumos kodola enerģētiskais stāvoklis parasti netiek mainīts, tādēļ  $\hat{H}_N$  parasti netiek ņemts vērā. Elektronus raksturojošā Hamiltoniāņa  $\hat{H}_{el}$  īpašstāvokļi atomārām sistēmām ir sīkstruktūras stāvokļi  $|\zeta, m_\zeta\rangle$ , kuru enerģijas ir  $E_\zeta$ . Šeit  $\zeta$  ir visu sīkstruktūras stāvokli raksturojošo kvantu skaitļu kopa, bet  $m_\zeta$  ir elektronu pilnā leņķiskā momenta z-projekcijas kvantu skaitlis. Supersīkstruktūras mijiedarbības operators  $\hat{V}_{hf}$  raksturo elektronu mākoņa un atoma kodola radīto multipolu momentu savstarpējo mijiedarbību. Tā kā mijiedarbības enerģija strauji samazinās, pieaugot multipolaritātei, lielākajai daļai atomu ir pietiekami ņemt vērā tikai magnētiskā dipola momentu mijiedarbību  $\hat{V}_{dd}$  un elektriskā kvadrupola momentu mijiedarbību  $\hat{V}_{qq}$ ,

$$\hat{V}_{dd} = \hat{A} \hat{I} \cdot \hat{J}$$

$$\hat{V}_{qq} = \hat{B} \frac{3(\hat{I} \cdot \hat{J})^2 + \frac{3}{2} \hat{I} \cdot \hat{J} - \hat{I}^2 \hat{J}^2}{2I(2I-1)J(2J-1)}$$

Šeit  $\hat{I}$  ir kodola spina vektor-operatori, bet  $\hat{J}$  ir elektronu pilnā leņķiskā momenta vektoroperatori un  $I, J$  ir šiem operatoriem atbilstošie kvantu skaitļi. Operatori  $\hat{A}$  un  $\hat{B}$  ir

attiecīgās mijiedarbības stiprumu katram sīkstruktūras stāvoklim raksturojošas konstantes. Ja kodola enerģētiskais stāvoklis eksperimentā netiek mainīts, kodola spinu  $I$  var uzskatīt par globālu konstanti, un kodola stāvokli raksturot, izmantojot tikai kodola spina  $z$ -projekciju  $m_I$ . Tādā gadījumā pilno atomāras sistēmas īpašstāvokli operatoru  $\hat{I}$  un  $\hat{J}$  īpašstāvokļu bāzē raksturo vektors  $|\zeta, m_J, m_I\rangle$ . Ja visas ārējās mijiedarbības ir vājākas par supersīkstruktūras mijiedarbību, tad parasti atoma aprakstam tiek izmantota atoma pilnā leņķiskā momenta  $\hat{F} = \hat{J} + \hat{I}$  bāze, kurā Hamiltoniānis  $\hat{H}_0$  ir diagonāls.

Kvantu mehānikā leņķiskā momenta operatoru komponentes parasti uzdod t.s. sfēriskajā bāzē,  $\hat{L} = \{L^{-1}, L^0, L^1\}$ . Katras komponentes iedarbību uz leņķiskā momenta  $\hat{L}$  īpašstāvokli  $|l, m_l\rangle$  apraksta šādas sakarības:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |l, m_l\rangle &= l(l+1) |l, m_l\rangle \\ L^0 |l, m_l\rangle &= m_l |l, m_l\rangle \\ L^{\pm 1} |l, m_l\rangle &= \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \mp 1)} |l, m_l \mp 1\rangle\end{aligned}$$

Uz dažādu haotisko elektromagnētiskā starojuma avotu fona lāzeri izceļas ar ģenerētā starojuma koherenci un monohromatiskumu. Bieži vien dažādos spektroskopijas pielietojumos lāzera starojuma elektriskā lauka komponenti labā tuvinājumā apraksta harmoniska viļņa izteiksme,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \cdot \text{Re}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}),$$

kur  $E_0$  ir elektriskā lauka intensitātes amplitūda,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  ir komplekss polarizācijas vektors,  $\mathbf{k}$  ir viļņa vektors, bet  $\omega$  ir lāzera lauka leņķiskā frekvence. Laikā mainīgs elektromagnētiskais starojums, mijiedarbojoties ar kvantu sistēmu, var tajā inducēt pārejas starp dažādiem enerģijas īpašstāvokļiem, ja starojuma frekvence ir tuva pārejas rezonanses frekvencei starp šiem stāvokļiem. Izolēts atoms, kas atrodas tā enerģijas operatora īpašstāvoklī, ir elektriski neitrāla daļiņa, savukārt pārejā starp īpašstāvokļiem atoms rada elektromagnētisko lauku, kuru raksturo katrai pārejai raksturīgi elektriskā un magnētiskā lauka multipolu momenti. Ja pāreju starp diviem stāvokļiem atļauj izvēles likumi elektriskā dipola pārejām, tad pārejā inducētā elektriskā dipola momenta un ārējā lauka mijiedarbības enerģija ir daudz lielāka par augstāku kārtu elektrisko multipolu un visu magnētisko multipolu mijiedarbības enerģijām. Līdz ar to labā tuvinājumā šādu pāreju raksturo elektriskā dipola un lāzera starojuma elektriskās komponentes mijiedarbība. Tā kā atoma raksturīgie izmēri ( $\sim 10^{-11} m$ ) ir niecīgi salīdzinājumā ar tipisku lāzera starojuma viļņa garumu ( $\sim 10^{-7} m$ ), tad to savstarpējā mijiedarbībā labā tuvinājumā var neņemt vērā elektromagnētiskā starojuma intensitātes telpisko sadalījumu. Elektriskā dipola un lāzera lauka mijiedarbības enerģiju raksturo Hamiltona operators:

$$\hat{V} = E_0 \cdot \text{Re}(\hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot e^{-i\omega t}).$$

Šeit  $\hat{\mathbf{d}} = -|e|\hat{\mathbf{r}}$  ir lāzera starojuma inducētās pārejas elektriskā dipola momenta vektoroperators. Ja kvantu sistēmas enerģijas operators ir atkarīgs no laika  $t$ , tad vispārīgā gadījumā sistēmas evolūciju laikā nosaka Šrēdingera vienādojums,

$$-i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi.$$

Šeit  $\Psi$  ir sistēmas viļņu funkcija, bet sistēmas pilnā enerģijas operatora  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  īpašvērtības tiek uzdotas leņķiskās frekvences vienībās. Tomēr, ja kvantu sistēmas un lāzera lauka mijiedarbības ilgums ir daudzārt lielāks par lāzera lauka svārstību periodu, labā tuvinājumā var uzskatīt, ka ātri oscilējoši mijiedarbību raksturojošie locekļi dod vērā neņemamu laikā vidējo ieguldījumu sistēmas enerģijā. Ģeometriski dzesētu nātrija atomu



virsskaņas kūlī individuāla atoma un lāzera starojuma mijiedarbības laiks tipiski ir  $10^{-7}$  s, kas ir ievērojami lielāks par redzamās gaismas svārstību periodu  $10^{-12}$  s, tādēļ modelējamā sistēma atbilst Rotējoša viļņa tuvinājuma pielietojamības kritērijam. Šī tuvinājuma, ko sauc par Rotējoša viļņa tuvinājumu, veikšanai nepieciešams izvēlēties specifiskus sistēmas viļņu funkcijas  $\Psi$  bāzes vektorus  $|\varphi\rangle$ , kurus ar „parastajiem” no laika neatkarīgajiem bāzes vektoriem  $|\varphi_0\rangle$  saista unitāra transformācija  $\hat{U}$ . Izvēloties jaunu viļņu funkcijas bāzi, tiek izmainīts arī sistēmas Hamiltona operators, kuru ar sākotnējo operatoru  $\hat{H}$  saista sakarība

$$\hat{H} = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} - i \hat{U}^{-1} \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}.$$

Rotējošā viļņa tuvinājumā Hamiltona operatora diagonāles elementi raksturo lāzera starojuma izskaņojumu  $\Delta = \omega - \omega_0$  no elektriskā dipola pārejas starp stāvokļiem  $|g\rangle$  un  $|e\rangle$  rezonanses frekvences  $\omega_0$ , savukārt nediagonālie elementi, kas atbilst atoma – lāzera starojuma mijiedarbībai, zaudē atkarību no laika, un ir vienādi ar pusi no mijiedarbības stiprumu raksturojošās Rabi frekvences  $\Omega_{ge} = \frac{\langle e | \hat{d} \cdot \mathbf{E}_0 | g \rangle}{\hbar}$ . Tā kā sistēmas Hamiltoniānis šajā tuvinājumā ir stacionārs, sistēmas īpašstāvokļu spektru un to enerģijas iespējams iegūt, atrisinot stacionāro Šrēdingera vienādojumu.

Ar lāzera starojumu mijiedarbībā esoša atoma īpašstāvokļi tiek saukti par ietērtajiem stāvokļiem. Izplatītākie teorētiskie modeļi ietērtā stāvokļu aprakstam ir piemēroti lietošanai sistēmās, kuras ir iespējams matemātiski aprakstīt kā neatkarīgu divlīmeņu sistēmu kopas. Supersīkstruktūras mijiedarbības dēļ starp viena sīkstruktūras enerģijas līmeņa dažādiem  $m$ , apakšlīmeņiem, kvantu sistēma neatbilst šādam matemātiskam aprakstam, tādēļ pētījuma ietvaros tika izveidots ietērtā stāvokļu ainu pieraksts, kuru ir ērti pielietot sistēmām, kuras veido daudzi savā starpā saistīti kvantu stāvokļi. Sistēmā, kuru veido divi sīkstruktūras enerģijas līmeņi  $\zeta = g, e$ , katrs līmenis satur  $2J_\zeta + 1$  apakšlīmeņus  $|\zeta, m_\zeta\rangle$ . Ietērtie stāvokļi, savukārt, tiek raksturoti, izmantojot divus kvantu skaitļus  $s = \pm 1$  un  $m$ . Ietērtā stāvokļu saistību ar izolēta atoma supersīkstruktūras stāvokļiem izsaka šāda sakarība:

$$|\Phi_{s,m}\rangle = \cos \theta_{s,m} |g, m_g\rangle + \sin \theta_{s,m} |e, m_g + p\rangle$$

$$E_{s,m} = \frac{1}{2} (\Delta + s \sqrt{\Delta^2 + \Omega_m^2})$$

Šeit  $p$  ir lāzera starojuma polarizāciju raksturojoša konstante,  $p = \pm 1$  atbilst cirkulārai  $\sigma^\pm$  polarizācijai, bet  $p=0$  atbilst lineārai jeb  $\pi$  polarizācijai. Sajaukšanās leņķis  $\theta_{s,m}$  tiek definēts, izmantojot šādu sakarību:

$$\tan \theta_{s,m} \equiv \frac{\Omega_m}{E_s},$$

savukārt Rabi frekvence  $\Omega_m$  ir vienāda ar inducētās pārejas  $|g, m_g\rangle \leftrightarrow |e, m_g + p\rangle$  rabi frekvenci. Eliptiskas lāzera starojuma polarizācijas gadījumā starojums inducē savstarpējas pārejas starp vairākiem stāvokļiem  $|\zeta, m_\zeta\rangle$ , tādēļ, lai pielietotu ietērtā stāvokļu aprakstu šādām sistēmām, nepieciešams izvēlēties īpašstāvokļu bāzi, kas nav elektronu pilnā leņķiskā momenta z-projekcijas īpašstāvokļi [skat. J. R. Morris and B. W. Shore, Phys. Rev. A 27, 906-912 (1983)]. Šādā eksperimentālā konfigurācijā ietērtā stāvokļu supersīkstruktūras apraksts kļūst ārkārtīgi sarežģīts un grūti interpretējams, tādēļ projekta ietvaros izstrādātajā modelī eliptiski polarizēta lāzera starojuma mijiedarbība ar atomu netika aplūkota.

Vispārīgā gadījumā no matemātiskā apraksta nedrīkst izslēgt t.s. tumšos stāvokļus jeb stāvokļus, kas ar lāzera starojumu nemijiedarbojas, tomēr, gadījumā, ja supersīkstruktūras mijiedarbība ir daudz vājāka par atoma – lāzera starojuma mijiedarbību, supersīkstruktūras mijiedarbība starp tumšajiem un gaišajiem jeb mijiedarbībā ar lāzera starojumu esošajiem stāvokļiem enerģijas spektrā ievieš vērā neņemamas korekcijas. Lai matemātiskajā aprakstā paturētu vienīgi gaišos stāvokļus, nepieciešams identificēt gaišo stāvokļu pāriem  $|g, m_g\rangle, |e, m_g + p\rangle$  atbilstošos kvantu skaitļus  $m_g$  un definēt viennozīmīgu sakarību starp kvantu skaitļiem  $m$  un  $m_g$  :

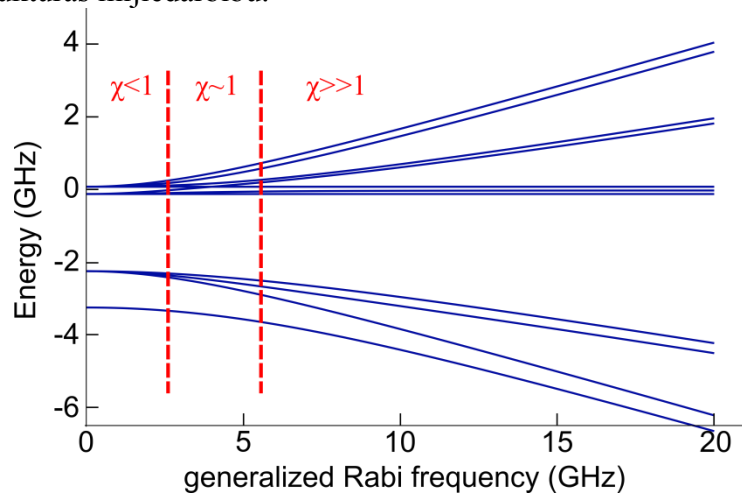
- Ja  $J_g$  ir pusvesels skaitlis,  $m_g \in [-J_g + \alpha(-1); J_g - \alpha(1)]$ ,
- Ja  $J_g$  ir vesels skaitlis,  $m_g \in [-J_g + \alpha(-1); 0) \cup (0; J_g - \alpha(1)]$ ,

$$\alpha(x) = \frac{1}{2}(p+x)(1-\Delta J)(p \cdot \Delta J + p - x \cdot \Delta J)$$

Šeit  $\Delta J = J_e - J_g$ . Ērti lietojama sakarība starp kvantu skaitļiem  $m$  un  $m_g$  ir  $m \equiv m_g$ .

Atoma – lāzera starojuma mijiedarbības enerģijas un supersīkstruktūras mijiedarbības enerģijas savstarpējai attiecībai ir iespējams identificēt trīs gadījumus (Att. 9):

- 1) Supersīkstruktūras mijiedarbība ir daudz spēcīgāka par atoma – lāzera starojuma mijiedarbību;
- 2) Abu mijiedarbību raksturīgās enerģijas ir līdzīgas;
- 3) Atoma – lāzera starojuma mijiedarbības enerģija ir daudz spēcīgāka par supersīkstruktūras mijiedarbību.



Att. 9. Atoma enerģijas īpašstāvokļu spektrā ir iespējams izšķirt trīs apgabalus, kas atbilst dažādām atoma – lāzera starojuma mijiedarbības enerģijas un supersīkstruktūras mijiedarbības enerģijas savstarpējās attiecības  $\chi$  vērtībām. Aprēķins veikts sistēmai  $I=1/2$ ,  $J_g=1/2$ ,  $J_e=3/2$ ,  $A_g=1\text{GHz}$ ,  $A_e=0.1\text{GHz}$ .

Pirmajā gadījumā supersīkstruktūras sašķelšanās ir pietiekami liela, lai atoma mijiedarbība ar lāzera starojumu būtu uzskatāma par nelielu izolēta atoma supersīkstruktūras perturbāciju. Lielās supersīkstruktūras sašķelšanās dēļ vērā ņemama mijiedarbība notiek tikai starp vienu pamata stāvokļa supersīkstruktūras līmeni un vienu ierosinātā stāvokļa supersīkstruktūras līmeni. Ietērpto stāvokļu veidošanās līdz ar to notiek samērā viegli matemātiski aprakstāmā divlīmeņu sistēmā, un ietērtajiem stāvokļiem sīkāka struktūra supersīkstruktūras mijiedarbības dēļ neveidojas.

Otrajā gadījumā spēcīga mijiedarbība notiek starp visiem sistēmas stāvokļiem, un patvaļīgas elektronu konfigurācijas atomam šajā gadījumā enerģijas līmeņu spektram analītisks risinājums neeksistē. Līmeņu struktūras veidošanās aprēķinus analītiski ir iespējams



veikt vienīgi specifiskas konfigurācijas sistēmām. Sistēmas sarežģītības dēļ efektīvāka metode ir skaitlisku simulāciju veikšana enerģijas spektra un līmeņu apdzīvotību noteikšanai.

Trešajā gadījumā mijiedarbība ar lāzera starojumu izraisa spēcīgu sašķelšanos starp dažādiem pamata un ierosinātā līmeņa kvantu stāvokļiem, kas savukārt ļauj ievērojami vienkāršot sistēmas enerģijas spektra aprēķinus. Tā kā aplūkotajā gadījumā enerģijas līmeņu struktūru nosaka galvenokārt atoma mijiedarbība ar lāzera starojumu, supersīkstruktūras mijiedarbība darbojas kā šo struktūru nedaudz perturbējošs mehānisms. Pētījuma ietvaros tika veikta pētnieciskā darbība, lai izveidotu analītisku modeli, kas apraksta sistēmas enerģijas līmeņu spektra veidošanos šajā gadījumā. Supersīkstruktūras mijiedarbības izraisītā ietērpto stāvokļu sašķelšanās tika pētīta, izmantojot perturbāciju teorijas metodes.

Supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa pētīšanai ir nepieciešams noskaidrot tā matricas elementus ietērpto stāvokļu bāzē:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{s,m}, m_l | \hat{V}_{hf} | \Phi_{s',m'}, m'_l \rangle = & \cos \theta_{s,m} \cos \theta_{s',m'} \langle g, m, m_l | \hat{V}_{hf} | g, m', m'_l \rangle + \\ & + \sin \theta_{s,m} \sin \theta_{s',m'} \langle e, m+p, m_l | \hat{V}_{hf} | e, m'+p, m'_l \rangle \end{aligned}$$

Perturbāciju teorijas pirmajā tuvinājumā netiek ņemta vērā mijiedarbība starp nedeģenerētiem stāvokļiem, tādēļ ir nepieciešams noskaidrot, vai starp ietērtajiem stāvokļiem pastāv deģenerācija. Ietērpto stāvokļu enerģijas spektru veido divas savstarpēji nedeģenerētas ietērpto stāvokļu grupas  $s = +1$  un  $s = -1$ , starp kurām novērojama sašķelšanās  $\Delta E = \sqrt{\Delta^2 + \Omega_m^2}$ . Tā kā ietērpto stāvokļu īpašenerģijas vērtība ir atkarīga no Rabi frekvences absolūtās vērtības, tad ietērtie stāvokļi ir deģenerēti, ja  $\Omega_m^2 = \Omega_{m'}^2$ . Ņemot vērā atomāras kvantu sistēmas un lāzera starojuma simetrijas īpašības, tika noskaidrots, ka gadījumos, kad  $p \cdot \Delta J = 0$ , ietērtie stāvokļi  $|\Phi_{s,m}\rangle$  un  $|\Phi_{s,-m-p}\rangle$  ir savstarpēji deģenerēti. Pārējos gadījumos visi ietērtie stāvokļi  $|\Phi_{s,m}\rangle$  ir savā starpā nedeģenerēti. Tā kā elektronu mijiedarbība ar lāzera starojumu nav atkarīga no kodola spina stāvokļa, visi sistēmas stāvokļi  $|\Phi_{s,m}, m_l\rangle$  ir  $(2I+1)$ -kārt deģenerēti pēc kvantu skaitļa  $m_l$ . Atbilstoši šai analīzei, supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniānī nepieciešams ņemt vērā vienīgi elementus  $\langle \Phi_{s,m}, m_l | \hat{V}_{hf} | \Phi_{s,m}, m'_l \rangle$  un gadījumā, kad  $p \cdot \Delta J = 0$ , arī elementus  $\langle \Phi_{s,m}, m_l | \hat{V}_{hf} | \Phi_{s,-m-p}, m'_l \rangle$ . Lai izvairītos no nevajadzīgi lielu izteiksmju izmantošanas, visefektīvāk ir šos elementus aprēķināt atsevišķi supersīkstruktūras mijiedarbības daļām  $\hat{V}_{dd}$  un  $\hat{V}_{qq}$ .

Magnētisko dipolu mijiedarbību raksturojošā operatora  $\hat{V}_{dd}$  matricas elementus ir viegli iegūt, izmantojot leņķiskā momenta vektor-operatoru skalārā reizinājuma izvīrējumu sfēriskajā bāzē,  $\hat{V}_{dd} = \hat{A} \hat{I} \cdot \hat{J} = \hat{A} (\hat{I}^0 \hat{J}^0 - \hat{I}^1 \hat{J}^{-1} - \hat{I}^{-1} \hat{J}^1)$ . Analizējot operatora matricas elementa

$$\langle \Phi_{s,m}, m_l | \hat{V}_{dd} | \Phi_{s,m}, m'_l \rangle = \langle \Phi_{s,m}, m_l | \hat{A} (\hat{I}^0 \hat{J}^0 - \hat{I}^1 \hat{J}^{-1} - \hat{I}^{-1} \hat{J}^1) | \Phi_{s,m}, m'_l \rangle$$

struktūru un vektoroperatoru komponentu iedarbību uz ietērtajiem stāvokļiem, redzams, ka nulles ieguldījumu dod vienīgi operatora loceklis  $\hat{A} \hat{I}^0 \hat{J}^0$ . Tā kā šī operatora daļa neizraisa mijiedarbību starp stāvokļiem ar atšķirīgām kodola spina z-projekcijas kvantu skaitļa  $m_l$  vērtībām, jāsecina, ka pie  $p \cdot \Delta J \neq 0$  perturbāciju teorijas pirmajā tuvinājumā magnētisko dipolu supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniānis ir diagonāls. Tas nozīmē, ka šī mijiedarbības dēļ stāvokļi  $|\Phi_{s,m}, m_l\rangle$  iegūst papildus enerģiju, bet netiek sajaukti savā starpā:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{s,m}, m_I | \hat{V}_{dd} | \Phi_{s,m}, m'_I \rangle &= A_g \cos^2 \theta_{s,m} \langle g, m, m_I | (\hat{I}^0 \hat{J}^0 - \hat{I}^1 \hat{J}^{-1} - \hat{I}^{-1} \hat{J}^1) | g, m, m'_I \rangle + \\ &+ A_e \sin^2 \theta_{s,m} \langle e, m + p, m_I | (\hat{I}^0 \hat{J}^0 - \hat{I}^1 \hat{J}^{-1} - \hat{I}^{-1} \hat{J}^1) | e, m + p, m'_I \rangle = \\ &= m_I \delta_{m_I, m'_I} [A_g m \cos^2 \theta_{s,m} + A_e (m + p) \sin^2 \theta_{s,m}] \end{aligned}$$

Aprēķinot magnētisko dipolu mijiedarbības radīto sajaukšanos starp deģenerētiem stāvokļiem gadījumā, kad  $p \cdot \Delta J = 0$ , tika iegūta šāda izteiksme:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{s,m}, m_I | \hat{V}_{dd} | \Phi_{s,-m-p}, m'_I \rangle &= \frac{\delta_{m'_I \pm 1, m_I} \delta_{m, \mp \frac{1 \pm p}{2}}}{2} \sqrt{I(I+1) - m_I m'_I} \cdot \\ &\cdot \left( A_g \sqrt{J_g(J_g+1) + \frac{(1+p)(1-p)}{4}} \cos^2 \theta_{s,m} + A_e \sqrt{J_e(J_e+1) + \frac{(1+p)(1-p)}{4}} \sin^2 \theta_{s,m} \right) \end{aligned}$$

Analizējot iegūto rezultāti, tika noskaidrots, ka Hamiltoniānī  $\hat{V}_{dd}$  nediagonālie locekļi savā starpā sasaista tikai divus ietērptos stāvokļus  $|\Phi_{s,m}, m_I\rangle$ , pie tam tas notiek tikai gadījumā, ja pētāmās sistēmas konfigurācija apmierina specifiskus nosacījumus:

a) Ja sistēma mijiedarbojas ar lineāri polarizētu lāzera starojumu ( $p=0$ ), un atoma pamata un ierosinātā sīkstruktūras līmeņa elektrona pilnā leņķiskā momenta kvantu skaitļi  $J_g$  un  $J_e$  ir pusveseli skaitļi, tad magnētisko dipolu mijiedarbība savā starpā saista stāvokļu pārus  $\left\{ \left| \Phi_{s, \frac{1}{2}}, m_I \right\rangle, \left| \Phi_{s, -\frac{1}{2}}, m_I + 1 \right\rangle \right\}$ ;

b) Ja sistēma mijiedarbojas ar cirkulāri polarizētu lāzera starojumu ( $p = \pm 1$ ), un atoma pamata un ierosinātā sīkstruktūras līmeņa elektrona pilnā leņķiskā momenta kvantu skaitļi  $J_g = J_e$  ir veseli skaitļi, tad magnētisko dipolu mijiedarbība savā starpā saista stāvokļu pārus  $\left\{ \left| \Phi_{s, \frac{1-p}{2}}, m_I \right\rangle, \left| \Phi_{s, -\frac{1+p}{2}}, m_I + 1 \right\rangle \right\}$ .

Analizējot elektriskā kvadrupola momentu mijiedarbību  $\hat{V}_{qq}$ , tika iegūti līdzīgi rezultāti. Operatora matricas elementā  $\langle \Phi_{s,m}, m_I | \hat{V}_{qq} | \Phi_{s,m}, m'_I \rangle$  nenulles ieguldījumu dod vienīgi operatora  $\hat{V}_{qq}$  daļa:

$$\hat{B} \frac{3(\hat{I}^q \hat{I}^{-q} \hat{J}^{-q} \hat{J}^q) + \frac{3}{2} \hat{I}^0 \hat{J}^0 - \hat{I}^2 \hat{J}^2}{2I(2I-1)J_\zeta(2J_\zeta-1)},$$

kas līdzīgi kā magnētisko dipolu mijiedarbības gadījumā neizraisa ietērpto stāvokļu sajaukšanos, bet vienīgi piešķir tiem papildus enerģiju:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{s,m}, m_I | \hat{V}_{qq} | \Phi_{s,m}, m'_I \rangle &= \delta_{m_I, m'_I} \frac{I(I+1) - 3m_I^2}{4I(2I-1)} \cdot \left( B_g \frac{J_g(J_g+1) - 3m^2}{J_g(2J_g-1)} \cos^2 \theta_{s,m} + \right. \\ &\left. + B_e \frac{J_e(J_e+1) - 3(m+p)^2}{J_e(2J_e-1)} \sin^2 \theta_{s,m} \right) \end{aligned}$$

Gadījumā, kad sistēmā veidojas deģenerēti ietērptie stāvokļi, kvadrupolu mijiedarbībā starp stāvokļiem  $\left\{ \left| \Phi_{s, \frac{1-p}{2}}, m_I \right\rangle, \left| \Phi_{s, -\frac{1+p}{2}}, m_I + 1 \right\rangle \right\}$  nenulles ieguldījumu dod vienīgi operatora  $\hat{V}_{qq}$  daļa:

$$\hat{B} \frac{-3(\hat{I}^1 \hat{I}^0 \hat{J}^{-1} \hat{J}^0 + \hat{I}^0 \hat{I}^1 \hat{J}^0 \hat{J}^{-1} + \hat{I}^0 \hat{I}^{-1} \hat{J}^0 \hat{J}^1 + \hat{I}^{-1} \hat{I}^0 \hat{J}^1 \hat{J}^0) - \frac{3}{2}(\hat{I}^1 \hat{J}^{-1} + \hat{I}^{-1} \hat{J}^1)}{2I(2I-1)J_\zeta(2J_\zeta-1)}$$

Savukārt mijiedarbībai starp stāvokļiem  $\left\{ \left| \Phi_{s, \frac{2-p}{2}, m_I} \right\rangle, \left| \Phi_{s, -\frac{2+p}{2}, m_I+2} \right\rangle \right\}$  nenulles

ieguldījumu dod operatora Vqq daļa:

$$\hat{B} \frac{-3(\hat{I}^1 \hat{I}^1 \hat{J}^{-1} \hat{J}^{-1} + \hat{I}^{-1} \hat{I}^{-1} \hat{J}^1 \hat{J}^1)}{2I(2I-1)J_\zeta(2J_\zeta-1)}$$

Aprēķinu rezultāti tika pārbaudīti, to iegūšanai izmantojot divas atšķirīgas pieejas – izmantojot augstāk izklāstīto operatoru formālisma pieeju, kā arī rezultātu iegūstot, ar Klebša-Gordāna koeficientu  $C_{l,m,l',m'}^{L,M}$  palīdzību pārejot no pilnā atoma leņķiskā momenta  $\hat{F}$

īpašvektoru bāzes uz ietērpto stāvokļu bāzi. Otrajā pieejā tiek izmantots fakts, ka  $\hat{F}$  īpašvektoru bāzē supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniānis ir diagonāls un Hamiltoniāņa matricas elementi ir aprēķināmi, izmantojot vienkāršu izteiksmi:

$$\Delta E(\zeta, F_\zeta) = \frac{1}{2} A_\zeta K_\zeta - B_\zeta \left( \frac{(I+1)(J_\zeta+1)}{2(2I-1)(2J_\zeta-1)} - \frac{2K_\zeta(K_\zeta+1)}{8I(2I-1)J_\zeta(2J_\zeta-1)} \right),$$

šeit  $K_\zeta = F_\zeta(F_\zeta+1) - I(I+1) - J_\zeta(J_\zeta+1)$ . Ar šo pieeju iegūtie rezultāti satur netriviālas Klebša-Gordāna koeficientu summas. Tām, veicot skaitlisku aprēķinu sērijas, tika iegūta daudz vienkāršāka analītiskā forma. Tika noskaidrots, ka:

$$\begin{aligned} & \sum_{F=|J-I|}^{J+1} \left( \left[ C_{J,m,I,m_I}^{F,m+m_I} \right]^2 [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \right) = 2m_I m \\ & \sum_{F=|J-I|}^{J+1} \left( \left[ C_{J,m,I,m_I}^{F,m+m_I} \right]^2 \left[ \frac{(I+1)(J+1)}{2(2I-1)(2J-1)} - \frac{2K(K+1)}{8I(2I-1)J(2J-1)} \right] \right) = \\ & = \frac{3[J(J+1)m_I^2 + I(I+1)m^2] - 9m_I^2 m^2 - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)} \end{aligned}$$

Šajā pētījumā virzienā iegūtie rezultāti ļauj secināt, ka ar lāzeru ietērpto atoma stāvokļu supersīkstruktūra gadījumā, kad supersīkstruktūras mijiedarbība ir vājāka par atoma – lāzera starojuma mijiedarbību, kvalitatīvi atšķiras no izolēta atoma supersīkstruktūras pamata un ierosinātajā stāvoklī. Pie tam, ar lāzeru ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras sašķelšanos spēcīgi ietekmē izmaiņas ierosinošā lāzera starojuma polarizācijā (att. 10) Zinātniskā darba rezultātā iegūtās izteiksmes ļauj interpretēt ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras sašķelšanos kā kodola enerģijas līmeņu sašķelšanos lāzera lauka un elektronu mākoņa mijiedarbībā radītā stacionārā elektriskajā un magnētiskajā laukā. Lāzera starojuma mijiedarbībā ar atoma elektronu mākonī kodola apkārtne rodas gar z-asi vērstas magnētiskais lauks, kura intensitāte ir

$$\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z, \quad B = - \frac{A_g m \cos^2 \theta_{s,m} + A_e (m+p) \sin^2 \theta_{s,m}}{\gamma_N},$$

šeit  $\gamma_N$  ir kodola žiromagnētiskā attiecība. Šī lauka klātbūtnes dēļ atoma enerģijas īpašstāvokļu spektrā ir novērojams kodola Zēmana efekts, kodolam iegūstot papildus enerģiju:

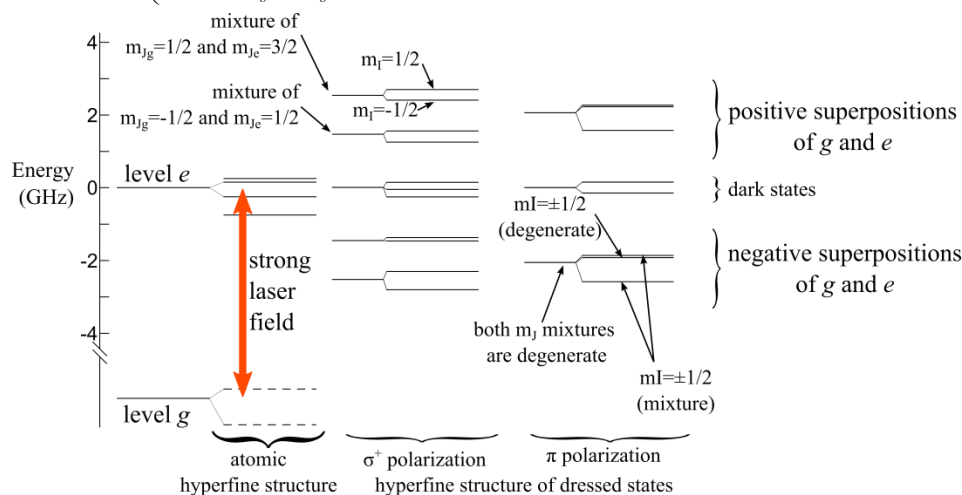
$$\langle m_I | \hat{V}_{dd} | m_I \rangle = \langle m_I | -\gamma_N \hat{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{B} | m_I \rangle = m_I [A_g m \cos^2 \theta_{s,m} + A_e (m+p) \sin^2 \theta_{s,m}].$$

Papildus šim efektam, kodola apkārtne rodas elektriskais lauks, kuru raksturo elektriskā kvadrupola momenta tenzors  $Q_{ij}$ , kura vienīgā nenulles komponente ir  $Q_{zz}$ ,

$$Q_{zz} \propto B_g \frac{J_g(J_g + 1) - 3m^2}{J_g(2J_g - 1)} \cos^2 \theta_{s,m} + B_e \frac{J_e(J_e + 1) - 3(m+p)^2}{J_e(2J_e - 1)} \sin^2 \theta_{s,m}.$$

Ja atoma kodolam ir nenulles elektriskā kvadrupola moments  $Q_{ij}^N$ , tad pateicoties tā mijiedarbībai ar šo elektrisko lauku, kodols iegūst papildus enerģiju:

$$\langle m_l | \hat{V}_{qq} | m_l \rangle = \frac{I(I+1) - 3m_l^2}{4I(2I-1)} \cdot \left( B_g \frac{J_g(J_g + 1) - 3m^2}{J_g(2J_g - 1)} \cos^2 \theta_{s,m} + B_e \frac{J_e(J_e + 1) - 3(m+p)^2}{J_e(2J_e - 1)} \sin^2 \theta_{s,m} \right)$$



Att. 10. Ar lāzeru ietērpto atoma stāvokļu supersīkstruktūra kvalitatīvi atšķiras no izolēta atoma supersīkstruktūras, pie tam sašķelšanos būtiski ietekmē ierosinošā lāzera starojuma polarizācija. Aprēķins veikts sistēmai  $I=1/2$ ,  $J_g=1/2$ ,  $J_e=3/2$ ,  $A_g=1\text{GHz}$ ,  $A_e=0.2\text{GHz}$ ,  $\Omega_0=10\text{GHz}$ .

Pētījumā iegūtie rezultāti ar stenda referātu prezentēti konferencē *44th Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS)* Gēteborgā (Zviedrijā) [4], kā arī ar mutisku referātu uzstājoties *1st TLL-COLIMA Joint workshop* Rīgā [5]. Sadarbībā ar LU Fizikas un matemātikas fakultātes lektoru V. Kaščejevu pētījuma rezultāti tiek gatavoti publicēšanai starptautiskā zinātniskā žurnālā.

### Augsti ierosinātu kvantu stāvokļu izstarošanas konstanšu noteikšana

LU Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā aktuālie un plānotie pētījumu virzieni iekļauj jaunu metožu izstrādi augsti ierosinātu (Ridberga) kvantu stāvokļu koherentai manipulācijai un to apdzīvotību efektīvai pārslēgšanai. Šo metožu eksperimentālai realizācijai ir nepieciešams izvēlēties optimālu ierosmes shēmu pētāmajos atomos vai molekulās. Nozīmīgi kritēriji kvantu sistēmas noteiktu enerģētisko līmeņu izvēlē ir to dzīveslaiks un sazaršanās konstate, kas raksturo dažādu sabrukšanas ceļu realizēšanās varbūtību. Šajā kontekstā rodas nepieciešamība pēc efektīvām metodēm augsti ierosinātu stāvokļu izstarošanas konstanšu precīzai noteikšanai. Pētījuma ietvaros tika veikts pētnieciskais darbs, izstrādājot metodi atomu ierosināto stāvokļu izstarošanas noteikšanai, kas balstīta uz stāvokļu apdzīvotību dinamikas sasaisti ar eksperimentāli novērojamiem emisijas spektru parametriem.

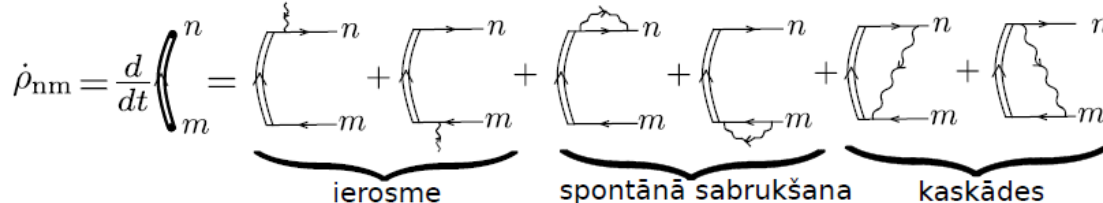
Līmeņu apdzīvotību dinamikas teorētiskai aprēķināšanai ir pieņemts izmantot optiskos Bloha vienādojumus stāvokļu blīvuma matricai:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho] + R\rho$$

Šeit pilnais sistēmas Hamiltona operators  $\hat{H}$  iekļauj gan neperturbēto izolēta atoma Hamiltoniāni, gan arī elektriskā dipola mijiedarbības ar lāzera starojumu operatoru. Relaksācijas matrica  $R$  apraksta sistēmā notiekošos nekoherentos efektus – spontāno emisiju un atomu caurlidošanas relaksāciju, lidojot caur ierosinošo lāzera staru. Multilīmeņu sistēmās enerģijas līmeņu apdzīvotību dinamikas pētīšana notiek, aprēķinot sistēmai atbilstošo stāvokļu blīvuma matricu  $\hat{\rho}$ . Daļēji atvērtās sistēmās stāvokļu blīvuma matricas elementus var iegūt, atrisinot optiskās pumpēšanās ātruma vienādojumus,

$$\dot{\rho}_{nm}(t) = -i(\hat{\Omega}\hat{\rho})_{nm} + i(\hat{\rho}\hat{\Omega})_{nm} - \hat{\Gamma}\hat{\rho}_{nm}.$$

Šeit  $\rho_{ij}$  - stāvokļa blīvuma matricas elements,  $\hat{\Omega}$  - matrica, kuru veido kvantu sistēmas līmeņu un ārējā lauka mijiedarbības stiprumu raksturojošās Rabi frekvences,  $\hat{\Gamma}$  - ierosināto stāvokļu spontāno sabrukšanu raksturojoša matrica. Izmantojot Konstantinova – Perela diagrammu metodi, katram no 3 sistēmā iespējamajiem procesiem (koherenta ierosme, spontānā sabrukšana un kaskādes) ir iespējams piekārtot grafisko reprezentāciju (att. 11), un tādā veidā sastādīt uzskatāmu optiskās pumpēšanās ātruma vienādojumu sistēmu.

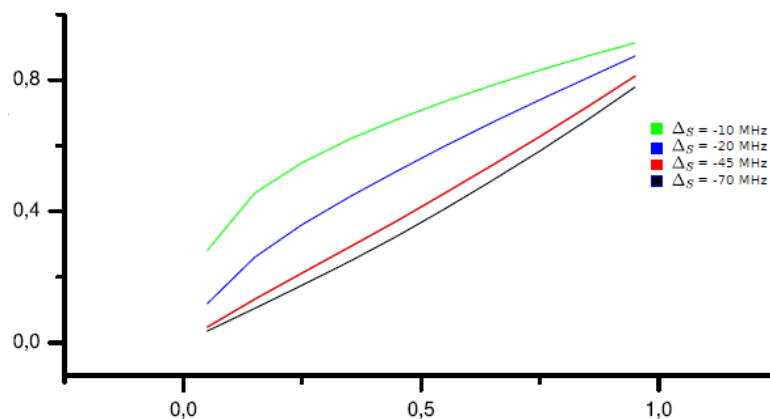


Att. 11. Optiskās pumpēšanās ātruma vienādojuma Konstantinova – Perela diagrammu pierakstā.

Analizējot optiskās pumpēšanas ātruma vienādojumus, adiabatiskajā tuvinājumā tika iegūta izteiksme, kas ļauj noteikt augsti ierosināta stāvokļa dzīveslaiku  $1/\Gamma_f$  no Autlera – Taunsa dubleta komponentu laukumu relatīvās attiecības  $\rho_f^{(area)}$ ,

$$\rho_f^{(area)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta_{10} I_f^{(1)}(\Delta_{10})}{\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta_{20} I_f^{(2)}(\Delta_{20})} = \frac{\Gamma_{f2}}{\Gamma_{f1}} = \frac{(\Gamma_{ef} + \Gamma_f)\sin^2 \theta + \Gamma_e \cos^2 \theta}{(\Gamma_{ef} + \Gamma_f)\cos^2 \theta + \Gamma_e \sin^2 \theta}$$

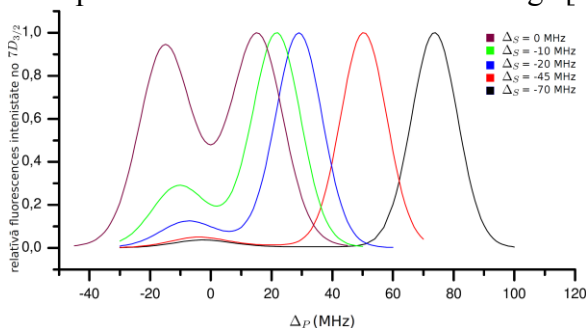
Šeit  $\theta$  - Autlera – Taunsa dubletu veidojošo neietērpto stāvokļu sajaukšanās leņķis. Analizējot šo izteiksmi, tika iegūtas sakarības starp Autlera – Taunsa dubleta komponentu laukumu relatīvo attiecību un dubletu veidojošo neietērpto stāvokļu dzīveslaiku attiecību (att. 12) nātrija atomu virsskaņas kūļos lāzertiesmei no  $3P_{1/2}$  stāvokļa uz augstu Ridberga stāvokli. Aprēķinos tika izmantoti eksperimentālās kūļu iekārtas raksturīgie parametri; atoma mijiedarbību ar ārējo lauku raksturojošās Rabi frekvences pārejai no pamatstāvokļa  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2}$  un pārejai no  $3P_{1/2}$  uz augsti ierosinātu Ridberga stāvokli ir attiecīgi  $10MHz$  un  $100MHz$ .



Att. 12. Autlera – Taunsa dubleta komponentu laukumu relatīvā attiecība  $\rho_f^{(area)}$  atkarībā no to veidojošo neietērpto stāvokļu dzīveslaiku attiecības  $\tau_e/\tau_f$  pie dažādiem lāzera starojuma izskaņojumiem  $\Delta_S$  no pārejas rezonanses frekvences. Šeit  $\tau_e = 16.23 \text{ ns}$

Matemātiskais modelis paredz, ka lineāra sakarība starp spektrālīniju laukumu attiecību un līmeņu dzīveslaiku attiecību veidojas pie ļoti lielām nobīdēm  $\Delta$  no pārejas rezonanses frekvences (att. 12). Lai noskaidrotu matemātiskā modeļa paredzētā efekta novērojamību reālās sistēmās, tika veiktas skaitliskas simulācijas nātrija atomārajām pārejām  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2} \rightarrow 7D_{3/2}$ , risinot pumpēšanas ātruma vienādojumus, kas sastādīti daļēji atvērta trīslīmeņu sistēmai, izmantojot Konstantinova - Perela diagrammu metodi. Veicot skaitliskās simulācijas, tika noskaidrots, ka lineārās sakarības nosacījums ir spēkā pie nobīdes no pārejas  $3P_{1/2} \rightarrow 7D_{3/2}$  rezonanses frekvences  $\Delta > 70 \text{ MHz}$ . Diemžēl šādā gadījumā divfotonu pārejai atbilstošās spektrālīnijas intensitāte ir sagaidāmā eksperimenta trokšņa līmenī (att. 13). Divfotonu pārejas relatīvās intensitātes krasais samazinājums ir saistīts ar atoma stāvokļu  $3P_{1/2}$  un  $7D_{3/2}$  dzīveslaiku lielo atšķirību (attiecīgi  $16.29 \text{ ns}$  un  $305 \text{ ns}$ ). Matemātiskā modeļa rezultātu verificēšanai tādēļ ir nepieciešams izvēlēties pāreju starp enerģijas līmeņiem, kuru dzīveslaiku attiecība ir mazāka, piemēram, izvēloties pāreju starp diviem augstu ierosinātiem stāvokļiem. Tomēr, ņemot vērā LU Lāzera centrā pieejamo lāzera tehniskās iespējas, šādu eksperimentu šobrīd nav iespējams realizēt.

Pētījuma rezultāti atspoguļoti S. Mežinskas bakalaura darbā „Atomu izstarošanas konstanšu mērījumi virsskaņas nātrija atomu kūlī, izmantojot nepārtrauktu lāzera ierosmi”. Pētījumā izstrādātā metode augsti ierosinātu atoma stāvokļu dzīveslaiku noteikšanai prezentēta konferencē Developments in Optics and Communications 2011 Rīgā [6].



Att. 13. Autlera - Taunsa dubleta komponentu relatīvās intensitātes atkarībā no nobīdes no pārejas  $3P_{1/2} \rightarrow 7D_{3/2}$  rezonanses frekvences.

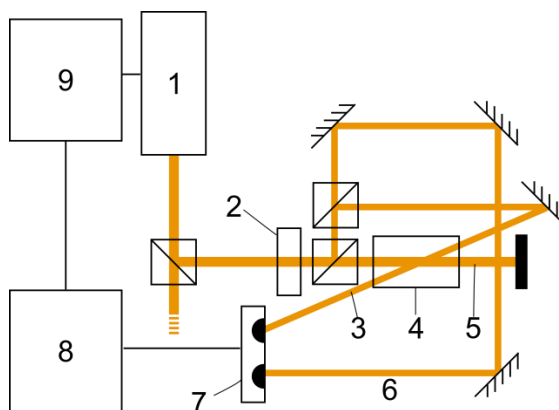


## Projekta ietvaros veiktā laboratorijas aprīkojuma uzturēšana un tehnoloģisko iespēju uzlabošana.

Lai uzturētu un paaugstinātu eksperimentālu zinātnisku pētījumu kvalitāti un kapacitāti LU Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā, projekta norises laikā veikta regulāra iekārtu profilaktiskā aprūpe un tehnoloģisko iespēju uzlabošana. Zinātnisku eksperimentu veikšanai ir nepieciešams nodrošināt 3 komponentu vienlaicīgu, saskaņotu un augstākās iespējamās kvalitātes darbību. Šīs komponentes ir: ģeometriski atdzesētu atomu ieguves iekārta, lāzeru sistēma un optiskā sistēma starojuma pievadīšanai atdzesētajiem atomiem, iekārtas eksperimentālo datu savākšanai un apstrādei.

Molekulāro kūļu laboratorijā ar speciālas iekārtas palīdzību tiek iegūts ģeometriski atdzesētu nātrija atomu vai molekulu virsskaņas kūlis. Tā kā nātrijs ir ķīmiski ļoti aktīvs metāls, iekārtā nepieciešams nepārtraukti uzturēt zema spiediena apstākļus ( $\sim 10^{-2} \text{ Torr}$ ), tādēļ visā projekta norises laikā veiktas regulāras vakuumsistēmas profilaktiskas apkopes.

Veicot spektroskopiskus mērījumus atdzesētos atomos, ir nepieciešams nodrošināt ļoti augstu lāzeru sistēmas jaudas un viļņa garuma stabilitāti. Tāpat nepieciešams optisko shēmu izolēt no vakuumsūkņu un klimata kontroles iekārtu radītajām vibrācijām. Pētījuma ietvaros tika izstrādāts projekts riņķveida krāsvielu lāzera frekvences stabilizācijas sistēmai, izmantojot lāzera starojuma absorbciju nātrija tvaiku šūnā. Sistēmas shematiskais attēlojums redzams [attēlā 14].



Att. 14. Lāzera frekvences stabilizācijas shēma, izmantojot nātrija tvaiku šūnu. 1 – lāzers, 2 – akusto-optiskais modulators, 3 – zondes stars, 4 – nātrija tvaiku šūna, 5 – piesātinošais stars, 6 – atbalsta stars, 7 – diferenciālais pastiprinātājs, 8 – signāla apstrādes bloks, 9 – lāzera frekvences kontroles bloks.

Piesātinošais stars nodrošina to, ka caur šūnu izgājušajam zondes staram absorbcijas spektrā nav novērojams spektrālīniju Doplera paplašinājums. Tādēļ, ar akustooptiskā modulatora palīdzību mainot lāzera stara frekvenci un novērojot zondes stara absorbciju šūnā, ir iespējams lāzera stara frekvenci ļoti precīzi saskaņot ar atomārās izvēlētajās atomārās pārejas rezonanses frekvenci – nedaudz izmainoties lāzera starojuma frekvencei, ievērojami samazinās zondes stara absorbcija. Ar diferenciālā pastiprinātāja palīdzību izmaiņas zondējošā stara un atbalsta stara intensitāšu attiecībā tiek pārvērstas elektriskā signālā, no kura ar speciālu algoritmu palīdzību tiek iegūts signāls lāzera frekvences korekcijai un tiek pievadīts lāzera frekvences kontroles blokam. Šādai frekvences stabilizācijas sistēmai ir ievērojama priekšrocība salīdzinājumā ar viļņa garuma mērītāja izmantošanu frekvences kontrolei. Viļņa garuma mērītāja mērījuma precizitāte ir atkarīga no iekārtas kalibrācijas, kas ne vienmēr ir absolūti precīza, savukārt izstrādātā frekvences stabilizācijas shēma izmanto visprecīzāko iespējamo frekvences etalonu – izvēlēta ķīmiskā elementa atomu. Pie tam, stabilizācijas shēmas frekvences etalonu ir iespējams mainīt, vienkārši izvēloties cita elementa tvaiku šūnu.



## Pētījuma publicitāte

### Dalība zinātniskās konferencēs

- [1] M. Bruvelis, A. Cinins, S. Mezinska, N. N. Bezuglov, I. I. Ryabtsev and A. Ekers, ***Particularities of Doppler profile for supersonic beams with circular, square, and arbitrary collimating apertures***, 43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS), University of Fribourg, Fribourg, Switzerland, June 28 – July 2 2011;
- [2] M. Bruvelis, N. N. Bezuglov and A. Ekers, **Doppler Profile Particularities in Supersonic Beams for Circular, Square and Arbitrary Collimating Apertures**, 21st International Conference on Spectral Line Shapes, St. Petersburg, Russia, June 3–9, 2012.
- [3] M. Bruvelis, A. Cinins, S. Mezinska, K. Miculis, N. N. Bezuglov and A. Ekers, ***Particularities of Doppler profile for supersonic beams with circular, square, and arbitrary collimating apertures***, npublicēts raksts.
- [4] A. Cininsh and V. Kashcheyevs, **Hyperfine structure of laser-dressed atomic states**, 44th Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS) Gothenburg, Sweden, July 9-13, 2012
- [5] A. Cininsh and V. Kashcheyevs, **Hyperfine structure of laser-dressed atomic states**, 1st TLL-COLIMA Joint workshop, Riga, Latvia, July 18-19, 2012
- [6] S. Mezinska, M. Bruvelis, V. Kashcheyevs, **Measurements of radiative constants in sodium supersonic atomic beam using continuous wave laser excitation**, Developments in Optics and Communications 2011, Riga, Latvia, April 28-30, 2011
- [7] M. Bruvelis, J. Ulmanis, K. Miculis, N. N. Bezuglov, C. Andreeva, and A. Ekers **“Interference patterns of laser-dressed states in a supersonic atomic/molecular beam”**, Frontiers of Matter Wave Optics FOMO 2011, Obergurgl, Austrija, March 20-25, 2011

### Uzstāšanās doktorantūras skolas semināros

- [8] Mārtiņš Brūvelis, **Residual Doppler Profile in Supersonic Molecular Beam**, Latvijas Universitātes Doktorantūras skolas „Atomāro un nepārtrauktās vides fizikālo procesu pētīšanas, modelēšanas un matemātisko metožu pilnveidošanas skola” seminārs, Rīga, 10. novembris, 2010
- [9] Mārtiņš Brūvelis, **Spatial control of Na excitation by means of interference due to Autler-Townes effect**, Latvijas Universitātes Doktorantūras skolas „Atomāro un nepārtrauktās vides fizikālo procesu pētīšanas, modelēšanas un matemātisko metožu pilnveidošanas skola” seminārs, Rīga, 16. februāris, 2011
- [10] Artūrs Ciniņš, **Hyperfine splitting of atomic levels in strong laser field limit**, Latvijas Universitātes Doktorantūras skolas „Atomāro un nepārtrauktās vides fizikālo procesu pētīšanas, modelēšanas un matemātisko metožu pilnveidošanas skola” seminārs, Rīga, 22. februāris, 2012