

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО ДИПОЛЯ ДЛЯ СЕЛЕКЦИИ ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ ПО КВАНТОВЫМ СОСТОЯНИЯМ

*В.Ф.Ежов, В.Л.Рябов, В.В.Ящук, А.А.Матышев,  
Ю.К.Голиков, В.Л.Варенцов*

### Введение

Для управления пучками дипольных частиц —нейтральных атомов или молекул, обладающих ненулевым эффективным электрическим или магнитным дипольным моментом, используются неоднородные электрические или магнитные поля. Это объясняется тем, что, например, в неоднородном электрическом поле  $\mathbf{E}$  на частицу действует сила  $\mathbf{F}$ , зависящая как от величины эффективного электрического дипольного момента частицы  $\mu_{e, \text{eff}}$ , так и от градиента модуля напряженности электрического поля  $\text{grad } E$ ,

$$\mathbf{F} = -\text{grad } W_s(E) = -\frac{dW_s}{dE} \text{grad } E = \mu_{e, \text{eff}} \text{grad } E. \quad (1)$$

Здесь  $W_s(E)$  — потенциальная энергия частицы в электрическом поле,  $E$  — модуль напряженности электрического поля. Зависимость величины действующей силы  $\mathbf{F}$  от  $\mu_{e, \text{eff}}$  определяет возможность селекции в неоднородном электрическом поле частиц, находящихся в различных квантовых состояниях (обладающих разными эффективными электрическими дипольными моментами). Аналогично в неоднородном магнитном поле существует возможность селекции частиц по величине эффективного магнитного момента.

В данной работе рассматривается селекция полярных двухатомных молекул, которые находятся в состоянии  $^1 \Sigma$ . В электрическом поле вращательные уровни энергии такой молекулы характеризуются квантовыми числами  $(J, M_J)$ , где  $J$  — вращательный момент количества движения в единицах  $\hbar$ ,  $M_J$  — его проекция на направление поля  $\mathbf{E}$ . На рис. 1 приведены графики зависимости  $\mu_{e, \text{eff}}$  от приложенного электрического поля  $E$  для различных уровней  $(J, M_J)$  [1]. Вместо  $E$  обычно вводится безразмерный параметр  $\lambda$  — отношение энергии взаимодействия электрического дипольного момента молекулы  $\mu_0$  с электрическим полем к вращательной константе  $B$ :  $\lambda = \mu_0 E / \hbar c B$ .

Обычно в эксперименте используются электрические квадрупольные или секступольные поля [2], которые, в силу того что в этих полях модуль напряженности электрического поля осесимметричен и растет при удалении от оси, могут фокусировать вращательные состояния с отрицательными  $\mu_{e, \text{eff}}$ . Например, на рис. 1 видно, что можно фокусировать состояние  $(1, 0)$  в области электрического поля, где  $\lambda < 5$ , или состояние  $(2, 0)$  при  $\lambda < 14$ . Состояния же  $(0, 0)$  или  $(1, 1)$  будут дефокусироваться и выводиться из пучка. Существуют другие системы [3], в которых ситуация обратная: фокусируются только состояния с положительными  $\mu_{e, \text{eff}}$ .

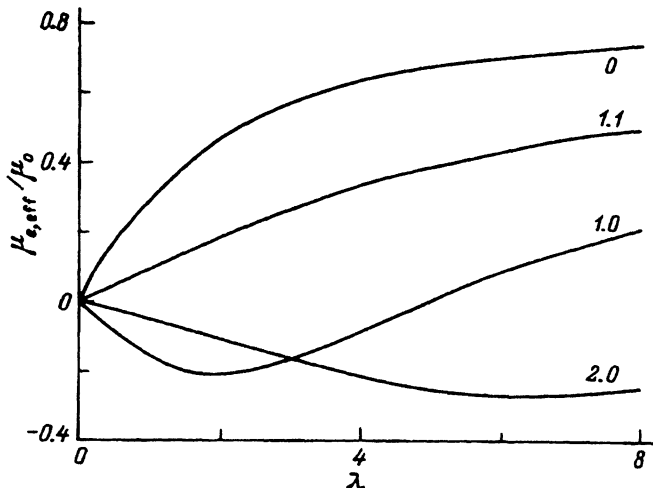


Рис. 1. Эффективный электрический дипольный момент вращающейся полярной двухатомной молекулы в электрическом поле [1].

Задачу выделения состояний с противоположными знаками  $\mu_{e,\text{eff}}$  в одном устройстве с помощью вышеупомянутых полей решить невозможно. Для этого необходимы поля дипольного типа. Настоящая работа посвящена описанию высокосветосильного устройства [4], позволяющего осуществить перестраиваемую селекцию пучка полярных молекул с произвольным знаком  $\mu_{e,\text{eff}}$ .

### Селектор состояний экспоненциального типа

Впервые поле экспоненциального типа для магнитного случая было рассмотрено Я.М.Фогелем [5] для частиц с постоянным магнитным дипольным моментом. Нами рассмотрен случай движения частиц с заданным набором зависимостей  $\mu_{e,\text{eff}}(E)$ .

Экспоненциальный диполь может быть создан из двух цилиндрических полеобразующих поверхностей, вложенных друг в друга с зазором  $2l$ . Направляющая поверхностей (поперечный профиль элементов) определяется из вида скалярного потенциала  $\varphi$  так, чтобы этот профиль совпадал с эквипотенциальными поверхностями. Потенциал поля диполя, таким образом, имеет вид [4]

$$\varphi = \varphi_0 \exp(ax) \cdot \cos(ay), \quad (2)$$

параметры  $\varphi_0$  и  $a$  определяются ниже, а эквипотенциальные линии этого поля показаны на рис. 2.

Вкратце напомним свойства этого поля. Селектирующие свойства отклоняющих (нефокусирующих) систем зависят от однородности градиента поля по высоте пучка, поскольку зависимость градиента напряженности электрического поля от высоты приводит к размытию пучка. Модуль напряженности поля легко вычисляется из (2)

$$E = |\mathbf{E}| = |-\text{grad } \varphi| = |a \cdot \varphi_0| \cdot \exp(ax). \quad (3)$$

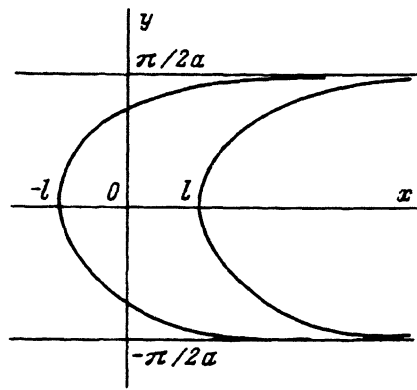


Рис. 2. Эквипотенциальные линии поля электростатического экспоненциального диполя.

Из (3) следует, что потенциальная энергия рассматриваемых диполей не зависит от координаты  $y$ , что составляет главное преимущество экспоненциального диполя перед известными отклоняющими системами [1]: он не вносит дополнительного углового расхождения в пучок в направлении  $OY$ , кроме естественного. Определим проекцию на ось  $OX$  действующей на частицу со стороны поля силы с помощью формул (1), (3)

$$F = \mu_{e,eff} a^2 \varphi_0 \cdot \exp(ax) = \mu_{e,eff} a E. \quad (4)$$

Итак, сила отклоняет частицу вправо или влево в зависимости от знака  $\mu_{e,eff}$  и зависит от параметра  $a$ . Определим физический смысл параметров поля  $a$  и  $\varphi_0$

$$\Delta\varphi \Big|_{y=0} = \varphi(l) - \varphi(-l) = \varphi_0 (e^{al} - e^{-al}),$$

$$\varphi_0 = \Delta\varphi / (e^{al} - e^{-al}), \quad (5)$$

где  $\Delta\varphi$  — разность потенциалов, приложенных к первому ( $x = -l$ ) и второму ( $x = l$ ) электродам.

Эквипотенциаль первого электрода определяется выражением:

$$y(x) = 1/a \cdot \arccos(e^{-a(x+l)}). \quad (6)$$

Откуда становится ясно, что величина  $\pi/2a$  является ограничивающей экспоненциальный диполь асимптотой (рис. 2). Выбор параметров экспоненциального диполя  $a$  и  $\varphi_0$  определяется конкретной постановкой задачи для исследований с пучками нейтральных частиц.

### Траекторные расчеты

Для иллюстрации возможностей экспоненциального диполя зададимся определенными его размерами  $l = 0.010$  м,  $\pi/2a = 0.010$  м. Определим силу, действующую на молекулу в состоянии  $(1, 0)$  в зависимости от  $x$  и параметра  $\varphi_0$ . Как видно из рис. 3, действующая сила для разных значений  $\varphi_0$  получается параллельным переносом графика, т.е. при заданных параметрах  $l$  и  $a$  параметром  $\varphi_0$  можно настраивать диполь

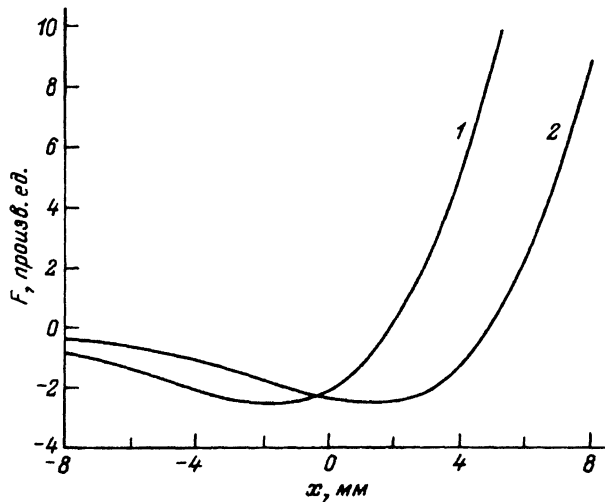


Рис. 3. Зависимость от координаты  $x$  (для разных  $\varphi_0$ ) величины силы, действующей на молекулу в состоянии (1,0).  $\varphi_0(1) > \varphi_0(2)$ .

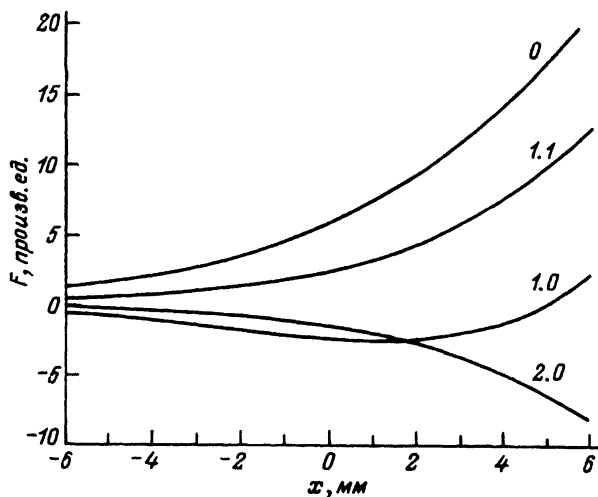


Рис. 4. Величина действующей силы для разных  $(J, M_J)$ .

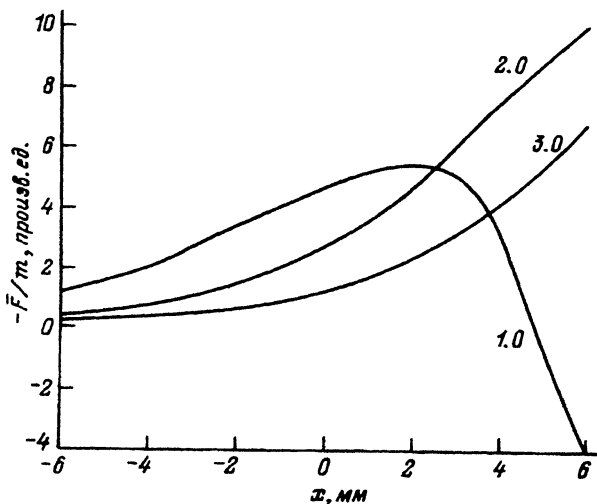


Рис. 5. Сила, действующая на молекулу в зависимости от точки влета в диполь.

на отклонение определенного состояния. На рис. 4 представлены силы, действующие на молекулу для основных конкурирующих (в смысле отклонения) состояний. Понятно, что проще всего выделять из состояний с  $\mu_{e,\text{eff}} > 0$  состояние  $(0, 0)$  и состояние  $(1, 0)$  — из состояний с  $\mu_{e,\text{eff}} < 0$  в центральной части диполя.

Поскольку создаваемое экспоненциальным диполем (3) силовое воздействие на молекулу зависит только от одной координаты  $x$ , то система трех уравнений движения полярной молекулы массой  $m$  сводится к одному уравнению

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = \mu_{e,\text{eff}} a E. \quad (7)$$

Из-за нелинейной зависимости  $\mu_{e,\text{eff}}$  от напряженности поля (рис. 1) в аналитическом виде записать решение уравнения (7) для разных состояний ( $J, M_J$ ) невозможно, поэтому приходится решать уравнение численно (с применением стандартных процедур). На рис. 5 показано действие поля на молекулу в зависимости от разных точек  $x$  влета в диполь для некоторых состояний. В данном случае диполь настроен на максимальное отклонение молекул в состоянии  $(1, 0)$  влево (при точке влета в диполь вблизи  $x = 0$ ). Если необходимо выделить состояние  $(2, 0)$ , то достаточно перенастроить диполь, подняв потенциал  $\varphi_0$  так, чтобы минимальное значение  $\mu_{e,\text{eff}}(\lambda(E))$  перемещалось к центру диполя. При этом ход кривых будет подобным, а значения действующей силы больше, чем для состояния  $(1, 0)$ . Мы не приводим более детальных расчетов по селекции молекул экспоненциальным диполем, так как они сильно связаны с предысторией пучка (его скоростной и угловой расходимостью).

## Заключение

Полученные в данной работе результаты показывают, что предложенный в [4] экспоненциальный диполь может быть успешно использован для увеличения пропускания пучков полярных двухатомных молекул в нужных вращательных состояниях при создании двухплечевых систем, отклоняя молекулы с  $\mu_{e,\text{eff}} > 0$  вправо, а с  $\mu_{e,\text{eff}} < 0$  — влево.

## Список литературы

- [1] Hughes H.K. // Phys. Rev. 1947. Vol. 72. N 7. P. 614–623.
- [2] Bennowitz H.G., Paul W., Schlier C. // Z. Phys. 1955. Vol. 141. P. 6–11.
- [3] Lubbert A., Rotzoll G., Gunther F. // J. Chem. Phys. 1978. Vol. 69. N 11. P. 5174–5179.
- [4] Рябов В.Л., Яцук В.В., Ежов В.Ф. и др. А. С. № 1535244 от 8.09. 1989.
- [5] Фогель Я.М. // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. Вып. 1. С. 38–41.

С.-Петербургский институт  
ядерной физики  
им. Б. П. Константинова

Поступило в Редакцию  
21 апреля 1992 г.