

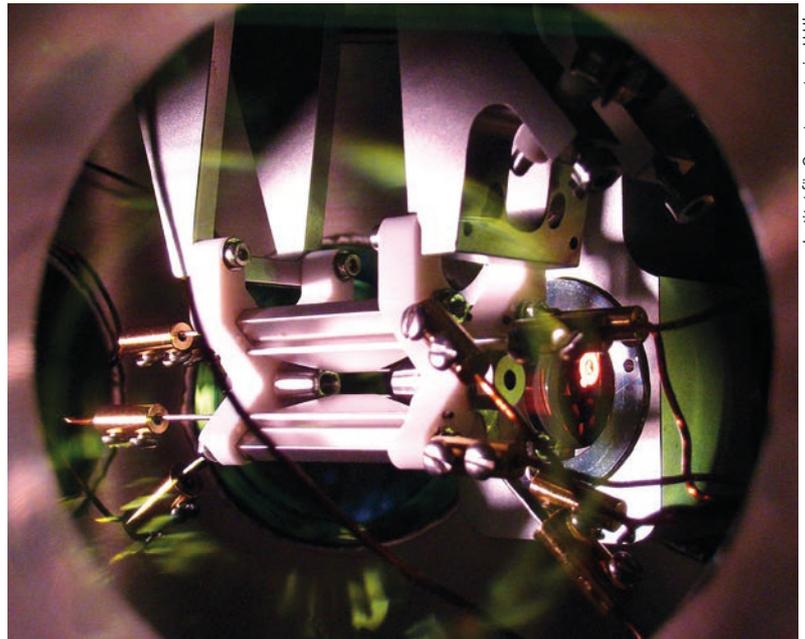
## ■ Moleküle mit Charakter

In einem ultrakalten Gas aus Rubidium-Atomen gelang es, den Molekülzustand nach einer Dreikörper-Rekombination detailliert zu bestimmen.

In den vergangenen Jahren wurden verschiedene Techniken entwickelt, um kalte oder sogar ultrakalte (deutlich unter 1 K) Moleküle in der Gasphase herzustellen. Diese Systeme sind beispielsweise interessant, um elementare molekulare Wechselwirkungen zu untersuchen, chemische Reaktionen bei extrem niedrigen Energien zu erforschen oder aber im Zusammenhang mit Quanteninformationstechnologien. Dabei ist es oft essenziell, dass die Moleküle nicht nur langsam sind, sondern auch in selektierten (meist tiefen) Rotationszuständen vorliegen.

Polare oder paramagnetische Moleküle lassen sich mittels zeitabhängiger elektrischer oder magnetischer Felder auf wenige Millikelvin abbremsen [1]. Hierbei sind häufig auch die Anregungszustände der Atome sehr niedrig. Noch tiefere Temperaturen sind mit Atomen möglich, die dann als Ausgangspunkt zum Zusammenbau zweiatomiger Moleküle dienen können. Um aus zwei freien Atomen ein Molekül zu formen, ist es erforderlich, Energie abzuführen, da bei dem Stoßprozess die Gesamtenergie konstant bleiben muss.

In der traditionellen Chemie wird in Lösungen die nötige oder überschüssige Enthalpie mit dem Lösungsmittel ausgetauscht, das somit die Rolle eines Wärmereser-



Diese Paul-Falle diente dazu, die zustands-selektiv ionisierten Moleküle ein-

zufangen und zu zählen. Im Zentrum ist die Dipolfalle zu sehen.

voirs übernimmt. In der Gasphase existiert allerdings kein thermischer Kontakt mit einer Umgebung. Neue Bindungen können nur dann entstehen, wenn Energie abgeführt wird. Im Fall von zwei Atomen in der Gasphase kann die überschüssige Energie ausschließlich durch Strahlung abgeführt werden. Genau dieser Prozess ist Grundlage der Photoassoziation – einer erfolgreichen Technik zum Erzeugen ultrakalter Moleküle. Dabei werden Paare von Atomen in einen elektronisch angeregten Zustand des Moleküls transferiert, der durch Emis-

sion eines Photons wieder in den Grundzustand übergeht. Obwohl das Atompaar anfänglich bei sehr großen Abständen vorliegt, kann das System nach der Fluoreszenz bei kurzen Abständen enden und ein Molekül formen. Die Bindungsenergie wird hier also in Form von Photonen abgeführt. In diesem Prozess bleibt die Bewegungsenergie der Moleküle sehr niedrig, allerdings sind tiefe Rotationstemperaturen nur durch zusätzliche Schritte zu erreichen.

Alternativ kann in einem Dreikörperstoß ein zusätzliches

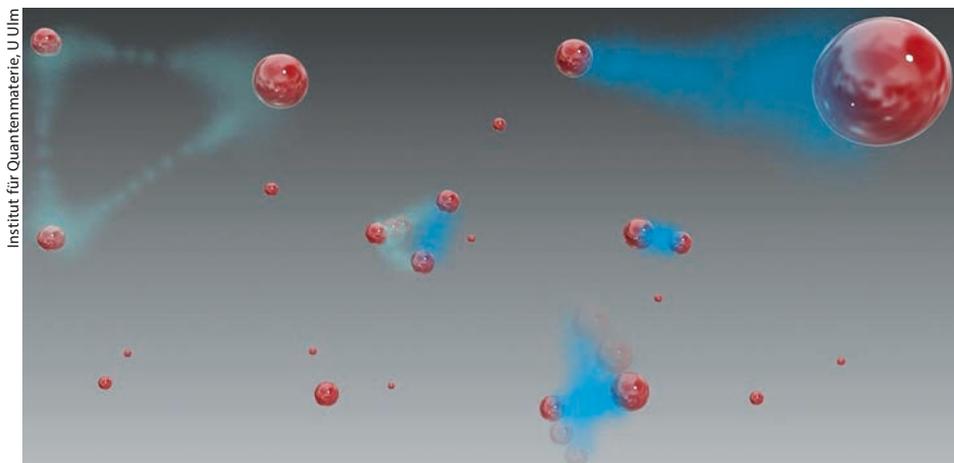


Abb. 1 Bei der Dreikörper-Rekombination kommt es zu Bindungen (blau) zwischen den einzelnen Rubidium-Atomen (rote Kugeln).

Teilchen die Energie abführen (Abb. 1). Bei resonanten Stößen von drei identischen Bosonen können sog. Efimov-Zustände auftreten, deren Beobachtung vor gut zehn Jahren erstmals gelungen ist [2]. Dreikörperstöße können auch in nichtresonanten Fällen zur Bildung von Molekülen führen. Dies zeigte die Gruppe um Johannes Hecker Denschlag an der Universität Ulm vor fünf Jahren in einem ultrakalten Gas (700 nK) von Rubidium-Atomen [3]. Die Wissenschaftler entwickelten zudem eine Technik, um die Moleküle mittels resonanzverstärkter Mehrphotonen-Ionisation selektiv nachzuweisen (REMPI). In ihrem Experiment wurden  $\text{Rb}_2$ -Moleküle ionisiert, in einer Ionenfalle eingefangen und anschließend massenspezifisch detektiert. Dieser Zugang ist sehr empfindlich und ermöglicht es zudem, die Moleküle zustandsselektiv nachzuweisen.

Bei dem ersten Experiment 2013 gelang es zu zeigen, dass mittels Dreikörperstößen tatsächlich Moleküle entstehen können. Da diese Stoßprozesse aber nicht resonant sind, führen sie zu einer sehr breiten Verteilung der Rotations- und Vibrationszustände der Moleküle. Die resonanzverstärkte Mehrphotonen-Ionisation erfolgte damals mithilfe eines der Laser, der auch für die Dipolfalle der Atome eingesetzt war. Dadurch war der Prozess nicht komplett zustandsselektiv. In einer aktuellen Arbeit demonstrierte die Ulmer Gruppe nun ein deutlich verbessertes Detektionsschema [4]: Dabei regen zwei Photonen die Moleküle in einen Zwischenzustand an, von dem aus ein weiteres Photon einer anderen Wellenlänge die Moleküle ionisiert. Die Ionisation mit zwei Lasern von unterschiedlicher und unabhängig abstimbarer Wellenlänge erlaubt es, die einzelnen Rotationsübergänge voneinander zu trennen. Damit liefert die Messung die komplette Zustandsinformation, womit prinzipiell zustandsaufgelöste Chemie möglich wird.

Die Wissenschaftler nutzten dies, um die Wahrscheinlichkeit zu messen, mit der die Dreikör-

per-Rekombination das Molekül in einem bestimmten Vibrations-Rotationszustand erzeugt. Die Besetzung der Vibrationszustände lässt sich recht einfach vorhersagen, weil sie im Wesentlichen mit der Wurzel der inversen Bindungsenergie abnimmt. Die Dynamik, die zu unterschiedlichen Besetzungswahrscheinlichkeiten für individuelle Rotationszustände führt, ist wesentlich komplexer. Ihre detaillierte Charakterisierung erlaubt direkte Rückschlüsse auf die zugrundeliegende Chemie. Im vorliegenden Fall traten Rotationszustände mit bis zu sechs Rotationsquanten auf – die Theorie sagt noch höhere Zustände vorher. Die Besetzungen oszillieren als Funktion des Rotationszustandes, weil mehrere Reaktionspfade zu einzelnen Zuständen führen können.

Diese Resultate bedeuten einen wichtigen Schritt hin zu komplett kontrollierter ultrakalter Chemie. Die Experimente sind nicht grundsätzlich auf Rubidium-Reaktionen beschränkt, sondern zeigen einen Weg auf, aus ultrakalten Atomgasen Moleküle zu erzeugen und komplett zu charakterisieren. Die Anwendung auf andere Isotope oder Atompaare – gleicher oder unterschiedlicher Art – lässt auf ein globaleres Bild der ultrakalten Chemie hoffen.

Andreas Osterwalder

- [1] S. Y. T. van de Meerakker et al., *Chem. Rev.* **112**, 4828 (2012)
- [2] T. Kraemer et al., *Nature* **440**, 315 (2006)
- [3] A. Härter et al., *Nat. Phys.* **9**, 512 (2013)
- [4] J. Wolf et al., *Science* **358**, 921 (2017)

Dr. Andreas Osterwalder, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1015 Lausanne, Schweiz

## DER MARS STEHT KOPF



ESA / DLR / FU Berlin

Beim Blick über die Nordhemisphäre des Mars von der Nordpoleiskappe am unteren Bildrand bis zum Äquator am Horizont steht unser Nachbarplanet Kopf. Die hochauflösende Stereokamera HRSC – betrieben vom DLR – an Bord der ESA-Raumsonde Mars Express hat dieses ungewöhnliche Bild während einer Kalibrierung im Juni 2017 aufgenommen, veröffentlicht wurde es Mitte Dezember. Am 25. Dezember jährte sich die Ankunft von Mars Express auf dem Roten Planeten zum 14. Mal. In den 14 Jahren hat die Sonde den Mars fast 18 000 Mal umrundet.