

streszczenie

Monofluorek glinu jest doskonałym kandydatem do badań w ultraniskich temperaturach ze względu na jego diagonalne czynniki Franka-Conzona i stabilność. Nasze badanie obejmuje obliczenia teoretyczne dotyczące procesów chłodzenia z udziałem AIF. Ponieważ cząsteczki są bardziej złożone niż atomy, potrzebne są nowe metody chłodzenia cząsteczek. Celem tych badań jest dostarczenie teoretycznych podstaw dla metod chłodzenia gazem buforowym, chłodzenia przez parowanie i chłodzenia sympatycznego. Zastosowaliśmy metody chemii kwantowej ab initio sprzężonego klastra (CC) i wieloreferencyjnej interakcji konfiguracji (MRCI) do obliczenia potencjałów oddziaływania z dużą dokładnością. Obliczono interakcję cząsteczek AIF ze sobą (układ czteratomowy), atomem helu (układ trójatomowy) oraz atomami rubidu (układ trójatomowy) dla stanu podstawowego i wzbudzonego cząsteczki AIF. Zgłaszane są wysokiej jakości powierzchnie energii potencjalnej dla wszystkich tych oddziaływań, a także badano zbieżność bazową metod ab initio oraz wpływ efektów relatywistycznych dla każdego z układów. Zademonstrowano również dokładność i ograniczenia metodologii chemii kwantowej ab initio. Wykonano obliczenia rozpraszania dla zderzeń AIF-He, które dają wgląd w perspektywy eksperymentalne chłodzenia AIF gazem buforowym. Dane do przyszłych obliczeń rozpraszania są również udostępniane dla interakcji AIF-AIF i AIF-Rb, co stanowiłoby podstawę teoretyczną dla odpowiednich eksperymentów. Jednym z głównych wyników tego badania jest obliczenie pełnego czterowymiarowego potencjału oddziaływania AIF-AIF z dużą dokładnością.