arXiv:2603.03898v1 [math-ph] 4 Mar 2026

磁四极阱中双原子分子的平动动力学

Yurij Yaremko*，Maria Przybylska†，Andrzej J. Maciejewski‡

*乌克兰国家科学院 Yukhnovskii Institute for Condensed Matter Physics，Svientsitskii 街 1 号，79011 利沃夫，乌克兰，电子邮箱：yar@icmp.lviv.ua

†绿山大学物理研究所，Licealna 街 9 号，65–417 绿山城，波兰，电子邮箱：m.przybylska@if.uz.zgora.pl。

‡绿山大学 Janusz Gil 天文研究所，Licealna 街 9 号，65–417 绿山城，波兰，电子邮箱：a.maciejewski@ia.uz.zgora.pl

摘要

我们研究处于 $^3\Sigma$ 电子态、深束缚振动态以及宇称明确的转动态的同核双原子分子的平动。因禁势源于电子总自旋和原子核轨道角动量与陷阱四极磁场之间的相互作用。分子的平动采用经典方法处理。我们通过数值和解析方法考察支配质心动力学的哈密顿方程。利用处于振动基态的氢分子数据，我们运用庞加莱截面法展示全局动力学，并分析各种类型的轨迹：周期、准周期和混沌。我们证明，支配这一运动的哈密顿系统不可积。粒子的轨道被限制在一个束缚空间区域内，该区域随能量增加而扩大；但在较低能量（< 1.8 K）下，运动仅限于一个处理腔室内（几厘米范围）。对称轴和水平面上的运动方程的解可用雅可比椭圆函数表示。

声明 本文已发表于《化学物理学杂志》*163, 154305*（*2025*年），最终版本见：**https://doi.org/10.1063/5.0291088**

1 引言

在过去半个世纪里，电场和磁场对气相中原子和分子动力学过程的影响得到了广泛研究。冷却技术、减速方法和囚禁方法是这篇综述文章的重点 [1]（另见其中的参考文献）。这些方法利用空间非均匀的

且随时间变化的电场和磁场，对处于选定量子态的冷、致密原子和分子样品进行操控。非均匀场分布产生的力会影响中性粒子，这是由于电磁场与粒子的磁偶极矩之间存在相互作用。特别是，塞曼效应使得利用多极磁场囚禁中性粒子成为可能。这是因为发生线性塞曼效应的原子和分子可以被视为具有与施加的外磁场耦合的磁偶极矩。

在原子与分子物理学发展的早期，人们利用电磁力使粒子偏离准直良好的热束流。在他们开创性的实验中，Stern 和 Gerlach [2] 施加磁场，将银原子束分离为自旋向上和自旋向下的磁分量（另见 [3, §6.1] 及其中的参考文献）。Rabi 及其同事 [4] 重新采用了这一思路，开展了一项让分子束通过场梯度方向相反区域的实验。这种方法能够精确测量原子和分子的磁偶极矩 [5]。后来，非均匀场使人们能够控制经量子态选择的原子和分子超声分子束的横向运动 [6, 7, 8, 9]。此后的进一步发展还实现了对其纵向运动的控制。

本文旨在研究双原子分子在磁四极阱中的动力学。因此，我们特别关注这一在实验物理学中广泛使用的装置。Migdall 研究组 [10]首次开展了将中性原子囚禁于球形四极阱中的实验。Doyle 及其同事 [11] 报告了首个利用由两组按反亥姆霍兹构型排列的超导线圈产生的四极磁场囚禁 CaH分子的实验。文献 [12], 报告了利用四极磁场囚禁经斯塔克减速的基态NH分子的实验。

甲基自由基CH_3 的磁囚禁由Liu等人 [13]报道。实验装置包括一个85级塞曼减速器和两个处于反亥姆霍兹构型的超导磁体。它们产生的四极磁场在 z方向上最大为0.75 T，在径向平面上为0.45 T。McCarron等人 [14]利用磁四极阱开展了两阶段实验。在第一阶段，激光冷却的SrF分子束被俘获于磁光阱中。随后，在第二阶段，百分之四十的分子云被转移到磁阱中的单一量子态。

电磁阱仍在随着量子计算机技术的发展而不断研发。DeMille [15] 提出了一种新颖的量子处理器架构，利用超冷双原子分子的电偶极矩与外部电场相互作用。作者认为，“这一设计有望实现一台拥有 $\geq 10^4$ 个量子比特的量子计算机，并能在预期的 $\sim 5s$ 退相干时间内执行 $\sim 10^5$ 个CNOT门。”许多研究人员研究了利用极性分子实现量子计算的可能性，并尝试拓展这种器件的功能。我们重点介绍这一系列论文 [16, 17, 18]。Caldwell 等人 展示了在磁阱中对超冷极性分子进行的实验。因此，在 [18], 中，研究团队研究了四极磁阱中受限分子的 $^2\Sigma$ 电子态内的转动跃迁。他们计算了多种双原子分子跃迁的磁灵敏度，结果表明，在磁阱中实现较长的相干时间是可行的。在 [19], 中，研究人员利用处于 $X^1\Sigma$ 电子态的NaCs分子实现了双量子比特iSWAP门。

实验中使用了辅以磁场 $863.9\,G$ 的光镊。关于单量子态制备、单个极性分子的转动相干性，以及导致量子纠缠的分子间偶极相互作用的最新进展，请参阅 [19] 及其中的参考文献。

本文旨在分析双原子分子在四极磁阱中的质心运动。由于平动模的德布罗意波长极小，我们采用半经典方法 [20]。我们将分子整体的运动视为经典运动，而其电子、振动和转动运动则根据量子理论处理。

Bergeman [21] 首先提出了四极磁场影响下离子和分子的平动动力学。数值模拟结果见 [22]。文中给出了平方根势下的典型经典轨迹和庞加莱截面 $\sqrt{z^2+\rho^2/4}$。本文分析处于某种势能中的极化粒子的动力学，该势能还包含一个额外项 $z^2+\rho^2/4$，此项源于二阶塞曼位移。

本文的结构安排如下。第 2 节重点讨论分子的总角动量与非均匀场相互作用所导致的塞曼位移

$$\mathbf{B}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} B_1 \left(-X, -Y, 2Z\right), \tag{1.1}$$

由一对相同的同轴线圈产生，其电流相等且流向相反。我们假设该分子被制备在 $^3\Sigma$ 电子态以及一个深束缚振动态中。我们采用刚性转子近似。塞曼位移产生囚禁势 $V(X, Y, Z) \propto |\mathbf{B}(\mathbf{X})|$ [23, 24, 22]。它在处理腔室中心为零，并沿所有方向增大。

接下来两节将分析所得的经典质心哈密顿量。首先，在第 3 节中，我们通过庞加莱截面以及代表不同运动类型的典型轨迹，展示分子在处理腔室中的平动数值模拟结果。第 4 节给出解析结果：证明所分析的哈密顿方程不可积，并明确给出相空间不变子流形上的解。这些子流形对应于直线 $X = Y = 0$ 和 $Z = 0$平面；在这些子流形上，回复力$\mathbf{F} = -\nabla V$为中心力，角动量守恒。为说明这一情形，我们在附录 A 中考察一种准稳定氢分子。我们采用海特勒-伦敦近似和试探波函数，该波函数要求两个电子处于三重态自旋构型 [25]。我们计算了自由分子能级的线性和二次塞曼位移。附录 B 简要介绍了具有齐次势的自然哈密顿量在刘维尔意义下满足的必要可积条件，并特别关注代数势。此处引用的定理1是第 4 节不可积性证明所用的关键工具。附录 C 明确给出了由囚禁势的中心回复力支配的规则运动的转向点。

2 塞曼效应

本节将说明如何利用分子-场相互作用来囚禁分子。在我们先前的文章 [26], 中，我们讨论了利用六极静电场囚禁极性双原子分子。本文研究利用四极磁场囚禁同核双原子分子。此类场的组合形成所谓的极性阱，该阱在 [27], 中首次提出，文中分析了极化纳米粒子的经典平动和转动动力学。磁场引起的微扰会导致谱线分裂。该谱问题由一个分子的哈密顿量支配；该分子由两个原子核和 n个电子组成，其质心变量见 [26]的附录 A。

我们的分析基于拉格朗日函数 [26, 式 (A.1)]。变换到核质心相对坐标系 [26, 式 (A.2)、(A.3)], 后，经过标准的勒让德变换，我们得到质心哈密顿量 [26, 式 (A.13)] 。动能部分由质心动能、各组成部分的内能以及质量极化修正构成；后者是从实验室坐标变换到原子核质心坐标时产生的。通常的静电势描述原子核与电子之间的相互作用。自由分子的各项还需加上由外磁场引起的一阶 [26, 式 (A.19)]和二阶 [26,式 (A.20)] 微扰。

在本文附录 A 中，我们将多电子哈密顿量 [26,式 (A.13)] 用于氢分子，并以其行为作为指导。我们详细分析了磁场 (1.1) 对分子电子云的影响。我们将微扰项 [26, 式 (A.19)] 和 [26, 式 (A.20)] 夹在试探波函数 (A.3) 与其复共轭之间，并对电子坐标积分。由于电子的总轨道角动量为零，线性塞曼效应由磁场与原子核轨道角动量的相互作用决定。二次塞曼效应给出表达式 (A.21)，该式取决于 R 原子核之间的相对距离。与振动模式的相互作用将 R 排除在考虑范围之外（见式 (A.22) 和 (A.23)）。接下来只需处理分子整体的转动。

所得期望值是坐标相关的磁场分量以及球角 θ 和 φ 的函数，这些球角定义了实验室参考系中核间轴的方向。此处，我们假设这些表达式适用于多电子分子。本节将考虑刚性分子在磁场 (1.1) 中旋转所引起的线性塞曼效应和二次塞曼效应。分子在非均匀磁场中的旋转会产生空间相关的囚禁势 [24, 22] ，该势包含在质心哈密顿量中。

我们首先考虑 $^3\Sigma$分子中的自旋塞曼效应，该分子与基电子态之间相隔很大的能隙。我们假设波函数是以下直积

$$\Psi(\theta,\varphi;M_s)=\chi(M_s)\Psi_0^{\rm rot}(\theta,\varphi), \tag{2.1}$$

其中，三重态 $\chi(M_s)$ 是旋量的线性组合，分别对应自旋向上$M_s=+1$ 方向、自旋为零 $M_s=0$ 方向和自旋向下 $M_s=-1$ 方向,

分别 .....地。函数 $\Psi_0^{\mathrm{rot}}(\theta,\ \varphi)$ 是刚性转子哈密顿量的本征态 n

$$\hat{H}_0 = b_e \hat{J}^2. \tag{2.2}$$

这里， $b_e = B_e/\mathcal{U}$ 是无量纲转动常数，即以能量原子单位 $\mathcal{U} = \hbar^2/(m_e a_0^2)$ 表示的转动常数 B_e。对于氢，我们有 B_e =29.3 cm^{-1} [28]；若以哈特里单位表示，则为 $b_e = 1.335 \cdot 10^{-4}$。

2.1 自旋塞曼效应

处于 $^3\Sigma$ 电子态的双原子分子具有磁偶极矩 $\boldsymbol{\mu}$ =$-\mu_B g_S \mathbf{S}$ ，其中 $\mu_B = e\hbar/2m_e$ 是玻尔磁子， g_S 是电子的 g因子。自旋算符**S**由空间维度上的厄米矩阵表示

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},\ S_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix},\ S_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{2.3}$$

。分子在陷阱的磁场（1.1）中受到力矩 $[\vec{\mu} \times \mathbf{B}]$ 。这种相互作用产生塞曼算符 $H_s = -$（$\vec{\mu}\cdot\mathbf{B}$）。能量以哈特里为单位。我们用特征陷阱尺寸 D对磁场（1.1）中的空间坐标进行缩放，即将（X, Y, Z）替换为（x, y, z） = （$X/D, Y/D, Z/D$）。用无量纲变量表示时，该算符的形式为

$$H_s = \frac{g_S}{2}\beta_L \begin{bmatrix} z & -\dfrac{x-\mathrm{i}y}{2\sqrt{2}} & 0 \\ -\dfrac{x+\mathrm{i}y}{2\sqrt{2}} & 0 & -\dfrac{x-\mathrm{i}y}{2\sqrt{2}} \\ 0 & -\dfrac{x+\mathrm{i}y}{2\sqrt{2}} & -z \end{bmatrix}. \tag{2.4}$$

无量纲支配参数

$$\beta_L = \frac{eB_1 D a_0^2}{\hbar} \tag{2.5}$$

表征自旋（2.3）与磁场（1.1）相互作用的强度。回想一下， B_1 是恒定场梯度， D 是处理腔室的尺寸， $\hbar$ 是约化普朗克常数， e 是电荷原子单位， a_0 是长度原子单位（玻尔半径）。

三重态是矩阵（2.4）的特征向量，其本征值为

$$\lambda_+ = \sqrt{z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}},\quad \lambda_0 = 0,\quad \lambda_- = -\sqrt{z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}}, \tag{2.6}$$

分别对应旋量的自旋向上、自旋为零和自旋向下取向。

旋量如下:

$$\chi_+ = \begin{bmatrix} \frac{(B_x - \mathrm{i}B_y)^2}{2|B|(|B| - B_z)} \\ \frac{B_x - \mathrm{i}B_y}{\sqrt{2}|B|} \\ \frac{|B| - B_z}{2|B|} \end{bmatrix}, \ \chi_0 = \begin{bmatrix} \frac{-(B_x - \mathrm{i}B_y)^2}{|B|\sqrt{2(B_x^2 + B_y^2)}} \\ \frac{(B_x - \mathrm{i}B_y)B_z}{|B|\sqrt{B_x^2 + B_y^2}} \\ \frac{\sqrt{B_x^2 + B_y^2}}{\sqrt{2}|B|} \end{bmatrix}, \ \chi_- = \begin{bmatrix} \frac{(B_x - \mathrm{i}B_y)^2}{2|B|(|B| + B_z)} \\ -\frac{B_x - \mathrm{i}B_y}{\sqrt{2}|B|} \\ \frac{|B| + B_z}{2|B|} \end{bmatrix}, \tag{2.7}$$

其中， $B_x = -x/2$、 $B_y = -y/2$和 $B_z = z$ 是磁场（1.1）的无量纲分量， $|B|$是磁场的大小。它们张成薛定谔方程解的解空间

$$\mathrm{i}\frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = H_s \chi(t). \tag{2.8}$$

通解为

$$\chi(t) = a\chi_+ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+ t} + b\chi_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0 t} + c\chi_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_- t} \tag{2.9}$$

其中能量为

$$E_k = \frac{g_S}{2}\beta_L \lambda_k. \tag{2.10}$$

复常数 a、 b和 c 满足归一化条件 $a^*a + b^*b + c^*c = 1$。它们由初始条件确定。

利用基本旋量（2.7）的正交性，我们推导出该混合态的共同能量 $E_s = \langle\chi|H_s|\chi\rangle$

$$E_s = \frac{g_S}{2}\beta_L \left(a^*a - c^*c\right)\sqrt{z^2 + \frac{x^2 + y^2}{4}}. \tag{2.11}$$

如果混合参数 $\varpi = a^*a - c^*c$ 为正，分子会经历正塞曼效应，即处于低场寻求态。否则，分子会变为高场寻求态，无法被俘获。

2.2 线性塞曼效应

设初始量子态 (2.1) 由长度相同的角动量态 $\sqrt{J(J+1)}$ 以及其在空间固定量子化轴 z 上的投影 M 的所有可能取值组成:

$$\Psi_0^{\mathrm{rot}}(\theta, \varphi) = \sum_{M=-J}^{J} D_{JM} Y_J^M(\theta, \varphi). \tag{2.12}$$

展开系数 D_{JM} 为复数。我们假设波函数已归一化。线性组合 (2.12) 是刚性转子哈密顿量 (2.2) 的本征态，其本征值为 J。未受扰态是简并的： $H_0\Psi_0^{\mathrm{rot}}(\theta, \varphi) = b_e J(J+1)\Psi_0^{\mathrm{rot}}(\theta, \varphi)$。

我们引入以能量原子单位 $\mathcal{U}$为基准的无量纲变量。附录 A 中的仔细分析表明，线性塞曼效应由以下微扰定义

$$H^{(1)}_{\rm Zeeman} = -\alpha_L\beta_L(\mathbf{B}\cdot[\mathbf{R}\times\mathbf{\Pi}]). \tag{2.13}$$

无量纲乘数 α_L 取决于粒子质量和电荷

$$\alpha_L = \frac{m_e}{2m}\left(Z_B\frac{m_A}{m_B} + Z_A\frac{m_B}{m_A} + n\frac{m_e}{m_B}\right). \tag{2.14}$$

这里， Z_A 和 Z_B 分别是双原子分子中两个原子的原子序数。该系数与负二分之一 g_R 因子 [3, 式（3.58）] 的区别仅在于一个极小项 nm_e/m_B，其中 $n = Z_A + Z_B$ 是电子数。

式（2.13）描述了无量纲磁场$\mathbf{B} = (-x/2,\ -y/2,\ z)$与原子核轨道角动量$\mathbf{L} = [\mathbf{R}\times\mathbf{\Pi}]$ 之间的相互作用，其无量纲分量为

$$L^1 = -\mathrm{i}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{2.15}$$

$$L^2 = -\mathrm{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{2.16}$$

$$L^3 = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{2.17}$$

按照 [25, §4.3.2], ，我们引入升算符 $L_+ = L^1 + \mathrm{i}L^2$ 和降算符$L_- = L^1 - \mathrm{i}L^2$。与磁场的相互作用会改变转动模态。利用关系式 [25, 式（4.120）、（4.121）] ，我们推导出以下规律

$$\begin{aligned}(\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}})Y_J^M(\theta,\varphi) &= -\frac{1}{4}\Big[(x-\mathrm{i}y)\sqrt{(J-M)(J+M+1)}Y_J^{M+1}(\theta,\varphi)\\ &+ (x+\mathrm{i}y)\sqrt{(J+M)(J-M+1)}Y_J^{M-1}(\theta,\varphi)\Big]\\ &+ zMY_J^M(\theta,\varphi).\end{aligned} \tag{2.18}$$

微扰后的波函数形式为 $\Psi^{\rm rot} = \Psi_0^{\rm rot} + \Psi_1^{\rm rot}$。波函数的修正 $\Psi_1^{\rm rot}$ $\Psi_0^{\rm rot}$满足方程

$$H_0\Psi_1^{\rm rot} + H^{(1)}_{\rm Zeeman}\Psi_0^{\rm rot} = b_eJ(J+1)\Psi_1^{\rm rot} + E_1\Psi_0^{\rm rot}, \tag{2.19}$$

其中， E_1 是本征值 $b_eJ(J+1)$的修正。现在，我们对该方程与球谐函数$Y_J^N(\theta,\varphi)$取内积。但算符 H_0 是厄米的，因此，修正后方程左侧的第一项与右侧的第一项相消。利用球谐函数的正交性，我们得到本征值方程

$$H_{NM}D_{JM} = \varepsilon_1 D_{JN}, \tag{2.20}$$

其中 $\varepsilon_1 = -E_1/\alpha_L\beta_L$ 和 $H_{NM} = \langle Y_J^N|(\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}})|Y_J^M\rangle$。三对角矩阵 H_{NM} 具有以下非零元素

$$\begin{aligned}H_{M,M-1} &= -\frac{x-\mathrm{i}y}{4}\sqrt{(J-M+1)(J+M)},\\ H_{M,M} &= zM,\\ H_{M,M+1} &= -\frac{x+\mathrm{i}y}{4}\sqrt{(J+M+1)(J-M)}.\end{aligned}$$

该三对角矩阵的特征值给出了转动能 $B_e J(J+1)$ 的一阶修正：

$$\varepsilon_1^M = M\sqrt{z^2 + \frac{1}{4}(x^2+y^2)}. \tag{2.21}$$

微扰 $H^{(1)}$ 塞曼打破了简并。转动能的修正$E_0 = b_e J(J+1)$呈坐标相关函数的形式

$$E_1(x,y,z) = -\alpha_L \beta_L M\sqrt{z^2 + \frac{1}{4}(x^2+y^2)}. \tag{2.22}$$

这一结果与电子态为 $^2\Pi$ [3, § 3.5.2] 的分子转动态的塞曼位移一致。具有转动角动量 J 的态会分裂为$2J+1$ 个塞曼态，分别对应其在空间固定量子化轴 z 上的投影 M 的所有可能取值。该修正与式 (2.11) 类似。区别在于平方根函数前的因子。自旋塞曼效应远强于线性塞曼效应。

2.3 二次塞曼效应

我们进一步考察因子 $\alpha_L\beta_L$ 与主导参数 (2.5) 的乘积 g_R，它们决定了陷阱磁场与核轨道运动偶极矩之间相互作用的强度。因子 α_L 与电子质量 m_e 和双原子分子总质量 m 之比 m_e/m 成正比，显著小于 1。二阶微扰与因子 β_L^2成正比，约为 $\alpha_L\beta_L$ 的五分之一。因此，必须考虑二阶塞曼效应。

在附录 A 中，我们分析了该微扰对处于 $^3\Sigma$ 电子态的氢分子造成的能量位移。总而言之，该项

$$\begin{aligned}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{n}_R)^2 &= \frac{x^2}{4}\cos^2\varphi\sin^2\theta + \frac{y^2}{4}\sin^2\varphi\sin^2\theta + z^2\cos^2\theta \\ &+ \frac{xy}{2}\cos\varphi\sin\varphi\sin^2\theta - z\,(x\cos\varphi + y\sin\varphi)\sin\theta\cos\theta,\end{aligned} \tag{2.23}$$

定义了转动能位移（见式 (A.21)）。它乘以一个取决于粒子电荷和质量的数值因子。无量纲质心变量（x， y， z）和极角在空间固定坐标系中保留下来。

让我们计算与初始量子态（2.12）相对应的转动能移动。项（2.23）是对哈密顿量 $H_0 = B_e\mathbf{J}^2$ 的微扰。利用克莱布施 - 戈尔丹系数，我们求得三角函数组合（ 2.23 ）的期望值。转动能的修正由其特征值定义，这些特征值属于

五对角矩阵 $\hat{}W = \langle Y_J^N | (\mathbf{B}\cdot\mathbf{n}_R)^2 | Y_J^M\rangle$，其元素为

$$\begin{aligned}
W_{M,M-2} &= -\frac{(x-\mathrm{i}y)^2}{8}\frac{\sqrt{(J-M+1)(J-M+2)(J+M-1)(J+M)}}{(2J-1)(2J+3)},\\
W_{M,M-1} &= \frac{(x-\mathrm{i}y)z}{2}\frac{\sqrt{(J-M+1)(J+M)}}{(2J-1)(2J+3)}(2M-1),\\
W_{M,M} &= \left(\frac{J^2+J-1+M^2}{(2J-1)(2J+3)}\right)\frac{x^2+y^2}{4}+\frac{2J^2+2J-1-2M^2}{(2J-1)(2J+3)}z^2,\\
W_{M,M+1} &= \frac{(x+\mathrm{i}y)z}{2}\frac{\sqrt{(J-M)(J+M+1)}}{(2J-1)(2J+3)}(2M+1),\\
W_{M,M+2} &= -\frac{(x+\mathrm{i}y)^2}{8}\frac{\sqrt{(J-M-1)(J-M)(J+M+1)(J+M+2)}}{(2J-1)(2J+3)}.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

本征值如下

$$E_2^M = \frac{2J^2+2J-1-2M^2}{(2J-1)(2J+3)}\left(z^2+\frac{x^2+y^2}{4}\right). \tag{2.25}$$

存在 J 个双重简并本征值，对应于 $\pm M$ ，而对于 $M=0$则为非简并本征值。该修正与磁场强度的平方成正比。

将所有能量贡献相加——自旋修正（2.11）、线性塞曼位移（2.22）以及二次塞曼位移（2.25）——我们得到作为空间坐标函数的囚禁势，该空间坐标覆盖处理腔体内的空间：

$$\begin{aligned}
V_{\mathrm{cm}}(\mathbf{x}) &= \frac{g_S}{2}\beta_L\varpi\sqrt{z^2+\frac{x^2+y^2}{4}}\\
&- \alpha_L\beta_L M\sqrt{z^2+\frac{x^2+y^2}{4}}\\
&+ \beta_L^2\left[A_1 - A_2\frac{2J^2+2J-1-2M^2}{(2J-1)(2J+3)}\right]\left(z^2+\frac{x^2+y^2}{4}\right).
\end{aligned} \tag{2.26}$$

回顾参数 $\varpi = a^*a - c^*c$。数值系数 A_1 和 A_2 取决于电子态和振动态的矩阵元，以及原子核和电子的电荷与质量。在附录 A 中，我们计算了氢分子处于 $f^3\Sigma_u^+ 4p\sigma$电子态时的这些系数（见公式（A.22）和（A.23））。

描述多电子双原子分子演化的哈密顿量 [26, eq. (A.13)] 的动能部分包含平动动能 $\mathbf{P}^2/2m$、组成粒子的动能以及质量极化修正。若将 K 夹在分子的某个特定电子-振动-转动态之间，就会再次得到项 $\mathbf{P}^2/2m$，以及分子能量这一部分在该特定状态下的期望值。由于电磁拉格朗日量 [26, eq. (A.1)] 包含与粒子速度耦合的矢势，磁场微扰 [26, eq. (A.19)]中包含平动动量$\mathbf{P}$。用无量纲坐标 [26, eq. (A.25)]和动量 [26, eq. (A.26)] 表示时，标量积 $-(\mathbf{P}\cdot\mathbf{b}_X)/2m$ 可写为

$$-\frac{(\mathbf{P}\cdot\mathbf{b}_X)}{2m}\frac{1}{\mathcal{U}} = -\gamma_L p_i \varepsilon^i{}_{jk} B^j d^k + \frac{1}{2}\frac{a_0}{D}\gamma_L p_i \varepsilon^i{}_{kr}\frac{\partial B^r}{\partial x^j}\Lambda^{kj}, \tag{2.27}$$

其中因子 γ_L 等于

$$\gamma_L = \frac{m_e}{m}\beta_L \frac{|\mathbf{d}|}{e a_0}. \tag{2.28}$$

张量 Λ^{kj} 由 [26, 式 (A.9)]给出。这里的$\mathbf{d}$ 指电偶极算符 [26,式 (A.18)]。式 (2.27) 描述了平动与分子内自由度之间的关系 [29]。若将其依次夹在一个电子态和一个振动态之间取矩阵元，便可得到双原子分子处于这些特定态时的永久电偶极矩。该向量沿核间轴方向。在空间固定坐标系中，其分量为

$$d^1 = \mathrm{d}\cos\varphi\sin\theta, \quad d^2 = \mathrm{d}\sin\varphi\sin\theta, \quad d^3 = \mathrm{d}\cos\theta, \tag{2.29}$$

其中，大小 d以电偶极矩原子单位 [3, p 298]为单位。期望值 $\langle\Psi_0^{\mathrm{rot}}|\mathbf{d}|\Psi_0^{\mathrm{rot}}\rangle = 0$为零，因为波函数 (2.12) 具有确定的宇称。该项对于极性粒子电磁阱中，在电场和磁场联合作用下运动的极化纳米粒子的经典动力学具有重要意义 [27]。本文详细分析了电偶极矢量的演化，并给出了若干数值模拟结果。

由于比值 a_0/D（其中 a_0 为玻尔半径， D 为陷阱的特征尺寸），式 (2.27) 中的第二项极小。本文忽略该项。(2.27) 中的第一项和第二项均不对能量有贡献。最后，质心哈密顿量为

$$\overline{H}_{\mathrm{cm}}(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V_{\mathrm{cm}}(\mathbf{x}). \tag{2.30}$$

该函数用 [26]中式 (A.25) 和 (A.26) 所定义的无量纲坐标和动量表示；演化参数 $\bar{\tau}$ 由 [26, 式 (A.27)] 给出。哈密顿函数 (2.30) 支配分子整体的平动。在后续各节中，我们用它来分析动力学并进行数值模拟。

2.3.1 陷阱深度

限制势的深度取决于分子的性质以及实验上能够实现的磁场大小。该磁场由一对平行的圆形超导线圈产生，两线圈中的电流方向相反。使用高质量磁体可以产生 ~ 5 T [30] 的磁场。处理腔室的直径为 8 cm（见本文图 1）。因此，四极磁场的梯度为 125 T $\cdot$ m^{-1}。利用先进技术可产生高达 250 T $\cdot$ m^{-1} [31] 的梯度。

阱深是极小点 $x = y = z = 0$ 与处理腔室边缘 $x = y = z = 1$之间的势能（2.26）之差:

$$\begin{aligned} \triangle V &= \frac{g_S}{2}\beta_L\varpi\sqrt{\frac{3}{2}} \\ &- \alpha_L\beta_L M\sqrt{\frac{3}{2}} \\ &+ \beta_L^2\left[A_1 - A_2\frac{2J^2+2J-1-2M^2}{(2J-1)(2J+3)}\right]\frac{3}{2}. \end{aligned} \tag{2.31}$$

我们来分析这三项。要进行粗略估算，只需将因子β_L、 $\alpha_L\beta_L$和 β_L^2 相乘，并以开尔文表示能量原子单位： $\mathcal{U}_K = 315775.23$ K。主导参数（2.5）包含乘积 $B_1 D$。它等于以 [30]表示的阱深$B_{\rm trap}$ 。本段后续取 $B_{\rm trap} = 5$ T。因此，式（2.31）中第一项的估算结果为 ~ 6.7 K。

线性塞曼效应与因子 $\alpha_L\beta_L$成正比，其数值比自旋贡献小四个数量级。势能平衡中的二次塞曼贡献与因子 β_L^2成正比，其数值可接近线性贡献的五分之一。

同核分子的 α_L (2.14)值（g_R 因子 [3, 见式（3.58）]）列于表1中。如果分子跃迁到零自旋的稳定能级，因禁势（2.26）的第一项便会消失。阱深会降至数百微开尔文（见表1第五列）。如果将无自旋线型分子制备在转动角动量垂直于量子化轴的状态，那么因禁势（2.26）的第二项也会消失。整个分子将在谐势中运动。

No.	分子	原子序数 Z	$\alpha_L \times 10^{-4}$	深度，μ开尔文
1.	氢 H_2	1	2.72309	1829.13
2.	氮 N_2	7	1.37085	920.814
3.	氧 O_2	8	1.37155	921.285
4.	氟 F_2	9	1.28898	865.826
5.	氯 Cl_2	17	1.31526	883.478
6.	溴 Br_2	35	1.20147	807.041
7.	碘 I_2	53	1.14554	769.474

表 1：同核分子阱深数值的估算。磁场 $B_{\rm trap} = 5$ T 由于自旋塞曼效应产生阱深 ~ 6.7 K（$\beta_L = 2.12718 \cdot 10^{-5}$）。线性塞曼效应导致的贡献列于第五行。二次塞曼效应产生 ~ 142.8 μK 的修正。

3 数值模拟

哈密顿量 (2.30) 可改写为

$$H_{\rm cm}(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \frac{1}{\beta_L}\overline{H}_{\rm cm}(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V_{\rm cm}(\mathbf{x}), \tag{3.1}$$

其中

$$V_{\rm cm}(\mathbf{x}) = \sigma\sqrt{z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}} + 2\delta\left(z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}\right), \tag{3.2}$$

and

$$\sigma = \frac{g_s}{2}\left(a^* a - c^* c\right) - \alpha_L M, \quad \delta = \frac{\beta_L}{2}\left[A_1 - A_2\frac{2J^2+2J-1-2M^2}{(2J-1)(2J+3)}\right]. \tag{3.3}$$

我们近似认为 $g_s = 2$。

定义于 [26, eq. (A.27)] 中的演化无量纲参数被一个新的时间参数取代

$$\tau = \sqrt{\beta_L}\overline{\tau} = \sqrt{\beta_L}\sqrt{\frac{M}{m_e}}\frac{\hbar}{a_0 M D}t.$$

到目前为止，点号表示对 τ 求导，而动量 p_i [26,eq. (A.26)] 变为 $p_i/\sqrt{\beta_L}$，其中 $i = x, y, z$。

本节中的数值计算采用 $\alpha_L = 2.72309 \cdot 10^{-4}$和 β_L =2.12718·10^{-5}，对应于氢分子。我们还选择 $a^*a - c^*c = 1/2$和数值 $A_1 = 0.5691906099701544$, $A_2 = 0.1665675408030196$，对应于氢的振动基态，见附录 A 中的式 (A.22)。我们给出数值模拟在数值 $J = 10$ 和 $M = -10$下的结果。所有这些数值给出系数 $\sigma = 0.502723$ 和 $\delta = 6.01911 \cdot 10^{-6}$，以及时间标度 $t = 2.0812 \cdot 10^{-4}\tau$ (s)。

首先，我们通过庞加莱截面法分析具有不同初始条件的轨迹，直观地展示整体动力学，参见例如 [32, 第 7]章。为此，采用柱坐标 (r, z, φ) 较为方便，其中 $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$，哈密顿量 (3.1) 可写为

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left(p_r^2 + p_z^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}\right) + \frac{\sigma}{2}\sqrt{r^2 + 4z^2} + \frac{\delta}{2}\left(r^2 + 4z^2\right). \tag{3.4}$$

由于磁场具有轴对称性，φ 是一个循环变量，相应的动量 $p_\varphi = r^2\dot{\varphi}$ 是一个运动常数。因此，我们将系统约化为一个具有两个自由度、参数为 p_φ的系统。

对于给定的能量值 h，我们考虑等能面

$$M_h = \{(r, z, p_r, p_z) \in \mathbb{R}^4 \mid \mathcal{H}(r, z, p_r, p_z) = h\},$$

其中 H 由 (3.4) 给出，而 p_φ 被视为参数。

将系统限制在该等能面上后，系统变为三维；因此，我们可以应用庞加莱截面法来研究其动力学。这种方法能够对系统的整体性质进行定性研究。

我们选择 $z = 0$ 作为截面平面，其坐标为（r，p_r）。对于给定的初始条件，通过数值计算得到轨迹。我们标记轨迹与该平面的交点，但仅显示满足 $p_z > 0$ 的点。图中给出了 $p_\varphi = \frac{1}{100}$的截面计算结果。需要注意的是，等能面 M_h 是有界的，因此粒子的运动区域始终有界，且区域大小取决于粒子的能量。

图1展示了一组由四个截面组成的序列。对于较小的能量 $h = 0.03$（0.4201 K），稳定周期解对应于图1(a)所示截面中心的一个点。围绕该点的椭圆对应拟周期解。这些椭圆是截面平面与不变环面的交线。在每个环面上，运动都是拟周期的，其特征由两个频率 ω_1 和ω_2决定。如果这两个频率之比为无理数，则解会稠密地充满环面。如果 $\omega_1/\omega_2 = l/k$ 是有理数，则整个环面由周期解充满。这样的周期解在截面上仅对应有限个点的序列。人们可以

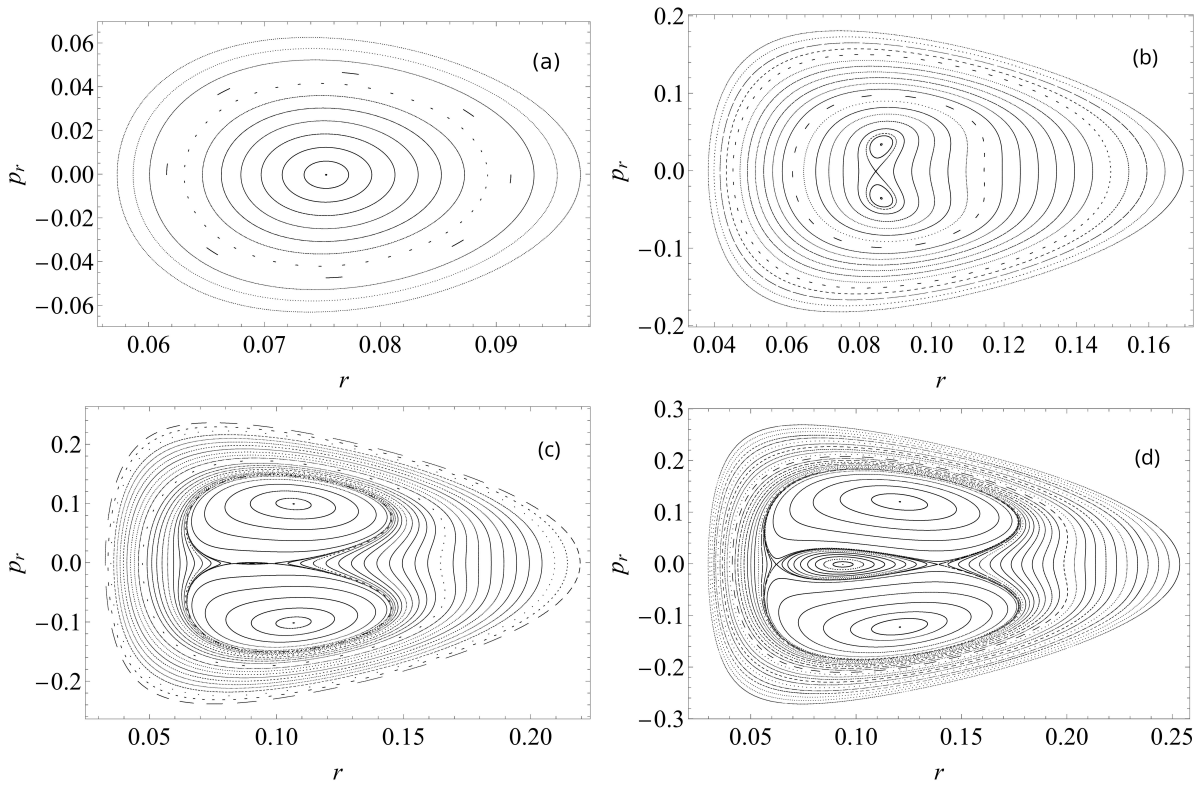

图 1：不同能量值 h 下，参数 $\sigma = 0.502723$ 和 $\delta = 0.0000179305$, $p_\varphi = \frac{1}{100}$对应的庞加莱截面。截面平面 $z = 0$ 以及轨迹的方向$p_z > 0$。各子图中的能量和温度值：(a) $h = 0.03$ (0.4201 K)；(b) $h = 0.0449$(0.6288 K)；(c) $h = 0.057$ (0.7983 K)；(d) $h = 0.065$ (0.9103 K)。

请注意，点的密度会随椭圆大小而变化。这表明 ω_1/ω_2 并非常数。

随着能量增加，系统的动力学会发生定性变化。上文提到的中心周期解失去稳定性，附近出现两个新的稳定周期解；见1(b)。它们都被不变环面包围，形成典型的“8字形”结构。

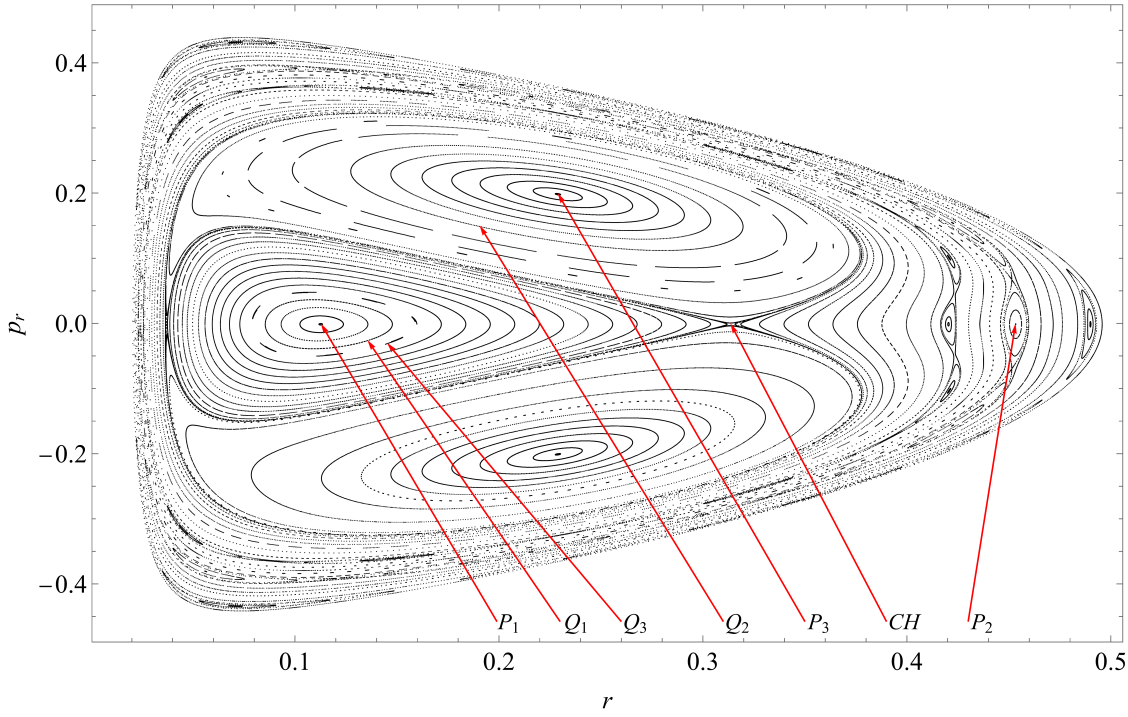

图2：参数 $\sigma = 0.502723$ 和 $\delta = 0.0000179305$、 $p_\varphi = \frac{1}{100}$以及能量值 $h = 0.125$ （1.7507 K）对应的庞加莱截面。截面平面 $z = 0$ 以及轨迹的方向 $p_z > 0$。

能量进一步增加会导致下一次分岔。此时，中心不稳定周期解分裂为两个不稳定周期解和一个稳定周期解；见图1(c)和1(d)，其中展示了具有三个稳定周期解和两个不稳定周期解的主导中心结构。

对于 $h = 0.125$ (1.7507 K)，运动区域的大小约等于陷阱的大小。该能量下的截面如图 2 所示。显然，上文提到的中心结构主导了所有特征。对于这一能量值，我们还可以发现一些很小的区域，在其中可以观察到系统的混沌行为；见图 3。这是系统不可积性的数值证据。

除了展示动力学全局定性性质的庞加莱截面之外，在空间中呈现粒子轨迹 (x, y, z) 也很方便。让我们从图2的截面中选取一些由 P_1、 P_2、 Q_1、 Q_2、 Q_3 和 CH 表示的点，并绘制相应的轨迹。因此，我们用以下七组初始条件，对由哈密顿量(3.1)生成的哈密顿运动方程进行数值积分：

P_1: $x(0) = 0.112615$, $y(0) = z(0) = 0$, $p_x(0) = 0$, $p_y(0) = 0.0887981$ and $p_z(0) = 0.430698$;

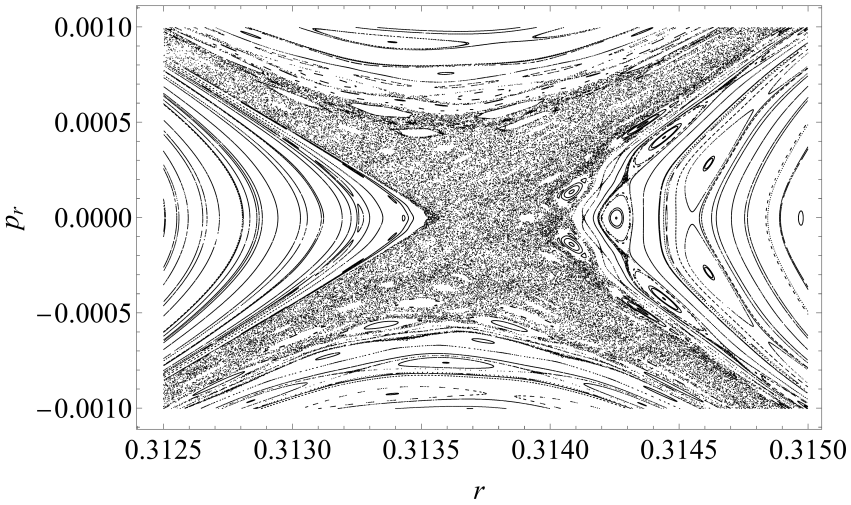

图3： 图2中交点 CH 附近混沌区域的放大图 .

P_2： $x(0) = 0.45325$， $y(0) = z(0) = 0$， $p_x(0) = 0$， $p_y(0) = 0.0220629$ 和 $p_z(0) = 0.14714$；P_3： $x(0) = 0.228784$， $y(0) = z(0) = 0$， $p_x(0) = 0.199993$， $p_y(0) = 0.0437094$和$p_z(0) = 0.305084$；Q_1： $x(0) = 0.13547$， $y(0) = z(0) = 0$， $p_x(0) = -0.0254729$， $p_y(0) = 0.0738171$和$p_z(0) = 0.419283$；Q_2： $x(0) = 0.190487$， $y(0) = z(0) = 0$， $p_x(0) = 0.150348$， $p_y(0) = 0.052497$ 和 $p_z(0) =$0.358994；Q_3： $x(0) = 0.145072$， $y(0) = z(0) = 0$， $p_x(0) = -0.0297181$， $p_y(0) = 0.0689313$ 和$p_z(0) = 0.414046$；CH： $x(0) = 0.313439$， $y(0) = z(0) = 0$， $p_x(0) = 0.000209503$， $p_y(0) = 0.0319041$和$p_z(0) = 0.302336$。

图4展示了图2中以椭圆点 P_1、 P_2 和 P_3 表示的轨道，因此它们在平面（r， z）上是周期的，见左栏；但相应的空间轨迹并非周期的，而是准周期的，如右栏所示。

接下来的图5展示了图2中属于准周期轨道 Q_1、 Q_2 和 Q_3的解，因此它们在平面（r， z）上是准周期的，见左栏。相应的空间轨迹也具有准周期性；然而，右栏所示的模式相当复杂。轨道 Q_1 和 Q_2 是围绕椭圆周期轨道 P_1 和 P_2的简单准周期轨道。Q_3 的轨迹位于一个环面上，该环面围绕着一个共振周期轨道（1:7共振）。

图6展示了图2中来自双曲周期解邻域混沌层的一个轨道 CH 所对应的轨迹。可见的散布点属于更复杂的轨迹；图6中给出了一个示例，并附有该轨道对应的庞加莱截面，见图6(a)。需要注意的是，这个混沌层非常狭窄，局限于周围的准周期轨道之间。在此图中，P_1 和 P_2 标示不稳定（双曲）周期解。稳定流形和不稳定流形

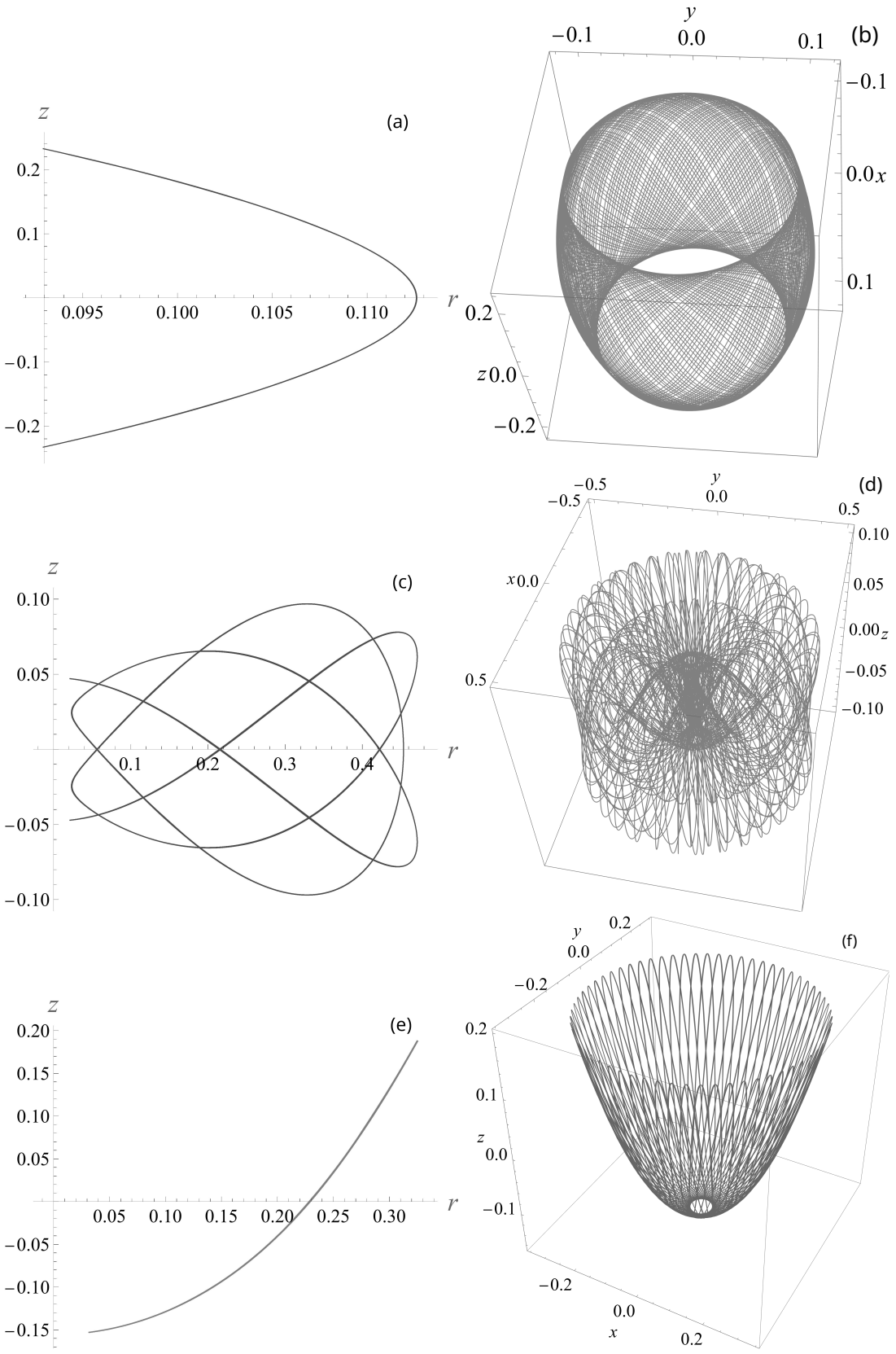

图4: 所选周期轨道的质心向量$\mathbf{x}$ 演化及积分时间 τ P_1见图2， P_2 和 P_3 。子图：（a）平面（r， z）中的轨道 P_1， $\tau = 700$；（b）空间中的轨道P_1， $\tau = 700$；（c）平面（r， z）中的轨道 P_2， $\tau = 700$；（d）空间中的轨道 P_2， $\tau = 700$；（e）平面（r， z）中的轨道 P_3， $\tau = 700$；（f）空间中的轨道 P_3， $\tau = 700$。

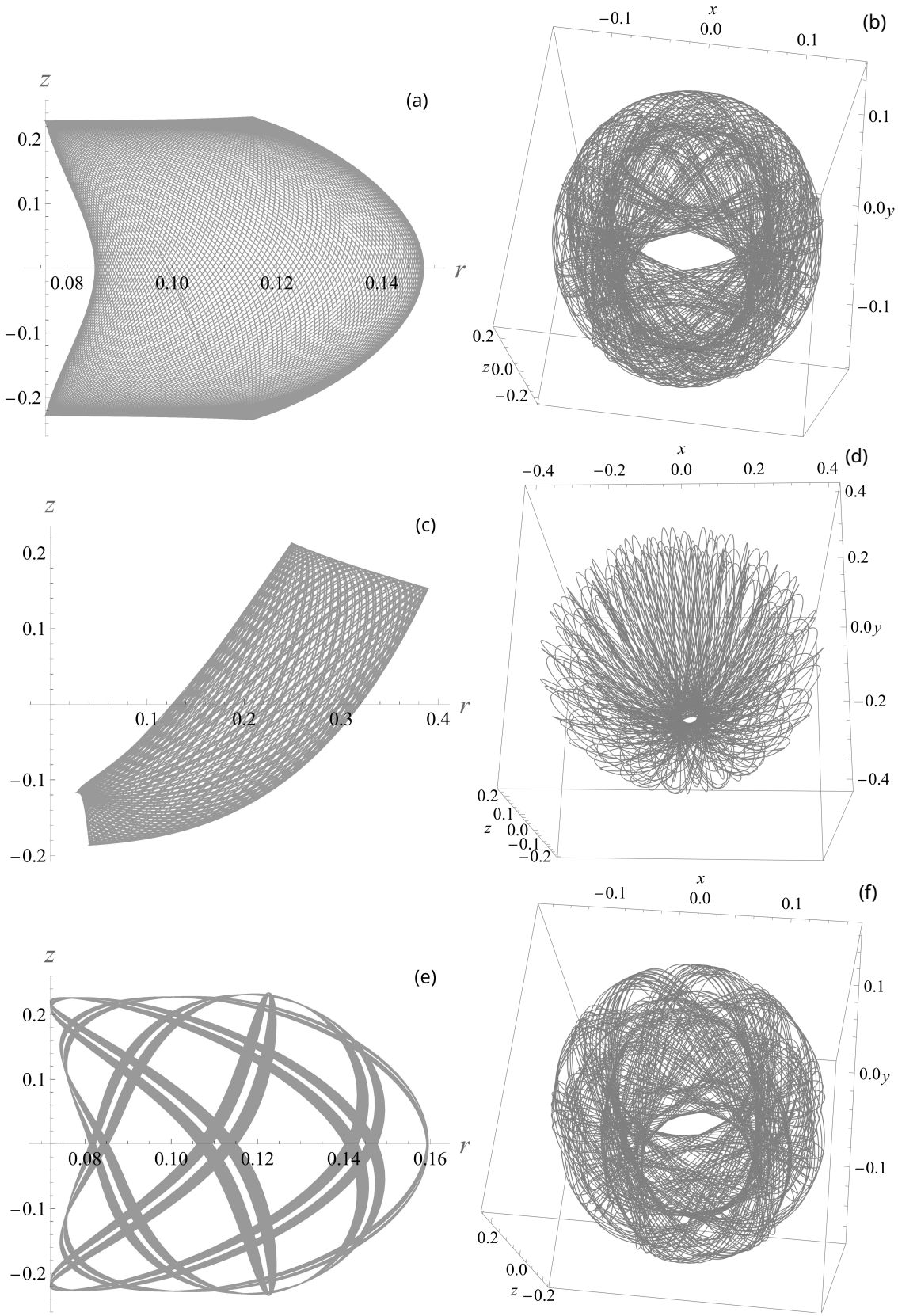

图5：图2中选定准周期轨道 Q_1、Q_2和 Q_3的质心向量x演化及积分时间 τ。子图：(a) 平面（r， z）中的轨道 Q_1， $\tau = 600$；(b) 空间中的轨道 Q_1， $\tau = 1200$；(c) 平面（r， z）中的轨道 Q_2， $\tau = 500$；(d) 空间中的轨道 Q_2， $\tau = 900$；(e) 平面（r， z）中的轨道 Q_3， $\tau = 1000$；(f) 空间中的轨道 Q_3， $\tau = 1000$。17

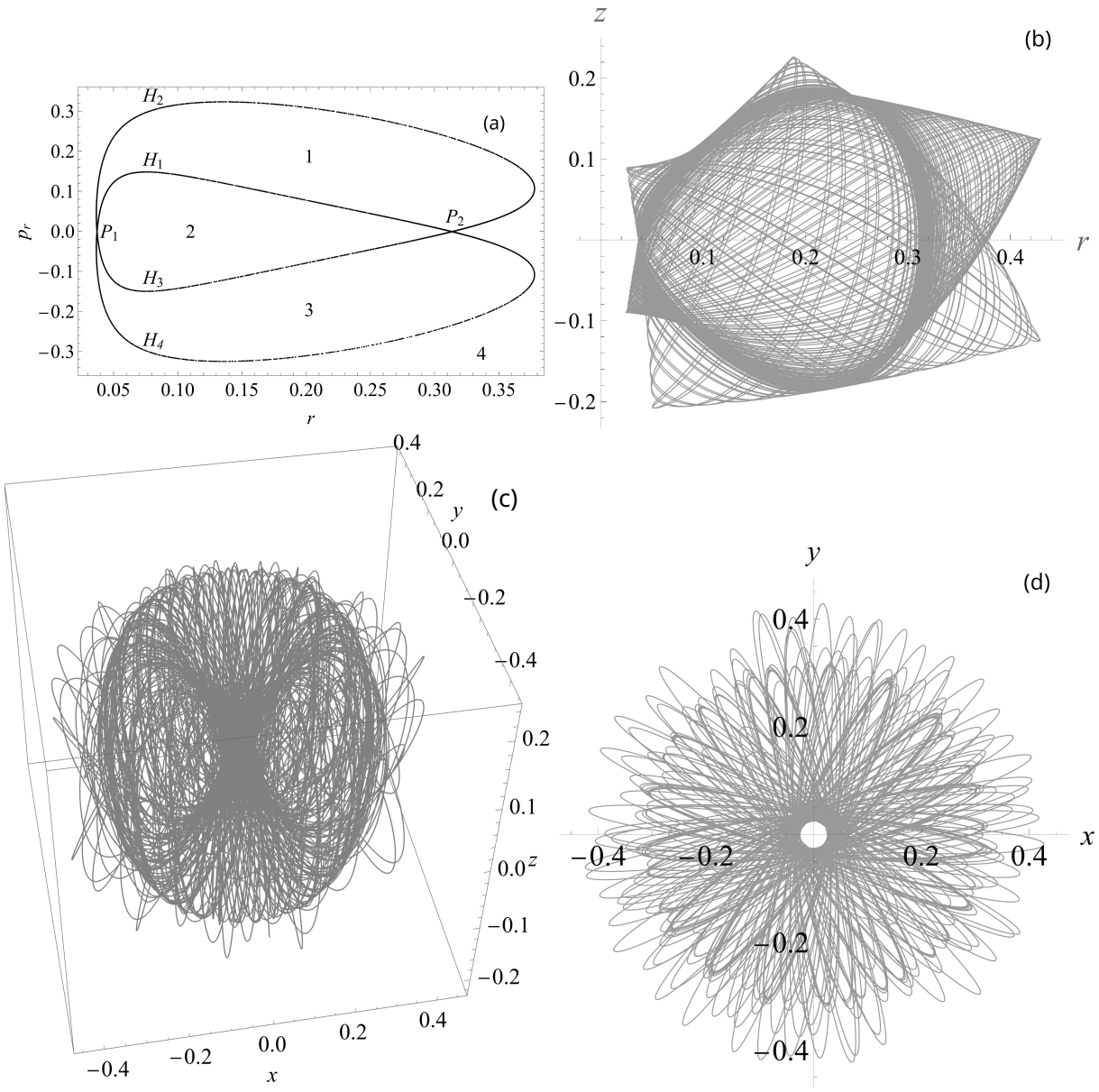

图6：图2中混沌轨道 CH 的质心向量$\mathbf{x}$ 的时间演化。子图：(a) 轨道CH的庞加莱截面；(b) 平面(r,z)中的轨道CH，$\tau = 1000$；(c) 空间(x,y,z)中的轨道CH，$\tau = 1500$；(d) 平面(x,y)中的轨道CH，$\tau = 1500$。

这些解将截面分成四个独立的区域，图中分别标记为1、2、3和4。点 P_1 和 P_2 由异宿解连接，这些异宿解在曲线 H_i附近穿过截面平面。混沌轨道可以沿着所有这些解运动。图6(c)展示了该轨迹在 $\mathbb{R}^3$ 中的行为；图6(b)和图6(d)分别展示了它在(r， z)平面和(x, y)平面上的投影。

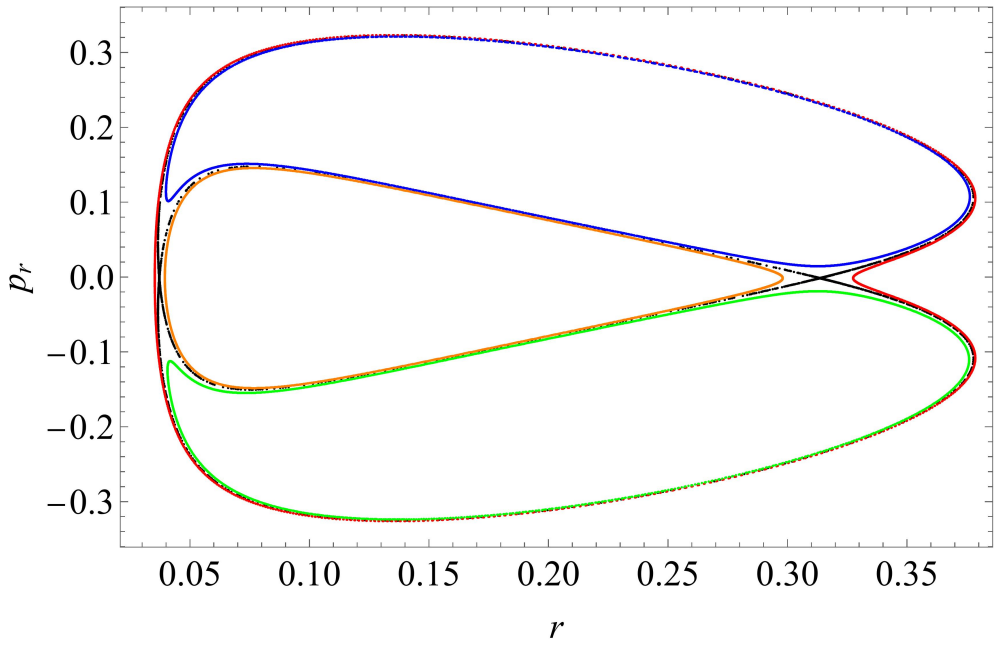

图7：图6中给出的、被捕获的混沌轨迹 CH （黑色）的庞加莱截面，它位于四条相邻的准周期轨迹之间（分别为蓝色、红色、绿色和橙色）。

图7展示了图6中的一条混沌轨迹 CH （黑色），其周围是来自四个不同区域的四条准周期轨道：右侧为红色，上方为蓝色，左侧为橙色，下方为绿色。图8绘出了这条混沌轨道右侧、上方和左侧这些周围轨迹的行为。我们没有展示其下方的周围轨道 CH （绿色）的图，因为它们是上方轨道 CH （蓝色）对应图的反射：在图8(c)中关于轴 r 反射，或在图8(d)中关于平面(x， y)反射。

在 $p_\varphi = 0$ 轨道位于空间的某个固定平面内的情况下（x， y， z）。若选择不变平面 $y = p_y = 0$，则式（3.1）中的哈密顿量 $H_{\rm cm}$ 可化简为具有两个自由度的系统，其正则变量为（x， y， p_x， p_y）。因此，我们可以用这些变量构造庞加莱截面，选择 $z = 0$ 作为截面平面；该平面内的变量为（x， p_x），轨迹的方向为 $p_z > 0$.

$p_\varphi = 0$ 的典型庞加莱截面如图 9 所示。在原点处，三个由闭合相曲线填充的区域彼此之间由 8字形鞍点分离曲线隔开。该中心区域被外围依次排列的拟周期轨道环绕，这些轨道对应于高阶共振。八极共振占据截面的大部分区域，其中有四个稳定不动点，周围环绕着稳定运动的拟周期轨道（稳定岛），而分离曲线则穿过四个不稳定不动点。

图 10 展示了其中一个点邻域的放大图。可以看到沿分离曲线分布的狭窄混沌层，这是数值证据，表明非-

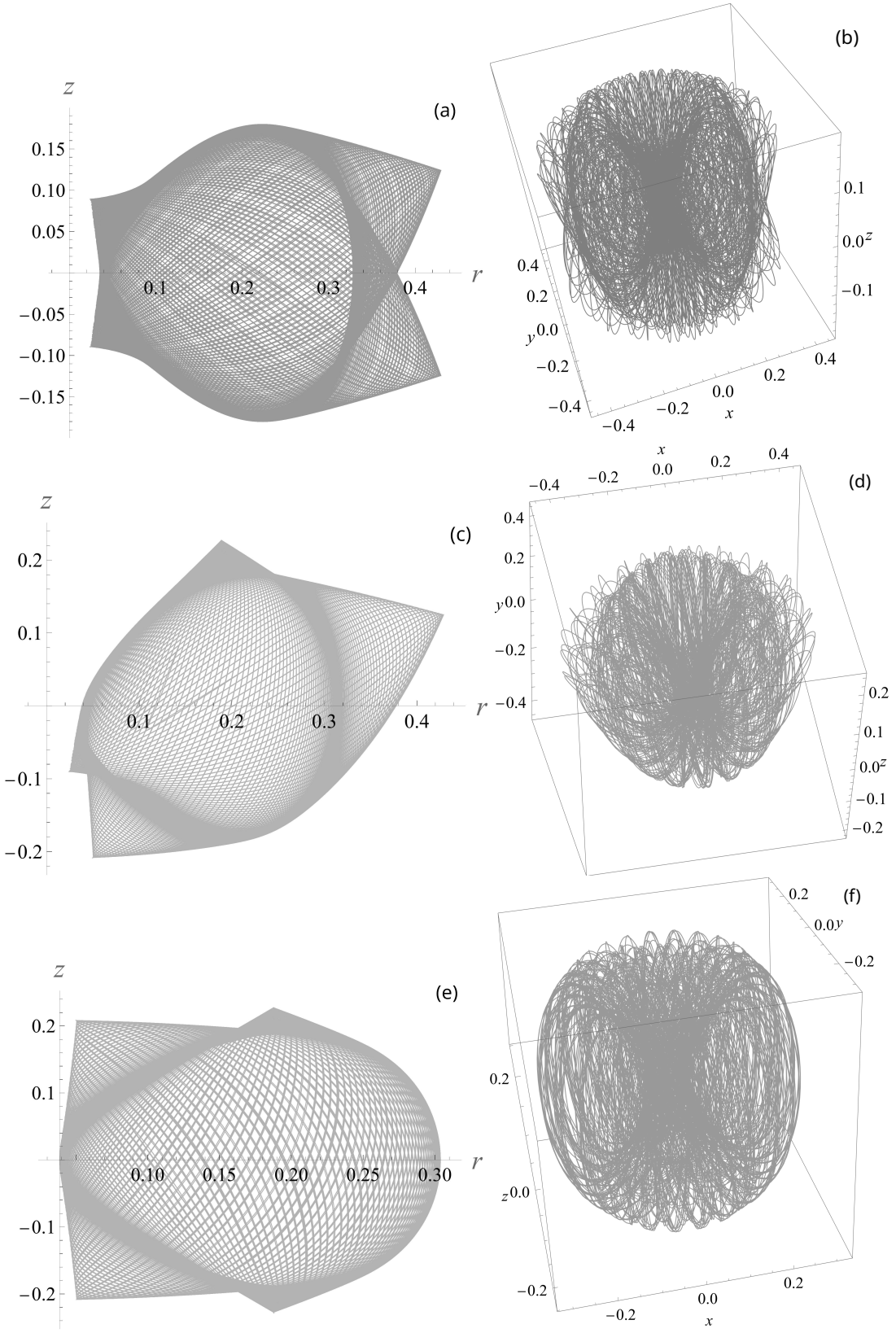

图8：质心向量 x 的时间演化，以及右侧、上方和左侧靠近混沌轨道 CH 的准周期轨道的积分时间 τ。子图：(a) 位于平面 (r, z) 中的“红色”轨道，$\tau = 1000$；(b) 位于 $\mathbb{R}^3$, $\tau = 1500$ 中的“红色”轨道；(c) 位于平面 (r, z) 中的“蓝色”轨道，$\tau = 1000$；(d) 位于 $\mathbb{R}^3$, $\tau = 1500$ 中的“蓝色”轨道；(e) 位于平面 (r, z) 中的“橙色”轨道 $\tau = 1000$；(f) 位于 $\mathbb{R}^3$, $\tau = 1500$ 中的“橙色”轨道。20

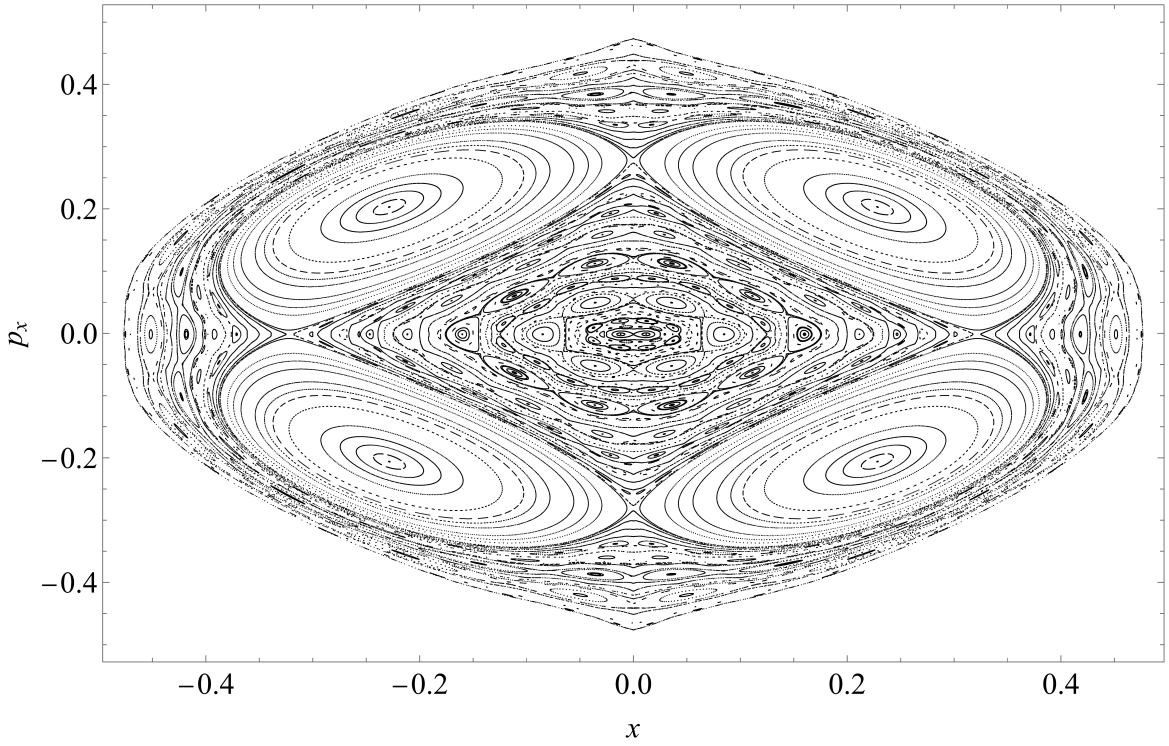

图 9： 参数 $\sigma = 0.502723$ and $\delta = 0.0000179305$、 $p_\varphi = 0$ 下的庞加莱截面，能量值为 $h = 0.125$ (1.7507 K)。截面平面 $z = 0$ ，以及轨迹的方向 $p_z > 0$。

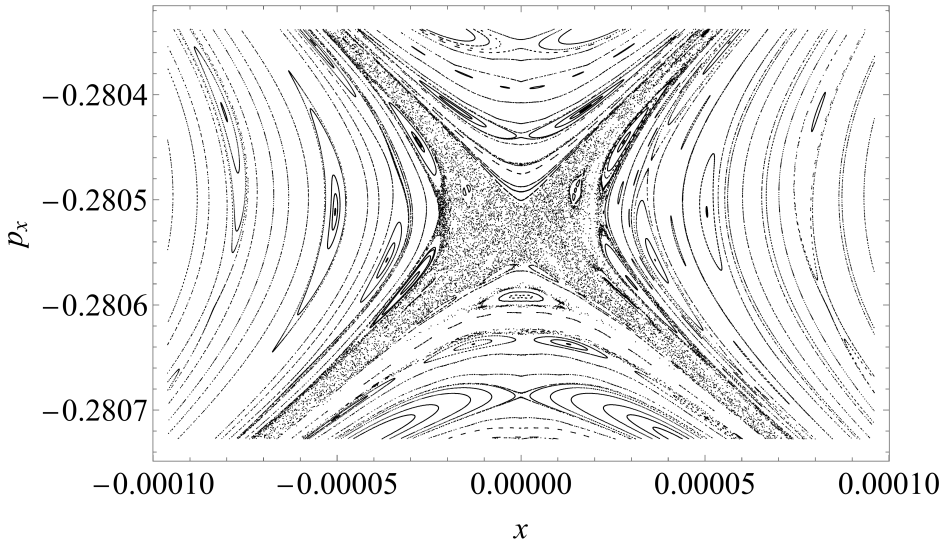

图 10： 图 9 中不稳定周期解附近混沌区域的放大图。

可积性。

对于不同的能量值，哈密顿量 (3.4) 在 $p_\varphi = 0$ 下的截面非常相似。这是因为 $\sigma \gg \delta$，而势能中的平方根项 $\sqrt{z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}}$ 占主导。因此，具有标准动能和这一占主导地位的一次齐次势能的哈密顿量是齐次的；因而它只有两个不同的等能面：0 和一个非零值。

对于 J、 M、 $\varpi = c^*c - a^*a$、 A_1和 A_2的不同取值，经过一定的坐标重标度（有时还包括时间重标度）后，所得图形相似。

4 可积性分析及不变子流形上的解

上一节所展示的特定轨迹的运动方程数值积分结果以及庞加莱截面，强烈促使我们对所研究的系统进行更深入的定性研究。最重要的问题是，所得的运动方程是否可解或可积。本节将证明它们具有不可积性。在着手证明这一事实之前，我们先作几点说明。

一般而言，要明确判定给定系统是可积的还是不可积的，并非易事。此外，对于不可积系统，研究部分可积性、不变集的存在性，或特定类别的特解，同样十分重要。下面，我们总结电磁阱的主要可积性结果。

对于具有四极静电势、且沿固定的 z 轴方向施加强恒定磁场的理想彭宁阱，点电荷的运动由束缚轨道组成，这些轨道是三种具有不同频率的简谐振荡的叠加：轴向、回旋和磁控；参见例如 [33, 第 3.1 节。3], [34, 章。 6], 或[35]。因此，该系统具有三个函数独立的第一积分，因而是可积的：(i) 哈密顿量，它分离为轴向（沿 z）部分和径向（在 (x, y) 平面内）部分；以及 (ii) 角动量的第三分量。

保罗阱也存在类似的可解性问题。在保罗阱中，不再使用恒定磁场，而是在静态（直流）四极势上叠加一个由简谐（交流）电压驱动的附加四极势；参见 [36, 37]或 [33, 第 2]章。该势的梯度给出作用力，而牛顿方程的每个笛卡尔分量都成为一个马丢方程。因此，该模型包含三个具有时间周期系数的线性二阶微分方程。根据弗洛凯理论，这类系统原则上可以变换为常系数系统，因此（形式上）是可积的。此外，如 [38, 第 81–82]页所述，可以为每个马丢方程构造形式第一积分。这种可积性仍然只是形式上的，因为所需的变换尚不明确，而且相应的积分级数可能不收敛。因此，稳定性分析依赖数值方法。

然而，当在电场或磁场展开中纳入高阶项以模拟阱缺陷，或考虑更复杂的几何结构时，系统通常会变得不可积。例如，在磁性伊奥菲–普里查德阱中，除一对亥姆霍兹构型的线圈外，还会垂直于线圈轴添加四根直平行导线（相邻导线中的电流方向相反），每

根导线都会产生随空间坐标呈线性和二次变化的磁场分量，参见例如 [39]。其他具有高阶多极结构的陷阱，例如球形六极“棒球”阱 [24, 40]或镜像阱 [41], ，同样会破坏可积性。

其他物理效应也可能破坏可积性；例如， [42] 证明了在相对论框架下，带电粒子在理想彭宁阱中的运动是不可积的。

一般而言，即使对可积模型施加微小微扰，也可能使其变得不可积，KAM理论对此作了说明。该理论定性描述了微小微扰对可积系统的影响（几乎所有不变环面的持存），参见 [38, 第2节3]或 [43, 第 2]章。因此，人们会采用近似方法；对于磁场缓慢变化的电磁阱，特别适用的一种方法是导引中心近似，参见 [41]。

在电磁场中用偶极子建模的极性粒子，其动力学研究要复杂得多，因为除了质心的平动之外，还需要研究偶极子的转动，而且一般而言，这些运动方程彼此耦合，参见例如[27]。不过，半经典分析会对偶极子变量进行平均，使运动方程简化为描述质心运动的方程，与上文所述电磁阱中点电荷的情况相同。

在本节中，我们再次对时间进行缩放，使得 $\sigma = 1$ ，并引入参数$\eta = \frac{\delta}{\sigma}$。于是，哈密顿量 (3.1) 可写为

$$H = T + V, \quad T = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right), \; V = \sqrt{z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}} + 2\eta\left(z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}\right). \quad (4.1)$$

我们将分析该哈密顿系统的可积性。注意，势能 V 由两个齐次项组成

$$V_1 = \sqrt{z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}}, \quad V_2 = 2\eta\left(z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}\right), \quad (4.2)$$

它们分别是关于坐标的 1 次和 2 次齐次函数。我们利用这样一个推论：整个哈密顿量 $H = T + V$ 在刘维尔意义下可积，意味着仅包含势能最低阶分量和最高阶分量的两个哈密顿量在刘维尔意义下也可积

$$H_1 = T + V_1, \quad H_2 = T + V_2. \quad (4.3)$$

哈密顿量 H_2 因为在笛卡尔坐标下可分离，所以是可积的；但对于H_1 ，我们可以采用附录B中定理1所阐述的、基于变分方程微分伽罗瓦群的必要可积性条件。该定理针对满足某个多项式方程 $F(\boldsymbol{q}, u) = 0$（见式（B.4））的齐次代数势 u。这里有 $u = V_1$，而多项式 $F(\boldsymbol{q}, u) = f_0(\boldsymbol{q}) + f_1(\boldsymbol{q})u + f_2(\boldsymbol{q})u^2$ 是一个二次多项式，其系数为 $f_0(\boldsymbol{q}) = -\left(z^2 + \frac{x^2+y^2}{4}\right)$、$f_1(\boldsymbol{q}) = 0$ 和 $f_2(\boldsymbol{q}) = 1$。势能 V_1 有一个达布点 $\boldsymbol{d} = (\pm 1/2, 0, 0)$，定义见式（B.3）；并且 $c = V_1(\boldsymbol{d}) = \frac{1}{2}$ 满足$F(\boldsymbol{d}, c) = 0$、 $\partial_u F(\boldsymbol{d}, c) \neq 0$、 $\partial_{\boldsymbol{q}} F(\boldsymbol{d}, c) = -\partial_u F(\underline{\boldsymbol{d}}, c)\boldsymbol{d}$。该达布点处的海森矩阵

为 $V_1''(\boldsymbol{d}) = \mathrm{diag}(0,1,4)$。根据定理1，如果由$H_1$ 定义的哈密顿系统在刘维尔意义下可积，那么对于任何满足假设的达布点，情形1或情形2必有一个成立。然而，(B.6)中定义的 $k = 1 \in \mathcal{K}_2$和 $\lambda = 4 \in \bigcup_{i=1}^{6} \mathcal{I}_i(1)$, 均不成立，其中当 $j = 1, .., 6$ 时，集合 $\mathcal{I}_i(k)$ 由式（B.5）给出。因此，哈密顿系统 H_1 ，以及由此可知，式（4.1）中的 H ，在刘维尔意义下不可积。

虽然式 (4.1) 中的哈密顿量 H 不可积，但它有两个不变子流形。为分析受限于这些子流形的动力学，引入柱坐标 $(r,\ z,\ \varphi)$ 更为方便， H 变换为式 (3.4) 中给出的 $\mathcal{H}$ ，其哈密顿方程可写为

$$\begin{aligned} \dot{r} &= p_r, \quad & \dot{p}_r &= \frac{p_\varphi^2}{r^3} - \eta r - \frac{r}{2\sqrt{r^2+4z^2}}, \\ \dot{z} &= p_z, \quad & \dot{p}_z &= -4\eta z - \frac{2z}{\sqrt{r^2+4z^2}}, \\ \dot{\varphi} &= \frac{p_\varphi}{r^2}, \quad & \dot{p}_\varphi &= 0. \end{aligned} \tag{4.4}$$

如上所述，角度 φ 是一个循环变量，相应的动量$p_\varphi = r^2\dot{\varphi}$ 是一个运动常数。

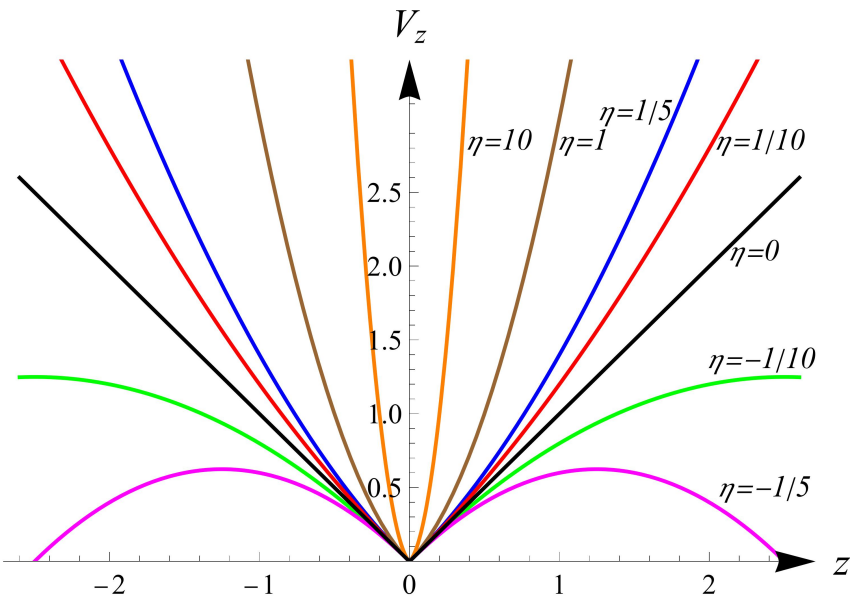

图11：势能 $V_z(z) = 2\eta z^2 + |z|$ 以及 η的不同取值对应的图像。

第一个不变子空间由 $x = y = p_x = p_y = 0$定义，粒子沿对称轴 z 运动，其微分方程为

$$\ddot{z} = -4\eta z - \operatorname{sgn} z. \tag{4.5}$$

该方程具有如下形式的第一积分

$$H_z = \frac{\dot{z}^2}{2} + V_z, \quad V_z = 2\eta z^2 + |z|. \tag{4.6}$$

势能 V_z 在不同参数值 η 下的图像见图11。对于固定的 $H_z = h_z$，该方程可通过求积求解

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \int \frac{1}{\sqrt{h_z - 2\eta z^2 - |z|}} dz = t + C_z, \tag{4.7}$$

（见方程 (C.18)-(C.20)）。

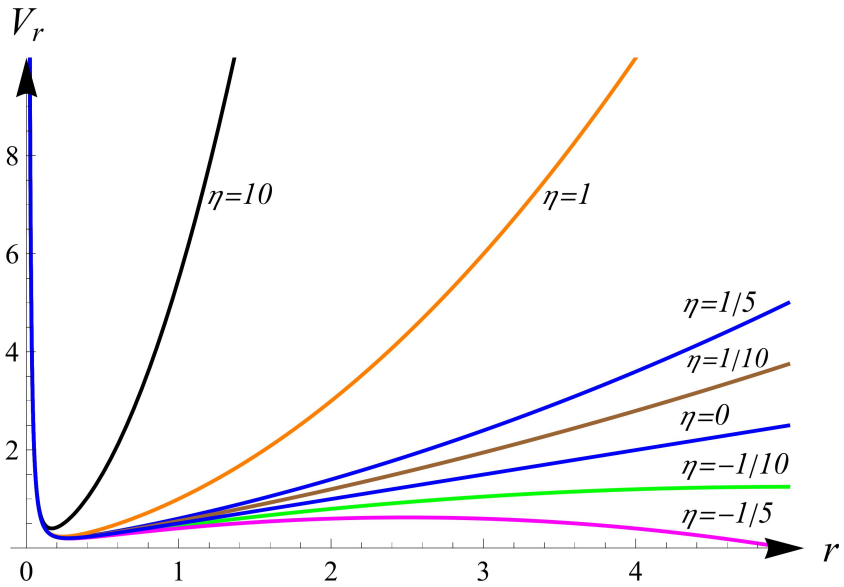

图12： $V_r(r)$ 的有效势图 $= \frac{p_\varphi^2}{2r^2} + \frac{\eta r^2}{2} + \frac{r}{2}$ 在 $p_\varphi = \frac{1}{10}$ 时以及 η 的各种取值下。

第二不变流形由方程 $z = p_z = 0$ 和

$$\ddot{r} = \frac{p_\varphi^2}{r^3} - \eta r - \frac{1}{2}.$$

它具有以下第一积分

$$H_r = \frac{1}{2}\dot{r}^2 + V_r, \quad V_r = \frac{p_\varphi^2}{2r^2} + \frac{\eta r^2}{2} + \frac{r}{2}. \tag{4.8}$$

当 $p_\varphi = \frac{1}{10}$ 取非零固定值时， η 的各种取值对应的有效势 V_r 图如图12所示。

为了求出该势能的极小值，我们分析其导数

$$V_r'(r) = \frac{2\eta r^4 + r^3 - 2c_z^2}{2r^3}.$$

V_r 的极值点位于分子零点之中。该分子的判别式为

$$\mathrm{disc}(2\eta r^4 + r^3 - 2c_z^2, r) = -4c_z^4(27 + 4096 c_z^2 \eta^3),$$

因此，当 $\eta > -\frac{3}{16 c_z^{2/3}}$ 为负时，意味着 $V_r'(r)$ 有两个不同的实根，但只有一个为正，这给出了全局最小值，如图12所示。正根由附录C中的公式（C.12）给出。

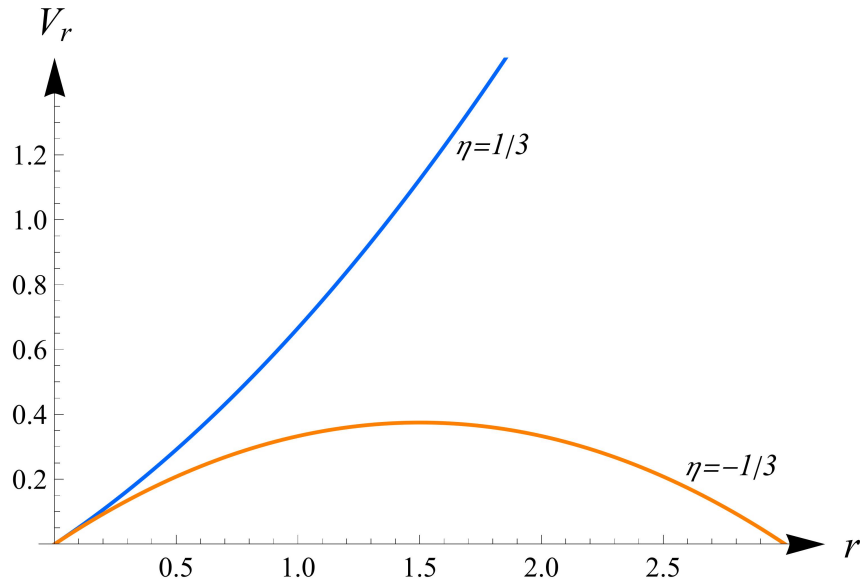

图 13：有效势 $V_r(r) = \frac{r}{2}(1+\eta r)$ 的图，其中 $p_\varphi = 0$ 和 $\eta = \pm \frac{1}{3}$。

对于 $p_\varphi = 0$，有效势可因式分解为 $V_r = \frac{r}{2}(1+\eta r)$。因此，根据 η的符号，其图像要么是顶点位于 $r = 0$ 的开口向上的抛物线，要么是经过$r = 0$ 且在 $r = -\frac{1}{2\eta}$ 处取得最大值的开口向下的抛物线，见图13。

考虑情况 $p_\varphi \neq 0$。观察图12可知，对于第一积分 H_r 的固定值 $h_r > \min V_r(r)$，距离 $r(t)$ 会在一定区间内振荡，其转向点满足 $\dot{r} = 0$，即 $V_r = h_r$ （见附录C，式(C.8)）。由第一积分（4.8）可得以下表达式

$$0 = \dot{r}^2 = 2(h_r - V_r(r)) = 2h_r - \frac{p_\varphi^2}{r^2} - \eta r^2 - r = -\frac{1}{r^2}[\eta r^4 + r^3 - 2h_r r^2 + p_\varphi^2] \tag{4.9}$$

方括号中的这个四次多项式应有两个正实根，其中一个记为 u。然后由式（4.9）可将 h_r 表示为 u 和其余参数的函数

$$h_r = \frac{1}{2u^2}(c_z^2 + \eta u^4 + u^3), \tag{4.10}$$

其中我们取 $p_\varphi = c_z \neq 0$。然后将此表达式代入式（4.9）中关于 $\dot{r}^2$ 的这一项，得到

$$\dot{r}^2 = 2(h_r - V_r(r)) = \frac{(r-u)}{u^2}[c_z^2(r+u) - r^2u^2(1+\eta(r+u))]. \tag{4.11}$$

可以将该微分方程的解写成以下形式

$$\begin{aligned} r(\tau) &= \frac{A_1 + B_1\,\mathrm{cn}(\omega\tau)}{A_2 + B_2\,\mathrm{cn}(\omega\tau)}, \\ A_1 &= 5c_z^2 u - u^3\left((\eta u+1)u + (4m-5)\omega^2\right), \quad B_1 = u^3\left((\eta u+1)u + (4m+1)\omega^2\right) - 5c_z^2 u, \\ A_2 &= u^2\left(u(5\eta u+2) + (5-4m)\omega^2\right) - c_z^2, \quad B_2 = c_z^2 + u^2\left((4m+1)\omega^2 - u(5\eta u+2)\right), \end{aligned} \tag{4.12}$$

其中，cn(x, m) 是模数为 m 的雅可比椭圆余弦，参数 m 和ω 满足以下方程

$$\begin{aligned} p_1 =& c_z^4 + 2c_z^2u^3(7\eta u + 1) + u^6(\eta u + 1)^2 - (16(m-1)m + 1)u^4\omega^4 = 0, \\ p_2 =& 96c_z^6 + 96c_z^4u^3(13\eta u + 2) + 2(16(m-1)m + 1)u^4\omega^4\left(\eta u^4 + u^3 - 47c_z^2\right) \\ &+ 3c_z^2u^6(32\eta u + 23) + 2(2m(16m(2m-3) + 15) + 1)u^6\omega^6 = 0. \end{aligned} \tag{4.13}$$

结　　这两个方程关于 m 的结果给出了一个关于 ω 的方程

$$\begin{aligned} &\mathrm{res}(p_1, p_2, m) = 110592u^{16}\omega^{12}\Big[u^8\omega^{12} - u^4\omega^8\left(c_z^4 + 2c_z^2u^3(7\eta u + 1) + u^6(\eta u + 1)^2\right) \\ &+ c_z^2\left(2\eta u^4 + u^3 - 2c_z^2\right)^2\left(4c_z^4\eta + c_z^2u^2(4\eta u(5 - 2\eta u) + 1) + 4u^5(\eta u + 1)^3\right)\Big] = 0. \end{aligned} \tag{4.14}$$

5 结论

本文研究了自旋1双原子分子在磁四极阱中的平动。该分子处于其 $^3\Sigma$ 电子态、深束缚振动态以及宇称确定的转动态 (2.12)。因禁势源于电子总自旋角动量和原子核轨道角动量与非均匀磁场 (1.1) 相互作用所产生的转动能。我们还计算了转动能级的二阶位移。这些位移为著名的平方根势 $\sqrt{z^2 + \rho^2/4}$ （见式 (2.26)）带来了额外的谐项 $z^2 + \rho^2/4$ 。基于自旋塞曼效应对阱深进行粗略估算，结果为 ~ 6.7 K（ $B_{\mathrm{trap}} = 5$ T [30]）。如果准稳定分子回到其无自旋态，阱深将降低至数百微开尔文（见表 1）。

我们将动能加入由上述包含线性和二次塞曼位移的谱问题导出的势能中。这得到一个支配分子平动的经典哈密顿量。

我们对这个哈密顿系统进行了详细分析。结果表明，它不可积。为了证明这一事实，除其他方法外，我们还采用了微分伽罗瓦方法。由于该系统不可积，因此可以借助近似方法或数值方法研究其动力学。我们选择了后者，并使用庞加莱截面法来获得该系统动力学的全局概览。通过对运动方程进行直接数值积分，我们概述了分子在陷阱中的可能轨迹。

这些研究的总体结论是，对于较小的能量值，分子始终被限制在一个与陷阱大小相当的区域内。此外，尽管支配该动力学的系统不可积，但混沌行为很弱，不会影响陷阱的稳定性。

致谢

本研究部分由波兰科学部长在“区域卓越倡议”计划下资助，项目编号为 RID/SP/0050/2024/1，并由波兰国家科学中心资助，资助编号为2020/39/D/ST1/01632。

处于 $^3\Sigma$ 电子态的氢分子

氢分子示意图见图14。我们使用分子固定坐标系。应用玻恩-奥本海默近似，我们将质子“固定”，使分离向量沿 z轴方向。选取坐标，使质子1位于原点，质子2位于 z 轴上、距离为 R 处，并将各粒子的坐标设定如下：$\mathbf{x}^{1p} = (0,0,0)$, $\mathbf{x}^{2p} = (0,0,R)$, $\mathbf{x}_{1e} = (r_1 \sin\vartheta_1 \cos\ \phi_1, r_1 \sin\vartheta_1 \sin\phi_1, r_1 \cos\ \vartheta_1)$，以及$\mathbf{x}_{2e} = (r_2 \sin\vartheta_2 \cos\phi_2,\ r_2 \sin\vartheta_2 \sin\phi_2, r_2 \cos\vartheta_2)$。图14所示向量具有以下分量：

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} &= \mathbf{x}_{2p} - \mathbf{x}_{1p} = (0,0,R), \\
\mathbf{r}_1 &= \mathbf{x}_{1e} - \mathbf{x}_{1p} = (r_1 \sin\vartheta_1 \cos\phi_1, r_1 \sin\vartheta_1 \sin\phi_1, r_1 \cos\vartheta_1), \\
\mathbf{r}_2 &= \mathbf{x}_{2e} - \mathbf{x}_{1p} = (r_2 \sin\vartheta_2 \cos\phi_2, r_2 \sin\vartheta_2 \sin\phi_2, r_2 \cos\vartheta_2), \\
\mathbf{r}_1' &= \mathbf{x}_{1e} - \mathbf{x}_{2p} = (r_1 \sin\vartheta_1 \cos\phi_1, r_1 \sin\vartheta_1 \sin\phi_1, r_1 \cos\vartheta_1 - R), \\
\mathbf{r}_2' &= \mathbf{x}_{2e} - \mathbf{x}_{2p} = (r_2 \sin\vartheta_2 \cos\phi_2, r_2 \sin\vartheta_2 \sin\phi_2, r_2 \cos\vartheta_2 - R).
\end{aligned} \tag{A.1}$$

波函数 (A.6) 中带撇号的自变量包含 R:

$$r_a' = \sqrt{R^2 + r_a^2 - 2 r_a R \cos\vartheta_a}\,. \tag{A.2}$$

我们引入基于能量原子单位的无量纲变量。将坐标变量按玻尔半径进行缩放，即 $R \to R/a_0$, $r_i \to r_i/a_0$。

我们采用构成氢分子 $^3\Sigma$ 电子态海特勒–伦敦近似的变分波函数：

$$\Phi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\mathbf{S}(\mathbf{s}_1.\mathbf{s}_2) \tag{A.3}$$

这意味着，我们的研究以如下变分波函数为基础：它是位置变量的空间反对称波函数与

$$\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A_- \left(\psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2') - \psi_{100}(r_1')\psi_{100}(r_2)\right), \tag{A.4}$$

以及自旋对称（三重态）态 $\mathbf{S}(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$

$$\begin{aligned}
|1,+1\rangle &= |1/2,+1/2\rangle|1/2,+1/2\rangle = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle; \\
|1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1/2,+1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle + |1/2,-1/2\rangle|1/2,+1/2\rangle\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle\right); \\
|1,-1\rangle &= |1/2,-1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle = |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

我们采用分子轨道（MO）理论，该理论认为每个电子的运动都可以用单粒子函数来描述

$$\psi_{100}(r_a) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-r_a}, \qquad \psi_{100}(r_a') = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-r_a'}. \tag{A.6}$$

试探函数 (A.3) 描述了反键分子轨道。式 (A.4) 中的归一化函数由 [25, 式 (8.60)], 给出，即 $A_- = [2(1-I^2)]^{-1/2}$。The

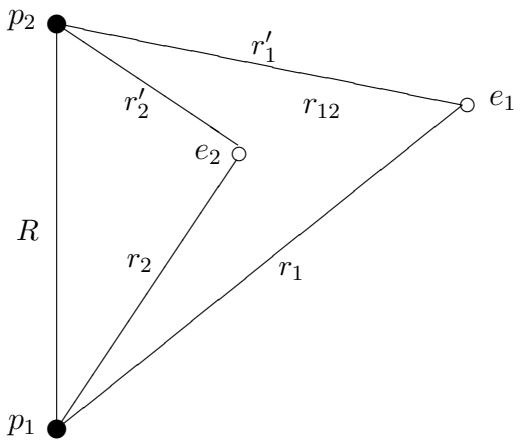

图 14: 氢分子示意图，显示电子的势能 $U_{ee}(R)$所依赖的距离。根据玻恩–奥本海默近似，质子 p_1 和 p_2 被“固定”在原位。符号 r_a 和 r_a' 分别表示第 a 个电子到第一个和第二个质子的距离。电子之间的距离为 r_{12}。

本手册也计算了重叠积分 $I(R) = \mathrm{e}^{-R}(1 + R + R^2/3)$（见 [25,式（8.43）]）。

哈密顿函数中三维矢量的分量取自由外场方向定义的坐标系。处理双原子分子时，使用体固定坐标系十分方便，其中 z轴沿核间轴方向（见图 14）。空间固定坐标系ˆ中的向量分量与体固定坐标系中的分量之间的关系由方向余弦矩阵 C [3,（见式（C.1））]给出。在本文中，我们使用经过修改的矩阵，其中方位角 φ被 $\varphi + \pi$ 替代，负极角 $-\theta$ 被 θ替代:

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} -\sin\varphi & \cos\varphi\cos\theta & \cos\varphi\sin\theta \\ \cos\varphi & \sin\varphi\cos\theta & \sin\varphi\sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}. \tag{A.7}$$

我们计算分子中受基本粒子场以及由陷阱线圈产生的外磁场（1.1）作用的电子能量。我们将哈密顿量 [26,方程（A.13）]应用于氢分子的具体情形

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} - \mathbf{b}_X\right)^2 + H_{\mathrm{free}} + H^{(1)}_{\mathrm{Zeeman}} + H^{(2)}_{\mathrm{Zeeman}}. \tag{A.8}$$

函数 $H^{(1)}$ 塞曼和 $H^{(2)}$ 塞曼包含陷阱磁场与电子及原子核的轨道角动量相互作用的贡献。我们将质心坐标（$-X/2, -Y/2, Z$）按陷阱的特征尺寸 D进行标度。我们将原子核和电子的坐标变量按玻尔半径进行标度，并以哈特里单位度量能量。我们逐步计算由函数 (A.8) 各项所引起的微扰的期望值。

A.1 一阶塞曼位移

在两个质子和两个电子的特定情形下，一阶塞曼微扰取如下形式

$$
\begin{aligned}
H^{(1)}_{\rm Zeeman} &= -\frac{1}{2}\beta_L \frac{m_e}{m_p}\left(\mathbf{B}\cdot[\mathbf{R}\times\mathbf{\Pi}]\right) \\
&- \frac{1}{4}\beta_L\left(\mathbf{B}\cdot\left\{[\mathbf{R}\times\mathbf{p}_1]-\left(2-\frac{m_e}{m_p}\right)[\mathbf{r}_1\times\mathbf{p}_1]+\frac{m_e}{m_p}[\mathbf{r}_2\times\mathbf{p}_1]\right\}\right) \\
&- \frac{1}{4}\beta_L\left(\mathbf{B}\cdot\left\{[\mathbf{R}\times\mathbf{p}_2]+\frac{m_e}{m_p}[\mathbf{r}_1\times\mathbf{p}_2]-\left(2-\frac{m_e}{m_p}\right)[\mathbf{r}_2\times\mathbf{p}_2]\right\}\right).
\end{aligned}
\tag{A.9}
$$

式 (A.9) 中的第一项描述了陷阱磁场与质子角动量之间的相互作用。用无量纲变量表示, 磁场$\mathbf{B}=(-x/2,\ -y/2,\ z)$和原子核角动量$\mathbf{L}=[\mathbf{R}\times\mathbf{\Pi}]$具有分量 (2.15)–(2.17)。其余各项是质量极化项，这是由于从实验室坐标到原子核质心坐标的变换而出现的。常数β_L 由式 (2.5) 给出。

算符$\mathbf{L}=[\mathbf{R}\times\mathbf{\Pi}]$既不作用于试探波函数 (A.3)，也不作用于原子核振动的状态。对于初态 (2.12)，转动能量位移由式 (2.22) 给出。

式 (A.9) 中的其他项定义了磁场与电子云角动量之间的相互作用。电子态 (A.3) 由原子的基态函数 (A.6) 组成。式 (A.9) 中电子的角动量如下

$$
\begin{aligned}
L^1_a &= -\mathrm{i}\left(-\sin\phi_a\frac{\partial}{\partial\vartheta_a}-\cos\phi_a\cot\vartheta_a\frac{\partial}{\partial\phi_a}\right), \\
L^2_a &= -\mathrm{i}\left(\cos\phi_a\frac{\partial}{\partial\vartheta_a}-\sin\phi_a\cot\vartheta_a\frac{\partial}{\partial\phi_a}\right), \\
L^3_a &= -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi_a}.
\end{aligned}
$$

由于波函数 $\Phi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$ 具有圆柱对称性，这些项的期望值均为零。

A.2 二阶塞曼位移

二阶塞曼微扰如下

$$
\begin{aligned}
H^{(2)}_{\rm Zeeman} &= +\frac{\beta_L^2}{16}\left(1+\frac{2m_e}{m_p}-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)[\mathbf{B}\times\mathbf{R}]^2 \\
&- \frac{\beta_L^2}{8}\left(1+\frac{m_e}{m_p}-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)\left\{([\mathbf{B}\times\mathbf{R}]\cdot[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_1])+([\mathbf{B}\times\mathbf{R}]\cdot[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_2])\right\} \\
&+ \frac{\beta_L^2}{16}\left(2+\frac{m_e}{m_p}-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)\left\{[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_1]^2+[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_2]^2\right\} \\
&+ \frac{\beta_L^2}{8}\left(\frac{m_e}{m_p}-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)([\mathbf{B}\times\mathbf{r}_1]\cdot[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_2]).
\end{aligned}
\tag{A.10}
$$

第一行中的项不作用于电子态函数 $\Phi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;\ \mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$。它描述了质子的角动量与陷阱磁场之间的相互作用。在空间固定坐标系中，第一项的形式为（2.23）。对于初态（2.12），转动能的修正由公式（2.25）给出。

下面我们来计算式（A.10）第二行各项的期望值。我们将算符夹在 $\Phi^*_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$ 和 $\Phi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$ 之间，并进行积分。在分子固定坐标系中，第二行中两个叉积的标量积如下所示

$$\begin{aligned} & ([\mathbf{B}\times\mathbf{R}]\cdot[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_a]) = \mathbf{B}^2 R r_a\cos\vartheta_a \\ - & \left(B'_x r_a\cos\phi_a\sin\vartheta_a + B'_y r_a\sin\phi_a\sin\vartheta_a + B'_z r_a\cos\vartheta_a\right)(\mathbf{B}\cdot\mathbf{R}). \end{aligned} \tag{A.11}$$

带撇号的大写字母 B 表示图 14 所示体固定坐标系中的陷阱磁场分量。与方位角的正弦和余弦成正比的项，其期望值由于球对称原子波函数（A.6）的积分 $\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi_a$ 而为零。与极角余弦成正比的项可利用以下关系进行积分

$$\langle\psi_{100}(r_a)|r_a\cos\vartheta_a|\psi_{100}(r_a)\rangle = 0, \tag{A.12}$$

$$\langle\psi_{100}(r_a)|r_a\cos\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle = \frac{1}{2}RI(R), \tag{A.13}$$

$$\langle\psi_{100}(r'_a)|r_a\cos\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle = R. \tag{A.14}$$

考虑到试探波函数已归一化，且归一化因子为 $2(1-I^2(R))$，最终得到如下结果

$$\langle\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|\sum_a([\mathbf{B}\times\mathbf{R}]\cdot[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_a])|\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\rangle = \frac{1}{2}R^2\left[\mathbf{B}^2 - B'_z(\mathbf{n}_R\mathbf{B})\right].$$

根据方向余弦矩阵 (A.7)，在实验室参考系中，带撇号的 z 分量变为

$$\begin{aligned} B'_z &= (\mathbf{n}_R\mathbf{B}) \\ &= -\frac{x}{2}\cos\varphi\sin\theta - \frac{y}{2}\sin\varphi\sin\theta + z\cos\theta. \end{aligned} \tag{A.15}$$

因此，式 (A.15) 方括号中的表达式与式 (2.23) 中的表达式一致。汇总第一项和第二项的贡献，我们得到中间结果

$$-\frac{\beta_L^2}{16}\left(1-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)\left[\mathbf{B}^2-(\mathbf{n}_R\mathbf{B})^2\right]R^2.$$

我们来考虑式 (A.10) 第四行中算符与$^3\Sigma$电子态之间的矩阵元。两个叉积的标量积中的大多数项都因对方位角积分而消失。只有以下项保留下来

$$\begin{aligned} & \langle\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|([\mathbf{B}\times\mathbf{r}_1]\cdot[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_2])|\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\rangle = \\ = & \left[\mathbf{B}^2-(\mathbf{n}_R\mathbf{B})^2\right]\langle\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|r_1\cos\vartheta_1 r_2\cos\vartheta_2|\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\rangle. \end{aligned} \tag{A.16}$$

利用式 (A.12)–(A.14)，我们计算矩阵元

$$\langle\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|r_1\cos\vartheta_1 r_2\cos\vartheta_2|\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\rangle = -\frac{R^2I^2(R)}{4(1-I^2(R))},$$

其中，$I(R)$ 是 [25, 式 (8.43)]中的重叠积分。能级位移 (A.16) 仍与表达式 (2.23) 成正比。

下面我们来计算源自式 (A.10) 第三行各项的能级修正

$$[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_a]^2 = \mathbf{B}^2r_a^2 - (B'_x\cos\phi_a\sin\vartheta_a + B'_y\sin\phi_a\sin\vartheta_a + B'_z\cos\vartheta_a)^2r_a^2.$$

混合项 $B'_xB'_y\cos\phi_a\sin\phi_a\sin^2\vartheta_a$、$B'_xB'_z\cos\phi_a\sin\vartheta_a\cos\vartheta_a$ 和 $B'_yB'_z\sin\phi_a\sin\vartheta_a\cos\vartheta_a$ 的期望值，由于对方位角 $\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi_a$ 积分时涉及原子波函数 (A.6)，均为零。

与磁场分量平方相关的期望值如下:

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2|\psi_{100}(r_a)\rangle &= 3,\\
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2\cos^2\phi_a\sin^2\vartheta_a|\psi_{100}(r_a)\rangle &= 1,\\
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2\sin^2\phi_a\sin^2\vartheta_a|\psi_{100}(r_a)\rangle &= 1,\\
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2\cos^2\vartheta_a|\psi_{100}(r_a)\rangle &= 1;
\end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= 3I(R)+\frac{1}{5}R^2X(R)+\frac{3}{10}R^2I(R),\\
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2\cos^2\phi_a\sin^2\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= I(R)+\frac{1}{15}R^2X(R),\\
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2\sin^2\phi_a\sin^2\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= I(R)+\frac{1}{15}R^2X(R),\\
\langle\psi_{100}(r_a)|r_a^2\cos^2\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= I(R)+\frac{1}{15}R^2X(R)+\frac{3}{10}R^2I(R);
\end{aligned} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{100}(r'_a)|r_a^2|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= 3+R^2,\\
\langle\psi_{100}(r'_a)|r_a^2\cos^2\phi_a\sin^2\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= 1,\\
\langle\psi_{100}(r'_a)|r_a^2\sin^2\phi_a\sin^2\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= 1,\\
\langle\psi_{100}(r'_a)|r_a^2\cos^2\vartheta_a|\psi_{100}(r'_a)\rangle &= 1+R^2;
\end{aligned} \tag{A.19}$$

经过一些代数运算，我们得到

$$\langle\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|\sum_a[\mathbf{B}\times\mathbf{r}_a]^2|\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\rangle = \tag{A.20}$$

$$= \mathbf{B}^2\left(4+\frac{3}{5}R^2+\frac{2}{15}R^2\frac{3-2X(R)I(R)}{1-I^2(R)}\right) - (\mathbf{n}_R\mathbf{B})^2\frac{R^2}{5}\left(3+\frac{2}{1-I^2(R)}\right).$$

汇总各项贡献后，最终得到

$$\begin{aligned}\langle\psi_+|H^{(2)}_{\text{Zeeman}}|\psi_+\rangle &= -\frac{\beta_L^2}{16}\left(1-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)\left[\mathbf{B}^2-(\mathbf{n}_R\mathbf{B})^2\right]R^2 \\ &- \frac{\beta_L^2}{32}\left(\frac{m_e}{m_p}-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)\left[\mathbf{B}^2-(\mathbf{n}_R\mathbf{B})^2\right]R^2\frac{I^2(R)}{1-I^2(R)} \\ &+ \frac{\beta_L^2}{16}\left(2+\frac{m_e}{m_p}-\frac{4m_e}{m_p+m_e}\right)\left\{\mathbf{B}^2\left(4+\frac{3}{5}R^2+\frac{2}{15}R^2\frac{3-2X(R)I(R)}{1-I^2(R)}\right)\right. \\ &- \left.(\mathbf{n}_R\mathbf{B})^2\frac{R^2}{5}\left(3+\frac{2}{1-I^2(R)}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{A.21}$$

解冻原子核后，两个原子会产生相对运动，这种运动可分为振动运动和轨道运动。为使二者解耦，我们采用刚性转子近似。我们将电子势展开为泰勒级数，并只保留一阶项。该项描述简谐振荡。为了设计势阱，我们使用 $f^3\Sigma_u^+4p\sigma$ 电子态的实验数据（参见氢分子的 [28], 常数）。具体而言，最低电子能量 T_e 和振动常数 ω_e 分别作为平衡点和有效弹簧常数。

为了计算质心哈密顿量（2.30）中的数值常数 A_1 和 A_2 ，我们将 R相关因子$\mathbf{B}^2$和（$\mathbf{n}_R\mathbf{B}$）^{2} 夹在振动波函数及其复共轭函数之间，并对区间 $]0,\infty[$上的结果表达式积分。我们用厄米多项式近似振动激发。经过一些代数运算，我们得到

- 振动基态:

$$A_1 = 0.5691906099701544, \quad A_2 = 0.1665675408030196\,; \tag{A.22}$$

- 1第一振动激发态:

$$A_1 = 0.5369997783542894, \quad A_2 = 0.1613113921392951\,. \tag{A.23}$$

B 齐次势可积性的微分伽罗瓦障碍

考虑具有 n 个自由度、由下列哈密顿函数支配的自然哈密顿系统

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} p_i^2 + V(\boldsymbol{q}), \tag{B.1}$$

其中 $\boldsymbol{q}=(q_1,\ \ldots\ldots,\ q_n)$ 和 $\boldsymbol{p}=(p_1,\ \ldots\ldots,\ p_n)$ 是正则坐标和动量，势能为 $V(\boldsymbol{q})$，它是一个非零整数次数 k 的齐次函数，即

$$V(\lambda q_1,\ldots,\lambda q_n) = \lambda^k V(q_1,\ldots,q_n), \quad \lambda>0.$$

一般情况下，具有齐次势的哈密顿方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{p} = -\nabla V(\boldsymbol{q}) \tag{B.2}$$

存在由代数方程的非零解 $\boldsymbol{d}$ 所确定的特殊直线解

$$\nabla V(\boldsymbol{d}) = \boldsymbol{d}, \tag{B.3}$$

称为达布点。这里， $\nabla V(\boldsymbol{q})$ 表示势能 $V(\boldsymbol{q})$ 的梯度。特解的存在使人们能够应用由分析哈密顿方程 (B.2) 的变分方程之微分伽罗瓦群性质而得到的障碍。哈密顿方程 (B.2) 存在第一积分，意味着微分伽罗瓦群存在不变量；这些方程在刘维尔意义下可积，则会导致微分伽罗瓦群的单位连通分支具有阿贝尔性。详情请见 [44]。将这些条件应用于借助达布点构造的特解所对应的变分方程，得到了一个著名定理，其中给出了 [44, 45] 所述、关于齐次势的哈密顿系统可积性的必要条件。该定理限制了势能在达布点 $V''(\boldsymbol{d})$ 处的海森矩阵本征值的允许取值。这个定理有许多应用。

然而，将微分伽罗瓦理论应用于可积性分析的框架，隐含地将所考虑的第一积分限制在坐标和动量的亚纯函数类中。但在实际应用中，会出现一些势能，它们是坐标的代数函数，即满足某个多项式方程

$$F(\boldsymbol{q}, V(\boldsymbol{q})) := \sum_{i=0}^{m} f_i(\boldsymbol{q}) V(\boldsymbol{q})^i = 0, \tag{B.4}$$

其中 $f_i(\boldsymbol{q})$ 是复多项式，且 $m > 0$。那么，我们无法分析亚纯可积性，因为该哈密顿量本身就不是亚纯的，甚至不是单值的。论文 [46] 中描述了此类系统可积性分析的复杂之处。在这里，我们只回顾在[47]中得到的可积性必要条件。为阐述本文的主要定理，我们先定义一些有理数集合

$$\begin{aligned}
\mathfrak{I}_1(k) &:= \left\{ p + \frac{k}{2} p(p-1) \mid \ p \in \mathbb{Z} \right\}, \\
\mathfrak{I}_2(k) &:= \left\{ \frac{1}{8k} \left[4k^2 \left(p + \frac{1}{2} \right)^2 - (k-2)^2 \right] \mid \ p \in \mathbb{Z} \right\}, \\
\mathfrak{I}_3(k) &:= \left\{ \frac{1}{8k} \left[4k^2 \left(p + \frac{1}{3} \right)^2 - (k-2)^2 \right] \mid \ p \in \mathbb{Z} \right\}, \\
\mathfrak{I}_4(k) &:= \left\{ \frac{1}{8k} \left[4k^2 \left(p + \frac{1}{4} \right)^2 - (k-2)^2 \right] \mid \ p \in \mathbb{Z} \right\}, \\
\mathfrak{I}_5(k) &:= \left\{ \frac{1}{8k} \left[4k^2 \left(p + \frac{1}{5} \right)^2 - (k-2)^2 \right] \mid \ p \in \mathbb{Z} \right\}, \\
\mathfrak{I}_6(k) &:= \left\{ \frac{1}{8k} \left[4k^2 \left(p + \frac{2}{5} \right)^2 - (k-2)^2 \right] \mid \ p \in \mathbb{Z} \right\}.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

定理1. 假设代数齐次势能 $V(\boldsymbol{q})$， $\boldsymbol{q}$，其次数为 $k \in \mathbb{Q}\backslash\{0\}$，由极小多项式 $F(\boldsymbol{q}, u)$ 定义，并满足以下条件：

1. 存在非零的 $\boldsymbol{d} \in \mathbb{C}^n$ 和 $c \in \mathbb{C}$，使得 $F(\boldsymbol{d}, c) = 0$, $\partial_u F(\boldsymbol{d}, c) \neq 0$,$\partial_{\boldsymbol{q}} F(\boldsymbol{d}, c) = -\partial_u F(\boldsymbol{d}, c)\boldsymbol{d}$，并且

2. 海森矩阵 $V''(\boldsymbol{d})$ 的特征值为 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$;

3. 它可积，且具有作为 M_0上的复亚纯函数的第一积分。于是

1. 或者

$$k \in \mathcal{K}_2 := \left\{ \frac{2}{2l+1} \mid l \in \mathbb{Z} \right\}, \tag{B.6}$$

2. 或者 $k \in \mathbb{Q}^\times \setminus \mathcal{K}_2$，对于这些 k 值， $V''(\boldsymbol{d})$ 的每个本征值 λ 要么属于集合 $\mathcal{I}(k) := \mathcal{I}_1(k) \cup \mathcal{I}_2(k)$，要么

(a) 若 $k = \pm\frac{3}{3l+1}$，对于某个 $l \in \mathbb{Z}$，则

$$\lambda \in \bigcup_{i=1}^{6} \mathcal{I}_i(k); \tag{B.7}$$

(*b*) 如果对于某个 $l \in \mathbb{Z}$， $k = \pm\frac{4}{4l+1}$，则

$$\lambda \in \mathcal{I}_1(k) \cup \mathcal{I}_2(k) \cup \mathcal{I}_3(k); \tag{B.8}$$

(*c*) 如果对于某个 $l \in \mathbb{Z}$，$k = \pm\frac{5}{5l+1}$，则

$$\lambda \in \mathcal{I}_1(k) \cup \mathcal{I}_2(k) \cup \mathcal{I}_3(k) \cup \mathcal{I}_5(k); \tag{B.9}$$

(*d*) 如果对于某个 $l \in \mathbb{Z}$， $k = \pm\frac{5}{5l+2}$，则

$$\lambda \in \mathcal{I}_1(k) \cup \mathcal{I}_2(k) \cup \mathcal{I}_3(k) \cup \mathcal{I}_6(k). \tag{B.10}$$

关于该定理的证明和应用，参见 [47]。

C 转向点

我们将重点研究由囚禁势的中心回复力所支配的规则运动的转向点。为简化讨论，我们对无量纲坐标进行重新标度

$$\mathrm{r} = \eta r, \qquad \mathrm{z} = \eta z, \tag{C.1}$$

以及演化参数

$$\mathrm{t} = \sqrt{\eta}\tau. \tag{C.2}$$

这些意味着对无量纲动量进行重新标度

$$\mathrm{p}_r = \sqrt{\eta} p_r, \qquad \mathrm{p}_z = \sqrt{\eta} p_z, \tag{C.3}$$

以及与循环角变量相对应的动量p_φ

$$c_z^2 = \eta^3 p_\varphi^2. \tag{C.4}$$

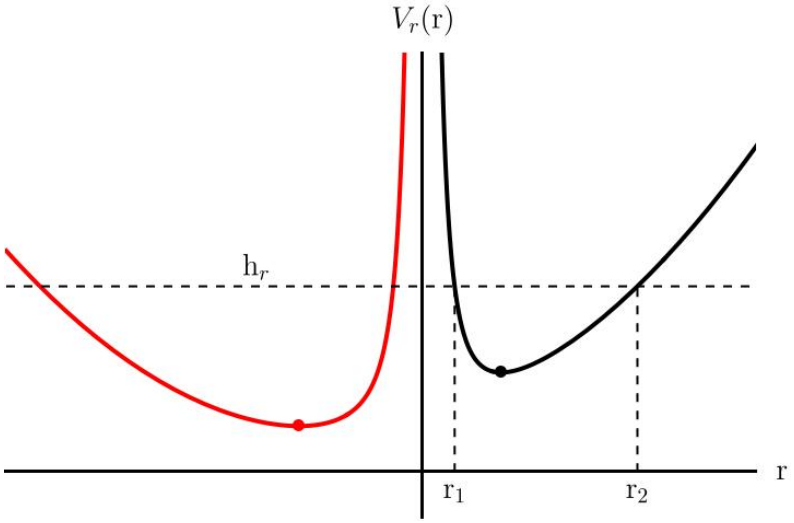

图15： 式(C.5)中定义的势能 V_r(r) 图像。非物理分支以红色标示。

C.1 流形 $z = p_z = 0$ 中的转向点

在平面 z中 $= 0$，分子在径向势(4.8中来回运动)

$$V_r(\mathrm{r}) = \frac{c_z^2}{2\mathrm{r}^2} + \frac{\mathrm{r}^2}{2} + \frac{\mathrm{r}}{2}. \tag{C.5}$$

其图像示意于图15中。

在转向点处，径向速度 $\dot{\mathrm{r}} = 0$。对于给定的径向能量 h_r，它们是四次多项式的根

$$P_4 = \mathrm{r}^4 + \mathrm{r}^3 - 2\mathrm{h}_r\mathrm{r}^2 + c_z^2, \tag{C.6}$$

其中 $\mathrm{h}_r = \eta h_r$ （参见(4.9)）。我们关注属于图15中蓝色分支的正根。对于固定的能级 h_r 和满足以下条件的角动量 c_z

$$c_z^2 < \frac{27}{512} + \frac{9}{16}\mathrm{h}_r + \mathrm{h}_r^2 - \left(\frac{9}{64} + \mathrm{h}_r\right)^{3/2}, \tag{C.7}$$

转向点 $\mathrm{r}_1 < \mathrm{r}_2$ 为

$$\mathrm{r}_1 = -\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\left(\sqrt{2m_0} - \sqrt{D_2}\right), \quad \mathrm{r}_2 = -\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\left(\sqrt{2m_0} + \sqrt{D_2}\right), \tag{C.8}$$

其中

$$D_2 = \frac{3}{4} + 4\mathrm{h}_r - 2m_0 - \left(\frac{1}{8} + \mathrm{h}_r\right)\sqrt{\frac{2}{m_0}} \tag{C.9}$$

是适当的费拉里判别式。辅助预解三次方程的实根为

$$m_0(\mathrm{h}_r, c_z) = \frac{1}{8} + \frac{2}{3}\mathrm{h}_r\left\{1 + \sqrt{1 + 3\frac{c_z^2}{\mathrm{h}_r^2}}\cos\left[\alpha(\mathrm{h}_r, c_z)\right]\right\} \tag{C.10}$$

其中三角角为

$$\alpha(\mathrm{h}_r, c_z) = \frac{1}{3}\arccos\frac{-1 + \frac{27}{16}\frac{c_z^2}{\mathrm{h}_r^3} + 9\frac{c_z^2}{\mathrm{h}_r^2}}{\left(1 + 3\frac{c_z^2}{\mathrm{h}_r^2}\right)^{3/2}}. \tag{C.11}$$

能量等能面 h_r 应大于或等于径向势 $V_r(\mathrm{r}_{\min})$ 的极值，其中极小点为

$$\mathrm{r}_{\min}(c_z) = -\frac{1}{8} - \frac{1}{2}\sqrt{2m_{00}(c_z)} + \frac{1}{2}\sqrt{D_1(c_z)}. \tag{C.12}$$

相应的费拉里判别式为

$$D_1(c_z) = \frac{3}{16} - 2m_{00}(c_z) + \frac{1}{32\sqrt{2m_{00}(c_z)}} \tag{C.13}$$

预解三次方程的实根为

$$m_{00}(c_z) = \frac{1}{32} + 2\sqrt{\frac{c_z^2}{3}}\sinh[\beta(c_z)], \tag{C.14}$$

其中双曲角为

$$\beta(c_z) = \frac{1}{3}\operatorname{arcsinh}\left(-\frac{3}{64}\sqrt{\frac{3}{c_z^2}}\right) \tag{C.15}$$

C.2 流形 $x = y = p_x = p_y = 0$中的转向点

在这条竖直线上，分子在径向势中来回运动

$$V_z = 2\mathrm{z}^2 + |\mathrm{z}|. \tag{C.16}$$

对于给定的方位能级 $\mathrm{h}_z = \eta h_z$，我们有以下转向点 $\mathrm{z}_1 < \mathrm{z}_2$:

$$\mathrm{z}_1 = \frac{1}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1 + 8\mathrm{h}_z}, \qquad \mathrm{z}_2 = -\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + 8\mathrm{h}_z}. \tag{C.17}$$

通过计算求积（4.7），我们得到周期轨道。用缩放变量 $\mathrm{z} = \eta z$ 和时间 $\mathrm{t} = \sqrt{\eta}\tau$ 表示，有

$\mathrm{z} \geq 0:\ \mathrm{t} \in [0,\mathrm{T}]$

$$\mathrm{z}(\mathrm{t}) = -\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + 8\mathrm{h}_z}\cos(2\mathrm{t} - \mathrm{T}); \tag{C.18}$$

$\mathrm{z} \leq 0: \mathrm{t} \in [\mathrm{T},2\mathrm{T}]$

$$\mathrm{z}(\mathrm{t}) = \frac{1}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1 + 8\mathrm{h}_\mathrm{z}}\cos(2\mathrm{t} - 3\mathrm{T}). \tag{C.19}$$

我们用大写字母 T 表示半周期

$$\mathrm{T} = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{1 + 8\mathrm{h}_z}}\right). \tag{C.20}$$

参考文献

[1] T. P. Softley, 《二十年代的冷分子与超冷分子》, 英国皇家学会学报 A **479**, 20220806（2023）。[2] O. Stern 和 W. Gerlach, 《银原子的磁矩》, 《物理学杂志 A》 **9**, 353-355 （1922）。[3] R. V. Krems. 电磁场中的分子。John Wiley and Sons Inc., 美国新泽西州霍博肯, 2019年。[4] I. I. Rabi、S. Millman、P. Kusch 和 J. R. Zacharias, 《测量核磁矩的分子束共振法：$_{3}Li^{6}$,$_{3}Li^{7}$ 和$_{9}F$的磁矩》, ^{19},物理评论 **55**, 526-535（1939）。[5] V. Aquilanti、D. Ascenzi、D. Cappelletti、F. Pirani, 《对近似逸出流和中等超声速度氧分子束的磁分析》, 《国际质谱与离子过程杂志》 **149/150**, 355-371（1995年）。[6] K.-J. Kügler、W. Paul 和 U. Trinks, 《中子的磁储存环》, 《物理快报 B》**72**, 422–424（1978）。[7] S. D. Hogan、M. Motsch 和 F. Merkt, 《利用非均匀电场和磁场减速超声分子束》, 《物理化学化学物理》 **13**, 18705-18723（2011）。[8] E. Narevicius 和 M. G. Raizen, 《利用磁减速超声分子束迈向冷化学》, 《化学评论》**112**, 4879-4889（2012）。[9] S. D. Hogan, 《原子和分子的里德伯-斯塔克减速》, 《欧洲物理学杂志：仪器》**3:2**, 1-50（2016年）。[10] A. L. Migdall、J. V. Prodan、W. D. Phillips、T. H. Bergeman 和 H. J. Metcalf, 《首次观测到磁囚禁中性原子》, 物理评论快报**54**, 2596–2599（1985）。[11] J. D. Weinstein、R. de Carvalho、T. Guillet、B. Friedrich 和 J. M. Doyle, 《毫开尔文温度下的一氢化钙分子的磁囚禁》, 《自然》**395**, 148–150（1998）。[12] J. Riedel、S. Hoekstra、W. Jäger、J. J. Gilijamse、S. Y. T. van de Meerakker 和 G. Meijer, 《在磁阱中积聚斯塔克减速NH分子》, 《欧洲物理学杂志 D》 **65**, 161–166 （2011）。[13] Y. Liu 、 M. Vashishta 、 P. Djuricanin 、 S. Zhou、W. Zhong、T. Mittertreiner、D. Carty 和 T. Momose, 《冷甲基自由基的磁囚禁》, 物理评论快报 **118**, 093201（2017）。[14] D. J. McCarron、M. H. Steinecker、Y. Zhu 和 D. DeMille, 《极性分子超冷气体的磁囚禁》, 物理评论快报 **121**, 013202（2018）。

[15] D. DeMille，囚禁极性分子的量子计算，物理评论快报**88**，067901（2002年）。[16] J. A. Blackmore、L. Caldwell、P. D. Gregory、E. M. Bridge、R. Sawant、J. Aldegunde、J. Mur-Petit、D. Jaksch、J. M. Hutson、B. E. Sauer、M. R. Tarbutt 和 S. L. Cornish，超冷分子用于量子模拟：氟化钙和铷铯中的转动相干性，《量子科学与技术》**4**，014010（2018）。[17] L. Caldwell、J. A. Devlin、H. J. Williams、N. J. Fitch、E. A. Hinds、B. E. Sauer 和 M. R. Tarbutt，深度激光冷却与分子的高效磁压缩，物理评论快报**123**，033202（2019）。[18] L. Caldwell、H. J. Williams、N. J. Fitch、J. Aldegunde、J. M. Hutson、B. E. Sauer 和 M. R. Tarbutt，磁阱中分子的长转动相干时间，物理评论快报**124**，063001（2020）。[19] L. R. B. Picard、A. J. Park、G. E. Patenotte、S. Gebretsadkan、D. Wellnitz、A. M. Rey 和 K.-K. Ni，分子量子比特间的量子纠缠与 iSWAP 门，《自然》**637**，821-826（2025年）。[20] A. Hashemloo 和 C. M. Dion，保罗阱中双原子分子离子的转动动力学，《化学物理学杂志》**143**，204308（2015年）。[21] T. Bergeman。静磁阱中原子轨迹的经典计算。《美国物理学会通报》**31** 939。BA50。（1986年）[22] H. Metcalf 和 P. van der Straten。中性原子的冷却与囚禁。《物理报告》**244**，203-286，（1994年）。[23] T. Bergeman、P. McNicholl 和 H. Metcalf。中性原子静磁阱中的平动量子模式。《美国物理学会通报》**31** 957。DA4。（1986年）[24] T. Bergeman、G. Erez 和 H. Metcalf。中性原子的静磁囚禁场。Phys. Rev. A**35**，1535-1546，（1987年）。[25] D. J. Griffiths 和 D. F. Schroeter。《量子力学导论》。剑桥大学出版社，英国，2018年（第3版）。[26] Yu. Yaremko、M. Przybylska 和 A. J. Maciejewski，极性阱中的双原子分子，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**58**，055101（2025年）。[27] M. Przybylska、A.J. Maciejewski 和 Yu. Yaremko，极性粒子电磁阱，《新物理学杂志》**22**，103047（2020年）。[28]NIST化学网络手册，*NIST*标准参考数据库第*69*号。（https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C1333740&Mask=1000）[29] Y. Fukuda，磁场对原子与分子碰撞的影响，《化学物理学》**118**，199-209（1987年）。

[30] J. G. E. Harris等，用于囚禁中性原子和分子的深层超导磁阱，《科学仪器评论》**75**，17-23（2004年）。[31] P. R. Sarma 和 S. K. Pattanayak，为获得理想磁场而设计的超导四极磁体线圈形状，《科学仪器评论》**76**，093303（2005年）。[32] M. S. Child。《分子应用中的半经典力学》。牛津大学出版社，牛津，英国，2014年（第2版）。[33] P. K. Ghosh，《离子阱》。牛津大学出版社，牛津，1995年。[34] M. Vogel，《潘宁阱中的粒子囚禁》，原子、光学与等离子体物理丛书**126**，施普林格国际出版股份公司，查姆，2024年，第2版。[35] S. Brown 和 G. Gabrielse，离子阱理论：彭宁阱中单个电子或离子的物理学，《现代物理评论》**58**，233（1986年）。[36] W. Paul，带电与中性粒子的电磁阱，《现代物理评论》**62(3)**，531—540（1990年）。[37] H. G. Dehmelt，囚禁离子的射频光谱学，Advan. At. Mol. Phys.**3**，53–72（1967年）。[38] G. Contopoulos，《动力天文学中的有序与混沌》。施普林格出版社，柏林海德堡，2002年。[39] J. Pérez-Ríos、A. S. Sanz，磁阱如何工作？《美国物理学杂志》**81(11)**，836–843（2013年）[40] W. Petrich 和 M. H. Anderson，J. R. 用于中性原子蒸发冷却的强约束磁阱，**V74**，3352–3355（1995年）。[41] J. R. Cary 和 A. J. Brizard，导引中心运动的哈密顿理论，《现代物理评论》**81**，693–738（2009年）。[42] Yu. Yaremko、M. Przybylska 和 A. J. Maciejewski，彭宁阱中相对论电荷的动力学。《混沌》**25**，053102，2015年。[43] L. E. Reichl，《保守经典系统向混沌的转变：量子表现》。Springer Science+Business Media，纽约，1992年。[44] J. J. Morales-Ruiz。《微分伽罗瓦理论与哈密顿系统的不可积性》，数学进展丛书第179卷。比克豪泽出版社，巴塞尔，1999年。[45] J. J. Morales-Ruiz 和 J.-P. Ramis，关于具有齐次势的某些哈密顿系统不可积性的一则注记，《方法与应用分析》**8(1)**，113–120（2001年）。[46] T. Combot，关于代数势与 Morales-Ramis理论的一则注记，《天体力学与动力天文学》**115(4)**，397–404（2013年）。[47] A. J. Maciejewski 和 M. Przybylska，具有代数势的哈密顿系统的可积性，《物理快报A辑》**380(1-2)**，76–82（2016年）。