

01
**Столкновения спин-поляризованных щелочных атомов Na и Cs
в основном состоянии**

© В.А. Картошкин

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: victor.kart@mail.ioffe.ru

Поступила в редакцию 22.03.2023 г.
В окончательной редакции 31.07.2023 г.
Принята к публикации 05.09.2023 г.

Рассмотрены столкновения с участием поляризованных щелочных атомов Na и Cs в основном состоянии. Рассчитаны комплексные сечения спинового обмена и упругого рассеяния указанных атомов в интервале энергий от 10^{-4} до 10^{-2} а.е.

Ключевые слова: оптическая ориентация, поляризованные атомы, поперечные сечения, спиновый обмен.

DOI: 10.61011/OS.2023.08.56294.4731-23

Введение

В последние годы возобновился интерес к изучению взаимодействия между атомами щелочных металлов в основном состоянии. Это справедливо для изучения как гомоядерных [1], так и гетероядерных димеров щелочных металлов [2]. Рост числа таких исследований обусловлен различными факторами, в частности, интересом к свойствам холодных и ультрахолодных столкновений в газах щелочных металлов в ловушках разного типа [2,3], а также возможностью переноса поляризации при столкновении спин-поляризованных щелочных атомов с атомами ядерных парамагнетиков [4] с последующим использованием их в качестве рабочих сред в квантовых магнитометрах [5,6] и гироскопах [7]. Изучение взаимодействия с участием спин-поляризованных щелочных атомов возможно в экспериментах по оптической ориентации атомов. Оптическая ориентация атомов — это передача углового момента от поляризованного резонансного излучения ансамблю атомов, находящихся либо в основном, либо в возбужденном состоянии и имеющих нескомпенсированный электронный спин. При этом перенос поляризации возможен как между электронными степенями свободы сталкивающихся атомов [8], так и между электронными и ядерными степенями свободы [4,9].

Столкновения атомов щелочных металлов в основном состоянии со спином электрона $S = 1/2$ сопровождаются обменом электронными координатами между сталкивающимися частицами, что приводит к передаче поляризации между ними (т.е. к известному явлению спинового обмена). Кроме того, наряду с передачей поляризации от одного партнера к другому [8] происходит уширение и смещение линий магнитного резонанса сталкивающихся атомов при спин-обменных столкновениях [10,11]. Последние два процесса зависят, в частности, от комплексного сечения спинового обмена. Действительная часть

сечения определяет так называемое „сечение спинового обмена“, отвечающее за уширение линий магнитного резонанса, а мнимая часть — сечение сдвига — определяет сдвиг частоты магнитного резонанса. При столкновении щелочных атомов в основном состоянии наряду с процессом спинового обмена имеет место также упругое рассеяние.

Целью данной работы является расчет поперечных сечений столкновений щелочных атомов Na и Cs. К ним относятся различные поперечные сечения — сечение упругого рассеяния, комплексное сечение спинового обмена, состоящее из действительной и мнимой частей. Как следует из стандартной теории рассеяния, все вышеперечисленные сечения могут быть рассчитаны с помощью фаз рассеяния на соответствующих термах димера NaCs [12]. Следует отметить, что при столкновениях щелочных атомов при не слишком низких температурах, когда время сверхтонкого взаимодействия $2\pi/\Delta\omega$ (например, $\Delta\nu = 9192 \cdot 10^6$ Hz для ^{133}Cs и $\Delta\nu = 1771 \cdot 10^6$ Hz для ^{23}Na [13]) значительно больше времени столкновения, которое составляет порядка 10^{-12} s, процесс спинового обмена можно рассматривать только как эволюцию спинов электронов во время столкновения. Другими словами, предполагается, что полный электронный спин сохраняется в процессе столкновения. Между столкновениями происходит взаимодействие электронных и ядерных спинов. В этом случае молекула, образовавшаяся из двух щелочных атомов в процессе столкновения, может быть описана в основном состоянии с помощью двух потенциалов, соответствующих суммарным спинам системы $S_1 = 0$ и $S_2 = 1$. Сечения столкновения рассчитаны на основе данных о синглетном ($S = 0, X^1\Sigma^+$) и триплетном ($S = 1, a^3\Sigma^+$) потенциалах, описывающих взаимодействие щелочных атомов в основном состоянии [14].

1. Потенциалы взаимодействия системы NaCs

Потенциалы взаимодействия системы NaCs исследовались достаточно давно [14–17] и, как уже отмечалось выше, в последнее время интерес к исследованию этой системы существенно вырос [3,17]. В настоящей работе для расчета интересующих нас сечений спинового обмена и упругого рассеяния мы воспользуемся результатами работы [14], в которой на основании экспериментальных данных, полученных с использованием метода фурье-спектроскопии, были найдены синглетный и триплетный термы димера NaCs. Искомые потенциалы были разбиты на три области в соответствии с межъядерным расстоянием: область малых межъядерных расстояний ($R < R_{SR}$), область больших межъядерных расстояний ($R > R_{LR}$), область средних межъядерных расстояний ($R_{SR} \leq R \leq R_{LR}$). Численные значения параметров R_{SR} и R_{LR} приведены ниже. Область малых межъядерных расстояний ($R < R_{SR}$) характеризуется сильным отталкиванием, область больших межъядерных расстояний ($R > R_{LR}$) обусловлена ван-дер-ваальсовым взаимодействием, в области средних межъядерных расстояний ($R_{SR} \leq R \leq R_{LR}$) синглетный и триплетный потенциалы взаимодействия характеризуются наличием потенциальной ямы.

В работе [14] синглетный и триплетный потенциалы были представлены в аналитическом виде следующим образом.

Для малых межъядерных расстояний ($R < R_{SR}$) потенциал имел вид отталкивания:

$$U_{SR}(R) = A + \frac{B}{R^3}, \quad (1)$$

где $A = -0.121078258 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$, $B = 0.278126476 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^3$ для синглетного терма и $A = -0.147429182 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$, $B = 0.160029429 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^3$ для триплетного терма.

Для больших межъядерных расстояний ($R > R_{LR}$) потенциал описывался ван-дер-ваальсовым взаимодействием с учетом члена, описывающего обменное взаимодействие:

$$U_{LR} = -\frac{C_6}{R^6} - \frac{C_8}{R^8} - \frac{C_{10}}{R^{10}} \pm E_{ex}. \quad (2)$$

Обменное взаимодействие E_{ex} входит со знаком (+) в триплетный терм и со знаком (–) в синглетный терм, его явный вид представлен в [14]:

$$E_{ex} = A_{ex} R^\gamma \exp(-\beta R). \quad (3)$$

Для расстояний $R_{SR} < R < R_{LR}$ потенциал был представлен в следующем виде:

$$U_{IR}(R) = \sum_{k=0}^n a_k x^k, \quad (4)$$

где $x = \frac{R-R_m}{R+R_m}$, a_i — подгоночные коэффициенты, R_m — расстояние, близкое к равновесному, равное

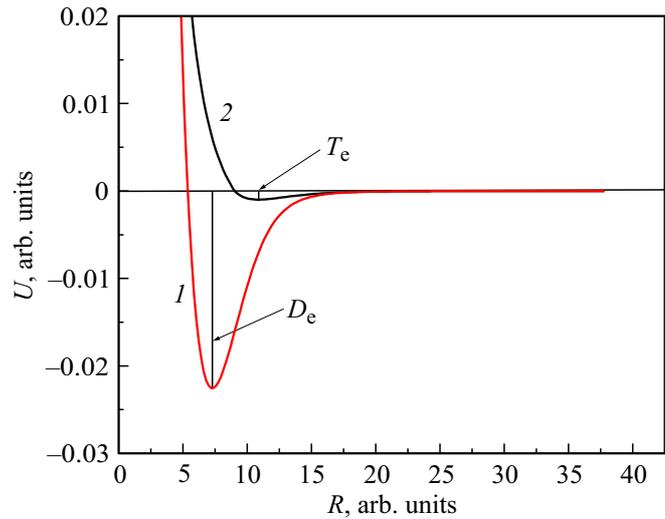


Рис. 1. Синглетный (1) и триплетный (2) потенциалы димера NaCs по данным работы [14] в атомной системе единиц.

3.85062906 Å для синглетного терма и 5.75585938 Å для триплетного терма. Явный вид параметров в выражениях (1)–(4) представлен в [14] в виде таблицы. Используя выражения (1)–(4) и входящие в них параметры, приведенные в [14], мы построили потенциалы взаимодействия димера NaCs в атомной системе единиц (рис. 1). Зная синглетный и триплетный термы димера NaCs в основном состоянии, можно перейти к расчету интересующих нас сечений.

В [14] также были определены энергия диссоциации молекулы NaCs и равновесное расстояние: для синглетного терма $D_e = 4954.237(10) \text{ cm}^{-1}$, $R_e = 3.8506 \text{ \AA}$, для триплетного терма $T_e = 217.168(10) \text{ cm}^{-1}$, $R_e = 5.7448 \text{ \AA}$. При этом для синглетного терма $R_{SR} = 2.8435 \text{ \AA}$, $R_{LR} = 10.2 \text{ \AA}$, для триплетного терма $R_{SR} = 4.78 \text{ \AA}$, $R_{LR} = 10.2 \text{ \AA}$.

2. Расчет фаз рассеяния при столкновении атомов Na и Cs

Как следует из теории рассеяния, расчет сечений обусловлен знанием фаз ($\delta_l^{s,t}$) рассеяния (здесь индекс s относится к синглетному терму, t — к триплетному терму) на соответствующих термах. Амплитуда рассеянной волны на триплетном (f_t) и синглетном (f_s) термах определяется следующим выражением через фазы рассеяния [18,19]:

$$f_{t,s} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\exp(2i\delta_l^{s,t}) - 1] P_l(\cos\theta). \quad (5)$$

Фаза рассеяния $\delta_l^{s,t}$ может быть получена из регулярного решения уравнения парциальных волн:

$$\frac{d^2 g_l^{t,s}}{dR^2} + \left[k^2 - V_{t,s} - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] g_l^{t,s} = 0. \quad (6)$$

При больших значениях R функция $g_l^{t,s}$ имеет следующий асимптотический вид:

$$g_l^{t,s} \sim k^{-1} \sin\left(kR - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l^{t,s}\right). \quad (7)$$

Здесь l — орбитальный момент, k — волновой вектор, $V_{l,s}$ — триплетный (или синглетный) потенциал взаимодействия, P_l — полином Лежандра.

Расчет фаз рассеяния проводился в квазиклассическом приближении на основании метода Джеффриса, модифицированного Лангером [18], в интервале энергий столкновения $E = 10^{-2} - 10^{-4}$ а.е. В соответствии с этим методом фаза рассеяния на потенциале V_s может быть представлена в следующем виде:

$$\delta_l = \int_{R_0}^{\infty} F_1(R) dR - \int_{R'_0}^{\infty} F_0(R) dR, \quad (8)$$

где

$$F_1^S(R) = \left[2\mu(E - V_S(R)) - \frac{(l + 1/2)^2}{2\mu R^2} \right], \quad S = s, t, \quad (9)$$

$$F_0(R) = \left[2\mu E - \frac{(l + 1/2)^2}{R^2} \right].$$

Здесь E — энергия столкновения, R_0 и R'_0 — корни уравнений $F_1^S(R) = 0$, $F_0(R) = 0$ (причем для $F_1^S(R)$ берется наибольший корень), $V_S(R)$ — потенциал взаимодействия, соответствующий полному спину S (0 или 1).

3. Расчет сечений при столкновении атомов Na и Cs

Расчет комплексных сечений спинового обмена и сечений упругого рассеяния можно провести, опираясь на стандартную теорию рассеяния. Расчет комплексных сечений спинового обмена при столкновении атомов натрия и цезия проводился аналогично тому, как это было сделано, например, при столкновении изотопов рубидия [20]. При столкновении двух атомных частиц, обладающих электронными спинами, возможен процесс обмена электронами, а если одна из частиц была предварительно поляризована, то и обмен электронной поляризацией. Подобный процесс можно условно представить следующим образом:

$$A(\uparrow) + B(\downarrow) \leftrightarrow A(\downarrow) + B(\uparrow). \quad (10)$$

Здесь стрелками показана возможная электронная поляризация атома.

Процесс спинового обмена можно описать с помощью комплексного сечения спинового обмена вида

$$q^{AB} = \bar{q}^{AB} + i\bar{\bar{q}}^{AB}. \quad (11)$$

Вместе с тем, зная потенциалы взаимодействия атомов Na и Cs, можно также определить сечения упругого рассеяния на каждом из потенциалов.

Комплексное сечение спинового обмена можно представить стандартным образом через матрицу рассеяния $T_S^{AB}(l)$ [12]:

$$q^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) [1 - T_0^{AB}(l) T_1^{AB}(l)^*]. \quad (12)$$

Здесь k_{AB} — волновое число, * указывает на комплексное сопряжение, S — полный спин системы. Матрица рассеяния может быть представлена через фазы рассеяния $\delta_S^{AB}(l)$ в канале с полным спином S следующим образом:

$$T_S^{AB}(l) = \exp(2i\delta_S^{AB}(l)), \quad (13)$$

где l — орбитальное квантовое число. При этом сечение упругого рассеяния можно представить [12] в виде

$$q^{s,t} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) |1 - T_{s,t}^{AB}(l)|^2. \quad (14)$$

Здесь индексы s и t соответствуют рассеянию на синглетном ($S = 0$) или триплетном ($S = 1$) термах.

Из выражений (12)–(13) следует, что действительная и мнимая части комплексного сечения спинового обмена имеют следующий вид:

$$\bar{q}^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2[\delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l)], \quad (15)$$

$$\bar{\bar{q}}^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin 2[\delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l)]. \quad (16)$$

При этом сечение упругого рассеяния на синглетном и триплетном термах можно представить в виде

$$q^{0,1} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2(\delta_{0,1}^{AB}(l)). \quad (17)$$

В соответствии с [21] полное сечение упругого рассеяния в случае столкновения неодинаковых атомов может быть представлено в виде

$$q_{el} = (1/4)(q^0 + 3q^1). \quad (18)$$

Таким образом, для расчета интересующих нас сечений с использованием выражений (15)–(18) необходимо рассчитать фазы рассеяния на синглетном и триплетном термах, представленных в разд. 1.

4. Расчет сечений упругого рассеяния и комплексных сечений спинового обмена при столкновении атомов Na и Cs

В квазиклассическом приближении на основании выражений (8) и (9) и потенциалов взаимодействия из

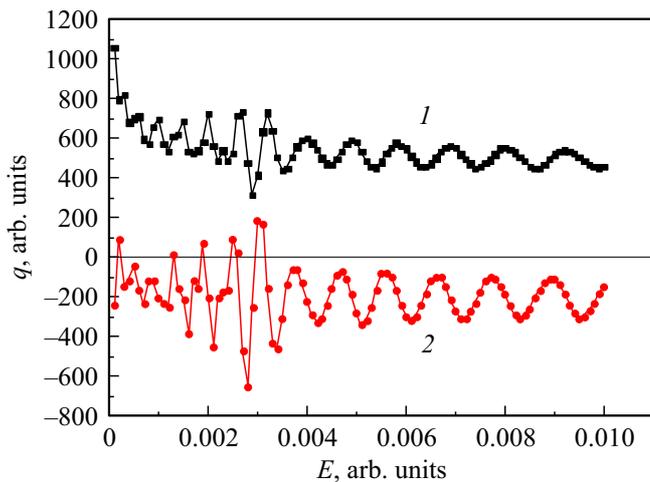


Рис. 2. Зависимость от энергии столкновения действительной (1) и мнимой (2) частей комплексного сечения спинового обмена при столкновении атомов Na и Cs в основном состоянии.

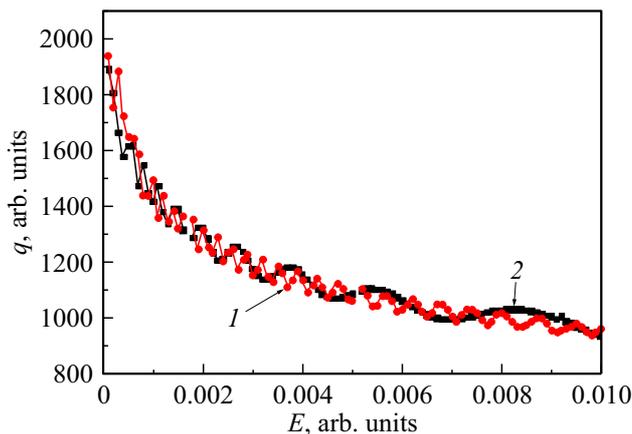


Рис. 3. Зависимость сечений упругого рассеяния от энергии столкновения: 1 — сечение рассеяния на синглетном терме (■), 2 — сечение рассеяния на триплетном терме (●).

работы [14] проводился расчет фаз рассеяния в интервале энергий столкновения от 10^{-4} до 10^{-2} а.е. Возможность использования квазиклассического приближения обусловлена тем, что вклад в сечения дает большое число фаз рассеяния даже при минимальной энергии столкновения. На рис. 2 приведены зависимости действительной и мнимой частей комплексного сечения спинового обмена от энергии столкновения, полученные на основании соотношений (15) и (16). На рис. 3 приведены зависимости сечений упругого рассеяния на синглетном и триплетном термах от энергии столкновения, полученные на основании соотношений (17).

Для перехода к температурным зависимостям искомых сечений необходимо провести максвелловское

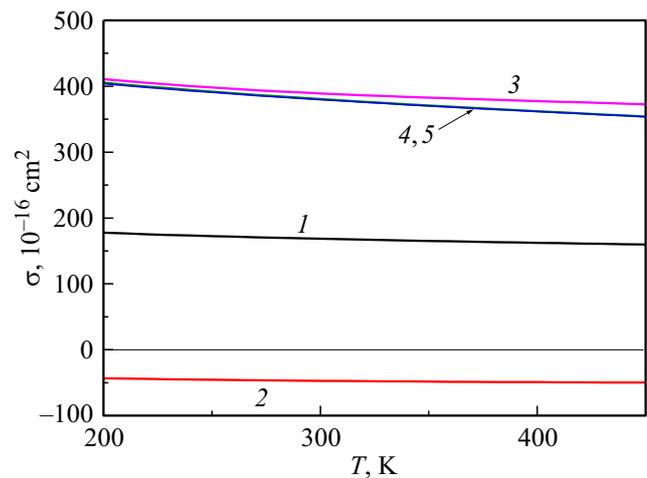


Рис. 4. Температурные зависимости сечений: 1 — действительная часть сечения спинового обмена, 2 — мнимая часть сечения спинового обмена, 3 — сечение рассеяния на синглетном терме, 4 — сечение рассеяния на триплетном терме, 5 — полное сечение рассеяния на синглетном и триплетном термах.

усреднение по скоростям в соответствии с выражением

$$\begin{aligned} \sigma^{AB}(T) &= \frac{\langle q^{AB}(E)v_{AB} \rangle}{\langle v_{AB} \rangle} \\ &= \frac{1}{(kT)^2} \int_0^{\infty} q^{AB}(E)E \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь k — постоянная Больцмана, E — энергия столкновения, v_{AB} — относительная тепловая скорость сталкивающихся частиц. На рис. 4 приведены результаты максвелловского усреднения энергетических зависимостей сечений, представленных на рис. 2 и 3, в том числе и полное сечение упругого рассеяния, которое выражается через сечения упругого рассеяния на триплетном и синглетном термах в соответствии с выражением (18). Поскольку сечения упругого рассеяния на синглетном и триплетном термах близки (рис. 3), а в соответствии с (18) в величине полного сечения превалирует вклад от рассеяния на триплетном терме, то получается, что полное сечение и сечение рассеяния на триплетном терме слабо различаются, что и следует из рис. 4.

Действительно, как видно, например, из [19], при столкновении двух атомов лития в основном состоянии при максвелловском усреднении сечений в температурном интервале 1–100 К сечения рассеяния на синглетном и триплетном термах совпадают, а сечение спинового обмена (действительная часть) существенно их меньше. Основное различие сечений упругого рассеяния на синглетном и триплетном термах имеет место в области низких температур (менее 1 К).

Заключение

Как видно из рис. 4, действительная часть сечения спинового обмена (\bar{q}^{AB}) достаточно велика и лежит в пределах от $1.8 \cdot 10^{-14}$ до $1.6 \cdot 10^{-14}$ см². В то же время мнимая часть сечения (\bar{q}^{AB}), отвечающая за сдвиги частоты магнитного резонанса, во-первых, отрицательна во всем температурном диапазоне, во-вторых, изменяется от $-4 \cdot 10^{-15}$ до $-5 \cdot 10^{-15}$ см². Величина и знак сечения являются существенными при расчете сдвига частоты магнитного резонанса при столкновении поляризованных атомов щелочных металлов в основном состоянии. От них, в частности, зависит поведение сдвига частоты с изменением температуры для двух сверхтонких состояний щелочных атомов.

Сечения спинового обмена позволяют описать процесс спинового обмена при столкновении двух атомов щелочных металлов в основном состоянии. Как уже отмечалось, процесс спинового обмена приводит как к передаче поляризации между сталкивающимися частицами, так и к уширению линии магнитного резонанса сталкивающихся атомов. Кроме того, наряду с передачей поляризации от одного партнера к другому происходит уширение и смещение линий магнитного резонанса сталкивающихся атомов при спин-обменных столкновениях. Эти процессы зависят, в частности, от комплексных сечений спинового обмена. Действительная часть сечения определяет так называемое „сечение спинового обмена“, отвечающее за уширение линий магнитного резонанса, а мнимая часть „сечение сдвига“ определяет сдвиг частоты магнитного резонанса. Спин-обменное уширение линии магнитного резонанса влияет на точность таких устройств квантовой электроники, как квантовые стандарты частоты и магнитометры, которые построены с использованием оптической ориентации атомов.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M.M. Hawamdeh, A.S. Sandouqa, B.R. Joudeh, O.T. Al-Obeidat, H.B. Ghassib. *Eur. Phys. J. Plus*, **137**, 1025 (2022). DOI: 10.1140/epjp/s13360-022-03244-y
- [2] W.B. Cairncross, J.T. Zhang, L.R.B. Picard, Y. Yu, K. Wang, K.-K. Ni. *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 123402 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.123402 Medline
- [3] S.G.H. Brookes, J.M. Hutson. *J. Phys. Chem. A*, **126**(25), 3987 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpca.2c01810
- [4] M.E. Limes, D. Sheng, M.V. Romalis. *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 033401 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.033401
- [5] Z. Wang, S.X. Liu, R.G. Wang, L.L. Yuan, J. Huang, Y.Y. Zhai, S. Zou. *IEEE/CAA J. Autom. Sinica*, **9**(4), 699 (2022). DOI: 10.1109/JAS.2021.1004383
- [6] Y. Lu, Y. Zhai, Y. Zhang, W. Fan, L. Xing, W. Quan. *Chin. Phys. B*, **29**(4), 043204 (2020). DOI: 10.1088/1674-1056/ab75d3
- [7] J. Liu, L. Jiang, Y. Liang, G. Li, Z. Cai, Z. Wu, W. Quan. *Phys. Rev. Appl.*, **17**, 014030 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.17.014030
- [8] S.P. Dmitriev, N.A. Dovator, V.A. Kartoshkin, A.I. Okunevich. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **1400**(6), 066019 (2019). DOI: 10.1088/1742-6596/1400/6/066019
- [9] M. Kelley, R.T. Branca. *J. Appl. Phys.* **129**, 154901 (2021). DOI: 10.1063/5.0037440
- [10] А.К. Вершовский, С.П. Дмитриев, М.В. Петренко. *Письма ЖТФ*, **47**(8), 51 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.08.50856.18654
- [11] С.П. Дмитриев, Н.А. Доватор. *ЖТФ*, **77**(7), 120 (2007).
- [12] С. Суннакава. *Квантовая теория рассеяния* (Мир, М., 1979).
- [13] А.А. Радциг, Б.М. Смирнов. *Справочник по атомной и молекулярной физике* (Атомиздат, М., 1980).
- [14] O. Docenko, M. Tamanis, J. Zaharova, R. Ferber, A. Pashov, H. Knockelnd, E. Tiemann. *J. Phys. B*, **39**(19), S929 (2006). DOI: 10.1088/0953-4075/39/19/S08
- [15] O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, H. Knöckel, E. Tiemann. *Eur. Phys. J. D*, **31**, 205 (2004). DOI: 10.1140/epjd/e2004-00156-5
- [16] A.L.M. Zanelatto, E.M.S. Ribeiro, R.d.J. Napolitano. *J. Chem. Phys.*, **123**, 014311 (2005). DOI: 10.1063/1.1950668
- [17] M. Schwarzer, J.P. Toennies. *J. Chem. Phys.*, **154**, 154304 (2021). DOI: 10.1063/5.0046194
- [18] N.F. Mott, H.S.W. Massey. *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford, Clarendon Press, 1965).
- [19] R.Côté, A. Dalgarno, M.J. Jamieson. *Phys. Rev. A*, **50**(1), 399 (1994). DOI: 10.1103/PHYSREVA.50.399.
- [20] В.А. Картошкин. *Опт. и спектр.*, **119**(4), 594 (2015).
- [21] H.O. Dickinson, M.R. Rudge. *J. Phys. B*, **3**, 1448 (1970).