

02

Спиновый обмен при столкновении двух атомов цезия в основном состоянии

© С.П. Дмитриев, Н.А. Доватор, В.А. Картошкин

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

(Поступило в Редакцию 9 июля 2014 г. В окончательной редакции 11 ноября 2014 г.)

Проведен расчет сечений спинового обмена и сдвига частоты магнитного резонанса при столкновении двух атомов цезия в основном состоянии. Расчет проведен на основании потенциалов взаимодействия для синглетного ($X^{-1}\Sigma_G^+$) и триплетного ($a^3\Sigma^+$) состояний димера Cs_2 , представленных в литературе в последние годы. Проведено сравнение результатов с ранее полученными.

Введение

Интерес к исследованию взаимодействия двух атомов цезия обусловлен в последние годы важной ролью, которую эти атомы играют в экспериментах по лазерному охлаждению атомов и исследованию столкновительных процессов с участием холодных атомов. Кроме того, поляризованные атомы цезия выступают в качестве рабочей среды в квантовых магнитометрах с оптической накачкой. При этом они могут использоваться как в „чистом виде“, т. е. собственно в цезиевом магнитометре [1], так и в смесях с другими щелочными атомами (например, с К) в однокамерных тандемных магнитометрах [2,3]. Происходящие в таких системах столкновительные процессы описываются с помощью комплексного сечения спинового обмена:

$$q^{AB} = \bar{q}^{AB} + i\bar{\bar{q}}^{AB}. \quad (1)$$

Здесь действительная часть сечения \bar{q}^{AB} определяет перенос ориентации при столкновении частиц, релаксацию, образование высших поляризационных моментов [4] (выстраивание, сверхтонкая поляризация), мнимая часть сечения $\bar{\bar{q}}^{AB}$ определяет сдвиги частоты магнитного резонанса [5] как в системе зеемановских, так и сверхтонких уровней атомов. Следовательно, зная комплексное сечение спинового обмена, можно полностью описать процессы, происходящие при спин-обменных столкновениях.

В процессе столкновения атомов Cs в основном состоянии образуется двухатомная молекула, которая описывается в основном состоянии двумя термами — синглетным — $V_s(X^1\Sigma^+)$, соответствующим полному спину системы $S = 0$, и триплетным $V_t(a^3\Sigma^+)$ термом, соответствующим полному спину $S = 1$. Использование методов инфракрасной спектроскопии позволяет получать экспериментальную информацию о положении колебательных уровней в димере и построении на основе этих данных потенциалов взаимодействия интересующей нас системы. Синглетное ($X^1\Sigma^+$) состояние молекулы Cs_2 изучено достаточно хорошо теоретически и экспериментально [6,7], при этом исследования триплет-

ного состояния молекулы Cs_2 проводились существенно реже и, что касается потенциала взаимодействия, описывающего состояние молекулы $a^3\Sigma^+$, данные по нему существенно более скудные.

Впервые расчет комплексных сечений спинового обмена атомов цезия был проведен в работе [8], при расчете сечений использовался синглетный ($X^1\Sigma_g^+$) потенциал взаимодействия из работы [7], триплетный ($a^6\Sigma_u^+$) потенциал был построен в виде

$$V_1(R) = V_0(R) + V_{ex}(R), \quad (2)$$

где $V_0(R)$ — синглетный терм, а $V_{ex}(R)$ — обменное взаимодействие. Обменное взаимодействие определялось на основании асимптотических формул [8]:

$$V_{ex} = R^{2/\alpha+2/\beta-1/(\alpha+\beta)^{-1}} \exp(-(\alpha+\beta)R) J(\alpha, \beta, R), \quad (3)$$

где $\alpha^2/2$ и $\beta^2/2$ — энергии связи электронов в атомах A и B, R — межъядерное расстояние, $J(\alpha, \beta, R)$ — интегралы, явный вид которых представлен в [9]. Таким образом, было получено выражение для обменного взаимодействия в случае димера Cs_2 (выражение представлено в атомной системе единиц):

$$V_{ex} = R^{5.52} 2.14 \cdot 10^{-3} \exp(-1.072R). \quad (4)$$

В дальнейшем полученные потенциалы взаимодействия были использованы для расчета комплексных сечений спинового обмена при столкновении двух атомов цезия в основном состоянии. Данные потенциалы, особенно это касается триплетного терма, не обладали высокой точностью, в частности из-за того, что расчет обменного взаимодействия (4) осуществлялся по асимптотическим формулам, точность которых заметно падает с уменьшением межъядерных расстояний.

Появление в последние годы данных по потенциалам взаимодействия димера Cs_2 из экспериментов по эмиссионной спектроскопии, как для триплетного, так и для синглетного термов, позволило провести ревизию как собственно потенциалов взаимодействия, так и полученных на их основе данных по комплексным сечениям спинового обмена.

Потенциалы взаимодействия димера Cs₂

В настоящей работе для проведения расчетов использовались данные по синглетному ($X^1\Sigma^+$) состоянию молекулы Cs₂, полученные в работе [6]. На рис. 1 приведена построенная методом сплайнирования зависимость энергии взаимодействия в $X^1\Sigma^+$ от межъядерного расстояния. Кривая получена из данных по энергии колебательных уровней ($v = 0-135$, что соответствует энергиям 20.98178 и 3622.03814 cm^{-1} и охватывает область межъядерных расстояний от $3.493\,792 \cdot 10^{-8}$ и до $11.037\,142 \cdot 10^{-8}$ см), представленных в виде таблицы в [6]. На этом же рисунке приведен терм, использовавшийся ранее в [8]. Как видно из приведенных зависимостей, данные работ достаточно хорошо совпадают во всем интервале межъядерных расстояний. Используемая в [6] энергия диссоциации — $D_e(X^1\Sigma^+) = 3649.884 \text{ cm}^{-1}$ [7] также была использована и в [8]. В дальнейшем при проведении расчетов в области межъядерных расстояний, меньших, чем $3.493\,792 \cdot 10^{-8}$ см, использовались данные по синглетному потенциалу, приведенному в [8].

На рис. 1 также приведены полученные в работах [8,10] зависимости триплетного потенциала взаимодействия от межъядерного расстояния. Как в [9], так и в [10] потенциалы взаимодействия приведены в аналитическом виде. Из рисунка видно, что в области малых межъядерных расстояний ($R < 5.5 \cdot 10^{-8}$ см) и больших расстояний ($R > 10 \cdot 10^{-8}$ см) потенциалы достаточно хорошо совпадают. Наибольшее различие потенциалов наблюдается в области минимума потенциальной энергии ($R_e = 6.245\,40 \cdot 10^{-8}$ см по данным работы [9] и $R_e = 6.35 \cdot 10^{-8}$ см по данным из [8]). Действительно, энергия диссоциации триплетного термина из [10] рав-

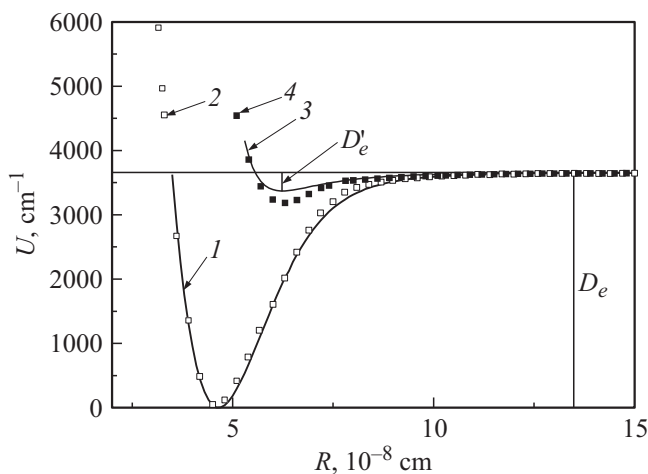


Рис. 1. Синглетные и триплетные термы димера Cs₂. 1 — синглетный потенциал по данным [10], 2 — синглетный потенциал по данным [9], 3 — триплетный потенциал по данным [6], 4 — триплетный потенциал по данным [9]. $D_e = 3650.0321 \text{ cm}^{-1}$, $D'_e = 279.349 \text{ cm}^{-1}$ [6].

на $D'_e(a^3\Sigma^+) = 279.349 \text{ cm}^{-1}$ и $D'_e(a^3\Sigma^+) = 400 \text{ cm}^{-1}$ из [8]. Кроме того, в работе [10] использовалось значение величины D_e , определяющей диссоционный предел для синглетного и триплетного термов димера Cs₂, равное $3650.0321 \text{ cm}^{-1}$.

Для расчета интересных нас сечений спинового обмена были использованы синглетный и триплетный термы, приведенные соответственно в работах [9,10]. В обоих случаях использовалась общая величина энергии диссоционного предела — $D_e = 3650.0321 \text{ cm}^{-1}$. Использование единого значения величины D_e при стремлении межъядерного расстояния в область больших значений необходимо для того, чтобы избежать возникновения ошибки в расчете сечений из-за того, что величина $\Delta = V_t - V_s$ не стремится к 0 при $R \rightarrow \infty$.

Комплексные сечения спинового обмена при столкновении двух атомов цезия в основном состоянии

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:

$$A(\uparrow) + B(\downarrow) \leftrightarrow A(\downarrow) + B(\uparrow). \quad (5)$$

Здесь стрелками показана возможная электронная поляризация частиц.

Как уже отмечалось выше, процесс спинового обмена можно описать с помощью комплексного сечения спинового обмена вида (1), где действительная часть сечения \bar{q}^{AB} определяет перенос ориентации при столкновении частиц, релаксацию, образование высших поляризационных моментов (выстраивание, сверхтонкая поляризация). Мнимая часть сечения $q^{=AB}$ определяет сдвиги частоты магнитного резонанса, как в системе зеемановских, так и сверхтонких уровней атомов.

Комплексное сечение спинового обмена можно представить стандартным образом через матрицу рассеяния $T_S^{AB}(l)$ (см., например, [8]):

$$q^{AB} = \pi/k_{AB}^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - T_0^{AB}(l)T_1^{AB}(l)^*]. \quad (6)$$

Здесь $k_{AB}^2 = \mu_{AB} \uparrow v_{AB}/h$ — волновой вектор, μ_{AB} — приведенная масса сталкивающихся частиц A и B, v_{AB} — средняя относительная скорость сталкивающихся атомов, * 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:

$$T_S^{AB}(l) = \exp(2i\delta_S^{AB}(l)), \quad (7)$$

где l — орбитальное квантовое число.

Из выражения (6) и (7) следует, что действительная и мнимая части комплексного сечения имеют вид

$$\bar{q}^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 [\delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l)], \quad (8)$$

$$\bar{q}^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin 2[\delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l)]. \quad (9)$$

Таким образом, для расчета интересующих нас сечений необходимо рассчитать фазы рассеяния на синглетном и триплетном термах.

На рис. 2 приведены рассчитанные по формулам (8) и (9) зависимости сечений спинного обмена \bar{q}^{AB} и сдвига частоты магнитного резонанса \bar{q}^{AB} от энергии столкновения с использованием потенциалов взаимодействия из работ [8,10].

Для сравнения результатов расчета с данными других авторов проводилось максвелловское усреднение по скоростям

$$\sigma(T) = \frac{\langle q(E)v \rangle}{\langle v \rangle} = \frac{1}{(kT)^2} \int_0^{\infty} q(E) \exp(-E/kT) dE, \quad (10)$$

где E — кинетическая энергия столкновения, k — постоянная Больцмана, T — температура, $q(E)$ и $\sigma(T)$ — зависимости поперечных сечений от энергии и температуры, v — относительная скорость сталкивающихся частиц. В таблице приведены результаты максвелловского усреднения по скоростям для поперечных сечений, рассчитанных в настоящей работе, полученных ранее в [6], и данные по сечениям, имеющимся в литературе. Следует отметить, что обычно в эксперименте измеряют сечение $\sigma_{SI}^{AB} = 1/2\bar{\sigma}^{AB}$, которое характеризует распад величины $\langle SI \rangle$ [11].

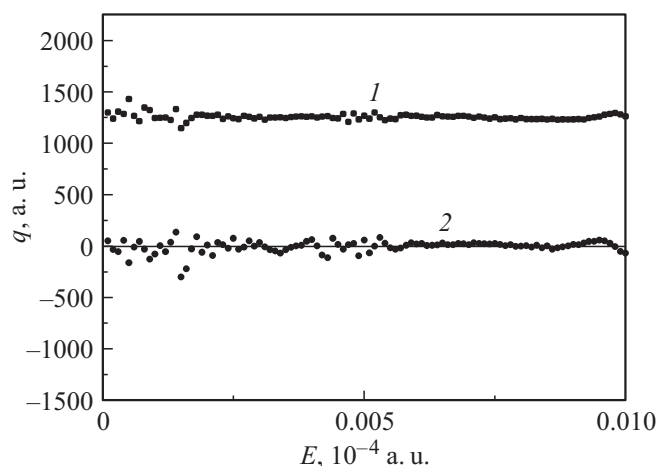


Рис. 2. Зависимость от энергии столкновения действительной и мнимой частей комплексного сечения спинного обмена. 1 — \bar{q}^{AB} , рассчитанное по данным потенциалов [6,10], 2 — \bar{q}^{AB} , рассчитанное по данным потенциалов [6,10].

Сечения спинного обмена при столкновении двух атомов цезия в основном состоянии (в единицах 10^{-14} cm^2)

T, К	Эксперимент	Расчет	Ссылка
300	2.20 ± 0.35	1.60	[8]
300			[12]
342		1.8	[13]
350		1.75	Настоящая работа

Заключение

Таким образом, переход от потенциалов, представленных в [6], к более точным, полученным в [8,10], позволил получить более точные значения сечений спинного обмена. Причем если (в соответствии с данными таблицы) действительная часть сечения спинного обмена изменилась не очень существенно (соответственно $\bar{\sigma}^{AB} = 1.6 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ по данным работы [9] и $\bar{\sigma}^{AB} = 1.75 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ по данным настоящей работы), то мнимая часть (сечение сдвига) изменилась практически на порядок по абсолютной величине: $\bar{\sigma}^{AB} = -6.3 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ при $T = 300 \text{ K}$ (в настоящей работе) и $\bar{\sigma}^{AB} = -8.3 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ при $T = 300 \text{ K}$ по данным [8]. Отсюда следует, в частности, что величины сдвигов частоты магнитного резонанса, рассчитанные в [14] и сравнивавшиеся с экспериментальными данными по сдвигам частоты магнитного в системе Cs–Rb [15], должны измениться по величине, так как величина этих (рассчитанных) сдвигов определяется, в частности, и величиной сечения сдвига \bar{q}^{AB} для двух сталкивающихся атомов Cs.

Настоящая работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 14-02-004710з).

Список литературы

- [1] Доватор Н.А., Александров Е.Б., Балабас М.Б., Дмитриев С.П., Доватор Н.А., Иванов А.И., Краснощекова И.А., Кулясов В.Н., Марченков В.В., Пазгалев А.С., Серебров А.П., Соловей В.А., Шмелев Г.Е. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 3. С. 100–102.
- [2] Александров Е.Б., Балабас М.В., Вершовский А.К., Пазгалев А.С. // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 7. С. 118–124.
- [3] Картошкин В.А. // Опт. и спектр. 2012. Т. 111. № 3. С. 1–5.
- [4] Дмитриев С.П., Доватор Н.А., Картошкин В.А., Окуневич А.И. // Опт. и спектр. 1994. Т. 77. № 5. С. 212–213.
- [5] Картошкин В.А. // Опт. и спектр. 2010. Т. 108. № 6. С. 914–917.
- [6] Xie F., Sovkov V.B. et al. // J. Chem. Phys. 2009. Vol. 130. P. 051 102.
- [7] Jenc F., Brandt V.A. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 39. N 9. P. 4561–4582.
- [8] Картошкин В.А. // Опт. и спектр. 1995. Т. 79. № 1. С. 26–32.

- [9] *Смирнов Б.М.* // Асимптотические методы в теории атомных столкновений. М.: Атомиздат, 1973. С. 293.
- [10] *Amiot C., Dulieu O.* // J. Chem. Phys. 2002. Vol. 17. N 11. P. 5155–5164.
- [11] *Окуневич А.И.* // Оптическая ориентация атомов и молекул. Л.: 1987. С. 65–76.
- [12] *Happer W.* // Rev. Mod. Phys. 1972. Vol. 44. N 4. P. 169–249.
- [13] *Micalizio S., Godone A. et al.* // Phys. Rev. 2006. Vol. 73 A. P. 033 414.
- [14] *Картошкин В.А.* // Опт. и спектр. 2010. Т. 103. № 6. С. 314–317.
- [15] *Дмитриев С.П., Доватор Н.А.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 2. С. 115–117.