

01

## Сдвиги частоты магнитного резонанса в тандемном Cs—K-магнитометре, обусловленные спиновым обменом

© В.А. Картошкин

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

Поступила в редакцию 31.03.2020 г.

В окончательной редакции 31.03.2020 г.

Принята к публикации 04.05.2020 г.

Рассчитаны сдвиги частоты магнитного резонанса атомов Cs и K, обусловленные спиновым обменом в условиях оптической ориентации атомов. Изучаемая ситуация характерна для случая тандемного магнитометра на смеси атомов цезия и калия, находящихся в одной рабочей камере.

**Ключевые слова:** спиновый обмен, поперечные сечения, сдвиги частоты магнитного резонанса.

DOI: 10.21883/OS.2020.09.49859.125-20

### Введение

В настоящее время большую роль в проведении разного рода магнитных измерений играют квантовые магнитометры с оптической накачкой (КМОН) [1,2]. В качестве рабочих сред такого рода магнитометров выступают атомы щелочных металлов в основном состоянии [3], смеси щелочных атомов и возбужденных атомов гелия в метастабильном состоянии  $2^3S_1$  [4], возбужденные атомы гелия в метастабильном состоянии  $2^3S_1$  [5].

Возросшее внимание к КМОН обусловлено, в частности, использованием квантовых магнитометров в прикладных целях в качестве элементов, входящих, в частности, в квантовые гироскопы и магнитоэнцефалографы. Использование в качестве рабочих сред в этих устройствах атомов щелочных металлов вместе с тем приводит к определенным проблемам. Эти проблемы обусловлены, в первую очередь, столкновениями с участием щелочных атомов. Подобного рода столкновения сопровождаются процессом спинового обмена, т.е. процессом обмена электронной поляризацией между сталкивающимися частицами, если последние обладают не скомпенсированным электронным спином. В дальнейшем за время между столкновениями происходит перераспределение электронной поляризации между электронной и ядерной степенями свободы щелочного атома, обусловленное сверхтонким взаимодействием. Как и практически любой процесс, спиновый обмен характеризуется как положительными моментами — возможностью передачи поляризации партнеру столкновения от предварительно оптически ориентированных атомов, так и отрицательными. К последним можно отнести уширение линий магнитного резонанса атомов, что отрицательно сказывается на точностных характеристиках КМОН, а также возникновение сдвигов частоты магнитного резонанса сталкивающихся атомов. Следует отметить, что в слу-

чае, когда спиновый обмен сопровождается неупругим процессом — хемоионизацией, как это имеет место, например, в [4], последний процесс существенно влияет как на сечения спинового обмена [6], так и на сдвиги частоты магнитного резонанса [7].

Для реализации определенного круга метрологических задач требуется сочетание быстродействия прибора и точности измерения. Зачастую подобные свойства оказывается трудно реализовать в одном устройстве, и тогда для решения поставленных задач используются квантовые магнитометры, построенные по типу „тандема“. Это устройство, которое в рабочей камере содержит смесь атомов щелочных металлов.

В [8] была предложена схема магнитометра, в рабочей камере которого находилась смесь щелочных атомов Cs и K. В устройстве поляризованные атомы Cs использовались для создания  $M_x$ -магнитометра, а поляризованные атомы K для создания  $M_z$ -магнитометра. Оба щелочных атома оптически ориентировались резонансным циркулярно поляризованным светом газоразрядных ламп. Для уменьшения деполаризации атомов при столкновении со стенкой камеры поглощения, в которой находилась смесь щелочных атомов, она покрывалась антирелаксационным покрытием — парафином. Таким образом, основным релаксационным процессом в камере поглощения были столкновения поляризованных щелочных атомов между собой, т.е. спиновый обмен. Как отмечалось выше, этот процесс приводит, в частности, к сдвигу частоты линий магнитного резонанса сталкивающихся атомов.

Присутствие в камере поглощения смеси щелочных атомов ведет к тому, что в условиях оптической ориентации в камере поглощения происходят столкновения как атомов K в основном состоянии между собой (то же имеет место для атомов Cs в основном состоянии), так и столкновения между атомами K и Cs. В работе будет рассмотрено влияние спин-обменных столкнове-

ний щелочных атомов цезия и калия на сдвиги частоты магнитного резонанса этих атомов.

## 1. Спин-обменные сдвиги частоты для смеси щелочных атомов

Рассмотрение спин-обменных сдвигов частоты магнитного резонанса в смеси щелочных атомов было проведено в [9]. Эволюция матрицы плотности атомов А описывается следующим уравнением:

$$\frac{d^{(A)}}{dt} \rho = \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_{AB} + \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_{AA} + \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_{AC} + \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_W + \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_H \right]^{(A)} \rho. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывает изменение матрицы плотности из-за столкновений атомов А и В, второе слагаемое — изменение матрицы плотности из-за столкновений атомов А и А, третье слагаемое — изменение матрицы плотности из-за столкновений атомов А с атомами буферного газа С, четвертое слагаемое — влияние диффузии к стенкам камеры поглощения, последнее слагаемое — влияние взаимодействия атомов с постоянным магнитным полем. Поскольку в [8] эксперименты проводились в камере поглощения с антирелаксационным покрытием без буферного газа, то третьим и четвертым слагаемыми можно пренебречь.

В соответствии с [9] учет только спин-обменных столкновений приводит к следующим выражениям для сдвигов частоты магнитного резонанса двух сверхтонких состояний щелочного атома:

$$\Delta\omega(\pm) = \delta^{(1)}\omega(\pm) + \delta^{(2)}\omega. \quad (2)$$

Здесь первое слагаемое обусловлено возникновением у атома А добавки к поперечной компоненте ориентации в столкновениях с продольно ориентированными атомами В, а второй член обусловлен переносом поперечной ориентации с одного подуровня  $F$  атома А на другой в результате столкновений. Представленные в (2) сдвиги в соответствии с [9] имеют следующий вид:

$$\delta^{(1)}\omega(+)= -\frac{P_z(B)}{2(2I_A+1)} \left[ \bar{\gamma}_{AB} - \bar{\gamma}_{AA}B - \left( \frac{2I_A-1}{2I_A+1} \right)^{1/2} \right], \quad (3)$$

$$\delta^{(1)}\omega(-)= -\frac{P_z(B)}{2(2I_A+1)} \left[ \bar{\gamma}_{AB} + \bar{\gamma}_{AA}B + \left( \frac{2I_A+3}{2I_A+1} \right)^{1/2} \right], \quad (4)$$

$$\delta^{(2)}\omega = -\frac{C}{\bar{\omega}_0} \{ (2\bar{\gamma}_{AA} + 3\bar{\gamma}_{AB})^2 - [\bar{\gamma}_{AA}P_s(B)]^2 \}. \quad (5)$$

Здесь  $\delta^{(1)}\omega(+)$  — сдвиг частоты магнитного резонанса для сверхтонкого состояния  $\mathbf{F} = \mathbf{S} + \mathbf{I}$  (где  $\mathbf{S}$  — электронный спин, в случае щелочных атомов он равен 1/2,  $\mathbf{I}$  — ядерный спин щелочного атома),  $\delta^{(1)}\omega(-)$  —

сдвиг частоты магнитного резонанса для сверхтонкого состояния  $\mathbf{F} = \mathbf{S} - \mathbf{I}$ ,  $P_z(B)$  — поляризация частицы В,  $I_A$  — ядерный спин частицы А,  $\bar{\gamma}_{AB}$  и  $\bar{\gamma}_{AA}$  — мнимые части комплексной скорости спинового обмена  $\gamma$ , которая может быть выражена через комплексное сечение спинового обмена. Мнимые части комплексной скорости спинового обмена можно представить в виде  $\bar{\gamma}_{AB} = \langle v_{AB} \rangle N_B \bar{q}_{AB}$ , где  $N_B$  — концентрация частиц сорта В,  $\langle v_{AB} \rangle = (8k_B T / \pi \mu_{AB})^{1/2}$  — средняя относительная тепловая скорость сталкивающихся частиц (здесь  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура,  $\mu_{AB}$  — приведенная масса),  $\bar{q}_{AB}$  — мнимая часть сечения спинового обмена сталкивающихся частиц,  $\bar{\omega}_0 = H_0 |g_s| \mu_B / \hbar$  (частота электронной прецессии),  $H_0$  — постоянное магнитное поле,  $g_s$  —  $g$ -фактор электрона,  $\mu_B$  — магнетон Бора. Индексы AA и AB соответствуют столкновениям между одинаковыми или разными щелочными атомами соответственно, величины  $C$ ,  $B_{\pm}$  в соответствии с [9] имеют вид

$$B_+ = \frac{2I_A + 2}{6} \left( \frac{2I_A + 3}{2I_A + 1} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

$$B_- = \frac{2I_A}{6} \left( \frac{2I_A - 1}{2I_A + 1} \right)^{1/2},$$

$$C = \frac{2I_A(2I_A + 2)(2I_A + 3)(2I_A - 1)}{288(2I_A + 1)^4}. \quad (7)$$

Таким образом, для расчета интересующих нас сдвигов частоты магнитного резонанса, обусловленных спиновым обменом, в соответствии с (3)–(5) необходимо знать величины комплексных сечений спинового обмена (в первую очередь их мнимых частей) для следующих пар сталкивающихся атомов: Cs–Cs, Cs–K и K–K.

## 2. Комплексные сечения спинового обмена атомов Cs–Cs, Cs–K и K–K

Столкновения щелочных атомов можно описать с помощью соответствующих потенциалов взаимодействия. Поскольку в основном состоянии все щелочные атомы имеют нескомпенсированный электронный спин ( $\mathbf{S} = \mathbf{1}/2$ ), то образующийся в процессе столкновения димер может быть описан с помощью двух потенциалов, соответствующих полным электронным спинам  $\mathbf{S} = \mathbf{0}$  (синглетный терм  $X^1\Sigma^+$ ) и  $\mathbf{S} = \mathbf{1}$  (триплетный терм  $a^3\Sigma^+$ ). В работах [10–12] на основании потенциалов взаимодействия между щелочными атомами в основном состоянии были рассчитаны комплексные сечения спинового обмена для пар сталкивающихся атомов Cs–Cs, Cs–K и K–K:

$$q = \bar{q} + i\bar{\bar{q}}.$$

Здесь действительная часть комплексного сечения ( $\bar{q}$ ) определяет передачу поляризации в столкновении, релаксацию и образование высших поляризационных моментов [13], в то время как мнимая часть сечения ( $\bar{\bar{q}}$ )

Зависимость коэффициентов, входящих в (3)–(7), от ядерного спина  $I_A$

Коэффициент	$I_A(\text{Cs}) = 7/2$	$I_A(\text{K}) = 3/2$
$B_+$	$\frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{4}}$	$\frac{5}{6} \sqrt{\frac{3}{2}}$
$B_-$	$\frac{7}{6} \sqrt{\frac{3}{4}}$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2}}$
$\left(\frac{2I_A - 1}{2I_A + 1}\right)^{1/2}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$
$\left(\frac{2I_A + 3}{2I_A + 1}\right)^{1/2}$	$\sqrt{\frac{5}{4}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$
$C$	0.0032	0.0012

определяет сдвиг частоты магнитного резонанса в системе зеемановских и сверхтонких уровней атомов [14].

### Система Cs–Cs

Комплексные сечения спинового обмена для атомов были рассчитаны в работе [10] на основании потенциалов взаимодействия, представленных в [15,16]. Атом цезия ( $^{133}\text{Cs}$ ) в основном состоянии  $6s5p^6$  обладает электронным спином  $S = 1/2$  и ядерным спином  $I = 7/2$ . Таким образом, у атома цезия существует два сверхтонких уровня в основном состоянии:  $F = 3$  и  $F = 4$ .

### Система Cs–K

В [11] были рассчитаны комплексные сечения спинового обмена между атомами цезия и калия. При расчете были использованы потенциалы взаимодействия, полученные в [17,18]. В природе существуют два изотопа калия —  $^{39}\text{K}$  и  $^{41}\text{K}$ . В тандеме Cs–K использовались атомы изотопа  $^{39}\text{K}$  в основном состоянии  $4s3p^6$ , обладающие ядерным спином  $I = 3/2$  и имеющие два сверхтонких состояния  $F = 2$  и  $F = 1$ , и атомы  $^{133}\text{Cs}$  в основном состоянии  $6s5p^6$ , обладающие электронным спином  $S = 1/2$  и ядерным спином  $I = 7/2$ .

### Система K–K

В [12] были рассчитаны комплексные сечения спинового обмена для пары атомов  $^{39}\text{K}$ – $^{39}\text{K}$  на основании потенциалов взаимодействия из работ [19–21]. Атомы изотопа калия  $^{39}\text{K}$  в основном  $4s3p^6$  обладают электронным спином  $S = 1/2$  и ядерным спином  $I = 3/2$ .

На рис. 1 и 2 представлены усредненные по скоростям действительные и мнимые части комплексного сечения спинового обмена рассматриваемых пар атомов, рассчитанные в [10–12]. Поскольку в выражения для сдвигов частоты (3)–(5), обусловленных спиновым обменом, входят мнимые части ( $\bar{v}_{AB}$  и  $\bar{v}_{AA}$ ) комплексной скорости

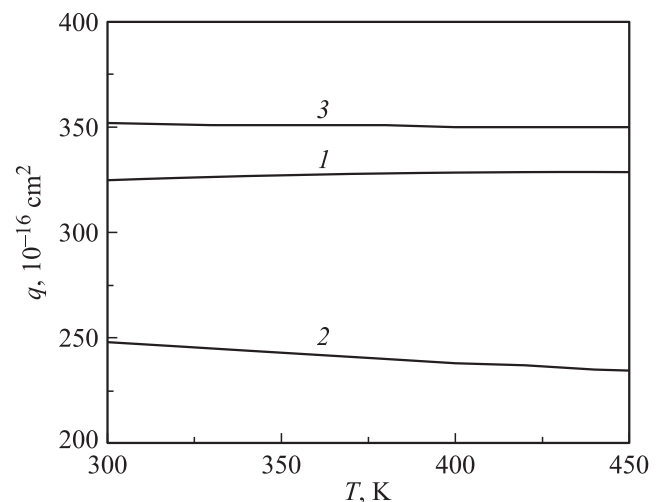


Рис. 1. Температурные зависимости действительных частей усредненных по скоростям комплексных сечений спинового обмена при столкновении атомов цезия и калия: 1 — система K–Cs [11], 2 — система K–K [12], 3 — система Cs–Cs [10].

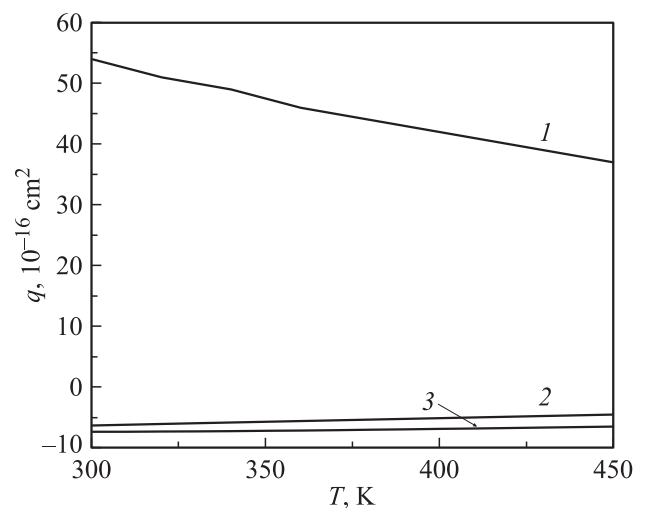
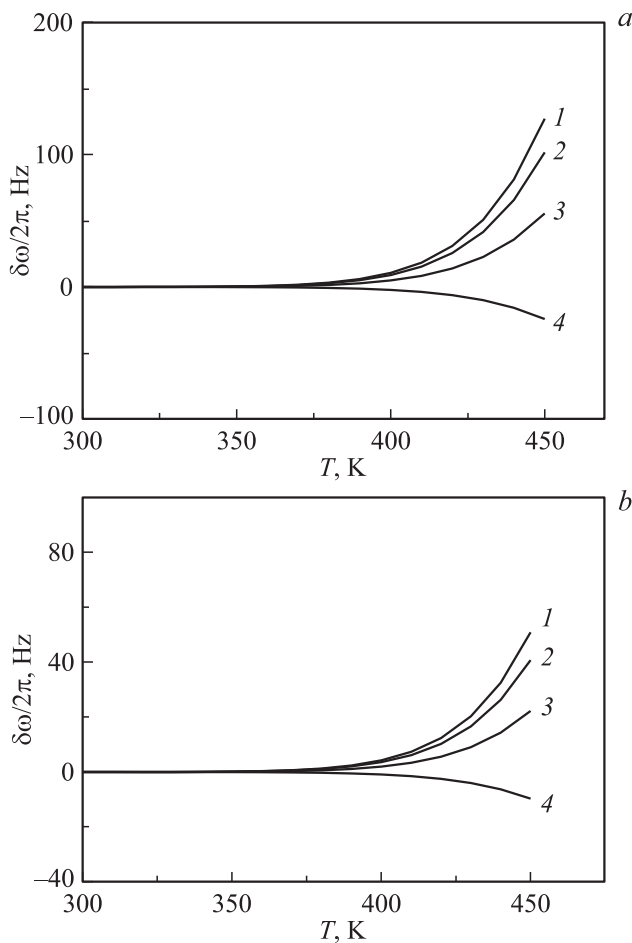


Рис. 2. Температурные зависимости мнимых частей усредненных по скоростям комплексных сечений спинового обмена при столкновении атомов цезия и калия: 1 — система K–K [12], 2 — система Cs–Cs [10], 3 — система K–Cs [11].

спинового обмена  $\gamma$ , зависящие от концентрации щелочных атомов, то необходимо учитывать, что в камере поглощения присутствует смесь щелочных атомов K и Cs. Концентрация атомов щелочных металлов определялась в соответствии с таблицами, приведенными в [22]. При использовании смеси щелочных атомов для перехода от температуры камеры поглощения к концентрации в ней щелочных атомов необходимо воспользоваться законом Рауля для давления насыщенного пара над расплавом смеси металлов. В [8] предполагалось, что в расплаве присутствуют щелочные атомы двух сортов в равных весовых соотношениях.



**Рис. 3.** (а) Зависимость сдвигов частоты магнитного резонанса от температуры при поляризации атома мишени в 50% ( $P_z(B)$ ): 1, 2 — атом мишени Cs; 3, 4 — атом мишени K; 1 —  $\delta\omega(+)$  (K–Cs), 2 —  $\delta\omega(-)$  (K–Cs), 3 —  $\delta\omega(-)$  (Cs–K), 4 —  $\delta\omega(+)$  (Cs–K). б) То же, что на (а), при поляризации атома мишени в 20%.

### 3. Расчет спин-обменных сдвигов частоты для случая атомов K и Cs

Расчет сдвигов частоты проводился на основании выражений (3)–(5) с учетом полученных ранее температурных зависимостей мнимых частей комплексных сечений спинового обмена. В таблице приведены значения коэффициентов из (3)–(7) для случаев, когда в качестве атома А выступает Cs или K. Результаты расчета приведены на рис. 3, а, б. Как видно из рисунков, по мере увеличения температуры в камере поглощения (а следовательно, и концентрации щелочных атомов) сдвиги частоты как  $\delta^{(1)}\omega(+)$ , так и  $\delta^{(1)}\omega(-)$  растут по абсолютной величине. При этом сдвиг  $\delta^{(1)}\omega(+)$ , обусловленный столкновениями атомов Cs с атомами K, остается отрицательным во всем диапазоне исследуемых температур, в то время как остальные сдвиги, а именно  $\delta^{(1)}\omega(-)$  для пар K–Cs и Cs–K и  $\delta^{(1)}\omega(+)$  для пары K–Cs остаются положительными во всем диапазоне ис-

следуемых температур. На рис. 3, а, б приведены результаты расчетов для двух значений поляризации атомов В — 50 и 20%.

Сдвиг частоты магнитного резонанса  $\delta^{(2)}\omega$ , представленный вторым членом в (2), существенно меньше, чем сдвиги  $\delta^{(1)}\omega(\pm)$ . Действительно, в магнитном поле порядка  $10^{-4}$  Т величина  $\bar{\omega}_0 = H_0|g_s|\mu_B/\hbar$  составляет порядка  $10^5$  Hz, величина в фигурных скобках выражения (5) при концентрации атомов порядка  $10^{12}$  см $^{-3}$  составляет порядка  $10^6$  с $^{-1}$ . С учетом величины  $C$  из таблицы получается, что  $\delta^{(2)}\omega/2\pi$  составляет порядка  $10^{-4}$  Hz, т.е. существенно меньше чем величины  $\delta^{(1)}\omega(\pm)$ , и сдвигами второго вида можно пренебречь.

### Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Budker D., Romalis M. // Nature Physics. 2007. V. 3. N 4. P. 227–234.
- [2] Александров Е.Б., Вершовский А.К. // УФН. 2009. Т. 179. № 6. С. 605–637.
- [3] Groeger S., Bison G., Schenker J.L. et al. // Eur. Phys. J. D. 2006. V. 38. N 2. P. 239–247.
- [4] Блинов Е.В., Житников Р.А., Кулешов П.П. // ЖТФ. 1979. Т. 49. № 1. С. 588–596.
- [5] Gilles H., Hamel J., Cheron B. // Rev. Sci. Instr. 2001. V. 72. N 5. P. 2253–2260.
- [6] Картошкин В.А., Клементьев Г.В., Мельников В.Д. // ЖТФ. 1985. Т. 55. № 1. С. 131–136.
- [7] Клементьев Г.В., Мельников В.Д., Картошкин В.А. // Химическая физика. 1985. Т. 4. № 1. С. 37–41.
- [8] Александров Е.Б., Балабас М.В., Вершовский А.К., Пазгалев А.С. // ЖТФ. 2000. Т. 70. № 7. С. 118–124.
- [9] Окуневич А.И. // Опт. и спектр. 1995. Т. 79. № 5. С. 718.
- [10] Дмитриев С.П., Доватор Н.А., Картошкин В.А. // ЖТФ. 2015. Т. 85. № 6. С. 40–43; Dmitriev S.P., Dovator N.A., Kartoshkin V.A. // Tech. Phys. 2015. V. 60. N 6. P. 826–829.
- [11] Картошкин В.А. // Опт. и спектр. 2012. Т. 113. № 3. С. 264–268; Kartoshkin V.A. // Opt. Spectrosc. 2012. V. 113. N 3. P. 235–239.
- [12] Картошкин В.А. // Опт. и спектр. 2011. Т. 111. № 6. С. 924–927; Kartoshkin V.A. // Opt. Spectrosc. 2011. V. 111. N 6. P. 881–884.
- [13] Дмитриев С.П., Доватор Н.А., Картошкин В.А., Окуневич А.И. // Опт. и спектр. 1994. Т. 77. № 5. С. 712–713; Dmitriev S.P., Dovator N.A., Kartoshkin V.A., Okunevich A.I. // Opt. Spectrosc. 1994. V. 77. N 5. P. 712.
- [14] Картошкин В.А. // Опт. и спектр. 2010. Т. 108. № 6. С. 914–917; Kartoshkin V.A. // Opt. Spectrosc. 2010. V. 108. N 6. P. 866–869.
- [15] Xie F., Sovkov V.B. et al. // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. P. 051102.
- [16] Amiot C., Dulieu O. // J. Chem. Phys. 2002. V. 117. N 11. P. 5155–5164.
- [17] Ferber R., Klincare I., Nikolayeva O. et al. // J. Chem. Phys. 2008. V. 128. P. 244316-1-9.

- [18] *Ferber R., Klinkare I., Nikolayeva O. et al.* // *Phys. Rev. A.* 2009. V. 80. P. 062501-1-9.
- [19] *Amiot C.* // *J. Molec. Spectrosc.* 1991. V. 146. N 2. P. 370–382.
- [20] *Amiot C., Verges J., Fellows C.* // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 103. N 9. P. 3350–3356.
- [21] *Ahmed E., Lyura A.M., Xie F. et al.* // *J. Molec. Spectrosc.* 2005. V. 234. N 1. P. 41–52.
- [22] *Несмеянов А.Н.* Давление паров химических элементов. М.: Изд-во АН СССР, 1961. 396 с.