01

Взаимодействия с участием оптически ориентированных атомов Na и Cs в основном состоянии в смеси Na-Cs. Сдвиги частоты

© В.А. Картошкин

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

Поступила в редакцию 12.04.2024 г. В окончательной редакции 29.07.2024 г. Принята к публикации 29.07.2024 г.

Рассмотрено взаимодействие щелочных атомов Na и Cs в смеси Na–Cs при оптической ориентации. Подобные системы используются в качестве рабочих сред при создании устройств, работающих на принципах оптической ориентации атомов и использующихся для магнитных измерений. В частности, при разработке квантовых магнитометров, гироскопов, а также в магнитоэнцефалографах. Оптически ориентированные атомы щелочных металлов в рабочей камере таких устройств сталкиваются друг с другом, при этом столкновения атомов сопровождаются известным процессом спинового обмена (т.е. имеет место обмен электронной поляризацией между сталкивающимися атомами). Процесс спинового обмена существенно влияет на ширину линии магнитного резонанса, а также на сдвиг частоты. В работе проведен расчет зависимостей сдвигов частоты магнитного резонанса от температуры в интервале T = 300-400 K, обусловленных столкновениями оптически ориентированных атомов для различных сверхтонких уровней этих атомов (полный момент F = 4, 3 атомов Cs и F = 2, 1 атомов Na). Установлено существенное различие в зависимости сдвигов от температуры при оптической ориентации атомов ¹³³ Cs или ²³ Na для разных сверхтонких уровней.

Ключевые слова: сдвиг частоты, оптическая ориентация, магнитный резонанс.

DOI: 10.61011/OS.2024.07.58892.6259-24

Введение

Квантовые магнитометры, работающие на принципах оптической ориентации (ОО) атомов в качестве "магниточувствительного элемента", используют линию магнитного резонанса (ЛМР) оптически ориентированных атомов. На точность и чувствительность этих устройств влияют следующие характеристики: отношение сигнал-шум, сдвиг ЛМР относительно точного резонанса, а также магнитные и радиотехнические шумы. При оптической ориентации щелочных атомов в качестве источников сдвига частоты выступают свет накачки, столкновения атомов в объеме рабочей камеры между собой или с атомами буферного газа. Избежать негативного влияния света накачки возможно в условиях "непрямой" оптической ориентации атомов, т.е. в ситуации, когда оптически ориентируются атомы одного сорта, а атомы другого сорта приобретают поляризацию в результате столкновений с оптически ориентированными атомами. В работе будет рассмотрен случай, когда в камере поглощения присутствует смесь щелочных атомов Na и Cs и сдвиг частоты обусловлен столкновениями между атомами Cs-Cs, Cs-Na и Na-Na. Подобного рода ситуация была рассмотрена ранее для смеси K-Cs [1], которая используется в так называемых ко-магнитометрах [2-4] наряду со смесью 39 K $-^{85}$ Rb[5–7].

Точность измерения в устройствах, использующих принцип ОО атомов, зависит, в частности, от соответствия измеряемой частоты ЛМР значению постоянного магнитного поля, в котором находится рабочая камера устройства, содержащая смесь щелочных атомов. В работе будет рассмотрена ситуация, когда сдвиг частоты обусловлен столкновениями между поляризованными атомами в основном состоянии, а в рабочей камере находится смесь щелочных атомов. В этом случае свет накачки взаимодействует только с атомами одного сорта, а у поляризованных за счет столкновений атомов другого сорта нет взаимодействия со светом и, естественно, отсутствуют световые сдвиги.

Таким образом, в работе рассматриваются сдвиги частоты, обусловленные спин-обменными столкновениями одинаковых и разных атомов в условиях ОО.

1. Столкновения с переносом поляризации в смеси Na-Cs

В столкновениях с участием поляризованных щелочных атомов имеет место перенос поляризации, если один из партнеров столкновения был предварительно поляризован в процессе ОО. Подобного рода процесс описывается с помощью комплексного сечения спинового обмена [1,8]:

$$\sigma = \bar{\sigma} + i\bar{\bar{\sigma}}.\tag{1}$$



Рис. 1. Схема нижних энергетических уровней (упрощенная) щелочных атомов ¹³³Cs и ²³Na в присутствии постоянного магнитного поля H_0 : D_1 и D_2 — оптические резонансные линии, использующиеся при ОО атомов, символ \iff указывает на наличие спин-обменных столкновений между атомами в основном состоянии, m_F — проекции полного момента F на выделенное направление (направление постоянного моля H_0).

Здесь первый член выражения (действительная часть) отвечает за перенос поляризации, релаксацию, а второй (мнимая часть) — за сдвиги частоты в системе сверх-тонких и зеемановских уровней атомов.

На рис. 1 представлена упрощенная схема, описывающая процессы, происходящие при ОО атомов в условиях спинового обмена. Снятие вырождения в системе зеемановских подуровней достигается приложением постоянного магнитного поля Н₀, при этом в полях порядка земного и меньше зеемановские подуровни соответствующего сверхтонкого состояния не разрешаются. Оптическая ориентация щелочного атома осуществляется резонансным оптическим излучением линий D_1 или D_2 (для ¹³³Cs $D_1 = 894$ nm, $D_2 = 852$ nm, для ²³Na $D_1 = 589$ nm, $D_2 = 589.6$ nm). При использовании правополяризованного излучения (σ^+) переходы из основного S_{1/2}-состояния в возбужденные P_{1/2} и P_{3/2} происходят с изменением проекции полного момента атома m_F на (+1), в то время как при использовании левополяризованного излучения (σ^{-}) m_F изменяется на (-1). В дальнейшем происходит распад возбужденного состояния с изменением m_F на 0 или ± 1 , что приводит к возникновению неравновесной заселенности в системе зеемановских подуровней основного состояния. Поляризованные таким образом атомы щелочного металла сорта А, сталкиваясь с неполяризованными атомами сорта В, передают им часть своей поляризации. Следует отметить, что при столкновении щелочных атомов при не очень низких температурах, т.е. при температурах, при которых время сверхтонкого взаимодействия $(2\pi\hbar/\Delta E)$ ($\Delta v = 1717 \cdot 10^6$ Hz для ²³Na и $\Delta v = 9192 \cdot 10^6$ Hz для ¹³³Cs [9]) существенно меньше времени столкновения, составляющего порядка 10^{-12} s, процесс спинового обмена может рассматриваться только как эволюция электронных спинов в момент столкновения. То есть предполагается сохранение полного спина электронов в процессе столкновения. При этом связь между электронным и ядерным спинами осуществляется в промежутке между столкновениями. Таким образом, образующаяся в процессе столкновения молекула, состоящая из двух щелочных атомов, может быть описана в основном состоянии с помощью двух потенциалов, соответствующих полным спинам системы $S_1 = 0$ и $S_2 = 1$.

Для определения сдвига частоты в системе зеемановских подуровней возбуждается магнитный резонанс с помощью прикладываемого вращающегося радиочастотного поля для разделения сигналов от двух сверхтонких состояний (сверхтонкие состояния исследуемых атомов имеют одинаковый по модулю g-фактор разного знака) [10]. Таким образом, определялся удвоенный модуль сдвига частоты.

Ранее в [11,12] были рассчитаны сечения (1) при столкновениях атомов Na–Na, Na–Cs, Cs–Cs. Действительная и мнимая части комплексного сечения спинового обмена (1) могут быть выражены через фазы рассеяния для синглетного и триплетного термов димера щелочного металла. Фазы рассеяния определялись в квазиклассическом приближении Джеффриса, модифицированном Лангером [13]. Использование ква-

Таблица 1. Значения мнимой части комплексного сечения спинового обмена $\bar{\sigma}(\times 10^{16} \text{ cm}^2)$ при различных температурах для пар атомов Na–Cs, Cs–Cs, Na–Na

Т,К	Na—Cs по данным работы [18]	Cs–Cs	Na—Na по потенциалам [12,13]	Na—Na по потенциалам [12]
200	-43, 3	-7, 6	-581	-429
250	-45.5	-6.8	-560	-411
300	-47.2	-6.45	-542	-395
350	-48.4	-5.7	-524	-381
400	-49.3	-5.0	-508	-369
450	-49.8	-4.7	-493	-357
500	-50.2	-4.06	-478	-346

зиклассического приближения при расчете фаз рассеяния вполне оправдано, поскольку в случае димеров щелочных металлов с большой приведенной массой $\frac{(l+1/2)^2}{2\mu_{\rm AB}R^2}$ µ_{АВ} центробежный барьер мало изменяется с ростом орбитального квантового числа *l* по сравнению с кинетической энергией. В результате необходимо учитывать вклады большого числа парциальных волн. Комплексные сечения спинового обмена исследуемых пар атомов рассчитывались в интервале энергий столкновения 10⁻⁴-10⁻² а.и. с использованием потенциалов взаимодействия для синглетного и триплетного термов димеров Na-Cs, Na-Na, Cs-Cs. В дальнейшем проводилась процедура максвелловского усреднения сечений по скоростям. Результаты расчета приведены в табл. 1.

На рис. 2 представлены зависимости величины $\bar{\sigma}$ исследуемых пар атомов от температуры, полученные ранее в [11,12]. Видно, что все сечения лежат в области отрицательных значений, причем сечения сдвига для пары Na-Na отличаются примерно в полтора раза для потенциалов Земке [14] (кривая 4) и Земке-Совкова [14,15] (кривая 3). Для кривой 4 расчет сечений проводился с использованием синглетного и триплетного потенциалов из работы [14], в то время как для кривой 3 синглетный потенциал брался из работы [14], а триплетный — из работы [15]. Отрицательный знак у сечения сдвига свидетельствует о том, что в результате спинового обмена резонансная частота сдвигается в сторону меньших значений по отношению к точному значению, определяемому соотношением $\omega = \gamma H_0$, где γ — гиромагнитное отношение, а H_0 величина постоянного магнитного поля.

2. Сдвиги частоты

Сдвиги частоты двух сверхтонких подуровней щелочного атома имеют вид [16]:

$$\delta^{(1)}\omega(+) = -\frac{P_z(\mathbf{B})}{2(2I_{\mathrm{A}}+1)} \Big[\bar{\bar{\gamma}}_{\mathrm{AB}} - \bar{\bar{\gamma}}_{\mathrm{AA}} \mathbf{B}_{-} \Big(\frac{2I_{\mathrm{A}}-1}{2I_{\mathrm{A}}+1}\Big)^{1/2}\Big],\tag{2}$$



Рис. 2. Зависимости мнимой части комплексного сечения спинового обмена от температуры: *1* — Na–Cs [20], *2* — Cs–Cs, *3* — Na–Na [14,15], *4* — Na–Na [14].

$$\delta^{(1)}\omega(-) = -\frac{P_z(\mathbf{B})}{2(2I_{\mathbf{A}}+1)} \cdot \left[\bar{\bar{p}}_{\mathbf{A}\mathbf{B}} + \bar{\bar{p}}_{\mathbf{A}\mathbf{A}}\mathbf{B}_+ \left(\frac{2I_{\mathbf{A}}+3}{2I_{\mathbf{A}}+1}\right)^{1/2}\right].$$
(3)

Сдвиги частоты $\delta^{(1)}\omega(+)$ атома А (сверхтонкое состояние F = I + S, где F — полный момент атома, I — ядерный спин, S — электронный спин) и $\delta^{(1)}\omega(-)$ (сверхтонкое состояние F = I - S), $P_z(B)$ — степень поляризации атома В (атом В поляризуется резонансным оптическим излучением), \bar{p}_{AA} — мнимая часть скорости спинового обмена при столкновении атомов А. Эта величина зависит от мнимой части сечения $\bar{\sigma}_{AA}$, средней относительной скорости сталкивающихся частиц $\langle v_{AA} \rangle = (8k_BT/\pi\mu_{AA})^{1/2}$ (здесь k_B — постоянная Больцмана, T — температура в рабочей камере, μ_{AA} — приведенная масса при столкновении одинаковых атомов) и концентрации N_A атомов A в камере поглощения:

$$\bar{\bar{\gamma}}_{\mathrm{AA}} = N_{\mathrm{A}} \langle v_{\mathrm{AA}} \rangle \bar{\bar{\sigma}}_{\mathrm{AA}}.$$

Аналогично выглядит величина \bar{p}_{AB} для случая столкновения атомов А и В. Индексы А и В соответственно относятся к атомам Сs или Na.

Таблица 2. Коэффициенты B_+ и B_- , входящие в выражения (4) и (5) и зависящие от ядерных спинов *I* сталкивающихся атомов

Ядерный спин, коэффициенты	¹³³ Cs	²³ Na
I _A	7/2	3/2
B_	$3\sqrt{5}/4$	$5/6\sqrt{3/2}$
\mathbf{B}_+	$7\sqrt{3}/12$	$1/2\sqrt{1/2}$

Коэффициенты B_- и B_+ в соответствии с [16] зависят от ядерных спинов атомов, участвующих в столкновениях (табл. 2). В частности, для рассматриваемой пары атомов Cs и Na имеем

$$B_{+} = \frac{2I_{A} + 2}{6} \left(\frac{2I_{A} + 3}{2I_{A} + 1}\right)^{1/2},$$
 (4)

$$B_{-} = \frac{2I_{A}}{6} \left(\frac{2I_{A}-1}{2I_{A}+1}\right)^{1/2}.$$
 (5)

Поскольку выражения (2), (3) включают зависимости мнимых частей комплексной скорости спинового обмена от температуры, то для расчета сдвигов необходимо знать концентрацию каждого из щелочных атомов в камере поглощения. Для расчета концентраций использовались таблицы из [17]. Поскольку в данной работе рассматривается смесь щелочных атомов, то для перехода от температуры камеры поглощения к концентрации щелочных атомов в ней необходимо использовать закон Рауля для давления насыщенного пара над расплавом смеси металлов. При расчете предполагалось, что щелочные металлы в смеси присутствуют в равных весовых соотношениях.

На рис. 3 приведены зависимости сдвигов частоты от температуры для случая, когда ОО подвергаются атомы Na (B), а сдвиг частоты наблюдается у атомов Cs (A). Из рисунка видно, что сдвиг $\delta^{(1)}\omega(-)$, соответствующий сверхтонкому состоянию атома Cs F = I - S = 3, лежит в области положительных значений. Исходя из выражения (3), которым этот сдвиг определяется, следует, что основной вклад в сдвиг вносят оба члена в квадратной скобке, определяемые, в частности, мнимыми частями комплексной скорости спинового обмена $\bar{\bar{y}}_{AB} = \langle v_{AB} \rangle N_{AB} \bar{\bar{\sigma}}_{AB}$ (в случае одинаковых атомов индекс В заменяется на А). Как следует из данных рис. 2, входящие в выражения (2) и (3) величины $\bar{\gamma}_{AB}$ и $\bar{\bar{\gamma}}_{AA}$ определяются мнимыми частями комплексных сечений $\bar{\sigma}_{AB}$ и $\bar{\sigma}_{AA}$, которые имеют одинаковый знак. В то же время сдвиг $\delta^{(1)}\omega(+)$ для сверхтонкого уровня *F* = *I* + *S* = 4 лежит в области отрицательных значений и по абсолютной величине меньше, чем сдвиг $\delta^{(1)}\omega(-)$. Это связано с тем, что в соответствии с соотношением (2) вклады от первого и второго членов в квадратной скобке имеют разные знаки, что обусловлено величинами $\bar{y}_{AB} = \langle v_{AB} \rangle N_{AB} \bar{\sigma}_{AB}$ и $\bar{y}_{AA} = \langle v_{AA} \rangle N_{AA} \bar{\sigma}_{AA}$, которые



Рис. 3. Зависимости сдвигов частоты магнитного резонанса от температуры для двух сверхтонких состояний атома Cs $\delta^{(1)}\omega(+)$ (1–3) и $\delta^{(1)}\omega(-)$ (4–6) при трех значениях степени поляризации атомов Na: $P_z(B) = 100$ (1, 4), 50 (2, 5) 20% (3, 6).

в свою очередь зависят от сечений $\bar{\sigma}_{AB}$ и $\bar{\sigma}_{AA}$ (рис. 2). Причем первый член зависит от концентрации атомов B, в данном случае это атомы Na, которая существенно меньше, чем концентрация атомов Cs. Таким образом, рассматриваемый сдвиг определяется вторым слагаемым в квадратной скобке. Потенциал взаимодействия для расчета сечений пары Cs–Cs был взят из работы [18].

При ОО в смеси атомов Cs сдвиг зависит от мнимой части сечения $\bar{\sigma}_{AB}$ для пары Cs—Na и мнимой части сечения $\bar{\sigma}_{AA}$ для пары Na—Na. Искомые сечения были ранее рассчитаны в [11,12] для различных потенциалов взаимодействия. Результаты по мнимым частям сечений приведены на рис. 2. Как уже отмечалось, сечения имеют одинаковый знак и отличаются примерно в полтора раза (рис. 2). Встает вопрос, каким образом подобное различие скажется на сдвигах частоты атомов Na.

На рис. 4 приведены зависимости сдвигов частоты от температуры у атомов Na для двух сверхтонких состояний при OO атомов Cs. Система Cs–Na описывается потенциалами из [19], а взаимодействие между двумя атомами Na — потенциалами из [14]. Как видно из рисунка, сдвиги частоты для двух сверхтонких состояний имеют одинаковый знак и практически совпадают. Это обусловлено тем, что основной вклад в сдвиг вносят первые члены в квадратных скобках выражений (2) и (3), которые определяются столкновениями атомов натрия с атомами цезия. Как и в предыдущем случае, концентрация Cs при одинаковых температурах выше, чем концентрация Na, кроме того, скорость столкновения атомов для пары Cs–Na выше, чем для пары Na–Na, что определяет величины $\bar{\gamma}_{AB}$ и $\bar{\gamma}_{AA}$.

Зависимости сдвигов частоты от температуры у атомов Na для случая, когда оптически ориентируются атомы Cs и система Cs—Na описывается потенциалами из [14,15], практически совпадают и имеют такой же



Рис. 4. Зависимости сдвигов частоты магнитного резонанса от температуры для двух сверхтонких состояний атома Na $\delta^{(1)}\omega(+)$ (1–3) и $\delta^{(1)}(-)\omega$ (4–6) при трех значениях степени поляризации атомов Cs: $P_z(B) = 100$ (1, 4), 50 (2, 5) 20% (3, 6).

знак, как и в случае использования потенциалов из [14]. Поэтому в работе они не приводятся.

Заключение

Следует заметить, что несмотря на существенное различие сечений $\bar{\sigma}_{AA}$, в случае, когда оптической ориентации подвергается атом Cs, а сдвиги определяются для атомов Na, величины сдвигов частот этих атомов практически совпадают. Это обусловлено тем, что основной вклад в сдвиги частоты атомов натрия в смеси Cs–Na дают столкновения атомов натрия с атомами Cs. Кроме того, абсолютное значение сдвигов атомов Na больше чем на порядок превышает сдвиги атомов Cs.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- В.А. Картошкин. Опт. и спектр., **128** (9), 1355 (2020).
 DOI: 10.21883/OS.2020.09.49859.125-20 [V.A. Kartoshkin. Opt. Spectrosc., **128** (9), 1355 (2020).
 DOI: 10.1134/S0030400X2009012X].
- Yudong Ding, Wei Xiao, Yixin Zhao et al. Phys. Rev. Appl., 19 (3), 034066 (2023).
 DOI: 10.1103/PhysRevApplied.19.034066
- [3] Е.Б. Александров, М.В. Балабас, А.К. Вершовский, А.С. Пазгалев. ЖТФ, **70** (7), 118 (2000). [Е.В. Aleksandrov, М.V. Balabas, А.К. Vershovskii, F.S. Pazgalev. Tech. Phys., **45**, 931 (2000). DOI: 10.1134/1.1259751].
- [4] Jian-Hua Liu, Dong-Yang Jing, Lin Zhuang, Wei Quan, Jiancheng Fang, Wu-Ming Liu. Chin. Phys. B, 29 (4), 043206 (2020). DOI: 10.1088/1674-1056/ab7d94

- [5] LvYang, Haoying Pang , Wei Quan. Photonics, 11 (2), 182 (2024). DOI: 10.3390/photonics11020182
- [6] Sixun Liu, Ruigang Wang, Linlin Yuan, Jiaqi Wu, Qi Yuan, Jun Zhu, Wenfeng Fan, Zhuo Wang, Pengcheng Du. Opt. Expr., 30 (9), 15310 (2022). DOI: 10.1364/OE.456937
- Y. Chen, W. Quan, S. Zou, Y. Lu, L. Duan, Y. Li, H. Zhang, M. Ding, J. Fang. Sci. Rep., 6, 36547 (2016). DOI: 10.1038/srep36547
- [8] M.M. Hawamdeh, A.S. Sandouqa1, 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
- [9] А.А. Радциг, Б.М. Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике (Атомиздат, М., 1980).
- [10] С.П. Дмитриев, Н.А. Доватор. ЖТФ, 77 (7), 120 (2007).
 [S.P. Dmitriev, N.A. Dovator. Tech. Phys., 52 (7), 940 (2007).
 DOI: 10.1134/S1063784207070183].
- [11] V.A. Kartoshkin. In Alkali metals: new research (Nova Sci. Publ. Publ., 2023). Ch. 3.
- [12] В.А. Картошкин. Опт. и спектр., 116 (4), 588 (2014).
 [V.A. Kartoshkin. Opt. Spectrosc., 116 (4), 548 (2014).
 DOI: 10.1134/S0030400X14030096].
- [13] N.F. Mott, H.S.W. Massey. The Theory of Atomic Collisions (Clarendon Press, Oxford, 1965).
- [14] W.T. Zemke, W.C. Stwalley. J. Chem. Phys., 100 (4), 2661 (1994). DOI: 10.1063/1.467249
- [15] V.S. Ivanov, V.B. Sovkov. J. Chem. Phys., 118 (18), 8242 (2003). DOI: 10.1063/1.1565107
- [16] А.И. Окуневич Опт. и спектр., **79** (5), 718 (1995). A.I. Okunevich. Opt. Spectrosc., **79** (5), 718 (1995)].
- [17] A.N. Nesmeyanov. *Vapor Pressure of the Elements* (Academic Press, N.Y., 1963).
- [18] C. Amiot, O.J. Dulieu. Chem. Phys., 117 (11), 5155 (2002).
 DOI: 10.1063/1.1499122
- [19] O. Docenko, M. Tamanis, J. Zaharova, R. Ferber, A. Pashov,
 H. Knockeland, E. Tiemann. J. Phys. B, **39** (19), S929 (2006).
 DOI: 10.1088/0953-4075/39/19/S08
- [20] В.А. Картошкин. Опт. и спектр., 131 (8), 1047 (2023).
 DOI: 10.21883/OS.2023.08.56294.4731-23 [V.A. Kartoshkin. Opt. Spectrosc., 131 (8), 992 (2023)].