

01

Комплексные сечения спинового обмена в системе Na-Rb. Упругое рассеяние

© В.А. Картошкин

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН,

Санкт-Петербург, Россия

e-mail: victor.kart@mail.ioffe.ru

Поступила в редакцию 26.12.2024 г.

В окончательной редакции 26.12.2024 г.

Принята к публикации 21.03.2025 г.

Исследованы взаимодействия с участием спин-поляризованных атомов щелочных металлов в основном состоянии. Проведен расчет поперечных сечений спинового обмена и упругого рассеяния для пары Na-Rb. Расчет сечений проводится для интервала энергий столкновения атомов от 10^{-4} до 10^{-2} а. е. Представленный расчет позволяет впервые получить температурные зависимости рассматриваемых сечений, которые, в свою очередь, могут быть использованы при рассмотрении кинетики переноса поляризации при оптической ориентации атомов.

Ключевые слова: столкновения поляризованных атомов, непрямая поляризация, поперечные сечения.

DOI: 10.61011/OS.2025.04.60526.7506-24

Введение

Интерес к устройствам квантовой электроники, в основу работы которых положен принцип оптической ориентации атомов, обусловлен возможностями создания высокоточных, чувствительных приборов широкого применения. В первую очередь это относится к квантовым магнитометрам с оптической ориентацией щелочных атомов [1,2], которые используются в качестве ключевых элементов при создании магнитоэнцефалографов [3], магнитокардиографов [4], квантовых гироскопов [5], а также квантовых стандартов частоты и времени [6]. Для подобного рода устройств ключевыми моментами, влияющими на их характеристики, являются отношение сигнал-шум, а также точность измерения частоты линии магнитного резонанса. Ширина и частота линии магнитного резонанса определяются, в частности, интересующими нас сечениями.

Эти сечения обусловлены происходящими в рабочей камере спин-обменными столкновениями. Процесс спинового обмена может быть описан с помощью комплексного сечения спинового обмена [7]. Как следует из [7], зная потенциалы взаимодействия димера NaRb, можно рассчитать фазы рассеяния на соответствующих термах, а с их помощью — интересующие нас поперечные сечения. Столкновение атомов Na и Rb приводит к образованию квазимолекулы (димер) NaRb с полным электронным спином $S = 0, 1$, которым соответствуют синглетный или триплетный термы соответственно.

В зависимости от поставленных задач в работах по оптической ориентации щелочных атомов возможно использование щелочных атомов как одного сорта [8],

так и смеси щелочных атомов [9]. В настоящей работе речь пойдет о смеси атомов Na и Rb.

Наличие в рабочей камере смеси атомов Na и Rb приводит к тому, что в ее объеме происходят столкновения как одинаковых, так и разных атомов. В процессе таких столкновений образуются квазимолекулы, которые могут быть описаны двумя термами, соответствующих полным спинам системы $S = 0$ и $S = 1$. Эти термы характеризуются глубокими потенциальными ямами. В связи с этим в объеме рабочей камеры присутствуют заметные концентрации двухатомных молекул. В частности, при комнатной температуре давление пара Rb_2 равно $7.046 \cdot 10^{-12}$ mmHg, Na_2 — $5.751 \cdot 10^{-14}$ mmHg при температуре 325 K [10].

Спин обменные столкновения исследовались ранее для разных атомов. Столкновения между атомами Na рассматривались в работе [11], а между атомами Rb — в [12]. В настоящей работе рассмотрены столкновения между атомами Na и Rb и рассчитаны сечения, обусловленные этими столкновениями.

Потенциалы взаимодействия димера Na-Rb

При столкновении атомов Na и Rb в S -состоянии образуется димер в синглетном $^1\Sigma$ - или триплетном $^3\Sigma$ -состояниях. В [13] из экспериментов по фурье-спектроскопии димера NaRb были получены данные по синглетному и триплетному потенциалам, короткодействующие части которых ($U_{SR}(R)$) были заданы в табличном виде в интервале межъядерных расстояний от 2.1 до 11 Å для синглетного и от 2.94444 до 11 Å для триплетного термов, а дальнедействующие ($U_{LR}(R)$)

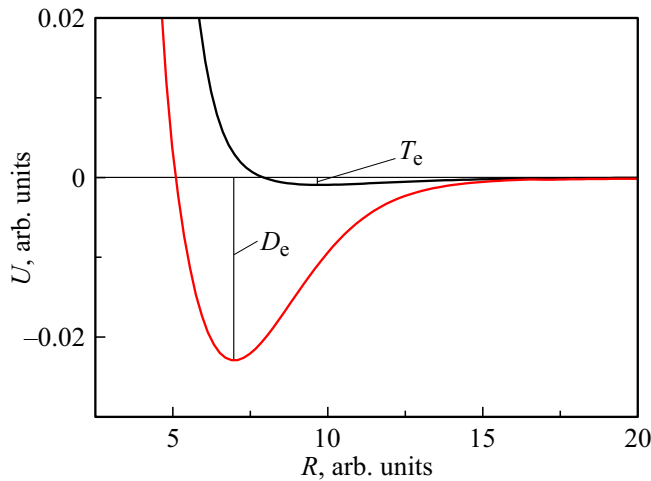


Рис. 1. Потенциалы взаимодействия атомов Na и Rb в основном состоянии (атомная система единиц). По данным [13].

представлены в аналитическом виде. Из данных работы [13] следует, что в области больших межъядерных расстояний ($R > 11 \text{ \AA}$) искомые потенциалы $U_{LR}(R)$ задаются соотношением

$$U_{LR}(R) = U_{\infty} - C_6/R^6 - C_8/R^8 - C_{10}/R^{10} \pm E_{exch}, \quad (1)$$

вклад обменного взаимодействия (E_{exch}) был представлен в виде

$$E_{exch} = A_{ex} R^{\gamma} \exp(-\beta R), \quad (2)$$

E_{exch} входит со знаком (+) в триплетный потенциал и со знаком (–) в синглетный. Коэффициенты, входящие в (1) и (2), имеют [13] следующие значения для синглетного потенциала: $U_{\infty} = 5030.50235 \text{ cm}^{-1}$, $R_0 = 11.2967 \text{ \AA}$, $C_6 = 1.3237 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^6$, $A_{ex} = 2.8609 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^{\gamma}$, $C_8 = 2.9889 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^8$, $\gamma = 5.0081$, $C_{10} = 1.5821 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^{10}$, $\beta = 2.2085 \text{ \AA}^{-1}$, $T_e^X = 0 \text{ cm}^{-1}$, $R_e^X = 3.6434 \text{ \AA}$, $D_e^X = 5030.502(50) \text{ cm}^{-1}$, $D_0^X = 4977.187(50) \text{ cm}^{-1}$ и для триплетного потенциала: $R_0 = 11.3370 \text{ \AA}$, $T_e^a = 4827.14727 \text{ cm}^{-1}$, $R_e^a = 5.6003 \text{ \AA}$, $D_e^a = 203.355(50) \text{ cm}^{-1}$, $D_0^a = 193.365(50) \text{ cm}^{-1}$. Здесь D_e^X — глубина потенциальной ямы для термина $^1\Sigma$, D_e^a — для термина $^3\Sigma$. Соответственно R_e^X и R_e^a — положения минимумов энергии для термов $^1\Sigma$ и $^3\Sigma$, D_0^X и D_0^a — энергии диссоциации относительно нижних колебательно-вращательных уровней.

Используя данные из [13], построены потенциалы взаимодействия в атомной системе единиц. Для интервала расстояний $11 \text{ \AA} \leq R$ при расчете потенциалов использовался метод сплайнирования приведенных в [13] табличных данных по потенциалам. Полученные таким образом зависимости представлены на рис. 1.

Сечения спинового обмена и упругого рассеяния для пары Na и Rb

Расчет интересующих нас сечений проведен в представлении матрицы рассеяния $T_S^{AB}(l)$, где S соответствует полному спину системы 1 или 0, l — орбитальное квантовое число [6,7]. Комплексное сечение спинового обмена:

$$q_{se}^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - T_0^{AB}(l) T_1^{AB}(l)^*], \quad (3)$$

сечения упругого рассеяния:

$$q^{s,t} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - T_{s,t}^{AB}(l)|^2. \quad (4)$$

Здесь $k_{AB} = \mu_{AB} v_{AB} / \hbar$ — волновой вектор, μ_{AB} — приведенная масса сталкивающихся частиц A и B , v_{AB} — средняя относительная скорость сталкивающихся частиц, звездочка обозначает комплексное сопряжение, l — орбитальный момент.

Представление матрицы рассеяния $T_S^{AB}(l)$ через фазы рассеяния ($\delta_S^{AB}(l)$) на соответствующих термах имеет вид

$$T_S^{AB}(l) = \exp(2i\delta_S^{AB}(l)). \quad (5)$$

Тогда действительная ($\bar{q}^{AB}$) и мнимая ($\bar{\bar{q}}^{AB}$) сечения спинового обмена и сечения упругого рассеяния на синглетном (q^0) и триплетном (q^1) термах могут быть представлены в следующем виде [14]:

$$\bar{q}^{AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2[\delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l)] \quad (6)$$

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

$$q^{0,1} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} (2l+1) \sin^2(\delta_{0,1}^{AB}(l)) \quad (7)$$

Следуя [15], полное сечение упругого рассеяния при столкновении разных атомов имеет вид

$$q_{tot} = \frac{1}{4}(q^0 + 3q^1). \quad (8)$$

Используя данные [13], были рассчитаны соответствующие поперечные сечения, представленные в атомной системе единиц на рис. 2.

Результаты расчетов зависимости сечений от энергии столкновения приведены на рис. 2–4. На рис. 2 представлены сечения $\bar{q}^{AB}$ и $\bar{\bar{q}}^{AB}$, на рис. 3 — q^0 и q^1 , на рис. 4 — q_{tot} . Как следует из соотношения (8), основной вклад в полное сечение упругого рассеяния вносит сечение рассеяния на триплетном терме.

Для того, чтобы использовать полученные сечения в экспериментах по оптической ориентации атомов, необходимо перейти от энергетических к температурным

Усредненные по скоростям значения сечений, представленных на рис. 2–4

T, K	$Q^0, 10^{-16} \text{ cm}^2$	$Q^1, 10^{-16} \text{ cm}^2$	$Q_{tot}, 10^{-16} \text{ cm}^2$	$\overline{Q}^{AB}, 10^{-16} \text{ cm}^2$	$\overline{\overline{Q}}^{AB}, 10^{-16} \text{ cm}^2$
300	325.3	314.1	316.9	156.6	–54.2
320	321.5	311.1	313.7	155.8	–54.5
340	317.9	308.3	310.7	154.0	–54.8
360	314.5	305.6	307.8	152.9	–55.1
380	311.4	303.0	305.1	151.7	–55.3
400	308.3	300.5	302.5	150.6	–55.5

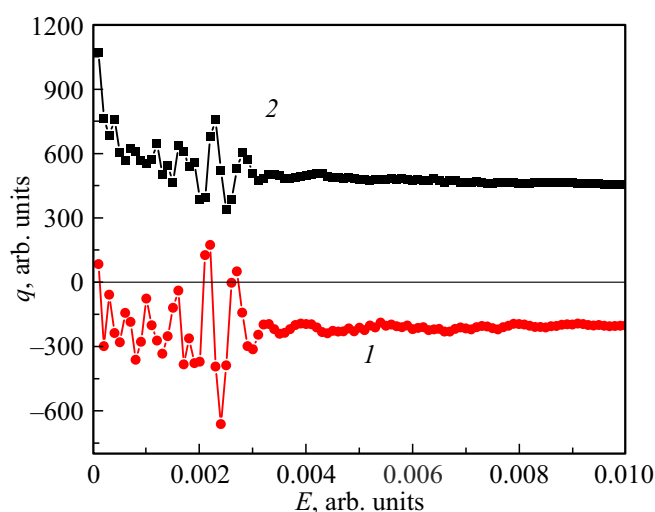


Рис. 2. Действительная (2) и мнимая (1) части сечения спинового обмена для $^{23}\text{Na}-^{85}\text{Rb}$ в атомной системе единиц.

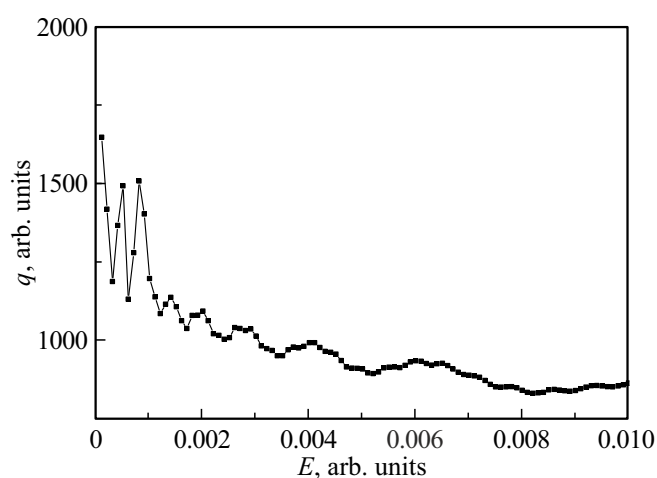


Рис. 4. Зависимость полного сечения упругого рассеяния (q_{tot}) от энергии столкновения для пары $^{23}\text{Na}-^{85}\text{Rb}$ в атомной системе единиц.

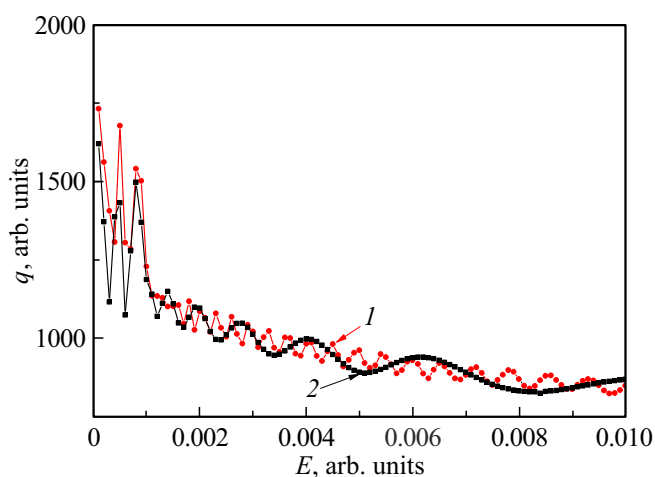


Рис. 3. Зависимость сечений упругого рассеяния q^0 и q^1 от энергии столкновения для пары $^{23}\text{Na}-^{85}\text{Rb}$ в атомной системе единиц.

зависимостям сечений. Результаты усреднения сечений по скоростям приведены в таблице.

Видно, что сечения упругого рассеяния Q^0 (синглетный терм) и Q^1 (триплетный терм) слабо отличаются друг от друга. Сечение Q_{tot} обусловлено в основном сечением Q_1 . Сечение сдвига частоты во всем температурном интервале температур имеет отрицательное значение.

Заключение

Полученные в работе сечения, а также полученные ранее данные по столкновениям Na-Na и Rb-Rb могут быть использованы при рассмотрении кинетики процессов переноса поляризации в смеси щелочных атомов Na-Rb при оптической ориентации атомов. Столкновения оптически ориентированных щелочных атомов в смесях существенным образом влияют на сдвиги частоты магнитного резонанса атомов, которые обусловлены спинным обменом. Вклады в эти сдвиги вносят столкновения как одинаковых, так и разных атомов. Эти вклады в свою очередь зависят как от абсолютных значений сечений, так и от их знаков, а также от концентрации щелочных атомов в рабочей камере. В частности,

возможны ситуации, когда спин-обменный сдвиг меняет знак и проходит через ноль.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M.V. Romalis. In *Flexible high performance magnetic field sensors*. Ed by E. Labyt, T. Sander, R. Wakai (Cham: Springer, 2022). P. 3.
- [2] T. Sander, A. Jodko-Władzińska, S. Hartwig, R. Brühl, T. Middelmann. *Adv. Opt. Technol.*, **9** (5), 247 (2020). DOI: 10.1515/aot-2020-0027
- [3] А.К. Вершовский, М.В. Петренко. Письма в ЖТФ, **49** (6), 43 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.06.54817.19378 [A.K. Vershovskii, M.V. Petrenko. *Techn. Phys. Lett.*, **49** (3), 77 (2023). DOI: 10.21883/TPL.2023.03.55693.19378]
- [4] K. Jensen, M.A. Skarsfeldt, H. Staerkind, J. Arnbak, M.V. Balabas, S-P. Olesen, D.H. Bentzen, E.S. Polzik. *Sci. Rep.*, **8** (1), 16218 (2018). DOI: 10.1038/s41598-018-34535-z
- [5] M. Lipka, A. Sierant, C. Troullinou, M.W. Mitchell. *Phys. Rev. Appl.*, **21**, 034054 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.21.034054
- [6] V.N. Baryshev, D.S. Kupalov, A.V. Novoselov et al. *Measur. Techn.*, **59** (12), 1286(2017). DOI: 10.1007/s11018-017-1130-6
- [7] V.A. Kartoshkin. In *Alkali metals: new research* (2023) P. 1.
- [8] C. Abel, S. Afach, N. Phys. Rev. A, **101** (5), 053419 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.101.053419
- [9] Yan Lu, Yueyang Zhai, Yong Zhang, Wenfeng Fan, Li Xing, Wei Quan. *Chin. Phys. B*, **29** (4), 043204(2020). DOI: 10.1088/1674-1056/ab75d3
- [10] A.N. Nesmeyanov. *Vapor Pressure of the Elements* (Academic, N.Y, 1963).
- [11] В.А.Картошкин. Опт. спектр., **119** (4), 594 (2015). [V.A. Kartoshkin. *Opt. Spectr.*, **119** (4), 594 (2015). DOI: 10.1134/S0030400X1510015X].
- [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] A. Pashov, O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, H. Knöckel, E. Tiemann. *Phys. Rev. A*, **72**, 062505 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevA.72.062505
- [14] С. Сунакава. *Квантовая теория рассеяния* (Мир, М., 1979).
- [15] H.O. Dickinson, M.R. Rudge. *J. Phys. B*, **3**, 1448 (1970).