

01;02

## Сдвиг частоты магнитного резонанса в системе метастабильный атом гелия–атом лития в основном состоянии

© 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 16 ноября 2007 г.)

Впервые проведен расчет сечений сдвигов частоты магнитного резонанса в системе метастабильный атом гелия–атом лития в основном состоянии, полученные результаты сравниваются с расчетами для систем He–K. Показано, что сечение сдвига возрастает по величине по мере увеличения температуры от 50 до 550 К, изменяя знак в районе температуры  $T = 80$  К.

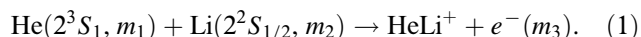
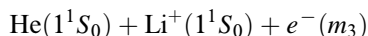
PACS: 32.70.Jz, 32.80.Cy

### Введение

В экспериментах по оптической ориентации атомом гелия в метастабильном  $2^3S_1$ -состоянии и атомов щелочных металлов в основном состоянии было показано, что наряду с ионизацией щелочного атома возможен также одновременно протекающий с ионизацией процесс спинового обмена [1]. Как известно, кроме переноса поляризации между сталкивающимися частицами спин-обменные столкновения приводят к сдвигу частоты магнитного резонанса [2]. Сдвиг частоты возникает как при столкновении атомных частиц между собой (щелочной атом–щелочной атом, метастабильный атом гелия–щелочной атом), так и при столкновении атомных частиц с электронами. Сдвиги частоты магнитного резонанса, обусловленные спиновым обменом, оказывают существенное негативное влияние, в частности, на работу приборов квантовой электроники, использующих в своей работе принципы оптической ориентации атомов.

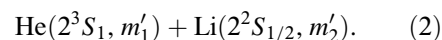
Если спин-обменный процесс сопровождается неупругим процессом, то величина сдвига магнитного резонанса существенным образом изменяется [3]. В настоящей работе проводится расчет сечения сдвига частоты магнитного резонанса в гелий-литиевой плазме и сравнение полученных результатов с расчетами для других систем, в частности, гелий–калий.

Как было показано ранее [1], при столкновении возбужденных атомов гелия в  $2^3S_1$ -состоянии с атомом щелочного металла в основном  $2S_{1/2}$ -состоянии происходит ионизация атомов щелочного металла за счет высокой внутренней энергии возбуждения метастабильных атомов гелия ( $E = 21.7 \cdot 10^{-19}$  J). При этом если один из партнеров столкновения предварительно был поляризован тем или иным образом, то эта поляризация может быть передана другому партнеру столкновения, если в процессе столкновения сохраняется полный спин системы, т. е. имеет место следующая картина:



Процесс (1) происходит со скоростью  $1/\tau_2^i = C_{ci}N_i$ , где  $C_{ci}$  — константа скорости хемоионизации, а  $N_i$  — концентрация метастабильных атомов гелия или атомов лития в основном состоянии. Реакция (1) разрешена, когда полный спин системы на входе реакции  $m_1 + m_2$  равен полному спину на выходе реакции —  $m_3$  (здесь  $m_i$  — проекция электронного спина соответствующей частицы).

Вторым процессом, который протекает одновременно с хемоионизацией, является спиновый обмен:



Процесс (2) происходит со скоростью  $1/\tau_3^i = C_{se}N_i$ , где  $C_{se}$  — константа скорости хемоионизации. Причем,  $m_1 + m_2 = m'_1 + m'_2$  при сохранении полного спина системы.

В результате процессов (1) и (2) в системе метастабильный атом гелия–атом лития в основном состоянии происходит не только перенос поляризации между партнерами, также наблюдается сдвиг частоты магнитного резонанса атомов благодаря процессу спинового обмена. Как уже отмечалось в [3], наличие одновременно протекающего процесса ионизации существенно влияет на величину сдвигов. Ниже приводятся результаты расчета сдвига частоты магнитного резонанса.

### 1. Потенциалы взаимодействия системы He( $2^3S_1$ )–Li( $2^2S_{1/2}$ )

При взаимодействии метастабильных атомов гелия, обладающих электронным спином  $S_1 = 1$ , с атомом лития в основном состоянии (электронный спин  $S_2 = 1/2$ ) образуется квазимолекула, которая может быть описана двумя термами, соответствующими полному спину квазимолекулы  $S = 1/2$  и полному спину  $S = 3/2$ . Наличие неупругого процесса можно учесть введением комплексного потенциала взаимодействия, мнимая часть

которого, автоионизационная ширина  $\Gamma(R)$ , отвечает за убыль частиц в процессе ионизации.

Поскольку квартетный  $V_q(R)$  и дублетный  $V_d(R)$  термы отличаются на величину обменного взаимодействия, т.е.

$$V_q(R) = V_d(R) + V_{\text{ex}}(R), \quad (3)$$

то для определения квартетного терма необходимо рассчитать величину обменного взаимодействия  $V_{\text{ex}}(R)$ . В соответствии с [4] обменное взаимодействие можно представить в виде:

$$V_{\text{ex}}(R) = R^{2/\alpha+2/\beta-1/(\alpha+\beta)-1} \exp(-(\alpha+\beta)/R) J(\alpha, \beta, R), \quad (4)$$

здесь  $\alpha^2/2$  и  $\beta^2/2$  — энергия связи электронов в метастабильном атоме гелия и атоме лития в основном состоянии,  $R$  — межъядерное расстояние,  $J(\alpha, \beta, R)$  — интеграл, явный вид которого представлен в [4].

Комплексные потенциалы взаимодействия для системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{--Li}(2^2S_{1/2})$  приведены в [6]. Дублетный потенциал взаимодействия и автоионизационная ширина взяты из [5].

## 2. Сдвиги частоты магнитного резонанса в системе $\text{He}(2^3S_1)\text{--Li}(2^2S_{1/2})$

Следуя [3], выражение для сечения сдвига частоты в спин-обменном процессе может быть представлено в виде

$$\sigma_{sh} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-2\lambda_l^d) \sin 2(\chi_l^d - \eta_l^q). \quad (5)$$

Это выражение существенным образом отличается от выражения для сдвига частоты в случае „чистого“ спинового обмена. В нашем случае в выражении (5) присутствует множитель  $\exp(-2\lambda_l^d)$ , обусловленный наличием ионизационного процесса. Здесь  $\eta_l^d = \chi_l^d + i\lambda_l^d$  — фаза рассеяния на дублетном терме,  $\eta_l^q$  — фаза рассеяния на квартетном терме. Наличие в  $\eta_l^d$  мнимой части означает, что на дублетном терме наряду с рассеянием возможна ионизация, т.е. убыль частиц в процессе столкновения. Из (5) видно, что по мере того как вероятность ионизации растет, т.е.  $\lambda_l^d \rightarrow \infty$ , величина сдвига магнитного резонанса стремится к нулю.

Таким образом, принимая во внимание выражение для сечения сдвига (5), величина сдвига частоты магнитного резонанса примет вид

$$\delta\omega_i = \frac{2}{3} N_i v \langle S_i \rangle^z \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-2\lambda_l^d) \sin 2(\chi_l^d - \eta_l^q). \quad (6)$$

Здесь  $\delta\omega_i$  — сдвиг частоты магнитного резонанса метастабильных атомов гелия или атомов лития в основном состоянии,  $N_i$  — концентрация атомов лития или метастабильных атомов гелия,  $v$  — средняя относительная

скорость сталкивающихся частиц,  $\langle S_i \rangle^z$  — ориентация атомов натрия или метастабильных атомов гелия.

Расчет искомым сечений хемоионизации осуществлялся с помощью выражений (5), при этом фазы рассеяния рассчитывались в квазиклассическом приближении с использованием потенциалов, приведенных выше,

$$\eta_l^i = \int_{R_0}^{\infty} F_1^i(R) dR - \int_{R'_0}^{\infty} F_0^i(R) dR, \quad (7)$$

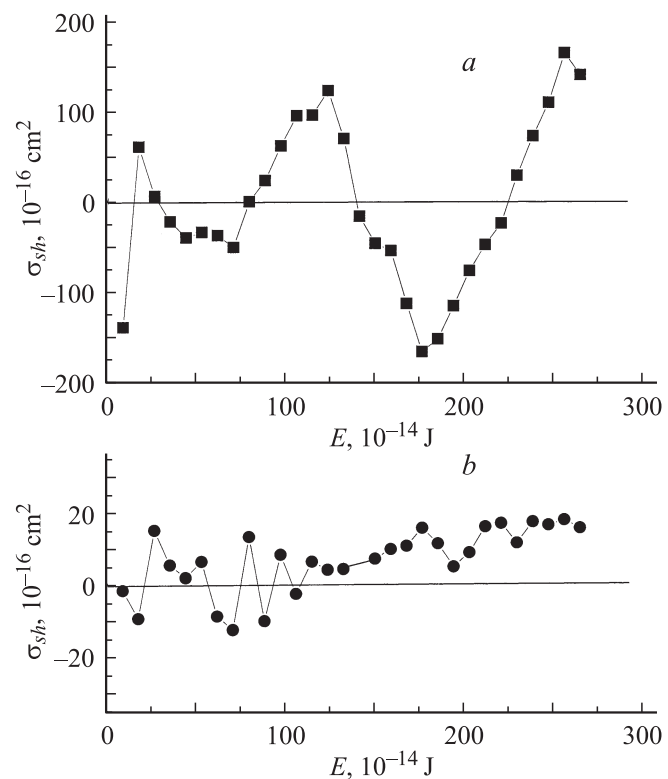
где

$$F_1^i(R) = \left[ 2m \left( E - V_i(R) - \frac{(l+1/2)^2}{2mR^2} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (8)$$

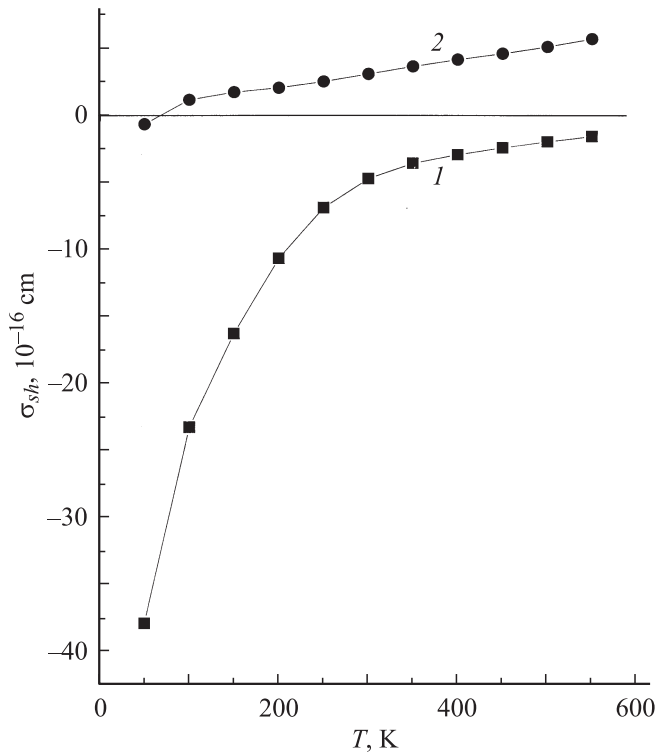
$$F_0^i(R) = \left[ 2m \left( E - \frac{(l+1/2)^2}{2mR^2} \right) \right]^{1/2}. \quad (9)$$

Здесь  $E$  — кинетическая энергия столкновения,  $R_0$  и  $R'_0$  — корни уравнений  $F_1^i(R) = 0$  и  $F_0^i(R) = 0$ , причем для  $F_1^i(R)$  следует брать наибольший корень,  $V_i(R)$  — потенциал взаимодействия для дублетного ( $i = d$ ) или квартетного термов ( $i = q$ ),  $m$  — приведенная масса системы,  $l$  — орбитальное квантовое число.

На рис. 1 приведены зависимости сечений сдвигов частоты магнитного резонанса  $\sigma_{sh}$  от энергии столкновения метастабильных атомов гелия и атомов калия (из [3]) и атомов лития, полученные в настоящей работе.



**Рис. 1.** Зависимость от энергии столкновения сечения сдвига частоты магнитного резонанса  $\sigma_{sh}$  для системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{--K}(4^2S_{1/2})$  (а) и системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{--Li}(2^2S_{1/2})$  (б). Сечения сдвига  $\sigma_{sh}$  и энергии столкновения частиц приведены в атомной системе единиц.



**Рис. 2.** Температурная зависимость сечения сдвига частоты магнитного резонанса для системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{-K}(4^2S_{1/2})$  (1) и системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{-Li}(2^2S_{1/2})$  (2).

В дальнейшем проводилось максвелловское усреднение зависимости сечения сдвига частоты магнитного резонанса по скоростям.

На рис. 2 приведены зависимости сечений сдвига частоты магнитного резонанса для системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{-K}(4^2S_{1/2})$  и  $\text{He}(2^3S_1)\text{-Li}(2^2S_{1/2})$  от температуры. Как видно из рисунка, величина сдвига частоты магнитного резонанса для системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{-K}(4^2S_{1/2})$  отрицательная во всем диапазоне температур от 50 до 550 К. При взаимодействии  $\text{He}(2^3S_1)$  с  $\text{K}(4^2S_{1/2})$  частота магнитного резонанса сдвигается в сторону меньших значений (по отношению к точному значению, определяемому величиной  $g$ -фактора для данного состояния). Величина сечения сдвига уменьшается с  $-37.97 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  при 50 К до  $-1.60 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  при 550 К. В то же время сечение сдвига частоты для системы  $\text{He}(2^3S_1)\text{-Li}(2^2S_{1/2})$  в том же интервале температур уменьшается от  $-0.68 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  до нуля при 80 К и затем нарастает до значения  $5.71 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  при  $T = 550 \text{ K}$ .

Рассмотрев температурную зависимость сечения для системы  $\text{He-Li}$ , можно сказать следующее.

1. Отрицательное значение сечения соответствует тому, что частота магнитного резонанса сдвигается в сторону меньших значений (по отношению к точному значению).

2. По мере роста температуры в камере поглощения резонансная частота начинает сдвигаться в сторону больших значений (по отношению к точному значению).

3. В окрестности  $T = 80 \text{ K}$  существует область, в которой сдвиг частоты снижается до нуля, вследствие „конкуренции“ процессов (1) и (2).

Используя полученные величины сечений, можно оценить сдвиги частоты магнитного резонанса, обусловленные спиновым обменом, сопровождающимся хемоионизацией, как для метастабильных атомов гелия, так и для атомов калия и лития в основном состоянии. Для температуры в камере поглощения  $T = 550 \text{ K}$  имеем: средняя относительная тепловая скорость столкновения частиц  $\sim 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ , сечение сдвига частоты —  $1.60 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ , концентрация атомов калия при данной температуре  $\sim 4.68 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

При степени поляризации частиц  $\sim 10\%$ , величина сдвига для атомов гелия составит  $\approx -7 \text{ KHz}$ . В тех же условиях для пары литий-гелий величина сдвига частоты будет в 3.5 раза больше из-за большей величины сечения, кроме того сдвиг частоты будет в сторону больших значений по отношению к точному значению частоты (т.е. положительным). Однако концентрация атомов лития будет существенно меньшей ( $\sim 6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ). В совокупности это приводит к сдвигу частоты  $\approx 4 \cdot 10^{-3} \text{ Hz}$ . Что касается сдвига частоты для метастабильных атомов гелия, то его величина будет отличаться от сдвига для щелочных атомов пропорционально отношению концентраций метастабильных атомов гелия и щелочных атомов в основном состоянии (в соответствии с (6)).

## Список литературы

- [1] Дмитриев С.П., Доватор Н.А., Картошкин В.А. // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 66. Вып. 3. С. 145.
- [2] Harper W. // Rev. Mod. Phys. 1972. Vol. 44. N 4. P. 169.
- [3] Картошкин В.А. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 1. С. 127.
- [4] Смирнов Б.М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. М.: Атомиздат, 1973. 291 с.
- [5] Kimura M., Lane N.F. // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 41. N 11. P. 2633.
- [6] Картошкин В.А. // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 32.