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} a. u. 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 объёме происходят столкновения как одинаковых, так и разных атомов. В процессе таких столкновений образуются квазимолекулы, которые могут быть описаны двумя термами, соответствующими полным спинам системы $S = 0$ и $S = 1$. Эти термы характеризуется глубокими потенциальными ямами. В связи с этим в объёме 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 $(U_{\mathrm{SR}}(R))$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 дальнодействующие $(U_{\mathrm{LR}}(R))$

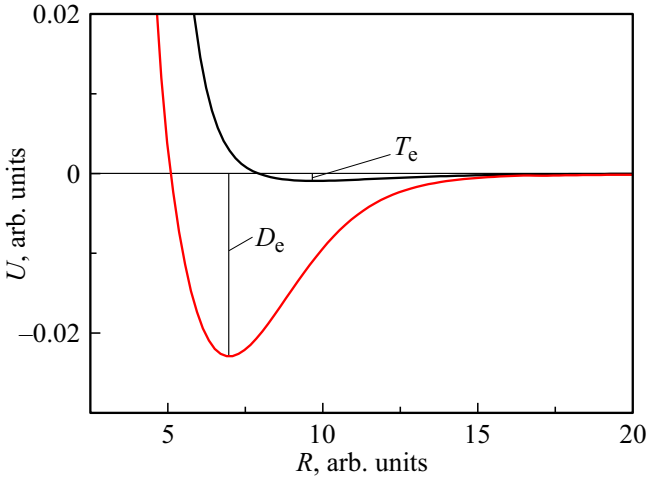

Рис. 1. Потенциалы взаимодействия атомов Na и Rb в основном состоянии (атомная система единиц). По данным [13].

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

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

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

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

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: $U_\infty = 5030.50235\,\mathrm{cm}^{-1}$, $R_0 = 11.2967$ Å, $C_6 = 1.3237 \cdot 10^7\,\mathrm{cm}^{-1}\,\text{Å}^6$, $A_{\mathrm{ex}} = 2.8609 \cdot 10^4\,\mathrm{cm}^{-1}\,\text{Å}^\gamma$, $C_8 = 2.9889 \cdot 10^8\,\mathrm{cm}^{-1}\,\text{Å}^8$, $\gamma = 5.0081$, $C_{10} = 1.5821 \cdot 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-1}\,\text{Å}^{10}$, $\beta = 2.2085\,\text{Å}^{-1}$, $T_e^{\mathrm{X}} = 0\,\mathrm{cm}^{-1}$, $R_e^{\mathrm{X}} = 3.6434$ Å, $D_e^{\mathrm{X}} = 5030.502(50)\,\mathrm{cm}^{-1}$, $D_0^{\mathrm{X}} = 4977.187(50)\,\mathrm{cm}^{-1}$ и для триплетного потенциала: $R_0 = 11.3370$ Å, $T_e^a = 4827.14727\,\mathrm{cm}^{-1}$, $R_e^a = 5.6003$ Å, $D_e^a = 203.355(50)\,\mathrm{cm}^{-1}$, $D_0^a = 193.365(50)\,\mathrm{cm}^{-1}$. Здесь D_e^{X} — глубина потенциальной ямы для терма $^1\Sigma$, D_e^a — для терма $^3\Sigma$. 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 $11\,\text{Å} \geq R$ 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 — орбитальный 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 ($\overline{q}^{AB}$) и мнимая ($\overline{\overline{q}}^{AB}$) сечения спинового обмена и сечения упругого рассеяния на синглетном (q^0) и триплетном (q^1) термах могут быть представлены в следующем виде [14]:

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

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

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

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

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

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 $\overline{q}^{AB}$ и $\overline{\overline{q}}^{AB}$, 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} cm^2	Q^1, 10^{-16} cm^2	Q_{tot}, 10^{-16} cm^2	$\overline{Q}^{AB}$, 10^{-16} cm^2	$\overline{\overline{Q}}^{AB}$, 10^{-16} 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

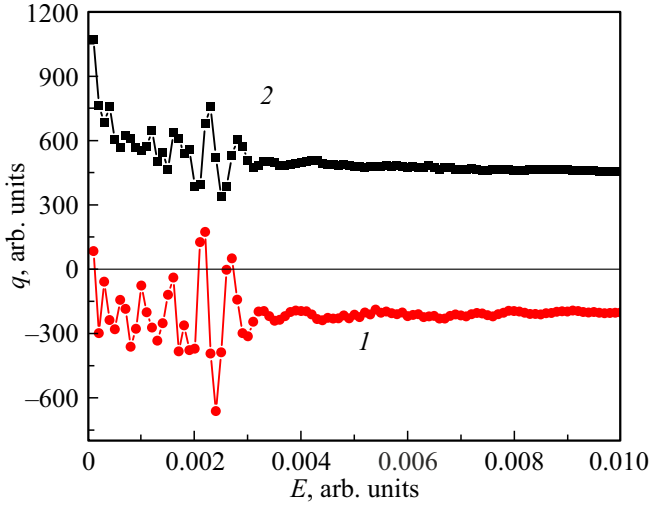

Рис. 2. Действительная (*2*) и мнимая (*1*) части сечения спинового обмена для ^{23}Na–^{85}Rb в атомной системе единиц.

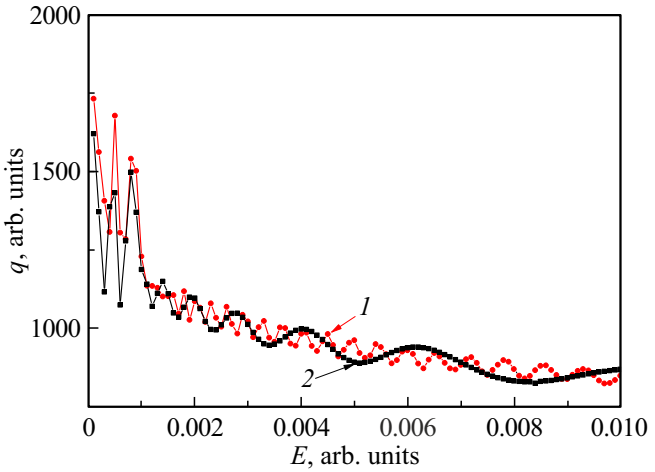

Рис. 3. Зависимость сечений упругого рассеяния q^0 и q^1 от энергии столкновения для пары ^{23}Na–^{85}Rb в атомной системе единиц.

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

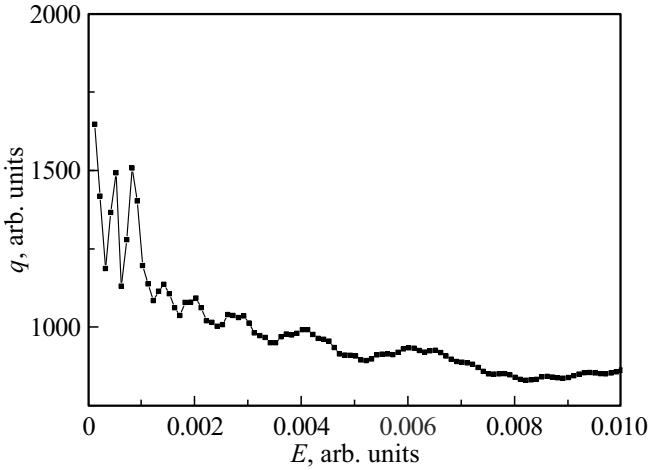

Рис. 4. Зависимость полного сечения упругого рассеяния (q_{tot}) от энергии столкновения для пары ^{23}Na–^{85}Rb в атомной системе единиц.

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 спиновым 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-Władzi'nska, 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. Письмав 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. и спектр., **119** (4), 594 (2015). [V.A. Kartoshkin. Opt. Spectrosc., **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).