

ЛАЗЕРНАЯ НАКАЧКА ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ В УСЛОВИЯХ СОХРАНЕНИЯ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ ЯДРА ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ В ГАЗОВОЙ ЯЧЕЙКЕ

К. А. Баранцев^{a*}, А. Н. Литвинов^a, А. С. Пазгалёв^b, А. К. Вершовский^b

^a Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия

^b Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 16 сентября 2021 г.,
после переработки 6 декабря 2021 г.
Принята к публикации 6 декабря 2021 г.

Исследуется поляризация полного момента щелочных атомов в газовой ячейке с буферным газом при накачке одночастотным циркулярно поляризованным лазерным излучением. В математической модели учитывается движение атомов и столкновения, сохраняющие спин ядра при хаотизации момента внешней электронной оболочки, полная сверхтонкая и зеемановская структуры. Анализируются стационарное решение уравнений для матрицы плотности щелочных атомов и влияние на него доли неупругих столкновений, при которых происходит тушение атомного возбуждения. Исследуется вклад различных сверхтонких состояний в поляризацию щелочных атомов. Проводится сравнение результатов с результатами модели мгновенного перемешивания населенностей в возбужденном состоянии.

DOI: 10.31857/S0044451022050042

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитометрия, в первую очередь квантовая, является одним из наиболее прецизионных разделов современной физической метрологии. Измерение магнитного поля имеет широкое применение в таких областях, как геомагнетизм и геофизика [1–5], картирование магнитного поля Земли [6], физика космоса [7,8], магнитокардиография и магнитоэнцефалография [9–11], проверка границ применимости фундаментальных физических законов [12,13], океанография [14], дистанционное отслеживание движущихся магнитных микро- и наночастиц [15], в задачах гироскопии и навигации [16–18]. Каждая из перечисленных выше задач требует применения средств измерения магнитного поля, характеризующихся определенным сочетанием чувствительности, точности, быстродействия и пространственного разрешения. С этим связано разнообразие применяемых в магнитометрии средств и методов. В частно-

сти, для задач биологии и медицины основным требованием является сочетание высокой чувствительности и пространственного разрешения. До недавнего времени этому требованию удовлетворяли только сверхпроводящие интерференционные датчики SQUID. Однако подобные магнитометры имеют существенный недостаток — это необходимость поддерживать низкие температуры (единицы кельвинов) во время их работы. Поэтому используемые для задач магнитоэнцефалографии массивы датчиков SQUID являются крупногабаритными и дорогостоящими, а также лишены мобильности.

Оптическая накачка щелочных атомов позволяет получить неравновесную поляризацию спинов (ориентацию или выстраивание) в атомарном газе. Если на ансамбль ориентированных спинов воздействовать резонансным радиочастотным полем, то это приведет к изменению оптических свойств атомарной среды, причем резонансная частота определяется величиной локального магнитного поля. На этом принципе работают оптические квантовые магнитометры [19–24]. Более четверти века назад был сделан большой шаг вперед по повышению чувствительности таких магнитометров, в результате че-

* E-mail: kostmann@yandex.ru

го она оказалась сопоставима с чувствительностью SQUID-магнитометров. При этом квантовые оптические магнитометры имеют существенное преимущество — они не требуют низких (гелиевых) температур, а могут эксплуатироваться при температурах порядка комнатных. Кроме того, объем чувствительного элемента оптического магнитометра может варьироваться (в зависимости от задачи) от десятых долей до тысяч кубических сантиметров. Благодаря этим особенностям, оптическим квантовым магнитометрам отводится особая роль в квантовой магнитометрии. Спектр их применений в последнее время непрерывно расширяется.

В работе [25] исследован магнитометр на атомах Cs с оптической накачкой в миниатюрной ячейке, содержащей буферный газ N_2 . Применение метода, основанного на разделении фаз накачки и детектирования по времени, позволяет анализировать свободную ларморовскую прецессию. Авторы работы [26] представили схему двухосевого магнитометра Ханле, использующего однопроходную схему, где лучи накачки и детектирования находятся под небольшим углом друг к другу. Магнитометр с оптической накачкой, работающий в режиме “light-shift dispersed M_z ”, представлен в работе [27]. Здесь авторам удалось при объеме магнитометра 50 мм^3 получить разрешение не хуже $10 \text{ фТл/Гц}^{1/2}$. В работе [28] представлен компактный векторный атомный магнитометр на основе эллиптически поляризованного света. Авторам удалось достичь чувствительности магнитного поля $20 \text{ фТл/Гц}^{1/2}$ по оси x , $25 \text{ фТл/Гц}^{1/2}$ по оси y и $30 \text{ фТл/Гц}^{1/2}$ по оси z при использовании миниатюрной ячейки ($4 \times 4 \times 4 \text{ мм}^3$) с парами ^{87}Rb . В работе [29] сообщается о практическом подходе к измерению векторного биомагнетизма с помощью атомного магнитометра с оптической накачкой. В работе экспериментально продемонстрирована возможность применения такого магнитометра в магнитокардиографии и показано, что такой подход способен предоставить более полную информацию.

Одна из основных характеристик, определяющих чувствительность оптических квантовых магнитометров, — это степень поляризации атомов, которая может быть достигнута при оптической накачке щелочных атомов. Чем выше удастся создать поляризацию атомов, тем большей чувствительности магнитометра можно добиться при прочих равных параметрах. На степень поляризации влияют следующие процессы: взаимодействие щелочных атомов с лазерным излучением, столкновения щелочных атомов с буферным газом, между собой (в

том числе в ячейках без буферного газа) и со стенками ячейки. Так, в работе [30] авторами изучался механизм оптической ориентации в парах атомов цезия на D_2 -линии при комнатной температуре в парафиновой ячейке. Оптическая ориентация исследовалась, когда имели место оптическая накачка, нелинейная спиновая динамика и спин-обменные столкновения. Анализ процессов оптической накачки в атомах Cs на D_1 -линии при наличии спин-обменной релаксации проведен в работе [31].

Теоретическое исследование светового сдвига в атомах Cs при наличии релаксации, вызванной столкновениями активных атомов и буферных, а также активных между собой проведено в работе [32].

При оптической накачке проявляются и другие особенности [33, 34], а именно, при столкновении активных атомов в возбужденном состоянии с атомами буферного газа электронный спин разрушается, а ядерный спин может сохраняться. Этот факт существенным образом влияет на достижение максимальной поляризации атомов. Таким образом, исследования оптической накачки щелочных атомов представляют прикладной интерес в области магнитометрии и позволяют глубже понять физику процессов на фундаментальном уровне.

В настоящей работе мы развиваем теорию оптической накачки щелочных атомов. Мы учитываем движение щелочных атомов, наличие сверхтонкой и зеемановской структур как основного, так и возбужденного состояний. При этом главным отличием данной работы от [35] является подход, в котором учитывается разрыв связи электрона с ядром во время столкновения, что существенно влияет на стационарное распределение населенностей и поляризацию щелочных атомов. В работе проанализированы стационарное распределение населенностей, формирующее поляризацию полного момента на различных сверхтонких подуровнях, а также влияние на поляризацию доли неупругих столкновений, при которых происходит безызлучательное тушение возбуждения щелочных атомов.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим атом щелочного металла в поле плоской монохроматической волны, распространяющейся вдоль оси z . Вектор напряженности электрического поля волны есть

$$\mathbf{E}(z, t) = \mathbf{e}_p E_0 e^{-i(\omega t - kz)} + \text{с.с.}, \quad (1)$$

где E_0 — комплексная амплитуда, \mathbf{e}_p — орт поляризации, ω и k — частота и волновое число. Квантовое кинетическое уравнение для матрицы плотности в представлении Вигнера имеет вид [36]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_a} \nabla\right) \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)] + R\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) + S\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ — атомная матрица плотности, \mathbf{p} — импульс, \mathbf{r} — координата, m_a — масса атома, R — оператор, описывающий спонтанный распад возбужденного состояния вследствие взаимодействия с вакуумным полем, S — столкновительный оператор, описывающий изменение импульса, внутренние переходы между сверхтонкими подуровнями и ударное тушение возбуждения при столкновениях атомов, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ — гамильтониан, являющийся суммой оператора внутренней энергии атома в отсутствие лазерного излучения,

$$\hat{H}_0 = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n|, \quad (3)$$

учитывающего зеемановские сдвиги в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси z , где ϵ_n — энергии атомных уровней, и оператора взаимодействия в дипольном приближении и приближении вращающейся волны,

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E} = -E_0 \sum_{e,g} (\mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{e}_p) e^{-i(\omega t - kz)} \times |e\rangle \langle g| + \text{H.c.} \quad (4)$$

Здесь индекс « e » пробегает все зеемановские уровни сверхтонкой структуры возбужденного состояния ($P_{1/2}$ для D_1 -линии и $P_{3/2}$ для D_2 -линии), а « g » — все зеемановские уровни основного состояния; в качестве базиса выберем собственные состояния оператора \hat{H}_0 , \mathbf{d}_{eg} — матричные элементы оператора дипольного момента.

Сведем задачу к одномерной, пользуясь приближением плоского фронта волны и тем, что, ввиду эффекта Доплера (без учета релятивистских эффектов), матрица плотности зависит только от продольной проекции импульса, $\hat{\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \hat{\rho}(v, z, t)$, где $v = p_z/m_a$ — компонента скорости вдоль оси z . Выделим в недиагональных элементах матрицы плотности (оптических когерентностях) быстроосциллирующий множитель на частоте внешнего поля:

$$\rho_{ge}(v, z, t) = \tilde{\rho}_{ge}(v, z, t) e^{i(\omega t - kz)}.$$

Пренебрегая диффузионными неоднородностями матрицы плотности у стенок ячейки и поглощением поля в среде (оптически тонкая среда),

положим производную по координате в левой части уравнения (2) равной нулю.

Запишем квантовое кинетическое уравнение (2) для оптических когерентностей:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge}(v, t) = \left[i(kv - \delta_{eg}) - \frac{\gamma}{2} - \nu_{opt} \right] \tilde{\rho}_{ge}(v, t) - iE_0^* \sum_{g'} D_{g'e} \rho_{gg'}(v, t) + iE_0 \sum_{e'} D_{ge'e} \rho_{e'e}(v, t), \quad (5)$$

где $D_{eg} = (\mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{e}_p)/\hbar$ — проекция матричного элемента оператора дипольного момента на орт поляризации, $\delta_{eg} = \omega - \omega_{eg}$ — отстройка излучения от перехода $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$, γ — скорость спонтанного распада возбужденного состояния, ν_{opt} — ударная ширина оптического перехода.

Сечение взаимодействия момента электронной оболочки с моментом относительного движения сталкивающихся атомов велико по сравнению с сечением спин-обменного взаимодействия, поэтому распад оптических когерентностей при столкновениях происходит значительно чаще, чем распад низкочастотных когерентностей. Тогда, в предположении распада оптических когерентностей при каждом столкновении, в уравнении (5) приходный член интеграла столкновений будет отсутствовать.

Для интенсивностей, которые не превышают 10 мВт/см², скорость распада возбужденного состояния, вследствие процессов столкновительного тушения и спонтанного распада, превосходит скорость его заселения под действием лазерного поля, поэтому можно положить $\rho_{ee} \ll \rho_{gg}$, а распределение по скоростям населенностей нижних уровней и низкочастотных когерентностей максвелловским:

$$\rho_{gg}(v) = M(v) \rho_{gg}, \quad \rho_{g'g'}(v) = M(v) \rho_{g'g'}, \quad (6)$$

где $M(v) = (\sqrt{\pi} v_T)^{-1} \exp(-v^2/v_T^2)$ — распределение Максвелла по проекции скорости, $v_T = \sqrt{2k_B T/m_a}$ — наиболее вероятная скорость.

В этих предположениях проинтегрируем уравнение (5) по скорости и перейдем к редуцированным элементам матрицы плотности $\rho_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\alpha\beta}(v) dv$. Для этого выразим из уравнения (5) редуцированные оптические когерентности в стационарном случае:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}_{eg}(v) dv = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(v) dv}{i(\delta_{eg} - kv) - \Gamma_{opt}} E_0 \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g}. \quad (7)$$

Интеграл по скорости может быть взят аналитически:

$$W(\delta_{eg}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M(v) dv}{i(\delta_{eg} - kv) - \Gamma_{opt}} = -\frac{\sqrt{\pi}}{kv_T} w\left(\frac{\delta_{eg} + i\Gamma_{opt}}{kv_T}\right), \quad (8)$$

где $w(x) = \exp(-x^2)\text{erfc}(x)$ — комплексная функция ошибок, $\Gamma_{opt} = \gamma/2 + \nu_{opt}$ — полная однородная ширина оптического перехода. Вещественная часть выражения (8) описывает форму линии поглощения на конкретном переходе $|e\rangle \leftrightarrow |g\rangle$, которая представляет собой контур Фойгта, имеющий доплеровскую (порядка kv_T) и однородную (порядка Γ_{opt}) ширины.

Теперь запишем стационарные уравнения для остальных редуцированных по скорости элементов матрицы плотности, подставив в них найденные оптические когерентности (7):

$$0 = -|E_0|^2 \sum_g \left(D_{eg} W^*(\delta_{e'g}) \sum_{g'} D_{g'e'} \rho_{gg'} + D_{ge'} W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} \right) + (i\omega_{e'e} - \gamma - \nu_Q) \rho_{ee}, \quad (9)$$

$$0 = |E_0|^2 \sum_e \left(D_{ge} W(\delta_{eg'}) \sum_{g''} D_{eg''} \rho_{g''g'} + D_{eg'} W^*(\delta_{eg}) \sum_{g''} D_{g''e} \rho_{gg''} \right) + (i\omega_{g'g} - \Gamma_{rf}) \rho_{gg'}, \quad (10)$$

$$0 = |E_0|^2 \sum_e \left(D_{ge} W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} + \text{c.c.} \right) - \Gamma_{mix}^{(g)} (\rho_{gg} - \rho'_{gg}) + \nu_Q \rho'_{gg} + \gamma \sum_e P_{ge}^{(\gamma)} \rho_{ee}, \quad (11)$$

$$0 = -|E_0|^2 \sum_g \left(D_{ge} W(\delta_{eg}) \sum_{g'} D_{eg'} \rho_{g'g} + \text{c.c.} \right) - \Gamma_{mix}^{(e)} (\rho_{ee} - \rho'_{ee}) - (\gamma + \nu_Q) \rho_{ee}, \quad (12)$$

где $P_{ge}^{(\gamma)}$ — матрица вероятностей спонтанных переходов $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$, элементы которой вычисляются как

$$P_{ge}^{(\gamma)} = (2F_g + 1)(2J_e + 1) \times \left(C_{F_g, M_g, 1, q}^{F_e, M_e} \begin{Bmatrix} J_g & I & F_g \\ F_e & 1 & J_e \end{Bmatrix} \right)^2, \quad (13)$$

$C_{F_g, M_g, 1, q}^{F_e, M_e}$ — коэффициенты Клебша – Гордана, F_α — полный момент атома, $M_\alpha = -F_\alpha, \dots, F_\alpha$ — его проекция, $q = M_e - M_g$, J_α — момент электронной оболочки, I — спин ядра, $\alpha = g, e$ — индекс, нумерующий все магнитные уровни сверхтонкой структуры соответственно основного и возбужденного состояний, фигурными скобками обозначен $6j$ -символ.

Рассмотрим подробнее процессы, происходящие при столкновении щелочных атомов с другими щелочными атомами и буферным газом. Характерное время взаимодействия пары сталкивающихся атомов порядка 10^{-12} с, что значительно меньше, чем время взаимодействия внешнего электрона атомов с ядром как в основном, так и в возбужденном состояниях (порядка 10^{-10} с, определяется частотой сверхтонкого расщепления). Следовательно, при столкновении разрывается связь электрон–ядро, и эволюция состояния электрона происходит в основном под действием тонкого взаимодействия, связывающего орбитальный момент со спином электрона [37]. Если второй атом является буферным, такое взаимодействие приводит к хаотизации проекции момента электронной оболочки, поскольку буферный газ является «внешней средой» и его состояние не зависит от состояния щелочных атомов. При этом состояние ядра практически не изменяется.

Если же вторым атомом является другой щелочной атом, между ними происходит спин-обмен. Исход столкновения определяется самим квантовым состоянием пары щелочных атомов и должен описываться двухчастичной матрицей плотности [38]. В пренебрежении квантовыми корреляциями между различными щелочными атомами можно использовать одночастичное описание, однако уравнения для одночастичной матрицы плотности при этом будут нелинейными. А именно, константа спин-обмена зависит от матрицы плотности атомов. Действительно, если представить гипотетическую ситуацию, что все щелочные атомы находятся в одном состоянии (например, атомы ^{87}Rb в основном состоянии с проекцией полного момента 2), то спин-обмен прекращается, что подтверждается экспериментом [39].

В данной работе мы ограничимся рассмотрением случая, когда концентрация атомов щелочного ме-

талла мала по сравнению с концентрацией буферного газа, так что скорость релаксации определяется исключительно столкновениями с буферными атомами. Это позволяет нам пренебречь нелинейными процессами при столкновениях щелочь–щелочь.

В нашей модели мы будем рассматривать следующие процессы при столкновении с атомом буферного газа.

1. Упругие столкновения, приводящие к хаотизации электронного момента при сохранении проекции спина ядра и орбитального квантового числа. Такие столкновения приводят к перемешиванию населенностей в основном (со скоростью $\Gamma_{mix}^{(g)}$) и возбужденном (со скоростью $\Gamma_{mix}^{(e)}$) состояниях. При таком столкновении обозначим изменение матрицы плотности как

$$\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}'. \tag{14}$$

2. Неупругие столкновения, приводящие к переходу из возбужденного состояния в основное (со скоростью ν_Q) при хаотизации электронного момента и сохранении проекции спина ядра. Такие столкновения происходят, например, при использовании азота или других молекулярных газов в качестве буферного газа. При столкновении щелочной атом совершает безызлучательный переход с передачей энергии на колебательно-вращательные степени свободы молекулы азота. При таком столкновении имеем следующее изменение матрицы плотности:

$$\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}'^Q. \tag{15}$$

Выше в уравнении (10) $\Gamma_{rf} = \Gamma_{mix}^{(g)}/2$ — скорость разрушения низкочастотных когерентностей в основном состоянии вследствие описанных процессов.

Преобразования (14), (15) можно записать как действие оператора Ξ следующего вида:

$$\hat{\rho}' = \Xi\{\hat{\rho}\} = \hat{A}^T \left\{ \hat{\rho}_E^{(0)} \otimes \text{Sp}_E \left(\hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^T \right) \right\} \hat{A}, \tag{16}$$

где \hat{A} — матрица перехода из базиса полного момента атома, имеющего базисные векторы $|F_\alpha M_\alpha\rangle$, в базис состояний электронной оболочки и ядра с базисными векторами $|m_\alpha \mu\rangle$. Здесь $m_\alpha = -J_\alpha, \dots, J_\alpha$ — проекция момента электрона, $\mu = -I, \dots, I$ — проекция момента ядра. Разложение векторов базиса полного момента по векторам электронно-ядерного базиса имеет вид [40]

$$|F_\alpha M_\alpha\rangle = \sum_{m_\alpha, \mu} A_{F_\alpha, M_\alpha; m_\alpha, \mu} |m_\alpha \mu\rangle, \tag{17}$$

где элементы матрицы \hat{A} — коэффициенты Клебша–Гордана $C_{J_\alpha, m_\alpha, I, \mu}^{F_\alpha, M_\alpha}$:

$$A_{F_\alpha, M_\alpha; m_\alpha, \mu} = C_{J_\alpha, m_\alpha, I, \mu}^{F_\alpha, M_\alpha}. \tag{18}$$

Матрица \hat{A} унитарна и вещественна, т. е. выполняется $\hat{A}^{-1} = \hat{A}^+ = \hat{A}^T$. Таким образом, преобразование матрицы плотности из базиса полного момента в электронно-ядерный базис и обратно имеют вид

$$\hat{\rho}_{NE} = \hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^T, \quad \hat{\rho} = \hat{A}^T \hat{\rho}_{NE} \hat{A}. \tag{19}$$

В выражении (16) в фигурных скобках стоит прямое произведение электронной матрицы плотности $\hat{\rho}_E^{(0)}$ с хаотизированной проекцией электронного спина и ядерной матрицы плотности $\hat{\rho}_N = \text{Sp}_E(\hat{\rho}_{NE})$ с сохраненной проекцией спина ядра.

Прямая подстановка выражения (16) в уравнения (11), (12) нецелесообразна для численного решения системы уравнений для матрицы плотности. Поскольку в выражении (16) все операции линейны, сам оператор Ξ также линеен. Его действие можно свести к умножению на матрицу вероятностей переходов, происходящих при столкновении. Для этого рассмотрим действие этого оператора на матрицы вида

$$\hat{\Delta}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \tag{20}$$

$$\hat{\Delta}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \dots$$

Для атома ^{87}Rb матрица $\hat{\Delta}_1$ соответствует нахождению атома с единичной вероятностью на уровне $|F_g = 1, M_g = -1\rangle$. Нумерация состояний идет по возрастанию проекции полного момента и снизу вверх по энергии сверхтонких состояний. Действие оператора Ξ на матрицу $\hat{\Delta}_1$ дает

$$\Xi\{\hat{\Delta}_1\} = \begin{pmatrix} 5/16 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/16 & \dots \\ 0 & 1/16 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3/8 & 0 & \dots \\ \sqrt{3}/16 & 0 & 0 & 0 & 3/16 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \tag{21}$$

Как видно из (21), при столкновении населенность распределяется по определенным уровням, а также возникают атомные когерентности, которых не было до столкновения. Выражение (21) иллюстрирует преобразование матрицы плотности одного атома при единичном акте столкновения. Необходимо помнить, что система квантовых кинетических

уравнений (9)–(12) записана для матрицы плотности, усредненной по большому числу столкновений [36], чтобы ее можно было считать непрерывно меняющейся величиной. Различные столкновения приводят к независимым фазовым добавкам в атомных когерентностях, поэтому усреднение по большому числу столкновений приведет к обнулению атомных когерентностей. Поэтому столкновения приводят к перераспределению населенностей и исчезновению когерентностей, наведенных электромагнитным полем.

Введем матрицу столкновительных переходов между состояниями $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$:

$$P_{ij} = \left(\Xi \{ \hat{\Delta}_j \} \right)_{ii}. \quad (22)$$

Диагональную часть матрицы плотности можно разложить по матрицам $\hat{\Delta}_j$:

$$\hat{\rho} = \sum_j \hat{\Delta}_j \rho_{jj}. \quad (23)$$

Теперь, используя (22), (23) и линейность оператора Ξ , можно записать преобразование диагональных элементов произвольной матрицы плотности:

$$\rho'_{ii} = \left(\Xi \left\{ \sum_j \hat{\Delta}_j \rho_{jj} \right\} \right)_{ii} = \sum_j P_{ij} \rho_{jj}. \quad (24)$$

Таким образом, действие оператора столкновений (16) на матрицу плотности свелось к линейной комбинации ее диагональных элементов.

При формировании матрицы \hat{P} используются выражения (22) и (16), где в качестве электронной матрицы плотности с хаотизированным электронным моментом, $\hat{\rho}_E^{(0)}$, берется диагональная матрица с равномерно распределенной населенностью на основном уровне при $i, j \in [1, N_g]$, на возбужденном уровне при $i, j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$, что соответствует преобразованию (14) при упругих столкновениях. Неупругие столкновения (15) описываются матричными элементами при $j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$, $i \in [1, N_g]$, где в качестве $\hat{\rho}_E^{(0)}$ берется диагональная матрица с равномерно распределенной населенностью на основном уровне. Переходы из основного в возбужденное состояние не происходят в рассматриваемом диапазоне температур, поэтому $P_{ij} = 0$ для $j \in [1, N_g]$, $i \in [N_g + 1, N_g + N_e]$. Здесь N_g и N_e — число уровней основного и возбужденного состояний.

Данную математическую модель легко свести к модели, не учитывающей сохранение спина ядра при

столкновениях. В такой модели при столкновениях населенности стремятся к равномерному распределению по уровням соответствующего мультиплета. Поскольку элементы матрицы \hat{P} имеют смысл вероятностей переходов при столкновениях, достаточно положить их одинаковыми. Так, при $i, j \in [1, N_g]$ положим $P_{ij} = 1/N_g$ (перемешивание вниз), при $i, j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$ положим $P_{ij} = 1/N_e$ (перемешивание вверх), а для неупругих столкновений $j \in [N_g + 1, N_g + N_e]$, $i \in [1, N_g]$ возьмем $P_{ij} = 1/N_g$.

При разрушении как состояния спина ядра, так и состояния электронной оболочки очевидно, что перемешивание населенностей в возбужденном состоянии будет происходить быстрее, чем в случае сохранения спина ядра. Поэтому во многих работах (см., например, [35]) применяется еще более упрощенная модель мгновенного перемешивания в возбужденном состоянии. В этой модели при возбуждении атома происходит мгновенное равновероятное распределение населенности по верхнему мультиплету. При этом уже нет смысла учитывать верхние уровни по отдельности, а в системе (9)–(12) можно оставить лишь суммарную населенность верхнего мультиплета. В нашей модели, для перехода к модели мгновенного перемешивания, помимо замены матрицы столкновений \hat{P} нужно положить одинаковыми вероятности переходов при спонтанном распаде, т. е. элементы $P_{ge}^{(\gamma)}$ матрицы спонтанных переходов.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим возбуждение D_1 -линии атомов ^{87}Rb узкополосным излучением σ^+ -поляризации в газовой ячейке с буферным газом N_2 . Далее будем анализировать решение стационарной системы уравнений для матрицы плотности (9)–(12) со столкновительным преобразованием (24), а также в модели мгновенного перемешивания, не учитывающей сохранение спина ядра при столкновениях.

На рис. 1а–г приведены зависимости населенностей подуровней основного состояния от отстройки δ излучения от перехода $|F_g = 2\rangle \leftrightarrow |F_e = 1\rangle$. На горизонтальной шкале указаны характерные значения отстройки (вертикальные прямые), соответствующие четырем переходам между всеми комбинациями сверхтонких подуровней основного и возбужденного состояний. Поскольку имеет место неравенство $\rho_{ee} \ll \rho_{gg}$, определяющий вклад в спиновую поляризацию атомов дает распределение населенностей основного состояния.

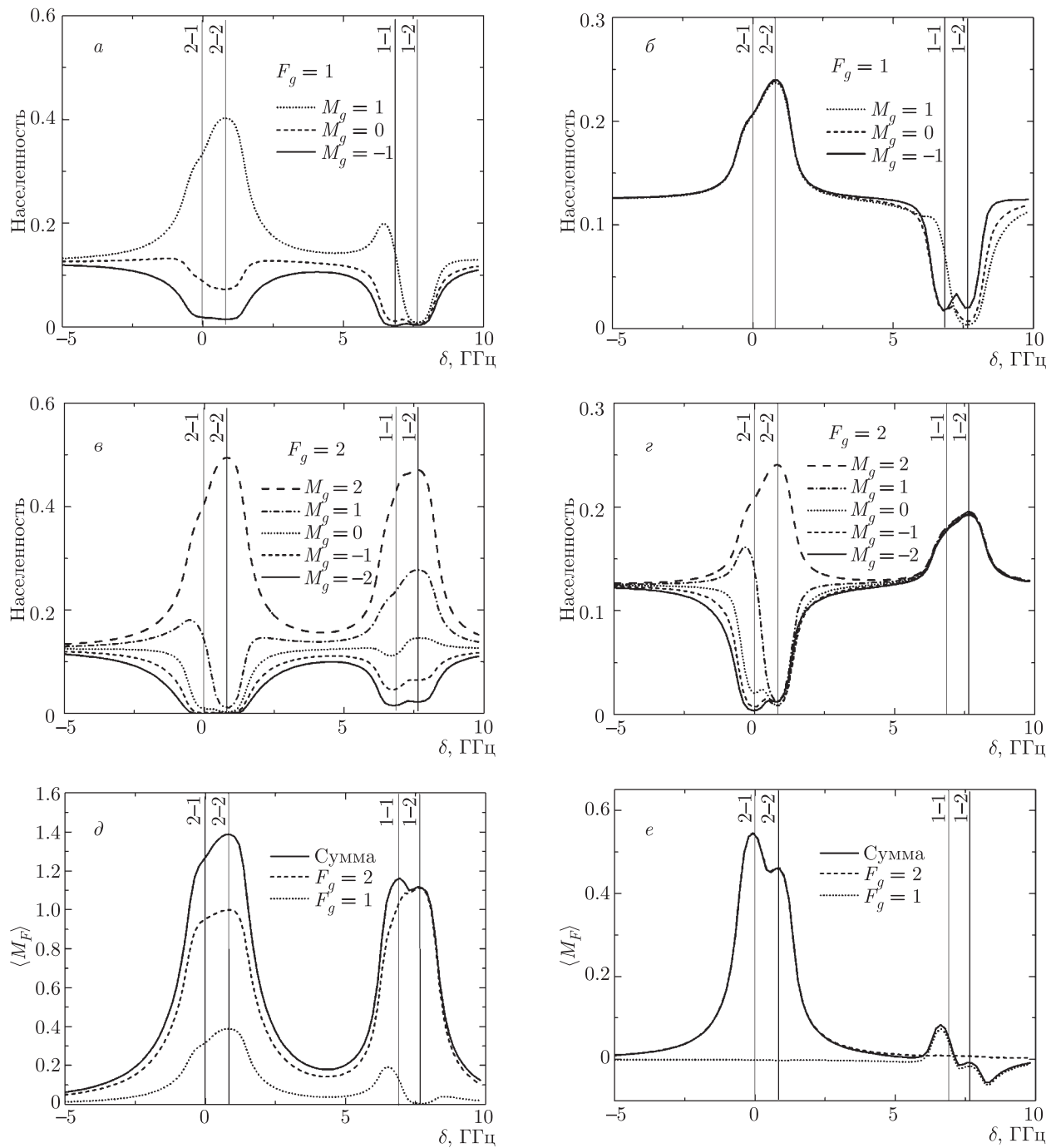


Рис. 1. Зависимости населенностей основного состояния атома ^{87}Rb и средней проекции полного момента от отстройки от перехода $|F_g = 2\rangle \leftrightarrow |F_e = 1\rangle$ при возбуждении σ^+ -поляризованным излучением при сохранении спина ядра (а, в, д) и в модели мгновенного перемешивания (б, з, е). Параметры: интенсивность излучения $I_p = 0.1$ мВт/см 2 , температура ячейки $T = 25$ °С, буферный газ N_2 , концентрация буферного газа $n_{buf} = 10^{17}$ см $^{-3}$, доля тушащих столкновений $x = 0.5$, доля столкновений перемешивания возбужденного уровня $y = 1$, магнитное поле $B = 0$

На рис. 1*d,e* приведено среднее значение проекции полного момента, пропорциональное поляризации, на сверхтонких подуровнях $|F_g = 1\rangle$ (пунктирная кривая) и $|F_g = 2\rangle$ (штриховая кривая), а также их сумма (сплошная кривая).

Левый столбец (рис. 1*a,в,d*) соответствует рассматриваемой модели, учитывающей сохранение спина ядра при столкновениях. В правом столбце (рис. 1*б,г,е*) приведены расчеты в модели мгновенного перемешивания.

Левые части графиков соответствуют действию лазерного поля, откачивающего атомы с уровня $|F_g = 2\rangle$. При этом уровень $|F_g = 1\rangle$ значительно отстроен, и действие поля с него для рассматриваемого набора параметров пренебрежимо мало (доплеровское уширение $kv_T \approx 300$ МГц, ударная ширина $\Gamma_{opt} \approx 60$ МГц, что значительно меньше сверхтонкого расщепления внизу, равного примерно 6.8 ГГц). Те же рассуждения верны и для правых частей графиков, где поле откачивает атомы с уровня $|F_g = 1\rangle$.

3.1. Накачка с уровня $|F_g = 2\rangle$

Обсудим вначале схему накачки с уровня $|F_g = 2\rangle$, т.е. левые части графиков на рис. 1 в диапазоне отстроек от -5 до 3 ГГц. В модели сохранения спина ядра, несмотря на отсутствие откачки лазерным полем, на уровне $|F_g = 1\rangle$ наблюдается значительное заселение зеемановского подуровня с положительной проекцией полного момента (рис. 1*a*, пунктирная кривая) при том, что два других зеемановских подуровня обеднены по сравнению с равновесной населенностью $1/8$.

Это происходит вследствие ряда параллельно протекающих процессов. В первую очередь, происходит заселение верхних подуровней с преимущественно положительной проекцией полного момента под действием циркулярно поляризованного лазерного поля. Вверху происходит перемешивание населенностей при столкновениях со скоростью $\Gamma_{mix}^{(e)} \approx 10$ МГц без перехода вниз, что приводит к уменьшению поляризации. Также имеют место два процесса распада вниз: спонтанный распад $\gamma = 5.75$ МГц и безызлучательное тушение возбуждения при столкновениях с буферным газом, $\nu_Q \approx 10$ МГц (см. уравнение (12)). Последние два процесса приводят к частичному переносу поляризации на уровень $|F_g = 1\rangle$, а также на зеемановский подуровень $|F_g = 2, M_g = 2\rangle$, который выступает в роли так называемого «кармана», т.е. состояния, в котором атомы скапливаются, не подвергаясь воздей-

ствию откачивающего излучения (рис. 1*б*, длинные штрихи).

Еще одним процессом, поляризующим состояния $|F_g = 1\rangle$, является перемешивание населенностей внизу при столкновениях атомов между собой, с буферным газом и со стенками ячейки со скоростью $\Gamma_{mix}^{(g)} \approx 100$ Гц, что значительно меньше, чем перемешивание населенностей вверху. Однако этот процесс значительно влияет на стационарное распределение населенностей, поскольку для некоторых зеемановских подуровней является единственным каналом выкачки населенности. При этом происходит переход населенности из «кармана» $|F_g = 2, M_g = 2\rangle$ преимущественно на зеемановский подуровень $|F_g = 1, M_g = 1\rangle$ с переносом поляризации ядерного спина.

В модели мгновенного перемешивания (рис. 1*б,г,е*) мы видим существенные отличия результатов от результатов модели сохранения спина ядра. Главным образом, отличие обусловлено наличием в последней процесса переноса наведенной излучением поляризации из возбужденного состояния в основное. Этот процесс отсутствует в модели мгновенного перемешивания ввиду обнуления поляризации в возбужденном состоянии. Процесс перехода атома из возбужденного состояния в основное связан с изменением орбитального момента электрона, поэтому во время столкновения существенная доля поляризации ядра переносится в основное состояние. Также в этот перенос вносит вклад спонтанный распад, который частично сохраняет поляризацию из-за правил отбора.

На рис. 1*б* при накачке с уровня $|F_g = 2\rangle$ зеемановские подуровни мультиплета $|F_g = 1\rangle$ заселяются равномерно (все три кривые в левой части совпадают). Также с ними совпадает населенность, соответствующая «карману» состояния $|F_g = 2\rangle$ (длинные штрихи на рис. 1*г*).

Как видно на рис. 1*д*, при откачке с уровня $|F_g = 2\rangle$ модели сохранения спина ядра основной вклад в поляризацию дает состояние $|F_g = 2\rangle$ благодаря заселению зеемановского «кармана» (штриховая кривая, левый пик) и частично дает вклад состояние $|F_g = 1\rangle$ благодаря безызлучательному переносу поляризации с верхнего состояния и переносу поляризации с уровня $|F_g = 2\rangle$ при столкновениях (пунктирная кривая, левый пик). В модели мгновенного перемешивания (рис. 1*е*) вклад состояния $|F_g = 1\rangle$ равен нулю (пунктирная кривая) по причине его равномерного заселения.

3.2. Накачка с уровня $|F_g = 1\rangle$

Теперь рассмотрим случай откачки с уровня $|F_g = 1\rangle$ (рис. 1, правая часть графиков в диапазоне отстройек от 5 до 10 ГГц). В модели сохранения спина ядра, в отличие от предыдущего случая, основной вклад в поляризацию здесь дает нерезонансный уровень $|F_g = 2\rangle$ (в предыдущем случае основной вклад в поляризацию давал резонансный уровень), на котором происходит накопление населенности на зеемановских подуровнях с проекциями полного момента $+1$ и $+2$ и обеднение подуровней с проекциями -2 и -1 (рис. 1б). При настройке на уровень $|F_e = 1\rangle$ частично возникает «карман» на подуровне $|F_g = 1, M_g = 1\rangle$, однако его вклад невелик, поскольку ширина линии поглощения сравнима со сверхтонким расщеплением вверху и происходит выкачка населенности на нерезонансный верхний сверхтонкий уровень $|F_e = 2\rangle$ (имеет место частично разрешенная сверхтонкая структура возбужденного состояния).

Отметим, что, несмотря на отсутствие «карманов» в данном типе накачки с уровня $|F_g = 1\rangle$, значение средней проекции полного момента состояния $|F_g = 2\rangle$ достигает большего значения (рис. 1д, штриховая кривая, правый пик), чем при накачке с уровня $|F_g = 2\rangle$ (штриховая кривая, левый пик). В целом же, за счет вклада нерезонансного уровня, суммарная средняя проекция полного момента оказывается больше при накачке с уровня $|F_g = 2\rangle$ (рис. 1в, сплошная кривая).

В модели мгновенного перемешивания обеднение состояния $|F_g = 1\rangle$ происходит приблизительно одинаково для зеемановских подуровней (рис. 1б, правая часть). Заселение же зеемановских подуровней $|F_g = 1\rangle$ при этом полностью равномерно (рис. 1з, правая часть). Таким образом, в данной модели и при данном типе накачки поляризация близка к нулю (рис. 1е, правая часть). При этом возникает небольшая отрицательная поляризация, что подробно обсуждалось в работе [35].

3.3. Анализ зависимости поляризации от доли тушащих столкновений

Как отмечено выше, большую роль в формировании поляризации играет перераспределение населенностей при столкновениях. Один из основных вкладов в распределение дает безызлучательный переход из возбужденного состояния в основное с сохранением проекции спина ядра (уравнение (11), слагаемое, пропорциональное ν_Q). Поэтому важно

точно определить значение частоты этого процесса ν_Q . Из газокинетических законов нетрудно определить полную частоту столкновений $\nu = n_{buf}\sigma u$, где n_{buf} — концентрация буферного газа (концентрацией щелочных атомов можно пренебречь), $\sigma \approx 5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ — газокинетическое сечение, которое может в первом приближении быть найдено как площадь круга с радиусом, равным сумме радиусов щелочного и буферного атомов, u — средняя относительная скорость атома щелочного металла и молекулы буферного газа. Частоту ν_Q можно определить как долю x столкновений, при которых происходит безызлучательное тушение возбуждения по отношению к полной частоте столкновений:

$$\nu_Q = x\nu, \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (25)$$

Значение x определяется типом буферного газа. Например, для азота $x > 0$, так как при столкновении есть ненулевая вероятность передачи энергии атомного возбуждения на колебательно-вращательные степени свободы молекулы N_2 . При построении графиков на рис. 1 из экспериментальных данных [34] было взято значение $x = 0.5$. Для других буферных газов, преимущественно атомарных, тушение возбуждения отсутствует или пренебрежимо мало, $x \approx 0$ [41].

Величина x определяет долю от полной частоты столкновений, при которых происходит тушение возбуждения. Соответственно, при остальных столкновениях с частотой $(1-x)\nu$ не происходит тушения, а атом остается в возбужденном состоянии. При этом в доле таких столкновений может происходить хаотизация электронной оболочки с сохранением ядерного спина, т.е. процесс (14) со скоростью $\Gamma_{mix}^{(e)}$. Таким образом, имеет место ограничение $\Gamma_{mix}^{(e)} \leq (1-x)\nu$. Введем долю y таких столкновений:

$$\Gamma_{mix}^{(e)} = y(1-x)\nu, \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (26)$$

Исследуем, как величина x влияет на среднюю проекцию полного момента. На рис. 2 в модели сохранения спина ядра приведены зависимости средней проекции полного момента на сверхтонких состояниях от отстройки при различных значениях доли x тушащих столкновений. При этом доля упругих столкновений, при которых происходит перемешивание вверху, $y = 1$. В целом происходит увеличение поляризации с ростом x , что обусловлено переносом поляризации из возбужденного состояния, в котором скорость перемешивания значительно больше, чем в основном. Наиболее значительно

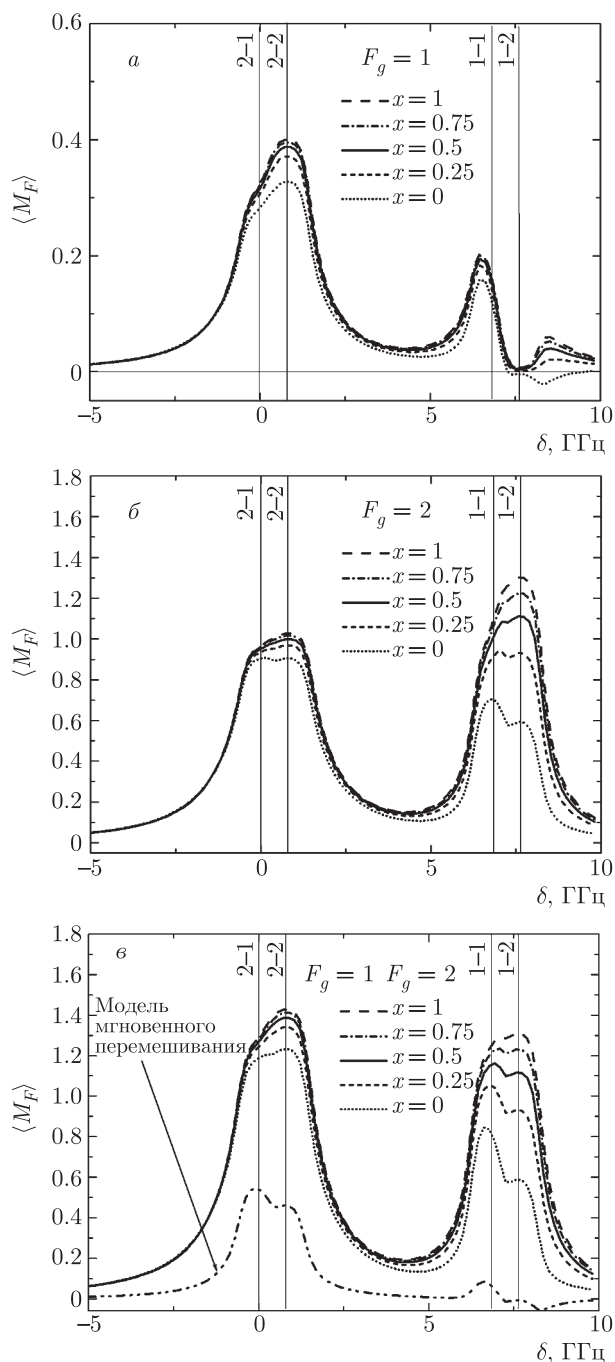


Рис. 2. Зависимости средней проекции полного момента атома ^{87}Rb на уровнях $F_g = 1$ (а), $F_g = 2$ (б) и их суммы (в) от отстройки при возбуждении σ^+ -поляризованным излучением. Параметры те же, что на рис. 1

изменяется поляризация на уровне $F_g = 2$ при возбуждении с уровня $F_g = 1$ (рис. 2б, правый пик). На рис. 2в приведена также кривая в модели мгновенного перемешивания (штрихпунктирная кривая с двумя точками). Интересно отметить, что в этой

модели кривая не зависит от доли x тушащих столкновений. Это объясняется тем, что в возбужденном состоянии, вследствие мгновенного перемешивания, поляризация равна нулю, и ее перенос в основное состояние при столкновениях отсутствует.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе разработана стационарная математическая модель, описывающая возбуждение щелочных атомов монохроматическим лазерным излучением в газовой ячейке с буферным газом с целью расчета поляризации газа при возбуждении циркулярно поляризованным излучением. Проводится исследование влияния столкновений на средний полный момент атомов при учете разрыва связи внешней электронной оболочки с ядром в момент столкновения. Учтены полная сверхтонкая и зеемановская структуры основного и возбужденного состояний.

Рассмотрено формирование поляризации полного момента на различных сверхтонких уровнях при сканировании отстройки лазерного излучения. Особое внимание уделено влиянию доли неупругих столкновений, при которых происходит тушение возбуждения щелочных атомов и перенос поляризации из возбужденного состояния в основное.

Проведено сравнение результатов данной модели с упрощенной моделью, в которой не учитывается сохранение спина ядра при столкновениях, и сделано предположение о мгновенном перемешивании населенности в возбужденном состоянии.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-29-10004).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Manda and M. Korte, *Geomagnetic Observations and Models*, Springer (2011).
2. P. Qi, X. Geng, G. Liu et al., *J. Phys. B* **54**, 125001 (2021).
3. D. Sheng, A. R. Perry, S. P. Krzyzewski et al., *Appl. Phys. Lett.* **110**, 031106 (2017).
4. W. Neubauer, *Naturwissenschaften* **88**, 13 (2001).
5. N. Linford, *Rep. Progr. Phys.* **69**, 2205 (2006).
6. H.-G. Meyer, R. Stolz, A. Chwala, and M. Schulz, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, 1504 (2005).

7. H. Korth, K. Strohhahn, F. Tejada et al., *J. Geophys. Res. Space Phys.* **121**, 7870 (2016).
8. I. Fratter, J.-M. Leger, F. Bertrand et al., *Acta Astronaut.* **121**, 76 (2016).
9. A. Weis, *Europhys. News* **43**(3), 20 (2012).
10. H. Koch, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **11**, 49 (2001).
11. M. Hämmäläinen, R. Hari, R. J. Ilmoniemi et al., *Rev. Mod. Phys.* **65**, 413 (1993).
12. S. Afach, G. Bison, K. Bodek et al., *J. Appl. Phys.* **116**, 084510 (2014).
13. S. Pustelny, D. F. Kimball, C. Pankow et al., *Ann. Phys.* **525**, 659 (2013).
14. C. Deans, L. Marmugi, and F. Renzoni, *Appl. Opt.* **57**, 2346 (2018).
15. A. Soheilian, M. Ranjbaran, and M. M. Tehrani, *Sci. Rep.* **10**, 1294 (2020).
16. T. G. Walker and M. S. Larsen, *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **65**, 373 (2016).
17. А. К. Вершовский, Ю. А. Литманович, А. С. Пазгалёв, В. Г. Пешехонов, *Гироскопия и навигация* **26**, 55 (2018).
18. К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, *КЭ* **49**, 169 (2019).
19. W. Happer, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 169 (1972).
20. E. Alexandrov, M. Balabas, A. Pasgalev et al., *Laser Phys.* **6**(2), 244 (1996).
21. J. C. Allred, R. N. Lyman, T. W. Kornack, and M. V. Romalis, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 130801 (2002).
22. A. Weis, G. Bison, and A. S. Pasgalev, *Phys. Rev. A* **74**, 033401 (2006).
23. D. Budker and D. F. Jackson Kimball, *Optical Magnetometry*, Cambridge Univ. (2013).
24. E. Pulz, K.-H. Jäckel, and H.-J. Linthe, *Meas. Sci. Technol.* **10**, 1025 (1999).
25. D. Hunter, S. Piccolomo, J. D. Pritchard et al., *Phys. Rev. Appl.* **10**, 014002 (2018).
26. G. Le Gal, G. Lieb, F. Beato et al., *Phys. Rev. Appl.* **12**, 064010 (2019).
27. V. Schultze, B. Schillig, R. IJsselsteijn et al., *Sensors* **17**, 561 (2017).
28. J. Tang, Y. Zhai, L. Cao et al., *Opt. Express* **29**, 15641 (2021).
29. W. Zheng, S. Su, G. Zhang et al., *Biomed. Opt. Express* **11**, 649 (2020).
30. P. Bevington, R. Gartman, and W. Chalupczak, *Phys. Rev. A* **101**, 013436 (2020).
31. Y. Shi, T. Scholtes, Z. D. Grujić et al., *Phys. Rev. A* **97**, 013419 (2018).
32. Y. Chang, Y.-H. Guo, and J. Qin, *Phys. Rev. A* **99**, 063411 (2019).
33. W. Happer, Y.-Y. Jau, and T. G. Walker, *Optically Pumped Atoms*, Wiley, New York (2010).
34. Е. Н. Попов, В. А. Бобрикова, С. П. Воскобойников и др., *Письма в ЖЭТФ* **108**, 543 (2018).
35. К. А. Баранцев, А. Н. Литвинов, А. С. Пазгалёв, А. К. Вершовский, *ЖЭТФ* **159**, 231 (2021).
36. С. Г. Раутиан, Г. И. Смирнов, А. М. Шалагин, *Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул*, Наука, Новосибирск (1979).
37. F. A. Franz, *Phys. Rev.* **148**, 82 (1966).
38. Т. Л. Андреева, *ЖЭТФ* **54**, 641 (1968).
39. S. Appelt, A. Ben-Amar Baranga, A. R. Young, and W. Happer, *Phys. Rev. A* **59**, 2078 (1999).
40. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, Москва (2004).
41. F. A. Franz, *Phys. Lett. A* **27**, 457 (1968).