

Оптически поляризованная мишень из плотного ${}^3\text{He}$ как спиновый фильтр пучка медленных нейтронов

Н.Н.Колачевский*, Ю.В.Прокофьевич**, В.Р.Ской**, И.И.Собельман*, В.Н.Сорокин*

Экспериментально продемонстрирована возможность поляризации ${}^3\text{He}$ и сохранения ее во внешнем магнитном поле 0.05 Э. Создана разновидность нейтронного фильтра с чрезвычайно низким ведущим полем для получения поляризованных пучков нейтронов. При энергии нейтронов 0.025 эВ была зарегистрирована степень поляризации 25%. Рассмотрены некоторые области применения других поляризованных благородных газов. Приведены оценки сечения кросс-релаксации ядерной поляризации в смеси ${}^{129}\text{Xe} - {}^{131}\text{Xe}$.

Ключевые слова: лазерная спиновая поляризация, спиновый фильтр, поляризация нейтронов.

1. Введение

Создание поляризованных состояний атомов и ядер (поляризации спина валентного электрона s и поляризации спина ядра I) открывает широкие возможности для прецизионных экспериментов в области фундаментальной физики (поиск и исследование эффекта несохранения четности и анапольного момента ядра в экспериментах с пучками поляризованных атомов, поиск эффектов нарушения Т-инвариантности). Мишени с поляризованными ядрами являются важным элементом экспериментов, направленных на решение целого ряда задач ядерной физики.

Особый интерес вызывает возможность поляризации ядерного спина в газе ${}^3\text{He}$. При высоких давлениях такой газ может служить очень эффективным поляризатором для нейтронов в широком диапазоне энергий [1, 2]. Это возможно, поскольку имеет место резонансное поглощение на поляризованных ядрах ${}^3\text{He}$ нейтронов, спины которых антипараллельны спинам ядер ${}^3\text{He}$. При энергии нейтронов $E_T = 0.0253$ эВ («тепловая точка») сечение такого резонансного поглощения σ_{res} в реакции ${}^3\text{He}(n, p){}^3\text{H}$ составляет $\sim 5370 \times 10^{-24}$ см². При увеличении энергии нейтронов сечение σ_{res} уменьшается обратно пропорционально скорости, но для энергий менее 10 эВ оно остается в тысячи раз большим, нежели сечение поглощения нейтронов со спинами, параллельными спином ядер ${}^3\text{He}$.

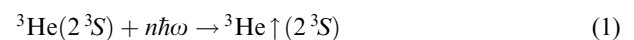
При достаточно больших размерах мишени и высокой концентрации поляризованных ядер ${}^3\text{He}$ выходящий пучок обогащается нейтронами, спины которых параллельны спином ядер.

В последние годы довольно неожиданно возникло новое перспективное направление использования в медицине благородных газов с поляризованными ядрами. Было показано, что вдыхаемый поляризованный благо-

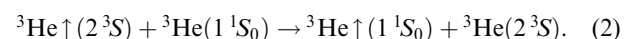
родный газ позволяет проводить диагностику легких методом ЯМР-томографии (см., напр., [3, 4]).

Разработка методов получения спин-поляризованных ядер имеет давнюю историю (см., напр., обзор [5]). Очень высокая поляризация ядер достигается при охлаждении их до температуры менее 1 К в магнитных полях с напряженностью $\sim 10^5$ Э. Однако этот метод не всегда можно эффективно использовать, поскольку для целого ряда прецизионных экспериментов с поляризованными ядрами необходимо иметь очень слабое (а в ряде случаев и нулевое) магнитное поле. Кроме того, желательно обеспечить возможность быстро менять ориентацию спинов, что легко реализовать в газовых мишенях, поляризованных оптическими методами, которые не требуют наложения большого магнитного поля. В этом случае ориентацию спинов можно изменять с достаточно большой частотой при адиабатическом перемагничивании.

Оптические методы поляризации ядерных спинов (в первую очередь спина ядра ${}^3\text{He}$) начали развиваться значительно позднее, нежели криогенные. Для них понадобилась современная лазерная техника. Возможны два метода поляризации спинов ${}^3\text{He}$. В первом происходит ориентация метастабильных атомов ${}^3\text{He}$ в состоянии $2\,{}^3S_1$ в высокочастотном разряде при поглощении циркулярно поляризованного излучения с $\lambda = 1.083$ мкм (переход $2\,{}^3S \rightarrow 2\,{}^3P$)



с последующей передачей поляризации в столкновениях с резонансной передачей возбуждения



Во втором методе сначала реализуется оптическая поляризация электронных спинов атомов щелочных металлов А на резонансном переходе ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ (D₁-линия)



*Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 53

**Объединенный институт ядерных исследований, лаборатория нейтронной физики им. И.М.Франка, Россия, 141980 Дубна, Московская обл.

Далее в столкновениях с атомами благородного газа В, ядра которых имеют отличный от нуля спин, поляризация электронного спина передается спину ядра атома В. Этот метод был опробован еще задолго до создания лазеров. Однако применение его началось после появления достаточно мощных лазеров. Большую роль в развитии данного метода сыграли работы Хаппера и его группы [1, 2]. В случае поляризации ${}^3\text{He}$ оба метода имеют различные преимущества и недостатки.

Так, при реализации первого метода концентрация ${}^3\text{He}$ ограничена, т. к. поляризация ядерного спина начинается с оптической накачки атома ${}^3\text{He}$ в метастабильном состоянии 2^3S . Высокую населенность метастабильного состояния нельзя создать при большом давлении – порядка 1 атм и выше. Однако эффективность передачи поляризации фотонов накачки ядерным спинам очень высока.

При использовании второго метода предпочтительнее работать при концентрациях ${}^3\text{He}$, соответствующих давлению 1–10 атм. Эффективность передачи поляризации фотонов ядерным спинам при этом оказывается низкой. Это связано с относительно большой вероятностью столкновительной релаксации поляризации щелочных атомов в основном состоянии $1S_{1/2}$. Механизмы такой релаксации были детально рассмотрены в ряде работ, в том числе в [6]. Приведем основные результаты для смеси $\text{Rb}-{}^3\text{He}$. Поскольку константа скорости процесса передачи поляризации от электронного спина ядра атома ${}^3\text{He}$ очень мала ($(\nu\sigma) \sim 10^{-19} \text{ см}^3/\text{с}$), определяющей в условиях экспериментов [1, 2] оказывается релаксация электронного спина при столкновении двух поляризованных атомов Rb :



В условиях эксперимента [1] при концентрации рубидия $n_{\text{Rb}} = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ скорость релаксации электронного спина $\Gamma \approx 10^3 \text{ с}^{-1}$. Необходимая для поляризации паров Rb в кювете объемом V удельная мощность накачки $W/V \approx 0.2 \text{ Вт}/\text{см}^3$, где W – поглощаемая мощность лазерного пучка. Заметим, что лишь очень малая часть ($\sim 1\%$) мощности накачки W расходуется на создание поляризации ${}^3\text{He}$, остальная же мощность теряется из-за спиновой релаксации.

Приведем основные данные эксперимента [1, 2] по поляризации ${}^3\text{He}$ в смеси $\text{Rb}-{}^3\text{He}$. На длине волны $\lambda = 795 \text{ нм}$ резонансной D_1 -линии атома Rb кольцевой лазер на красителе с накачкой криптоновым ионным лазером обеспечивал мощность 1 Вт. В кювете объемом $V \sim 6 \text{ см}^3$ с поперечным сечением 0.65 см^2 при $n_{\text{He}}L \approx 3 \times 10^{20} \text{ см}^{-2}$ (где L – длина кюветы, n_{He} – концентрация гелия) поляризация ядерного спина ${}^3\text{He}$ составила около 70%. Результаты работ [1, 2] сыграли исключительно важную роль, показав эффективность использованного оптического метода, однако стало ясно, что для целого ряда экспериментов с поляризованными ядрами необходимо существенно увеличить мощность накачки.

Заметим, что кольцевые лазеры на красителях с накачкой ионными лазерами (Ar^+ - и Kr^+ -лазерами) позволяют получить выходную мощность $\sim 1 \text{ Вт}$, а лазеры на кристалле сапфира с примесными ионами Ti^{3+} (титан-сапфировые лазеры) – до 3–4 Вт в пределах контура D_1 -линии атомов Rb и K . Дальнейшее увеличение оптиче-

ской мощности стало возможным благодаря использованию полупроводниковой лазерной накачки. Особенно перспективными представляются диодные линейки, настроенные на D_1 -линию щелочного атома, в частности Rb , и осуществляющие необходимую накачку вообще без титан-сапфирового лазера. Подобный прямой метод использования полупроводниковой накачки позволяет поднять мощность накачки до 10–50 Вт.

Надо отметить, что спецификой метода является то, что спектральная ширина линии излучения полупроводниковой линейки значительно (примерно на порядок) превышает спектральную ширину D_1 -линии поглощения Rb . Это потребовало определенных изменений в технике эксперимента (см., напр., [7, 8]). Во-первых, использовалось по возможности большое (свыше 3 атм) давление ${}^3\text{He}$ для обеспечения значительного ударного уширения D_1 -линии. (При давлении ${}^3\text{He}$, равном 4 атм, и температуре 190°C ударная ширина линии составляет $\sim 2.5 \text{ см}^{-1}$.) Кроме того, с ростом давления ${}^3\text{He}$ увеличивается эффективность канала передачи поляризации от рубидия к гелию. Во-вторых, накачка осуществлялась в условиях большой оптической толщи паров рубидия в области D_1 -линии. Это позволяло использовать для накачки значительную часть крыльев контура поглощения и, как следствие, около 80% мощности полупроводниковой линейки при спектральной ширине ее линии генерации 2.4 нм.

Ниже приведены результаты экспериментов по поляризации пучка тепловых нейтронов гелиевой мишенью, для поляризации которой применялась накачка Rb излучением полупроводниковой линейки мощностью 15 Вт на $\lambda = 795 \text{ нм}$.

Для оптической накачки рубидия требуется постоянное магнитное поле B_{\parallel} , направление которого совпадает с лазерным лучом. Это связано с необходимостью расщепления магнитных подуровней основного состояния атома. Оценки показывают, что даже самого незначительного магнитного поля достаточно для полного расщепления подуровней и, следовательно, для оптической накачки. Таким образом, напряженность внешнего поля можно было бы сильно уменьшить по сравнению с той, которая обычно используется. Например, в экспериментах с нейтронным пучком, когда ориентации поляризатора и мишени взаимно ортогональны, возникает прецессия поляризации нейтронов в скрещенных полях в области между поляризатором и мишенью, что приводит к ряду ложных систематических эффектов. В слабых полях частота прецессии мала, а значит, малы и связанные с ней систематические эффекты.

С другой стороны, наличие внешнего однородного магнитного поля необходимо для предотвращения деполаризации ядер ${}^3\text{He}$ за счет неоднородности лабораторного поля. Характерное время ядерной релаксации τ_m , связанной с магнитными неоднородностями, дается выражением [9]

$$\frac{1}{\tau_m} \approx D_{\text{He}} \left(\frac{\nabla B_{\perp}}{B_{\parallel}} \right)^2, \quad (5)$$

где D_{He} – коэффициент диффузии гелия; B_{\perp} и B_{\parallel} – компоненты поля, перпендикулярная и параллельная направлению ядерной поляризации.

Решить обе задачи (уменьшить напряженность ведущего поля и влияние внешних полей) сразу можно, помес-

тив кювету внутри цилиндрического магнитного экрана. Поскольку фактор экранировки компоненты поля S_{\perp} , поперечной к оси экрана, обычно намного больше фактора продольной экранировки S_{\parallel} , то экран «выстраивает» поле вдоль своей оси. Следовательно, совместив ось экрана с направлением лазерного пучка, можно создать очень малое остаточное однородное поле в месте расположения кюветы.

Поскольку градиенты внешних полей обычно малы, то можно считать, что

$$B_{\parallel}^{\text{int}} = \frac{B_{\parallel}^{\text{ext}}}{S_{\parallel}}, \quad \nabla B_{\perp}^{\text{int}} \approx \frac{\nabla B_{\perp}^{\text{ext}}}{S_{\perp}}, \quad (6)$$

где индексы «int» и «ext» относятся к компонентам поля соответственно внутри и снаружи экрана. В этом случае выражение (6) для кюветы внутри экрана принимает вид

$$\frac{1}{\tau_m^{\text{int}}} = \frac{1}{\tau_m^{\text{ext}}} \left(\frac{S_{\parallel}}{S_{\perp}} \right)^2 \ll \frac{1}{\tau_m^{\text{ext}}}. \quad (7)$$

Таким образом, магнитный экран позволяет получить малое, довольно однородное поле и существенно снизить влияние неоднородных окружающих полей. Кроме того, для работы с экраном не требуются внешние источники полей в виде колец или соленоидов, достаточно естественного поля Земли.

В ряде практических случаев представляет интерес не только передача атомарной поляризации щелочных металлов ядрам благородных газов, но и кросс-поляризация. Это явление может происходить, например, в бинарных смесях разных инертных газов или разных изотопов одного и того же газа. Оно заключается во взаимном обмене (передаче) ядерной поляризации между компонентами смеси. Если соответствующая константа скорости передачи мала, то компоненты практически не взаимодействуют и смесь состоит из двух отдельных спиновых подсистем. В противном случае получается сложная динамическая система, в которой один из компонентов может играть роль «спинового резервуара» для другого. Например в рамках эксперимента CaTRIn [10] по проверке временной инвариантности во взаимодействии поляризованных нейтронов с поляризованными ядрами представляет интерес исследование спин-обменных процессов в смеси $^{129}\text{Xe} - ^{131}\text{Xe}$, которую предполагается использовать в качестве поляризованной мишени. Этот вопрос подробно рассмотрен в Приложении.

2. Экспериментальная установка

Для проверки сделанных выше заключений мы провели эксперимент на пучке медленных нейтронов реактора ИБР-30 в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка ОИЯИ. На рис.1 схематически представлено использованное нами устройство поляризатора нейтронов. Мишень – поляризатор нейтронов – представляла собой сферическую кювету диаметром 3 см, изготовленную из алюмосиликатного стекла марки «Корнинг 1720». Это стекло химически инертно к действию горячих паров рубидия и содержит малое количество ферро- и парамагнитных примесей, которые обычно приводят к быстрой релаксации ядерной поляризации при столкновениях поляризованных атомов со стенками кюветы. Кювета была заполнена на стенде и отпаяна. Она содержала немного

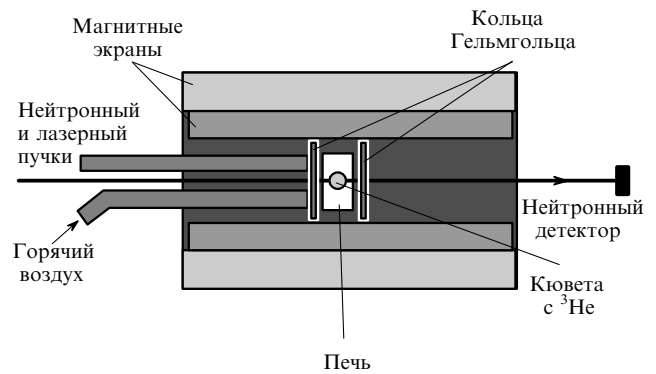


Рис.1. Схема эксперимента на нейтронном пучке.

металлического рубидия, азот при давлении 70 Тор и ^3He , концентрация которого соответствовала плотности газа при давлении немного меньше атмосферного и температуре жидкого азота. Предварительно для этой мишени на установке в ФИАНе [8] было проведено измерение времени жизни ядерной поляризации, которое составило 36 ± 2 мин. Такое довольно малое время связано с тем, что при наполнении кюветы не использовался фильтр прецизионной очистки ^3He .

В эксперименте на нейтронном пучке мишень располагалась внутри алюминиевой коробки-печки и нагревалась горячим воздухом от тепловентилятора до температуры около 190°C . Такой температуре соответствует оптимальная концентрация паров рубидия $(4 - 8) \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Стенки печки одновременно экранировали мишень от внешних переменных полей. Снаружи были расположены два цилиндрических магнитных экрана соосно с лазерным и нейтронным пучками. Оба экрана изготовлены из пермаллоя толщиной 0.5 мм, имеют длину 67 см и диаметры 38 и 44 см. На экранах находятся обмотки для размагничивания. Размагничивание было проведено за день до экспериментов, чтобы затухли релаксационные процессы в материале экранов. В центре (там, где расположена мишень) остаточное магнитное поле оказалось продольным и равным 0.05 Э. Симметрично около печки была установлена пара малых колец Гельмгольца. С их помощью можно создавать продольное магнитное поле до 7 Э.

На рис.2 показана оптическая схема облучения мишени циркулярно поляризованным лазерным пучком для накачки паров рубидия и контроля спектра излучения, прошедшего через мишень. Мы использовали диодный лазер A015-795-FCPS (производство OptoPower Corporation), излучение которого выходило через 23-волоконный жгут диаметром 1.55 мм. Выходное излучение не было поляризовано, а его мощность составляла 15 Вт в телесном угле, раствор конуса которого равнялся 12° по уровню $1/e^2$. Спектр излучения имел сложный вид при полной ширине около 2.4 нм. Регулировкой температуры диодов устанавливалось оптимальное соответствие спектра контуру линии поглощения рубидия.

Лазерный пучок коллимировался линзой и делился поляризационным кубиком на два линейно поляризованных пучка со взаимно ортогональными плоскостями поляризации. Линейная поляризация превращалась в циркулярную с помощью ромбов Френеля. Оба пучка сходились в объеме кюветы под углом менее 4° . Диаметр пучков на мишени можно было менять от 2 до 4 см, пе-

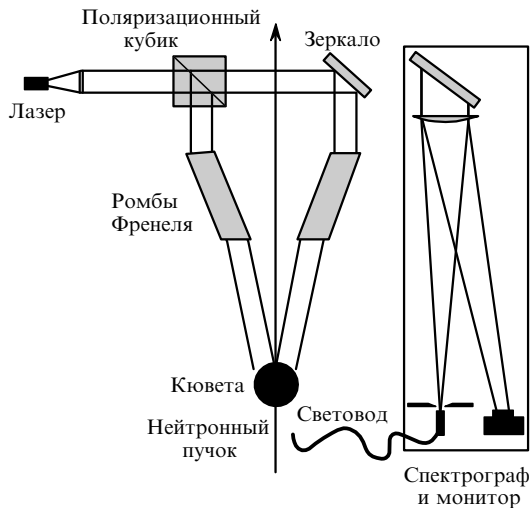


Рис.2. Схема оптической накачки.

ремещаю линзу. В прошедшем через мишень пучке был установлен торец световода, по которому излучение поступало в 30-сантиметровый спектрометр с ПЗС-матрицей на месте выходной щели. Спектрометр регистрировал излучение в диапазоне 792.7 – 797.3 нм с разрешением 0.05 нм.

Число нейтронов, прошедших через мишень с поляризацией p_{He} ,

$$N = N_0 \exp[-\sigma_{\text{res}}(E)n_{\text{He}}L] \cosh[p_{\text{He}}\sigma_{\text{res}}(E)n_{\text{He}}L] = N_1 \cosh[p_{\text{He}}\sigma_{\text{res}}(E)n_{\text{He}}L], \quad (8)$$

где E – кинетическая энергия нейтронов; N_0 – число нейтронов, падающих на мишень; N_1 – число нейтронов, прошедших через мишень с неполяризованным ^3He . Поляризация выходящего из мишени нейтронного пучка определяется выражением

$$p_n = \tanh[p_{\text{He}}\sigma_{\text{res}}(E)n_{\text{He}}L]. \quad (9)$$

В эксперименте измерение нейтронной поляризации проводилось по стандартной времяпролетной методике. Поляризация определялась из соотношения (см. (8))

$$p_n = \left[1 - \left(\frac{N_0}{N} \right) \right]^{1/2}. \quad (10)$$

Нейтронный пучок коллимировался так, чтобы он проходил между оптическими элементами, показанными на рис.2, не задевая их.

В качестве нейтронного детектора использовалась камера деления с изотопом ^{235}U . Резонансы в сечении поглощения нейтронов ^{235}U играли роль «естественных» энергетических точек при определении нейтронной поляризации. Для статистической нормировки данных, измеренных в разное время, мы использовали высокоэнергетическую часть нейтронного спектра в диапазоне 7.89 – 93.46 эВ. В пределах этой области использовавшаяся кювета поляризует пучок очень слабо ($p_n \ll 1\%$).

Измерения проводились в два этапа – с включенными и выключенными кольцами Гельмгольца. В первом слу-

чае ведущее поле составляло 3 Э, во втором – 0.05 Э (остаточное поле в экране). Перед началом второго этапа измерений (без поля) поляризация ^3He разрушалась небольшим постоянным магнитом для восстановления начального состояния. В каждом случае измерение нейтронных спектров начиналось спустя 1.5 ч после начала накачки, когда поляризация ^3He достигала насыщения.

Кроме основных измерений были выполнены измерения спектров нейтронов, прошедших через кювету с неполяризованным гелием, и открытого пучка (без кюветы), а также фонового спектра. Последний регистрировался при установке в пучок пластинки кадмия толщиной 0.5 мм для поглощения тепловых нейтронов пучка.

3. Результаты экспериментов

Результаты измерения нейтронной поляризации как функции энергии нейтронов при включенном и выключенном поле колец показаны на рис.3. Видно, что в пределах статистической погрешности обе поляризации хорошо согласуются между собой. Таким образом, была установлена практическая возможность оптической накачки паров Rb, поляризации и хранения поляризованного ^3He в слабом магнитном поле.

Давление ^3He в кювете P определялось из результатов подгонки величины $\exp[-Pn_L(E_T/E)^{1/2}\sigma_{\text{res}}(E_T)x]$, где n_L – число Лошмидта, а x – эффективная толщина кюветы, к трансмиссии – отношению спектров нейтронов, прошедших через кювету с неполяризованным гелием, и открытого пучка. При подгонке был учтен вклад поглощения нейтронов стенками самой кюветы. Дело в том, что алюмосиликатное стекло содержит около 5% B_2O_3 . В естественную смесь изотопов бора входит 19.8% ^{10}B , который очень сильно поглощает тепловые нейтроны. Учет этого вклада производился по результатам компьютерного моделирования с помощью стандартных программ.

На рис.4 представлена трансмиссия нейтронов через кювету с неполяризованным гелием после поправки на поглощение в стенках, а также кривая, полученная подгонкой и соответствующая давлению ^3He , равному 3.40 ± 0.02 атм. Это значение отвечает условиям наполнения кюветы при температуре жидкого азота.

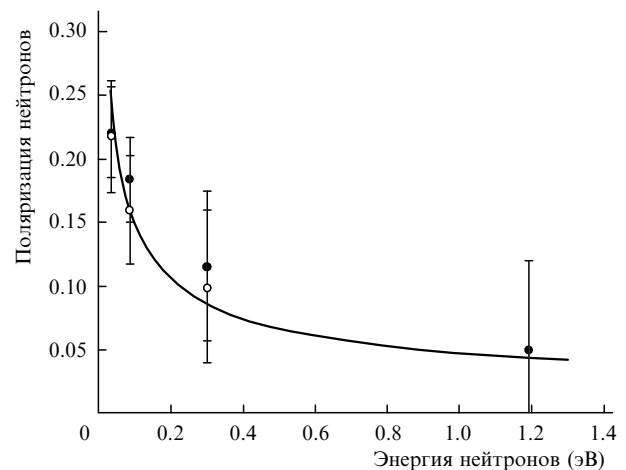


Рис.3. Зависимости поляризации нейтронов от их энергии при включенных (●) и выключенных (○) кольцах Гельмгольца. Сплошная кривая – подгонка при $p_{\text{He}} = 0.30 \pm 0.03$.

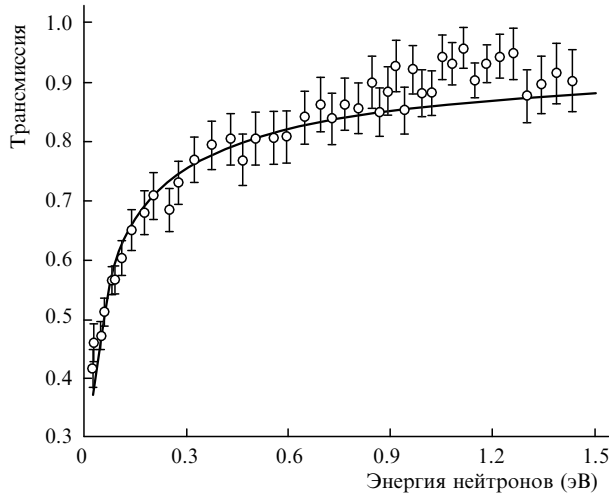


Рис.4. Трансмиссия нейтронов для кюветы с неполяризованным ^3He с поправкой на поглощение в стенках (точки). Сплошная кривая – подгонка при $P = 3.40 \pm 0.02$ атм.

4. Заключение

Таким образом, продемонстрирована возможность оптической накачки паров Rb, поляризации ^3He и сохранения ее в слабом (0.05 Э) ведущем магнитном поле. Был создан прототип новой разновидности нейтронного фильтра для получения поляризованных пучков нейтронов. Выполненные измерения степени поляризации ^3He в данной кювете позволяют в дальнейшем применять ее в качестве эталона при создании новых кювет и определения их характеристик методом ЯМР. Последнее обстоятельство избавляет от необходимости калибровки поляризации ^3He по сигналу ЯМР протонов воды, которая в ряде случаев весьма затруднительна из-за малой величины сигнала.

Мы намерены использовать приобретенный опыт и методические приемы при создании полномасштабной установки KaTRIn и проведении экспериментов по поиску эффектов нарушения временной инвариантности во взаимодействии поляризованных нейтронов с поляризованными ядрами.

Авторы благодарны Ш.Зейналову и А.В.Сермягину за содействие при проведении измерений на нейтронном пучке и И.Ю.Толстихиной за помощь в численных расчетах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 00-15-96586 и 02-02-16980), Федеральной программы «Интеграция» (Б-0049) и Фонда Александра Гумбольдта.

Приложение

Взаимодействие ядерных магнитных диполей

Гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия ядерных спинов I_1 и I_2 имеет вид [11]

$$H' = Ag_1g_2[3(I_1n)n - I_1]I_2, \quad (\text{П1})$$

где

$$A = -\frac{1}{2}\alpha^2 \left(\frac{m_e}{m_p}\right)^2 \left(\frac{a_0}{R}\right)^3 \frac{e^2}{2a_0}; \quad (\text{П2})$$

$\alpha = e^2/\hbar c \simeq 1/137$; a_0 – атомная единица длины; e^2/a_0 – атомная единица энергии; m_e и m_p – массы электрона и протона соответственно; g_1 и g_2 – гиромагнитные отно-

шения (g -факторы) для ядер 1 и 2; R – расстояние между ядрами 1 и 2; n – единичный вектор, направленный по вектору R .

Строгое вычисление эффективного сечения передачи поляризации между ядрами 1 и 2

$$\sigma(m_1, m_2 \rightarrow m_1 - 1, m_2 + 1), \quad (\text{П3})$$

где m_1 и m_2 – магнитные квантовые числа, требует решения задачи об упругом рассеянии атомов 1 и 2 с учетом малого потенциала спин-спинового взаимодействия (П1) в рамках теории возмущений. Для приближенных оценок сечения (П3) можно использовать более упрощенную (квазиклассическую) процедуру, положив

$$\sigma(m_1, m_2 \rightarrow m_1 - 1, m_2 + 1) = 2\pi \int_0^{\rho_0} W(\rho)\rho d\rho, \quad (\text{П4})$$

где

$$W(\rho) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle m_1, m_2 | H' | m_1 - 1, m_2 + 1 \rangle|^2 \left(\frac{\rho}{v}\right)^2 \quad (\text{П5})$$

– безразмерная вероятность обмена поляризацией ($m_1, m_2 \rightarrow m_1 - 1, m_2 + 1$) при столкновении атомов 1 и 2 с прицельным параметром ρ и скоростью v за время $\tau = \rho/v$. Прицельный параметр ρ_0 выражается через сечение упругого рассеяния σ_{el} :

$$\rho_0 \simeq \left(\frac{\sigma_{el}}{\pi}\right)^{1/2}. \quad (\text{П6})$$

Апробируем предлагаемый метод оценки сечения (П4) и вероятности (П5) на примере процессов передачи поляризации от электронного спина s атома Rb ядерному спину I при столкновениях Rb с ^3He и Rb с ^{129}Xe . Для этих процессов имеются надежные экспериментальные данные.

В указанных столкновениях спин ядра $I = 1/2$ и основную роль в передаче поляризации играет контактное взаимодействие, потенциал которого пропорционален sI . В соответствии с [11]

$$H' = \frac{8\pi}{3}\alpha^2 g_1 \left(\frac{m_e}{m_p}\right) \frac{e^2}{2a_0} a_0^3 |\psi(0)|^2 sI, \quad (\text{П7})$$

$$\begin{aligned} &\langle m_s, m_I | sI | m_s - 1, m_I + 1 \rangle \\ &= 3/2 \left| \begin{pmatrix} 1/2 & 1 & 1/2 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (\text{П8})$$

$$\langle m_s, m_I | H' | m_s - 1, m_I + 1 \rangle = \frac{2\pi}{3}\alpha^2 g_1 \left(\frac{m_e}{m_p}\right) \frac{e^2}{a_0} a_0^3 |\psi(0)|^2,$$

где $\psi(0) = \psi(R=0)$ – волновая функция электрона атома Rb, описывающая его движение в поле ядра атома благородного газа, взятая при $R=0$.

При столкновениях Rb с ^3He имеем $g_I = 4.26$ [12], поэтому из (П5) получаем

$$\begin{aligned} W(\rho) &= 6.5 \times 10^{-14} \left(\frac{v_0}{v}\right)^2 \left(\frac{\rho}{a_0}\right)^2 \left[a_0^3 |\psi(0)|^2\right]^2 \\ &= 7.8 \times 10^{-8} \left(\frac{\rho}{a_0}\right)^2 \left[a_0^3 |\psi(0)|^2\right]^2, \end{aligned} \quad (\text{П9})$$

где $v_0 = e^2/\hbar = 2.19 \times 10^8$ см/с – атомная единица скорости; $v = 2 \times 10^5$ см/с соответствует температуре $T \simeq 500$ К.

Интеграл по ρ в (П4) можно оценить, воспользовавшись тем обстоятельством, что ρ_0 (П6) примерно соответствует наибольшему сближению электрона атома Rb с ядром атома ${}^3\text{He}$. Приняв $\sigma_{\text{el}} \sim 10^{-15}$ см², получим $\rho_0 = 1.8 \times 10^{-8}$ см $\simeq 3.4a_0$.

Для оценки фактора $a_0^3|\psi(0)|^2$ были выполнены вычисления $|\psi(0)|^2$ для электрона $2s$ в возбужденном состоянии $1s2s$ атома He, электрона $1s$ в основном состоянии $1s^2$ атома He и электрона $2s$ в основном состоянии $1s^2 2s$ атома Li. Последние два случая являются контрольными, т. к. позволяют дать надежную оценку сверху фактора $a_0^3|\psi(0)|^2$. Для электрона $1s$ атома He среднеквадратичный радиус электронной орбиты $r \simeq a_0 = 0.53 \times 10^{-8}$ см, т. е. значительно меньше ρ_0 , для атома Li заряд $Z = 3$ вместо $Z = 2$ для атома He. Напомним, что для атома водорода $|\psi_{ns}(0)|^2 = Z^3/(\pi a_0^3 n^3)$, где n – главное квантовое число.

Вычисления проводились с помощью программы RCN из пакета COWAN [13], которая является одной из наилучших программ многоконфигурационного метода Хартри – Фока. В результате расчетов найдено:

$$\begin{aligned} r = 4.8a_0, \quad a_0^3|\psi_{2s}(0)|^2 &= 0.103 \quad \text{для He}(1s2s), \\ r = 1.08a_0, \quad a_0^3|\psi_{1s}(0)|^2 &= 1.75 \quad \text{для He}(1s^2), \quad (\text{П10}) \\ r = 4a_0, \quad a_0^3|\psi_{2s}(0)|^2 &= 0.18 \quad \text{для Li}(2s^2 2s). \end{aligned}$$

Радиус $r = 4.8a_0$ близок к $\rho_0 = 3.4a_0$, поэтому подставим в (П9) наиболее вероятное значение $[a_0^3|\psi(0)|^2]^2 = 0.01$ и получим

$$W(\rho) = 7.8 \times 10^{-10} \left(\frac{\rho}{a_0} \right)^2. \quad (\text{П11})$$

Из (П4) следует, что

$$\begin{aligned} \sigma(m_s, m_I \rightarrow m_s - 1, m_I + 1) &= 3.8 \times 10^{-10} \pi \rho_0^2 \left(\frac{\rho_0}{a_0} \right)^2 \\ &\simeq 4.3 \times 10^{-24} \text{ см}^2. \end{aligned} \quad (\text{П12})$$

Сечение (П12) соответствует процессу обмена поляризацией спинов $\text{Rb} \uparrow + {}^3\text{He} \downarrow \rightarrow \text{Rb} \downarrow + {}^3\text{He} \uparrow$. В эксперименте представляет интерес процесс $\text{Rb} \uparrow + {}^3\text{He} \rightarrow \text{Rb} + {}^3\text{He} \uparrow$, сечение которого в два раза меньше сечения (П12). Учитывая сказанное, получаем, что сечение поляризации ${}^3\text{He}$ в смеси с полностью поляризованным Rb

$$\sigma \simeq 2.15 \times 10^{-24} \text{ см}^2. \quad (\text{П13})$$

При $v = 2 \times 10^5$ см/с константа скорости такого процесса поляризации

$$\langle v\sigma \rangle = 4.3 \times 10^{-19} \text{ см}^3/\text{с}. \quad (\text{П14})$$

Из [2] следует, что

$$\langle v\sigma \rangle_{\text{exp}} = 1.2 \times 10^{-19} \text{ см}^3/\text{с}. \quad (\text{П15})$$

Видно, что теоретическая оценка (П14) находится в удовлетворительном согласии с экспериментом. Напомним,

что в используемом методе оценки сечение σ фактически зависит от сечения упругого рассеяния: $\sigma \propto \sigma_{\text{el}}^2$ (П12). Достаточно уменьшить σ_{el} в два раза, положив его равным 0.53×10^{-15} см² вместо 10^{-15} см², как это было сделано выше, чтобы оценки (П14) и (П15) совпали.

В случае столкновения атомов Rb и ${}^{129}\text{Xe}$ ($I = 1/2$) в выражении (П9) надо сделать замену

$$\begin{aligned} g_I({}^3\text{He}) &= 4.26 \rightarrow g_I({}^{129}\text{Xe}) = -1.554, \\ v^2(\text{Rb} - {}^3\text{He}) &= 4 \times 10^{10} (\text{см/с})^2 \rightarrow v^2(\text{Rb} - {}^{129}\text{Xe}) \\ &= 0.43 \times 10^{10} (\text{см/с})^2. \end{aligned}$$

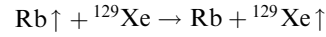
В результате получим

$$W(\rho) = 9 \times 10^{-8} \left(\frac{\rho}{a_0} \right)^2 [a_0^3|\psi(0)|^2]^2. \quad (\text{П16})$$

Фактор $a_0^3|\psi(0)|^2$ в (П16) можно оценить, вычислив $W(\rho)$ для $5s$ - и $6s$ -электронов основного состояния атома Cs. В атомах Xe и Cs заряды ядер практически одинаковы (54 и 55). Экранировка заряда ядра заполненными электронными оболочками тоже одинакова, поэтому

$$\begin{aligned} r = 6.3a_0, \quad a_0^3|\psi_{6s}(0)|^2 &= 2 \quad \text{для Cs}(6s), \quad (\text{П17}) \\ r = 1.94a_0, \quad a_0^3|\psi_{5s}(0)|^2 &= 33 \quad \text{для Cs}(5s). \end{aligned}$$

Используя те же, что и для столкновений Rb с ${}^3\text{He}$, значения $\sigma_{\text{el}} = 10^{-15}$ см², $\rho_0 = 3.4a_0$ и сравнивая среднеквадратичные радиусы $r = 6.32a_0$ и $1.94a_0$ с ρ_0 , получаем $a_0^3|\psi(0)|^2 \simeq 5 - 7$. В результате для процесса



константа скорости реакции

$$\langle v\sigma \rangle = (1 - 2) \times 10^{-16} \text{ см}^3/\text{с}, \quad (\text{П18})$$

что также вполне удовлетворительно согласуется с экспериментом (см., напр., [14]).

Перейдем к оценке сечения передачи поляризации между двумя ядерными спинами, например при столкновении двух изотопов ${}^{129}\text{Xe}$ и ${}^{131}\text{Xe}$. В этом случае контактное взаимодействие типа (П7) невозможно из-за электростатического отталкивания ядер и следует исходить из соотношений (П1), (П2). Ограничимся случаем, когда один из ядерных спинов $I_1 = 1/2$. Введем обозначения $I_1 = i$, $I_2 = I$ ($i = 1/2$). Выражение (П1) можно переписать в виде тензорного произведения неприводимых тензорных операторов [11]:

$$H' = -Ag_i g_I \sqrt{10} \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda} [C^2 \times i^1]_{\lambda}^1 I_{-\lambda}, \quad (\text{П19})$$

где

$$[C^2 \times i^1]_{\lambda}^1 = \sum_{\lambda, \sigma, \sigma'} (-1)^{-1-\lambda} \sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ \sigma & \sigma' & -\lambda \end{pmatrix} C_{\sigma}^2 i_{\sigma'}^1, \quad (\text{П20})$$

$$C_{\sigma}^2 = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} Y_{2\sigma}(\theta_R \varphi_R).$$

Общие формулы, определяющие неприводимые тензорные операторы U_q^k, T_q^r , их скалярные произведения $U^k T^k = \sum_q (-1)^q U_q^k T_q^k$ и тензорные произведения $[U^k \times T^k]_\sigma^r$, содержатся, например, в [11]. Подставив (П20) в (П19), получим

$$H' = Ag_i g_I \sqrt{30} \sum_{\lambda, \sigma, \sigma'} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ \sigma & \sigma' & -\lambda \end{pmatrix} C_{\sigma' i \sigma}^2 C_{\sigma' I -\lambda}^2. \quad (\text{П21})$$

Рассмотрим матричный элемент гамильтониана H' для процесса обмена поляризациями спинов i и I , т. е. для перехода $m_i, m_I \rightarrow m_i - 1, m_I + 1$, где m_i, m_I – магнитные квантовые числа спинов ядер. Стандартные вычисления сумм, содержащих $3j$ -символы, дают следующий результат [11]:

$$\begin{aligned} & \langle m_i, m_I | H' | m_i - 1, m_I + 1 \rangle \\ &= Ag_i g_I \sqrt{45} [I(I+1)(2I+1)]^{1/2} (-1)^{I-m_i} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} Y_{20} \quad (\text{П22}) \\ & \times \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1 & 1/2 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -m_I & -1 & m_I + 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Подставляя численные значения первых двух $3j$ -символов в (П22), получаем

$$\begin{aligned} & \langle m_i, m_I | H' | m_i - 1, m_I + 1 \rangle \\ &= -\left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} Ag_i g_I [I(I+1)(2I+1)]^{1/2} (-1)^{I-m_i} \\ & \times \begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -m_I & -1 & m_I + 1 \end{pmatrix} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} Y_{20}. \quad (\text{П23}) \end{aligned}$$

В выражении для константы A (П2) можно заменить R на ρ , поскольку R – расстояние между ядрами сталкивающихся атомов. Зависимость A от ρ примерно такова: $A(\rho) \simeq A(\rho_0) \simeq (a_0/\rho_0)^3$ при $\rho \leq \rho_0$ и $A(\rho) = (a_0/\rho)^3$ при $\rho \geq \rho_0$. Поэтому выражение (П5) запишем в виде

$$\begin{aligned} W(\rho) &= 0.63 \times 10^{-24} \left(\frac{v_0}{v}\right)^2 g_i^2 g_I^2 \\ & \times \left[I(I+1)(2I+1) \left| \begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -m_I & -1 & m_I + 1 \end{pmatrix} \right|^2 \right] \\ & \times \left\langle \frac{4\pi}{3} Y_{20}^2 \right\rangle \left(\frac{a_0}{\rho_0}\right)^6 \frac{\rho^2}{a_0^2}, \quad \rho \leq \rho_0. \quad (\text{П24}) \end{aligned}$$

Оценивая угловой фактор $\langle (4\pi/3) Y_{20}^2(\theta_R \varphi_R) \rangle$, напомним, что вектор \mathbf{R} направлен от ядра со спином i к ядру со спином I . Из наглядных представлений о телесном угле, который дает основной вклад во взаимодействие, можно заключить, что $\langle (4\pi/3) Y_{20}^2 \rangle \simeq 1$.

Приведем оценку сечения кросс-поляризации σ в смеси изотопов $^{129}\text{Xe} - ^{131}\text{Xe}$ при комнатной температуре и $(v_0/v)^2 = 2 \times 10^8$. Спины и g -факторы изотопов таковы:

$$i = 1/2, \quad g_i = -1.56 \quad \text{для } ^{129}\text{Xe},$$

$$I = 3/2, \quad g_I = +0.47 \quad \text{для } ^{131}\text{Xe}.$$

Вычисление суммы по $m = -3/2, -1/2, +1/2$ дает

$$I(I+1)(2I+1) \frac{1}{2I+1} \sum_m \left| \begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -m & -1 & m+1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{5}{4}.$$

С помощью выражения (П4) получаем оценку (при $\pi\rho_0^2 = \sigma_{\text{el}} = 10^{-15} \text{ см}^2, \rho_0 = 3.4a_0$)

$$\sigma \simeq 0.5 \times 10^{-16} \pi a_0^2 \left(\frac{\pi a_0^2}{\sigma_{\text{el}}}\right) \simeq 0.5 \times 10^{-32} \left(\frac{\pi a_0^2}{\sigma_{\text{el}}}\right), \quad (\text{П25})$$

что примерно в $(m_e/m_p)^2$ раз меньше, чем σ (П13), как этого и следовало ожидать.

1. Chupp T.E., Wagshul M.E., Coulter K.P., McDonald A.B., Happer W. *Phys. Rev. C*, **36**, 2244 (1987).
2. Coulter K.P., McDonald A.B., Happer W., Chupp T.E., Wagshul M.E. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Research A*, **270**, 90 (1988).
3. Albert M., et al. *Nature*, **370**, 199 (1994).
4. Ebert M., et al. *Lancet*, **347**, 1297 (1996).
5. Лалоз Ф., Ледюк М., Наше П.Ж., Новиков Л.Н., Тастевен Ж. *УФН*, **147**, 433 (1985).
6. Папченко А.А., Собельман И.И., Юков Е.А. *Препринт ФИАН № 24* (М., 1989).
7. Kolachevsky N.N., Papchenko A.A., Prokofiev Yu.V., Skoy V.R., Sobelman I.I., Sorokin V.N. *Препринт ФИАН № 39* (М., 1999).
8. Колачевский Н.Н., Папченко А.А., Прокофьевичев Ю.В., Ской В.Р., Собельман И.И., Сорокин В.Н. *Квантовая электроника*, **30**, 81 (2000).
9. Cates G.D., Shaefer S.R., Happer W. *Phys. Rev. A*, **37**, 2877 (1988).
10. Skoy V.R., et al. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Research A*, **402**, 232 (1998).
11. Sobelman I.I. *Atomic Spectra and Radiative Transitions* (New York: Springer Verlag, 1979).
12. Бете Г., Солпитер Е. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М.: Физматгиз, 1960).
13. Cowan R.D. *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley: University of California Press, 1981).
14. Cates G.D., et al. *Phys. Rev. A*, **45**, 4631 (1992).