

О ТОЧНОСТИ ОДНОМЕРНОГО ПОДХОДА К РЕШЕНИЮ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ЗАВИСЯЩИМИ ОТ СКОРОСТИ ЧАСТОТАМИ СТОЛКНОВЕНИЙ

*А. И. Пархоменко**, *А. М. Шалагин***

*Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

*Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 30 июня 2014 г.

Решение многих задач светоиндуцированной газовой кинетики и спектроскопии можно существенно упростить, используя квантовые кинетические уравнения в рамках так называемого одномерного приближения, в котором исходные уравнения усредняются по поперечным (к направлению излучения) скоростям. Ошибки, вносимые при использовании такого приближения, обычно считаются небольшими, однако до сих пор это количественно подтверждено только на основе простейших (двухуровневой и трехуровневой) моделей частиц. Количественно исследована точность одномерного приближения для многоуровневых частиц на примере эффекта светоиндуцированного дрейфа (СИД) атомов цезия в атмосфере инертных буферных газов. Показано, что в случае так называемого «нормального» СИД всегда можно использовать одномерные кинетические уравнения вместо трехмерных без риска потерять какие-либо важные тонкие детали в зависимости скорости дрейфа от частоты излучения. В случае аномального СИД погрешность одномерного приближения незначительна и ею можно пренебречь только в случае легких буферных частиц. При сопоставимых массах резонансных и буферных частиц одномерное приближение может давать заметную погрешность в определении амплитуд скорости дрейфа, но при этом хорошо описывать положение нулей и экстремумов скорости дрейфа в зависимости от отстройки частоты излучения. Полученные результаты показывают, что погрешность, вносимая при использовании одномерного приближения, для многоуровневых частиц оказывается более существенной, чем для простейших моделей частиц.

DOI: 10.7868/S0044451014110078

матрицы плотности $\rho_{ij}(\mathbf{v})$ резонансных частиц можно представить в факторизованном виде:

1. ВВЕДЕНИЕ

$$\rho_{ij}(\mathbf{v}) = W(\mathbf{v}_\perp)\rho_{ij}(v_z), \quad (1)$$

Хорошо известно, что лазерное излучение при взаимодействии с газом резонансных частиц создает, благодаря эффекту Доплера, неравновесность распределений частиц по скоростям только для проекции v_z скорости частиц \mathbf{v} на волновой вектор излучения \mathbf{k} ($v_z = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}/k$). Распределение частиц по ортогональной к волновому вектору \mathbf{k} проекции \mathbf{v}_\perp скорости \mathbf{v} непосредственно излучением не возмущается. Поэтому в отсутствие столкновений элементы

где $W(\mathbf{v}_\perp)$ — распределение Максвелла по проекции скорости \mathbf{v}_\perp . Соотношение факторизации (1) позволяет свести трехмерные квантовые кинетические уравнения для матрицы плотности $\rho_{ij}(\mathbf{v})$ к одномерным уравнениям для $\rho_{ij}(v_z)$ путем подстановки (1) в исходные трехмерные уравнения с последующим интегрированием их по \mathbf{v}_\perp .

При учете столкновений соотношение факторизации (1) становится приближенным, так как столкновения, вообще говоря, «переносят» неравновесность в распределении по v_z на распределение по ортогональным проекциям скорости \mathbf{v}_\perp . В моделях

*E-mail: par@iae.nsk.su

**E-mail: shalagin@iae.nsk.su

столкновений с не зависящими от скорости частотами столкновений перенос неравновесности отсутствует, соотношение факторизации (1) не нарушается и поэтому так же, как и в отсутствие столкновений, трехмерные уравнения для $\rho_{ij}(\mathbf{v})$ сводятся к одномерным уравнениям для $\rho_{ij}(v_z)$, что существенно упрощает решение задач.

В настоящее время для решения многих задач спектроскопии (см., например, [1–4]) и светоиндуцированной газовой кинетики требуется учет зависимости частоты столкновений от скорости. Это особенно ярко видно на примере экспериментально наблюдаемого эффекта аномального светоиндуцированного дрейфа (СИД) газов, целиком и полностью обусловленного зависимостью транспортных частот столкновений от скорости [5–8]. В применяемых для решения подобных задач моделях столкновений с зависящими от скорости частотами столкновений всегда будет заложен перенос неравновесности на ортогональные проекции скорости \mathbf{v}_\perp [9]. Поэтому соотношение факторизации (1) в этих моделях нарушается и решаемые уравнения с необходимостью должны быть трехмерными. Естественно, что как нахождение решения трехмерных уравнений, так и его анализ во многих случаях существенно сложнее, чем в одномерной ситуации. Поэтому становится актуальным вопрос о возможности использования более простых приближенных одномерных уравнений для решения задач спектроскопии и светоиндуцированной газовой кинетики, в которых важен учет зависимости частоты столкновений от скорости. Другими словами, важно знать величину погрешности решения, получаемую при переходе от трехмерных уравнений к одномерным.

Количественный анализ точности решения, даваемого одномерными квантовыми кинетическими уравнениями в случае зависящих от скорости частот столкновений, впервые проведен в работе [9]. В [9] рассматривалось взаимодействие лазерного излучения с двухуровневыми частицами, испытывающими столкновения с частицами буферного газа. Рассчитывались форма спектральной линии поглощения излучения, работа пробного поля и форма линии СИД (скорость светоиндуцированного дрейфа как функция частоты излучения). Для интеграла столкновений использовалась так называемая модель «кенгуру» [10], являющаяся обобщением модели сильных столкновений на случай зависящих от скорости транспортных частот столкновений. В работе [9] частоты столкновений рассчитывались для степенных потенциалов взаимодействия. Было показано, что наиболее сильно эффект столкновитель-

ного переноса неравновесности в распределении резонансных частиц по скоростям проявляется в случае аномального СИД. Тем не менее, погрешность, вносимая использованием одномерных интегралов столкновений, и в этом случае невелика. Позднее аналогичные результаты были получены при исследовании формы линии аномального СИД для реальной системы — для атомов лития в атмосфере инертных буферных газов [11]. Результаты работ [9, 11] подтвердили интуитивное предположение о том, что эффект переноса неравновесности является слабым [12–15] и во многих случаях его можно не принимать во внимание. В работах [16–18] для двухуровневых частиц исследована точность одномерного приближения к расчету контуров спектральных линий в условиях полного сохранения фазовой памяти при столкновениях (это наиболее благоприятные условия для проявления эффекта Дикке сужения спектральных линий). Оказалось, что величина погрешности решения, получаемого при переходе от трехмерных уравнений к одномерным, не превышает нескольких процентов.

В работах [9, 11], где одномерное приближение оказалось хорошим, рассматривались либо двухуровневая модель [9], либо трехуровневая Λ -схема [11]. Для многоуровневых систем подобные исследования не проводились. Вместе с тем наличие многих уровней в атоме может заметным образом сказаться на СИД, а также, в принципе, повлиять и на эффективность столкновительного переноса неравновесности.

В данной работе исследован эффект столкновительного переноса неравновесности на примере аномального СИД для многоуровневой системы — для атомов цезия в атмосфере инертных буферных газов. Детально исследована погрешность, вносимая использованием одномерного приближения при расчете формы линии СИД.

2. ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ РЕШЕНИЕ

Для расчета скорости светоиндуцированного дрейфа атомов щелочных металлов необходимо учитывать сверхтонкую структуру (СТС) уровней, затронутых излучением. При этом следует иметь в виду то обстоятельство, что для атомов щелочных металлов, находящихся в атмосфере инертных буферных газов, сечения столкновительных переходов между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния очень малы — на 6–10 порядков

меньше газокинетических сечений [19]. Благодаря этому обстоятельству в атомах щелочных металлов ярко проявляется эффект так называемой оптической накачки (см., например, [20]). Суть эффекта состоит в том, что даже слабое оптическое излучение, резонансное переходу в ближайшее возбужденное электронное состояние атомов, способно создать сильное и долго существующее неравновесное распределение населенностей по подуровням СТС основного состояния. В частности, такое излучение способно перекачать практически все атомы (с которыми эффективно осуществляется взаимодействие) на одну из компонент сверхтонкой структуры. Перекачка с одной сверхтонкой компоненты основного состояния на другую проявляется тем ярче, чем больше сверхтонкое расщепление по сравнению с доплеровской шириной линии. Из щелочных атомов в этом отношении особенно показательны атомы Cs, где сверхтонкое расщепление достигает 40 доплеровских ширин.

Оптическая накачка, столь существенная при большом сверхтонком расщеплении основного электронного состояния атомов цезия, значительно уменьшает величину скорости светоиндуцированного дрейфа. Сильное влияние оптической накачки может быть радикально уменьшено при возбуждении атомов цезия двумя излучениями с разными частотами, выбранными таким образом, чтобы каждое излучение затрагивало разные сверхтонкие подуровни основного состояния. Будем полагать, что одно излучение является монохроматическим, а другое — широкополосным с шириной спектра излучения больше доплеровской ширины линии. Монохроматическое излучение воздействует на поглощающие частицы селективно по скоростям и поэтому обеспечивает возникновение эффекта СИД. Широкополосное излучение, взаимодействующее с атомами неселективно по скоростям, само по себе не вызывает эффект СИД, но обеспечивает его многократное увеличение из-за того, что радикально уменьшает оптическую накачку. При этом можно надеяться, что скорость дрейфа будет иметь тот же порядок величины, что и для двухуровневых частиц. Ввиду этого обстоятельства далее при расчете скорости светоиндуцированного дрейфа атомов Cs будем полагать, что атомы возбуждаются двухчастотным излучением.

Рассмотрим газ поглощающих частиц со сверхтонкой структурой основного и возбужденного состояний, находящийся в смеси с буферным газом. Пусть индекс $i = 1, 2, 3, 4$ нумерует подуровни СТС возбужденного состояния e , а индекс $j = n, l$ —

СТС нижнего (основного) состояния g . Вырождение уровней i, j по направлениям магнитного момента будем учитывать введением статистических весов g_i, g_j . Столкновениями между поглощающими частицами пренебрежем, полагая концентрацию буферного газа N_b много большей концентрации поглощающего газа N .

Взаимодействие поглощающих частиц газа с резонансным излучением в стационарных и пространственно-однородных условиях описывается следующими уравнениями для распределений населенностей по скоростям $\rho_i(\mathbf{v}), \rho_j(\mathbf{v})$ на подуровнях СТС i и j :

$$\begin{aligned} S_i(\mathbf{v}) + N \sum_j P_{ji}(\mathbf{v}) - \Gamma_e \rho_i(\mathbf{v}) &= 0, \\ S_j(\mathbf{v}) - N \sum_i P_{ji}(\mathbf{v}) + \sum_i \Gamma_{ij} \rho_i(\mathbf{v}) &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} N &= N_e + N_g, \quad N_e = \sum_i N_i, \quad N_g = \sum_j N_j, \\ N_i &= \int \rho_i(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad N_j = \int \rho_j(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (3)$$

N_i, N_j и N — парциальная (по подуровням СТС) и полная концентрации поглощающих частиц, N_e и N_g — концентрации поглощающих частиц в возбужденном и основном состояниях, Γ_{ij} — скорость спонтанного распада возбужденного состояния i по каналу $i \rightarrow j$, Γ_e — полная скорость спонтанного распада возбужденного уровня e , $S_i(\mathbf{v})$ и $S_j(\mathbf{v})$ — интегралы столкновений, $P_{ji}(\mathbf{v})$ — вероятность поглощения излучения в единицу времени на переходе $j \rightarrow i$ в расчете на один поглощающий атом с заданной скоростью \mathbf{v} .

Скорость Γ_{ij} радиационного перехода между подуровнями СТС возбужденного $|i\rangle = |J_e, I, F_i\rangle$ и основного $|j\rangle = |J_g, I, F_j\rangle$ состояний дается следующим выражением [21]:

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_e (2J_e + 1)(2F_j + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} J_e & F_i & I \\ F_j & J_g & 1 \end{array} \right\}^2, \quad (4)$$

где $\left\{ \begin{array}{ccc} abc \\ def \end{array} \right\}$ — $6j$ -символ [21, 22], I — спин ядра атома, J_e, J_g — полные моменты электронной оболочки атома соответственно в возбужденном и основном состояниях, F_i, F_j — полные моменты атома (вместе с ядром) для соответствующих сверхтонких компонент. С помощью известных формул для $6j$ -символов [21, 22] нетрудно убедиться, что скорости спонтанного распада Γ_{ij} подчиняются следующим соотношениям:

$$\sum_j \Gamma_{ij} = \Gamma_e, \quad \sum_i w_i \Gamma_{ij} = w_j \Gamma_e, \quad (5)$$

где $w_i = g_i / \sum_{i'} g_{i'}$ и $w_j = g_j / \sum_{j'} g_{j'}$ — относительные статистические веса подуровней i и j ($g_i = 2F_i + 1$, $g_j = 2F_j + 1$). Первое соотношение в (5) отражает известный факт [21], что полная скорость спонтанного распада Γ_e возбужденного сверхтонкого подуровня i одинакова для всех сверхтонких подуровней i возбужденного состояния e . Смысл второго соотношения в (5) таков, что если распределение частиц по сверхтонким компонентам возбужденного состояния равносильно, то спонтанный распад приводит тоже к равновесной заселенности частиц по СТС нижнего состояния.

Найдем вероятность поглощения излучения $P_{ji}(\mathbf{v})$ в уравнениях (2). Для простоты ограничимся условием слабых интенсивностей монохроматического и широкополосного излучений, считая, что доля частиц в возбужденном состоянии e мала ($N_e \ll N$), а распределение населенностей по скоростям на сверхтонких компонентах $j = n, l$ в основном состоянии g близко к максвелловскому:

$$\rho_j(\mathbf{v}) = N_j W(\mathbf{v}), \quad (6)$$

где $W(\mathbf{v})$ — распределение Максвелла. Полагаем, что ширина спектра широкополосного излучения много больше доплеровской ширины линии. В этих условиях вероятность поглощения излучения $P_{ji}(\mathbf{v})$ в уравнениях (2) определяется следующим известным выражением:

$$P_{ji}(\mathbf{v}) = B_{ji} \frac{N_j}{N} W(\mathbf{v}) [Y_{ji}(\mathbf{v}) + I_b F(\omega_{ij})],$$

$$Y_{ji}(\mathbf{v}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(v)}{\Gamma^2(v) + (\omega - \omega_{ij} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2}, \quad (7)$$

$$B_{ji} = \frac{\lambda^2 \Gamma_e g_i \Gamma_{ij}}{4 \hbar \omega g_j \Gamma_e}, \quad \int_0^\infty F(\omega) d\omega = 1,$$

где ω , λ , \mathbf{k} и I — частота, длина волны, волновой вектор и интенсивность монохроматического излучения, I_b — интенсивность широкополосного излучения, $F(\omega)$ — форма линии широкополосного излучения, ω_{ij} — резонансная частота перехода $j \rightarrow i$; B_{ji} — второй коэффициент Эйнштейна [21] (полагаем, что этот коэффициент одинаков для монохроматического и широкополосного излучений ввиду малости частоты сверхтонкого расщепления по сравнению с оптической частотой), $\Gamma(v)$ — однородная полуширина линии поглощения, которая в общем случае зависит от скорости и является суммой спонтанной $\Gamma_e/2$ и столкновительной $\gamma(v)$ полуширин:

$$\Gamma(v) = \Gamma_e/2 + \gamma(v). \quad (8)$$

В формулу (7) для вероятности поглощения $P_{ji}(\mathbf{v})$ входит населенность N_j j -го подуровня СТС основного состояния. Населенности N_j находятся из уравнений (2), проинтегрированных по скоростям. Для усредненных по скоростям интегралов столкновений примем следующие выражения:

$$\int S_i(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \bar{v}_e [w_i N_e - N_i], \quad \int S_j(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 0. \quad (9)$$

Для интегралов столкновений $S_i(\mathbf{v})$ частота \bar{v}_e имеет смысл частоты столкновительного перемешивания компонент СТС возбужденного состояния e . Считается, что каждое эффективное столкновение, характеризующееся частотой \bar{v}_e , приводит к равносильному распределению по компонентам сверхтонкой структуры состояния e . Для интегралов столкновений $S_j(\mathbf{v})$, $j = n, l$, принято, что они обусловлены только упругим рассеянием (при упругих столкновениях $\int S_j(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 0$), учитывая то обстоятельство, что для атомов щелочных металлов, находящихся в атмосфере инертных буферных газов, сечения столкновительных переходов между подуровнями СТС основного состояния очень малы. С учетом (9) и (7) балансные уравнения для населенностей $N_{i,j}$ имеют следующий вид:

$$\bar{v}_e [w_i N_e - N_i] + Q_{li} N_l + Q_{ni} N_n - \Gamma_e N_i = 0,$$

$$\sum_i Q_{ji} N_j - \sum_i \Gamma_{ij} N_i = 0, \quad (10)$$

где

$$Q_{ji} = B_{ji} \left[I \int Y_{ji}(\mathbf{v}) W(\mathbf{v}) d\mathbf{v} + I_b F(\omega_{ij}) \right]. \quad (11)$$

Применяя приближенное условие нормировки $N_l + N_n \approx N$ (здесь учтено принятое нами приближение $N_e \ll N$) и используя соотношения (5), из уравнений (10) получим следующие выражения для относительных населенностей подуровней СТС основного состояния:

$$\frac{N_l}{N} = \frac{\sum_i Q_{ni} (\Gamma_{il} + w_l \bar{v}_e)}{\sum_i Q_{ni} (\Gamma_{il} + w_l \bar{v}_e) + \sum_i Q_{li} (\Gamma_{in} + w_n \bar{v}_e)}, \quad (12)$$

$$\frac{N_n}{N} = 1 - \frac{N_l}{N},$$

где суммирование ведется по всем разрешенным переходам $n, l \rightarrow i$. Населенностью возбужденного состояния здесь пренебрегается.

Получим выражение для скорости дрейфа, исходя из кинетических уравнений (2). Заметим, что сверхтонкое расщепление является результатом взаимодействия электронов атома с угловым моментом (спином) ядра. Ядерный спин слабо влияет на электронную оболочку атома, которой определяется потенциал взаимодействия в столкновениях, и, следовательно, ядерный спин слабо влияет на столкновительные характеристики атомов. Следовательно, поглощающие атомы на разных подуровнях «внутри» своей СТС имеют практически одинаковые потенциалы взаимодействия в столкновениях с атомами буферного газа. Таким образом, столкновительные характеристики атомов могут различаться только для тонких компонент (например, состояния $P_{1/2}$ или $P_{3/2}$) и для основного состояния ($S_{1/2}$). Это приближение позволяет нам, просуммировав уравнения в (2) по i и по j , получить следующие уравнения:

$$\begin{aligned} S_e(\mathbf{v}) + NP(\mathbf{v}) - \Gamma_e \rho_e(\mathbf{v}) &= 0, \\ S_g(\mathbf{v}) - NP(\mathbf{v}) + \Gamma_e \rho_e(\mathbf{v}) &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь

$$\rho_e(\mathbf{v}) = \sum_i \rho_i(\mathbf{v}), \quad \rho_g(\mathbf{v}) = \sum_j \rho_j(\mathbf{v})$$

— суммарные населенности возбужденного (e) и основного (g) состояний,

$$\begin{aligned} P(\mathbf{v}) &= \sum_{i,j} P_{ji}(\mathbf{v}) = W(\mathbf{v}) \sum_{j=l,n} \frac{N_j}{N} \times \\ &\times \sum_i B_{ji} [IY_{ji}(\mathbf{v}) + I_b Y_{ji}^b(\mathbf{v})] \end{aligned} \quad (14)$$

есть сумма вероятностей поглощения (7) по всем разрешенным переходам,

$$S_e(\mathbf{v}) = \sum_i S_i(\mathbf{v}), \quad S_g(\mathbf{v}) = \sum_j S_j(\mathbf{v}).$$

Для интегралов столкновений в (13) будем использовать модель изотропного по скоростям «прихода» [23, 24]:

$$S_k(\mathbf{v}) = -\nu_k(v)\rho_k(\mathbf{v}) + S_k^{(2)}(v), \quad k = e, g, \quad (15)$$

где член прихода $S_k^{(2)}(v)$ является функцией модуля скорости $v = |\mathbf{v}|$. Величина $\nu_k(v)$ в (15) является транспортной частотой столкновений [8, 23]. Столкновительная модель (15) учитывает зависимость частоты столкновений от скорости и в то же время позволяет получить аналитическое решение рассматриваемой задачи при любых соотношениях масс активных и буферных частиц.

Связь транспортной частоты столкновений $\nu_k(v)$ в (15) с характеристиками элементарного акта рассеяния дается формулой (см. [13])

$$\nu_k(v) = \frac{q}{v^3} \int_0^\infty u^2 \exp\left(-\frac{u^2+v^2}{\bar{v}_b^2}\right) F(uv)\sigma_k(u) du, \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} F(uv) &= \frac{2uv}{\bar{v}_b^2} \operatorname{ch}\left(\frac{2uv}{\bar{v}_b^2}\right) - \operatorname{sh}\left(\frac{2uv}{\bar{v}_b^2}\right), \\ q &= \frac{\mu}{M} \frac{N_b \bar{v}_b}{\sqrt{\pi}}, \quad \mu = \frac{MM_b}{M+M_b}, \quad \bar{v}_b = \sqrt{\frac{2k_B T}{M_b}}, \end{aligned} \quad (17)$$

N_b и M_b — концентрация и масса буферных частиц, M — масса поглощающих излучение частиц, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, u — величина относительной скорости резонансной и буферной частиц до столкновения, $\sigma_k(u)$ — транспортное сечение рассеяния поглощающей частицы в состоянии k на буферной частице. Сечения $\sigma_k(u)$ вычисляются, исходя из потенциалов взаимодействия поглощающих и буферных частиц.

Скорость СИД поглощающих частиц определяется как

$$\mathbf{u}_L = \frac{1}{N} \int \mathbf{v} [\rho_e(\mathbf{v}) + \rho_g(\mathbf{v})] d\mathbf{v}. \quad (18)$$

Из выражения (18) с учетом соотношений (13), (14) и (15) для скорости дрейфа получаем окончательную формулу

$$\mathbf{u}_L = \int \frac{\nu_g(v) - \nu_e(v)}{\nu_g(v) [\Gamma_e + \nu_e(v)]} \mathbf{v} P(\mathbf{v}) d\mathbf{v}. \quad (19)$$

Форма линии СИД существенным образом зависит от того, как ведет себя разность транспортных частот столкновений $\Delta\nu(v) \equiv \nu_e(v) - \nu_g(v)$. Если $\Delta\nu(v)$ не изменяет свой знак как функция v (транспортные частоты столкновений $\nu_e(v)$ и $\nu_g(v)$ отличаются друг от друга сильно), то скорость дрейфа \mathbf{u}_L как функция частоты излучения соответствует нормальному СИД и хорошо описывается теорией СИД с не зависящими от скорости транспортными частотами столкновений, т. е. при замене в выражении (19) частоты $\nu_k(v)$ ($k = e, g$) на среднюю транспортную частоту

$$\nu_k^{tr} = \frac{2}{v_T^2} \int (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})^2 W(\mathbf{v}) \nu_k(v) d\mathbf{v}, \quad (20)$$

где $v_T = (2k_B T/M)^{1/2}$ — наиболее вероятная скорость поглощающих частиц, \mathbf{n} — единичный вектор в произвольно выбранном направлении. Сред-

няя транспортная частота ν_k^{tr} связана простой формулой с коэффициентом диффузии D_k частиц в состоянии k [13, 25]:

$$\nu_k^{tr} = \frac{v_T^2}{2D_k}. \quad (21)$$

Если же разность транспортных частот столкновений $\Delta\nu(v)$ изменяет свой знак как функция v (транспортные частоты столкновений $\nu_e(v)$ и $\nu_g(v)$ близки друг к другу), то в скорость дрейфа \mathbf{u}_L дают вклад поглощающие частицы как с положительным значением $\Delta\nu(v)$, так и с отрицательным. Это приводит к сильному отличию формы линии СИД от той, которую предсказывает теория нормального эффекта СИД с не зависящими от скорости транспортными частотами столкновений — возникает аномальный СИД.

При вычислении скорости СИД атомов, находящихся в смеси двух разных буферных газов, в формуле (19) для $\nu_k(v)$ следует полагать

$$\nu_k(v) = \nu_{1k}(v) + \nu_{2k}(v), \quad k = e, g, \quad (22)$$

где индексы «1» и «2» обозначают сорт буферных частиц. Аналогично полная ударная полуширина линии поглощения $\gamma(v)$ равна сумме полуширин $\gamma_1(v)$ и $\gamma_2(v)$, вызванных ударным воздействием буферных частиц сортов 1 и 2.

3. ОДНОМЕРНЫЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ СКОРОСТИ ДРЕЙФА

Переход от трехмерных кинетических уравнений (2) к одномерным осуществляется, как уже говорилось во Введении, путем подстановки приближенного соотношения факторизации $\rho_i(\mathbf{v}) = W(\mathbf{v}_\perp)\rho_i(v_z)$ в исходные уравнения (2) с последующим интегрированием их по \mathbf{v}_\perp (см. также [13]). Из полученных таким образом уравнений находим, что скорость СИД дается соотношением, формально аналогичным (19):

$$\mathbf{u}_L^{(1)} = \frac{\mathbf{k}}{k} \times \int_{-\infty}^{\infty} v_z \frac{\nu_g^{(1)}(v_z) - \nu_e^{(1)}(v_z)}{\nu_g^{(1)}(v_z)[\Gamma_e + \nu_e^{(1)}(v_z)]} P_m^{(1)}(v_z) dv_z, \quad (23)$$

где $\nu_k^{(1)}(v_z)$ ($k = e, g$) — одномерная частота столкновений, связанная с трехмерной частотой $\nu_k(v)$ формулой

$$\nu_k^{(1)}(v_z) = \int \nu_k(v) W(\mathbf{v}_\perp) d\mathbf{v}_\perp. \quad (24)$$

С учетом соотношения $\mathbf{v}^2 = \mathbf{v}_\perp^2 + v_z^2$ формула (24) принимает вид

$$\nu_k^{(1)}(v_z) = \frac{2 \exp(v_z^2/v_T^2)}{v_T^2} \times \int_{|v_z|}^{\infty} v \nu_k(v) \exp\left(-\frac{v^2}{v_T^2}\right) dv. \quad (25)$$

Вероятность поглощения монохроматического излучения $P_m^{(1)}(v_z)$ в выражении (23) дается формулой, формально аналогичной (14):

$$P_m^{(1)}(v_z) = IW(v_z) \sum_{j=l,n} \frac{N_j^{(1)}}{N} \sum_i B_{ji} Y_{ji}^{(1)}(v_z), \quad (26)$$

где

$$Y_{ji}^{(1)}(v_z) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma^{(1)}(v_z)}{(\Gamma^{(1)}(v_z))^2 + (\omega - \omega_{ij} - kv_z)^2},$$

$$\Gamma^{(1)}(v_z) = \frac{\Gamma_m}{2} + \gamma^{(1)}(v_z), \quad (27)$$

$$W(v_z) = (\sqrt{\pi} v_T)^{-1} \exp(-v_z^2/v_T^2).$$

В (27) одномерный аналог $\gamma^{(1)}(v_z)$ трехмерной величины $\gamma(v)$ дается формулами, аналогичными (24) и (25), а относительная населенность $N_j^{(1)}/N$ уровня j дается формулой, аналогичной (12) для N_j/N при замене в ней Q_{ji} на $Q_{ji}^{(1)}$, где

$$Q_{ji}^{(1)} = B_{ji} \left[I \int_{-\infty}^{\infty} Y_{ji}^{(1)}(v_z) W(v_z) dv_z + I_b F(\omega_{ij}) \right]. \quad (28)$$

Можно показать, что если транспортные частоты столкновений $\nu_k(v)$ и ударное уширение $\gamma(v)$ не зависят от скорости, то формулы (19) для \mathbf{u}_L и (23) для $\mathbf{u}_L^{(1)}$ совпадают, как это и должно быть.

В пределе большого доплеровского уширения ($\Gamma^{(1)} \ll kv_T$) формула (23) для скорости дрейфа максимально упрощается:

$$\mathbf{u}_L^{(1)} = \frac{\mathbf{k}}{k} v_T \frac{I}{\sqrt{\pi}(kv_T)^2} \sum_{j=l,n} \frac{N_j^{(1)}}{N} \times \sum_i B_{ji} \Omega_{ij} \tau^{(1)} \left(\frac{\Omega_{ij}}{k} \right) \exp\left(-\frac{\Omega_{ij}^2}{kv_T^2}\right), \quad (29)$$

$$\tau^{(1)} \left(\frac{\Omega_{ij}}{k} \right) = \frac{\nu_g^{(1)}(\Omega_{ij}/k) - \nu_e^{(1)}(\Omega_{ij}/k)}{\nu_g^{(1)}(\Omega_{ij}/k)[\Gamma_e + \nu_e^{(1)}(\Omega_{ij}/k)]},$$

$$\Omega_{ij} = \omega - \omega_{ij}.$$

Столь простое для анализа, не содержащее интегралов выражение для скорости дрейфа не удается получить при использовании трехмерных уравнений. Формула (29) позволяет провести быстрый экспресс-анализ формы линии СИД. В частности, по формуле (29) легко определяются отстройки частоты излучения, при которых скорость дрейфа обращается в нуль. Например, в случае возбуждения частиц на изолированном переходе (двухуровневые частицы) скорость дрейфа пропорциональна произведению $\Omega\tau^{(1)}(\Omega/k)$ (здесь $\Omega = \omega - \omega_{21}$, ω_{21} — резонансная частота перехода) и обращается в нуль в точке $\Omega = 0$ и при тех значениях отстройки Ω , при которых разность одномерных транспортных частот столкновений

$$\Delta\nu^{(1)}(\Omega/k) \equiv \nu_e^{(1)}(\Omega/k) - \nu_g^{(1)}(\Omega/k)$$

равна нулю. Для многоуровневых частиц в случае, когда разделенность уровней в основном и возбужденном состояниях заметно превышает доплеровскую ширину, в отношении нулей скорости дрейфа получается аддитивный результат от двухуровневых частиц: нули скорости дрейфа совпадают с нулями функции $\Omega_{ij}\Delta\nu^{(1)}(\Omega_{ij}/k)$.

4. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Мы исследовали эффект столкновительного переноса неравновесности в распределении резонансных частиц по скоростям в поле лазерного излучения путем прямого сравнения численных расчетов скорости СИД атомов цезия в атмосфере инертных буферных газов по формулам (19) (трехмерный подход) и (23) (одномерный подход). На рис. 1 приведена схема уровней атомов цезия ^{133}Cs для переходов $6^2S_{1/2}-6^2P_{1/2}$ (D_1 -линия) и $6^2S_{1/2}-6^2P_{3/2}$ (D_2 -линия). Для атомов цезия, согласно данным сайта NIST [26], скорости спонтанного распада возбужденных уровней $6^2P_{1/2}$ и $6^2P_{3/2}$ соответственно равны $\Gamma_e = 2.86 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$ и $\Gamma_e = 3.28 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$, длина волны D_1 -линии $\lambda = 894.3 \text{ нм}$, длина волны D_2 -линии $\lambda = 852.1 \text{ нм}$. Скорости Γ_{ij} радиационного перехода между подуровнями СТС рассчитываются с помощью формулы (4).

Транспортные частоты столкновений $\nu_k(v)$ для систем Cs-X, где X — атом инертного газа, рассчитывались нами численно по формуле (16) с использованием транспортных сечений $\sigma_k(u)$, вычисленных в работах [8, 27] на основе потенциалов взаимодействия Паскаля-Вандепланка [28]. В случае, когда ударная полуширина линии поглоще-

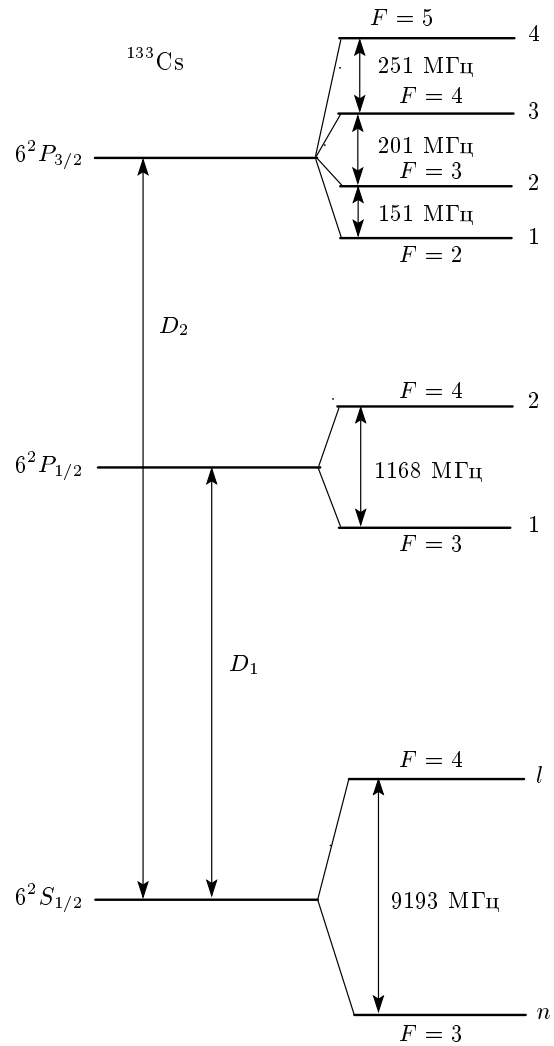


Рис. 1. Схемы уровней атомов цезия ^{133}Cs (спин ядра $I = 7/2$) для переходов $6^2S_{1/2}-6^2P_{1/2}$ (D_1 -линия, $\lambda = 894.3 \text{ нм}$) и $6^2S_{1/2}-6^2P_{3/2}$ (D_2 -линия, $\lambda = 852.1 \text{ нм}$); F — полный угловой момент атома, в единицах МГц указано расстояние между подуровнями сверхтонкой структуры; $n, l, 1, 2, 3, 4$ — обозначения подуровней СТС, используемые в тексте

ния $\gamma(v)$ мала по сравнению с доплеровской шириной $k v_T$ (именно этот случай мы рассматриваем в данной работе), влияние зависимости $\gamma(v)$ на скорость дрейфа \mathbf{u}_L незначительно и им можно пренебречь [24, 29]. Поэтому при численных расчетах мы полагали $\Gamma(v) = \Gamma = \text{const}$. Конкретные значения величин $\Gamma = \Gamma_e/2 + \gamma$ для разных систем Cs-X определялись по данным [30] для ударной полуширины γ линии поглощения (при возбуждении D_1 -линии: $\gamma = 5.01 \text{ МГц/Торр}$ для Cs-Ne, $\gamma = 9.82 \text{ МГц/Торр}$ для Cs-Ar, $\gamma = 9.92 \text{ МГц/Торр}$

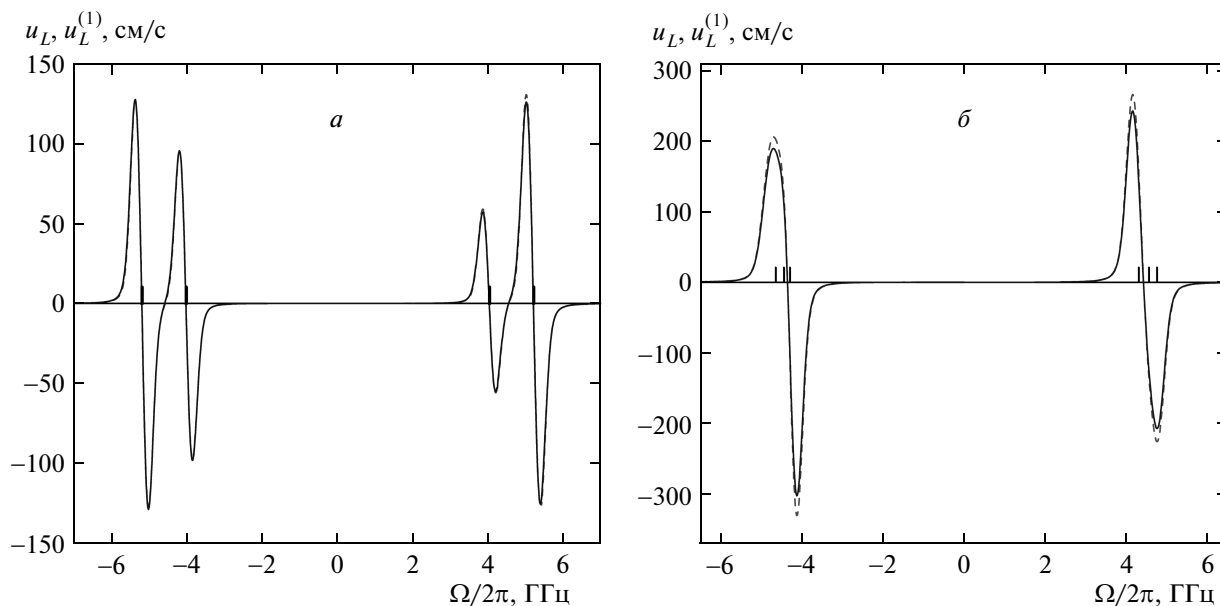


Рис. 2. Зависимости скоростей дрейфа u_L (сплошные кривые) и $u_L^{(1)}$ (штриховые кривые) от отстройки частоты излучения $\Omega = \omega - \omega_0$ для атомов Cs в буферном газе Ar в случае «нормального» СИД при возбуждении D_1 -линии (а) и D_2 -линии (б) атомов Cs, $T = 300$ К, $P_{buf} = 5$ Торр, $I = 0.1$ Вт/см², $I_b = 1$ Вт/см², $\Delta\omega/2\pi c = 0.1$ см⁻¹. Вертикальными линиями обозначены частоты, резонансные переходам $l-1, 2$ и $n-1, 2$ (а) и переходам $l-2, 3, 4$ и $n-1, 2, 3$ (б)

для Cs–Kr, $\gamma = 10.70$ МГц/Торр для Cs–Xe; при возбуждении D_2 -линии: $\gamma = 13.35$ МГц/Торр для Cs–He, $\gamma = 11.39$ МГц/Торр для Cs–Ar).

Для атомов щелочных металлов, находящихся в атмосфере инертных буферных газов, населенности компонент СТС возбужденного состояния легко перемешиваются столкновениями [19]. Ввиду этого обстоятельства для частоты $\bar{\nu}_e$ столкновительного перемешивания компонент СТС внутри возбужденного состояния мы будем использовать те же значения, что и для ударных полуширин ($\bar{\nu}_e = \gamma$).

Далее при численных расчетах будем полагать, что спектр широкополосного излучения имеет гауссову форму:

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\omega} \exp \left[- \left(\frac{\omega - \omega_b}{\Delta\omega} \right)^2 \right], \quad (30)$$

где ω_b — центральная частота широкополосного излучения, $\Delta\omega$ — полуширина (на высоте $1/e$) его спектра. Величину $\Delta\omega$ выберем в несколько раз большей доплеровской ширины линии поглощения, конкретно принимая при расчетах, что $\Delta\omega/2\pi = 3000$ МГц ($\Delta\omega/2\pi c = 0.1$ см⁻¹). При таком значении $\Delta\omega$ полуширина линии широкополосного излучения будет в несколько раз меньше частотного расстояния между уровнями СТС основного состояния и в несколь-

ко раз больше частотного расстояния между уровнями СТС возбужденного состояния. Центральную частоту ω_b выберем таким образом, чтобы широкополосное и монохроматическое излучения затрагивали разные уровни СТС основного состояния. Формально это выражается в том, что при отрицательной (положительной) отстройке Ω частоты монохроматического излучения центральная частота широкополосного излучения ω_b равна частоте между «серединой» СТС возбужденного состояния и подуровнем n (l) СТС основного состояния:

$$\omega_b = \begin{cases} \omega_0 + \omega_{ln}/2, & \text{если } \Omega < 0, \\ \omega_0 - \omega_{ln}/2, & \text{если } \Omega > 0, \end{cases} \quad (31)$$

где ω_{ln} — частотное расстояние между уровнями СТС основного состояния. В качестве отстройки Ω частоты монохроматического излучения введена величина

$$\Omega = \omega - \omega_0, \quad (32)$$

где ω_0 — частота между «серединой» СТС возбужденного и основного состояний. Как отмечалось выше, широкополосное излучение само по себе не вызывает эффект СИД, однако обеспечивает его многократный рост из-за того, что значительно уменьшает перекачку атомов с одной сверхтонкой компоненты основного состояния на другую.

На рис. 2, 3 представлены результаты численных расчетов по формулам (19) и (23) скоростей дрейфа $u_L \equiv \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_L/k$ и $u_L^{(1)} \equiv \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_L^{(1)}/k$ в зависимости от отстройки частоты Ω для атомов Cs в атмосфере инертных буферных газов при использовании трехмерного (u_L) и одномерного ($u_L^{(1)}$) подходов к описанию СИД. Все расчеты выполнены для давления буферного газа $P_{buf} = 5$ Торр.

На рис. 2 показана зависимость скоростей дрейфа u_L и $u_L^{(1)}$ атомов Cs от отстройки частоты излучения в буферном газе Ag при температуре $T = 300$ К. В этом случае форма линии скорости дрейфа соответствует «нормальному» СИД (разность транспортных частот столкновений $\Delta\nu$ как функция v не изменяет знак) и хорошо описывается теорией СИД с не зависящими от скорости v транспортными частотами столкновений. Различие скоростей u_L и $u_L^{(1)}$ оказалось столь незначительным, что, как видно из рис. 2а, графики u_L и $u_L^{(1)}$ сливаются и воспринимаются глазом как одна кривая. Анализ показывает, что столь слабое различие u_L и $u_L^{(1)}$ имеет место при любом характере уширения линии поглощения (доплеровском, $\Gamma \ll kv_T$, или однородном, $\Gamma \gg kv_T$). Таким образом, влияние эффекта столкновительного переноса неравновесности на форму линии «нормального» СИД столь незначительно, что им всегда можно пренебречь.

Рисунок 3 иллюстрирует различие скоростей дрейфа u_L и $u_L^{(1)}$ в случае аномального СИД (когда разность транспортных частот столкновений $\Delta\nu$ как функция v изменяет свой знак). Заметим, что расчеты скорости дрейфа по формулам для нормального СИД (без учета зависимости транспортных частот столкновений от скорости, т. е. при замене $\nu_{e,g}(v) \rightarrow \nu_{e,g}^{tr}$) при параметрах рис. 3 дают $u_L = u_L^{(1)} = 0$. Это означает, что при параметрах рис. 3 эффект СИД полностью обусловлен зависимостью от скорости транспортных частот столкновений и, следовательно, форма линии аномального СИД при указанных параметрах максимально чувствительна к столкновительному переносу неравновесности.

Как видно из рис. 3, в случае аномального СИД скорости дрейфа u_L и $u_L^{(1)}$ могут заметно различаться. Основную погрешность одномерное приближение дает в описании амплитуд (величины максимумов и минимумов) скорости дрейфа. Амплитуды одних пиков скоростей дрейфа u_L и $u_L^{(1)}$ почти совпадают, амплитуды других пиков могут отличаться более чем в два раза. В то же время одномерное приближение хорошо описывает положение нулей и экстремумов скорости дрейфа в зависимости от от-

стройки частоты излучения. Погрешность одномерного приближения зависит от соотношения масс поглощающих и буферных частиц. Погрешность тем меньше, чем легче буферные частицы. В случае легких буферных частиц, $M_b \ll M$, погрешность одномерного приближения незначительна и ею можно пренебречь (рис. 3д).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на примере эффекта СИД для многоуровневой системы (для атомов цезия в атмосфере инертных буферных газов) количественно исследован эффект столкновительного переноса неравновесности в распределении резонансных частиц по скоростям в поле лазерного излучения. Перенос неравновесности исследовался путем прямого сравнения скоростей дрейфа \mathbf{u}_L и $\mathbf{u}_L^{(1)}$ атомов цезия в атмосфере инертных буферных газов. Скорость дрейфа \mathbf{u}_L рассчитывалась с учетом столкновительного переноса неравновесности на основе трехмерных кинетических уравнений, а скорость дрейфа $\mathbf{u}_L^{(1)}$ рассчитывалась из приближенных одномерных уравнений, полученных без учета переноса неравновесности.

Результаты расчетов показали, что в случае «нормального» СИД (когда разность транспортных частот столкновений $\Delta\nu$ как функция скорости v не меняет свой знак) столкновительный перенос неравновесности не оказывает заметного влияния на форму линии СИД. Это означает, что для описания «нормального» СИД всегда можно использовать одномерные кинетические уравнения вместо трехмерных без риска потерять какие-либо важные тонкие детали в зависимости скорости дрейфа от частоты излучения.

В случае аномального СИД (когда разность транспортных частот столкновений $\Delta\nu$ как функция v изменяет свой знак) ситуация оказывается иной. Аномальный СИД в ряду известных эффектов взаимодействия лазерного излучения с газовыми средами обладает максимальной чувствительностью к столкновительному переносу неравновесности. Оказалось, что для аномального СИД погрешность одномерного приближения незначительна и ею всегда можно пренебречь только в случае легких буферных частиц, $M_b \ll M$. При сопоставимых массах резонансных и буферных частиц одномерное приближение может давать заметную погрешность в определении амплитуд скорости дрейфа, вместе с тем хорошо описывая положение нулей и экстремумов скорости дрейфа в зависимости от отстройки частоты излучения.

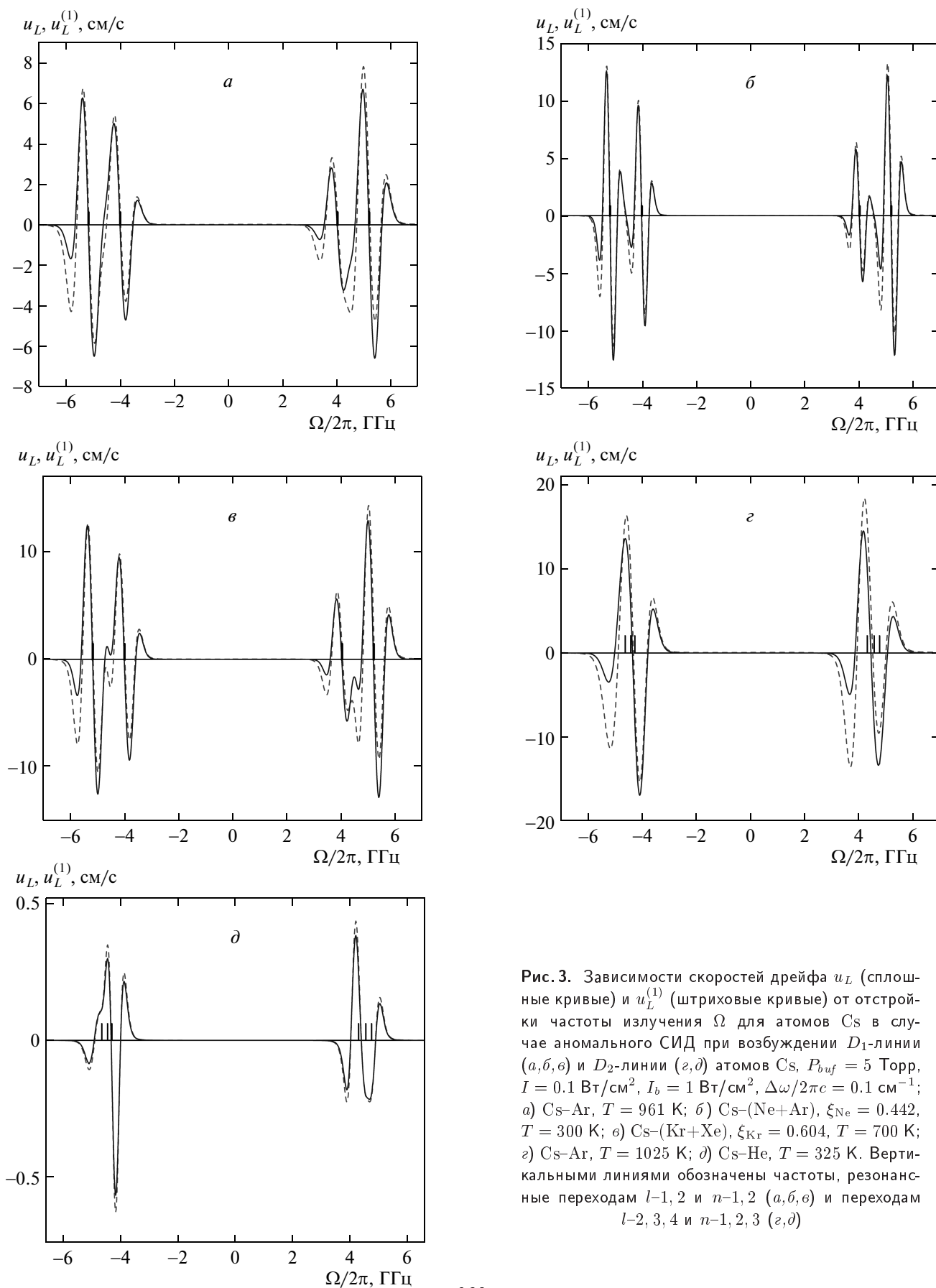


Рис. 3. Зависимости скоростей дрейфа u_L (сплошные кривые) и $u_L^{(1)}$ (штриховые кривые) от отстройки частоты излучения Ω для атомов Cs в случае аномального СИД при возбуждении D_1 -линии (*a, б, в*) и D_2 -линии (*г, д*) атомов Cs, $P_{buf} = 5$ Торр, $I = 0.1$ Вт/см², $I_b = 1$ Вт/см², $\Delta\omega/2\pi c = 0.1$ см⁻¹; *a*) Cs-Ar, $T = 961$ К; *б*) Cs-(Ne+Ar), $\xi_{Ne} = 0.442$, $T = 300$ К; *в*) Cs-(Kr+Xe), $\xi_{Kr} = 0.604$, $T = 700$ К; *г*) Cs-Ar, $T = 1025$ К; *д*) Cs-He, $T = 325$ К. Вертикальными линиями обозначены частоты, резонансные переходам $l-1, 2$ и $n-1, 2$ (*a, б, в*) и переходам $l-2, 3, 4$ и $n-1, 2, 3$ (*г, д*)

Авторы признательны Дж. Паскалю (J. Pascale) за любезно предоставленные подробные табличные данные по потенциалам взаимодействия атомов щелочных металлов с атомами инертных газов.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы ОФН РАН «Фундаментальная оптическая спектроскопия и ее приложения» (проект III.9.1) и государственной программы поддержки ведущих научных школ РФ (№ НШ-4447.2014.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. S. Pine, *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer* **62**, 397 (1999).
2. P. Duggan, P. M. Sinclair, A. D. May, and J. R. Drummond, *Phys. Rev. A* **51**, 218 (1995).
3. D. A. Shapiro, R. Ciurylo, R. Jaworski, and A. D. May, *Canad. J. Phys.* **79**, 1209 (2001).
4. J. M. Hartmann, C. Boulet, and D. Robert, *Collisional Effects on Molecular Spectra: Laboratory Experiments and Models, Consequences for Applications*, Elsevier Sci., Amsterdam, Boston (2008).
5. G. J. van der Meer, J. Smeets, E. R. Eliel, P. L. Chapovsky, and L. J. F. Hermans, *Phys. Rev. A* **47**, 529 (1993).
6. I. Kuščer, L. J. F. Hermans, P. L. Chapovsky, J. J. M. Beenakker, and G. J. van der Meer, *J. Phys. B* **26**, 2837 (1993).
7. B. Nagels, P. L. Chapovsky, L. J. F. Hermans, G. J. van der Meer, and A. M. Shalagin, *Phys. Rev. A* **53**, 4305 (1996).
8. F. Kh. Gel'mukhanov, A. I. Parkhomenko, T. I. Privalov, and A. M. Shalagin, *J. Phys. B* **30**, 1819 (1997).
9. T. Privalov and A. Shalagin, *Phys. Rev. A* **59**, 4331 (1999).
10. A. Brissaud and U. Frish, *J. Math. Phys.* **15**, 524 (1974).
11. А. И. Пархоменко, А. М. Шалагин, *ЖЭТФ* **118**, 279 (2000).
12. С. Г. Раутиан, Г. И. Смирнов, А. М. Шалагин, *Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул*, Наука, Новосибирск (1979).
13. S. G. Rautian and A. M. Shalagin, *Kinetic Problems of Nonlinear Spectroscopy*, North-Holland, Amsterdam–New York–Oxford (1991).
14. P. F. Liao, J. E. Bjorkholm, and P. R. Berman, *Phys. Rev. A* **21**, 1927 (1980).
15. P. R. Berman, T. W. Mossberg, and S. R. Hartmann, *Phys. Rev. A* **25**, 2550 (1982).
16. А. И. Пархоменко, А. М. Шалагин, *ЖЭТФ* **120**, 830 (2001).
17. O. V. Belai, O. Y. Schwartz, and D. A. Shapiro, *Phys. Rev. A* **76**, 012513 (2007).
18. V. P. Kochanov, *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer* **121**, 105 (2013).
19. W. Happer, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 169 (1972).
20. Е. Б. Александров, Г. И. Хвостенко, М. П. Чайка, *Интерференция атомных состояний*, Наука, Москва (1991).
21. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Наука, Москва (1977).
22. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).
23. Л. В. Ильичев, А. И. Пархоменко, *ЖЭТФ* **112**, 856 (1997).
24. А. И. Пархоменко, *ЖЭТФ* **116**, 1587 (1999).
25. F. Kh. Gel'mukhanov, L. V. Il'ichov, and A. M. Shalagin, *Physica A* **137**, 502 (1986).
26. NIST Atomic Spectra Database: <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>.
27. F. Kh. Gel'mukhanov and A. I. Parkhomenko, *J. Phys. B* **28**, 33 (1995).
28. J. Pascale and J. Vandephanque, *J. Chem. Phys.* **60**, 2278 (1974).
29. А. И. Пархоменко, А. М. Шалагин, *КЭ* **43**, 162 (2013).
30. N. Allard and J. Kielkopf, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1103 (1982).