

А. К. ВЕРШОВСКИЙ, В. И. ПЕТРОВ

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ИЗОТОПИЧЕСКОГО СДВИГА ЯМР В КСЕНОНЕ

*Компактизация оптических квантовых датчиков, в том числе гироскопов на эффекте ядерного магнитного резонанса (ЯМР), в первую очередь предполагает уменьшение размера рабочей газовой ячейки. В данной работе рассматривается зависимость изотопического сдвига в балансной схеме гироскопа на ЯМР в изотопах ксенона от размера газовой ячейки. С этой целью проведено экспериментальное и теоретическое исследование факторов, влияющих на скорости релаксации изотопов ксенона. Представлена численная модель, позволяющая прогнозировать величину изотопического сдвига для ячеек различного размера при вариации их основных параметров, а именно температуры и давления газовой смеси. На основе результатов численного моделирования даются рекомендации по оптимизации основных параметров газовой ячейки при изменении ее размера.*

**Ключевые слова:** ядерный магнитный гироскоп, ядерный магнитный резонанс, оптическая накачка, спин-обмен, ферми-контактное усиление, изотопический сдвиг, ячейка малого размера.

### Введение

Поляризованные ядра ксенона (Xe) используются как чувствительные к магнитному полю и вращению элементы в квантовых датчиках, имеющих широкий спектр применения, включая медицину [1, 2], навигацию [3–6], высокоточное измерение магнитного поля [7], поиск фундаментальных взаимодействий вне рамок стандартной модели [8, 9]. Высокая чувствительность таких датчиков обусловлена не только собственными магнитными свойствами ядер ксенона, но и большой эффективностью их поляризации в процессе соударений с атомами ориентированного щелочного металла (ЩМ) [10], а также эффективностью считывания состояния этих ядер атомами щелочного металла, которая увеличена почти на три порядка вследствие эффекта контактного взаимодействия (ЭКВ) [11]. Контактное (ферми-контактное, или сверхтонкое контактное) взаимодействие, возникающее при столкновении электронного парамагнетика, в роли которого выступает атом ЩМ, с ядерным парамагнетиком (атомом инертного газа) приводит к тому, что воздействие магнитного поля, созданного ядром атома инертного газа, на электронную оболочку атома ЩМ многократно усиливается в результате сверхтонкого взаимодействия. ЭКВ в той же мере проявляется и в обратном процессе: он приводит к усилению воздействия поля, созданного атомом ЩМ, на ядерный момент инертного газа. Магнитное поле, усиленное

---

**Вершовский** Антон Константинович. Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (С.-Петербург).

**Петров** Владимир Игоревич. Научный сотрудник, АО «Концерн «ЦНИИ «Электроприбор» (С.-Петербург).

за счет ЭКВ, мы будем называть эффективным полем. Эффективное продольное (по отношению к внешнему магнитному полю, определяющему ось чувствительности датчика) поле, созданное атомами ЩМ в ячейке, будем называть эффективным внутренним (или просто внутренним) полем в отличие от приложенного к ячейке внешнего магнитного поля  $B_0$ .

Коэффициент ферми-контактного усиления зависит от параметров сталкивающихся веществ, его величина варьируется от единиц для легких веществ (Li, He) до сотен для тяжелых (Cs, Rb, Ag, Xe) и достигает максимума при столкновениях цезия с ксеноном. Приводимые разными исследовательскими группами значения коэффициента взаимодействия отличаются на 20-30%. Возможно, по этой причине не существует экспериментальных данных, свидетельствующих о равенстве или неравенстве этих величин для двух близких по массе стабильных нечетных изотопов ксенона  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$ , используемых в балансных схемах квантовых ЯМР-датчиков [3].

В 2013 году, однако, было обнаружено [8], что отношение частот прецессии магнитных моментов изотопов Xe, находящихся в общем объеме с атомами поляризованного (оптически ориентированного) ЩМ, зависит от степени и знака его поляризации. Было показано, что относительная разность  $\delta B_A$  величин эффективного поля  $B_A$ , созданного атомами ЩМ, при измерении магнитометрами на изотопах  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$  составляет примерно  $\delta B_A = 0,0017$ . Этот эффект получил название изотопического сдвига (ИС). Вскоре было показано [4], что ИС является основным фактором, негативно влияющим на долговременные точностные характеристики балансных датчиков на изотопах  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$ . В частности, именно он обуславливает крайне высокую чувствительность таких датчиков к температуре рабочей ячейки (поскольку концентрация насыщенных паров ЩМ, а соответственно и величина внутреннего поля, меняется на порядок при изменении температуры на 20–35°C). В связи с этим в настоящее время в мире интенсивно ведутся исследования, направленные на разработку схем, в которых не создается продольное внутреннее поле, а потому не возникает ИС. В частности, показано, что избежать возникновения ИС можно при применении сложных импульсных методов оптической накачки [12, 13]. Вместе с тем сейчас трудно ожидать, что импульсные схемы смогут заменить существенно более простые классические схемы ЯМГ, поэтому задача исследования и последующей минимизации ИС сохраняет первостепенную значимость.

При открытии ИС естественно было предположить, что он обусловлен разностью коэффициентов ферми-контактного усиления для двух изотопов. В этом случае его величина  $\delta B_A$  должна быть постоянной в широком диапазоне условий. Наши экспериментальные исследования, напротив, показали, что величина  $\delta B_A$  при изменении температуры меняет не только величину, но и знак. Объяснение этого эффекта и его экспериментальное подтверждение были приведены нами в [14, 15]. Было показано, что эффект ИС обусловлен поглощением излучения оптической накачки в оптически плотной ячейке, поскольку это поглощение приводит к появлению неравномерности распределения по длине ячейки следующих параметров: 1) интенсивности оптической накачки; 2) концентрации поляризованных атомов ЩМ; 3) индукции внутреннего поля; 4) концентрации поляризованных столкновениями с атомами ЩМ атомов Xe.

Атомы Xe, поляризованные преимущественно у фронтальной поверхности рабочей ячейки, т.е. в области, где внутреннее поле максимально, диффундируют по объ-

ему ячейки, усредняя неоднородное внутреннее поле  $B_a$ . Чем больше время жизни атома Хе в поляризованном состоянии, тем ближе измеренное значение внутреннего поля к среднему по ячейке. Ввиду этого величина ИС зависит от соотношения скоростей релаксации изотопов Хе. В частности, при равных скоростях релаксации ИС обнуляется.

Нами были предложены два механизма обнуления ИС: за счет подбора температуры, обеспечивающей равенство скоростей релаксации Хе, и введения градиента внешнего магнитного поля, обеспечивающего компенсацию неоднородности внутреннего поля. Была создана численная модель, продемонстрировавшая хорошее соответствие экспериментальным данным [15].

К сожалению, в эксперименте мы не могли варьировать длину ячейки – данные получены на кубической ячейке с длиной внутреннего ребра 0,5 см. В любом случае, исследование размерных зависимостей ИС осложнено тем, что дозированное заполнение газовой смесью ячеек меньшего размера требует разработки и применения специальных технологий [16, 17], в отсутствие которых разброс давлений компонентов газовой смеси для разных ячеек оказывается слишком велик. В связи с этим для таких исследований, как правило, нельзя использовать ячейки, изготовленные по стандартным стеклодувным технологиям. Вместе с тем актуальные сегодня задачи миниатюризации квантовых датчиков требуют, в первую очередь, уменьшения размера рабочей ячейки (в настоящее время за рубежом активно разрабатываются датчики, использующие кубические ячейки с длиной внутреннего ребра 0,1 и 0,2 см [18]), и все возможные последствия такого уменьшения должны быть предварительно оценены как теоретически, так и численно.

По этой причине нами была предпринята попытка моделирования зависимости ИС от размера ячейки. Процессы спин-обменной накачки в балансных датчиках на изотопах ксенона крайне сложны, они описываются многими параметрами, но данная задача упрощается тем, что величина ИС от большинства из них не зависит и определяется прежде всего пространственным распределением оптической накачки и скоростями релаксации ЦМ и Хе в рабочей ячейке. В итоге модификация описанной в [15] модели сводится к определению зависимости этих скоростей от размера ячейки. Поскольку механизмы релаксации ЦМ относительно просты и всесторонне изучены [19, 20], задача сводится к исследованию размерных зависимостей изотопов ксенона. В следующих разделах приведены результаты экспериментальных исследований температурных зависимостей скоростей релаксации изотопов ксенона в кубической ячейке с размером внутреннего ребра  $L = 5$  мм, произведен их анализ и представлена построенная на их основе численная модель, позволяющая прогнозировать величину ИС для ячеек различного размера. Представлены и проанализированы результаты численного моделирования.

## 1. Скорости релаксации изотопов Хе: теория

Механизмы релаксации изотопов Хе были исследованы в конце прошлого века группой У. Хаппера [21–26]. В частности, было показано, что изотоп  $^{131}\text{Xe}$  в существенно большей степени подвержен релаксации на стенках ячейки, чем изотоп  $^{129}\text{Xe}$ . Это объясняется тем, что ядро изотопа  $^{131}\text{Xe}$  имеет ненулевой квадрупольный электрический момент, эффективно взаимодействующий с пристеночным электроста-

тическим потенциалом. Соответственно, в широком диапазоне температур и давлений релаксация  $^{129}\text{Xe}$  преимущественно происходит в объеме ячейки (в основном за счет образования ван-дер-ваальсовых молекул с атомами ЩМ), а релаксация  $^{131}\text{Xe}$  – на ее стенках. В работе мы пользовались упрощенными выражениями из [22–26], исключив из рассмотрения все механизмы релаксации Хе, кроме двух основных: 1) релаксации Хе при тройных соударениях Хе-ЩМ- $\text{N}_2$  (азот является обязательным компонентом газовой смеси в ячейке, эффективно повышающим скорость спин-обмена ЩМ-Хе, а также гасящим нежелательное переизлучение излучения накачки атомами ЩМ) и при тройных соударениях Хе-ЩМ-Хе; 2) релаксации Хе на стенках стеклянной ячейки.

Выражение для скорости объемной релаксации изотопов ксенона  $\Gamma_{iXeV}$  (где  $iXe = ^{129}\text{Xe}, ^{131}\text{Xe}$ ) можно записать в виде

$$\Gamma_{iXeV} = kv_{iXeN_2} \cdot n[N_2] \cdot n[Me] + kv_{iXeXe} \cdot n[Xe] \cdot n[Me], \quad (1)$$

где  $kv_{iXeN_2}$  и  $kv_{iXeXe}$  – постоянные коэффициенты,  $n[N_2]$ ,  $n[Xe]$  и  $n[Me]$  – концентрации азота, ксенона, газовой смеси и насыщенных паров щелочного металла соответственно. Выражения для объемной релаксации, приведенные в [22–26], гораздо сложнее: они нелинейны по концентрации составляющих газовой смеси. Анализ результатов этих работ показывает, что нелинейностью можно пренебречь, если считать, что вносимая ею погрешность не превышает 10–15% при условии, что, во-первых, давление газовой смеси невелико, в частности парциальное давление азота не превышает 20 torr, и, во-вторых, относительные вариации давления не превышают –50/+20%. Результаты, полученные при значениях давлений и их вариаций, лежащих вне указанного диапазона, должны рассматриваться как иллюстративные.

В дальнейшем мы ограничим наше рассмотрение газовыми смесями с постоянным составом, т.е. с постоянным отношением давлений азота  $P_{N_2}$  и ксенона  $P_{Xe}$ . Для этого случая выражение (1) можно еще упростить:

$$\Gamma_{iXeV} = kv_{iXe} \cdot n[Gas] \cdot n[Me]. \quad (2)$$

Здесь  $n[Gas]$  – концентрация атомов в газовой смеси. Преимущество такого подхода заключается в том, что входящий в (2) коэффициент  $kv_{iXe}$  можно непосредственно определить из эксперимента для любой конкретной газовой смеси.

Для практических целей удобнее выразить концентрацию газа в ячейке через давление  $P$ , измеренное при температуре изготовления ячейки  $T_p$ . Тогда

$$\Gamma_{iXeV} = kv_{iXe} \cdot \frac{N_A}{V_{mol}} \cdot \frac{T_0}{T_p} \cdot \frac{P}{P_0} \cdot n[Me], \quad (3)$$

где  $N_A = 6,02214076 \cdot 10^{23}$  моль $^{-1}$  – число Авогадро,  $V_{mol} = 2,2413996 \cdot 10^4$  см $^3$  – объем одного моля газа при нормальных условиях,  $T_0 = 273,16$  К,  $P_0 = 760$  torr. Концентрация насыщенных паров ЩМ  $n[Me]$  однозначно определяется температурой  $T$  [К] газовой ячейки, точнее, ее самого холодного участка [27]:

$$n[\text{Me}] = \frac{N_A \cdot T_0}{P_0 \cdot V_{mol}} \cdot 10^{(8,2217 - \frac{4006,048}{T} - 6,0194 \cdot 10^{-4} \cdot T - 0,19623 \cdot \lg T)} \quad (4)$$

Выражение для пристеночной релаксации изотопов ксенона  $\Gamma_{iXeW}$  можно записать в виде

$$\Gamma_{iXeW} = \frac{1}{L^2} \cdot D_{iXe} \cdot kw_{iXe} \cdot \exp\left(\frac{E_{iXe}}{kT}\right), \quad (5)$$

где  $L$  – длина ребра кубической ячейки или диаметр сферической,  $D_{iXe}$  – коэффициент диффузии ксенона,  $E_{iXe}$  – энергия адгезии атома ксенона к стенке ячейки,  $k = 1,380649 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – постоянная Больцмана. Входящие в (5) коэффициенты  $kw_{iXe}$  и  $E_{iXe}$  зависят от свойств поверхности, для каждой конкретной ячейки их также можно определить из эксперимента.

## 2. Экспериментальное исследование размерных зависимостей скоростей релаксации Хе

Нами был проведен эксперимент по измерению зависимостей скоростей релаксации изотопов Хе в исследуемой ячейке от ее температуры. Описание экспериментальной установки приведено в [14, 15]. Как следует из формул, приведенных в предыдущем разделе, вклады, обусловленные объемной и пристеночной релаксацией, характеризуются разными температурными зависимостями, что дает возможность определить их величины по экспериментальным данным (рис. 1).

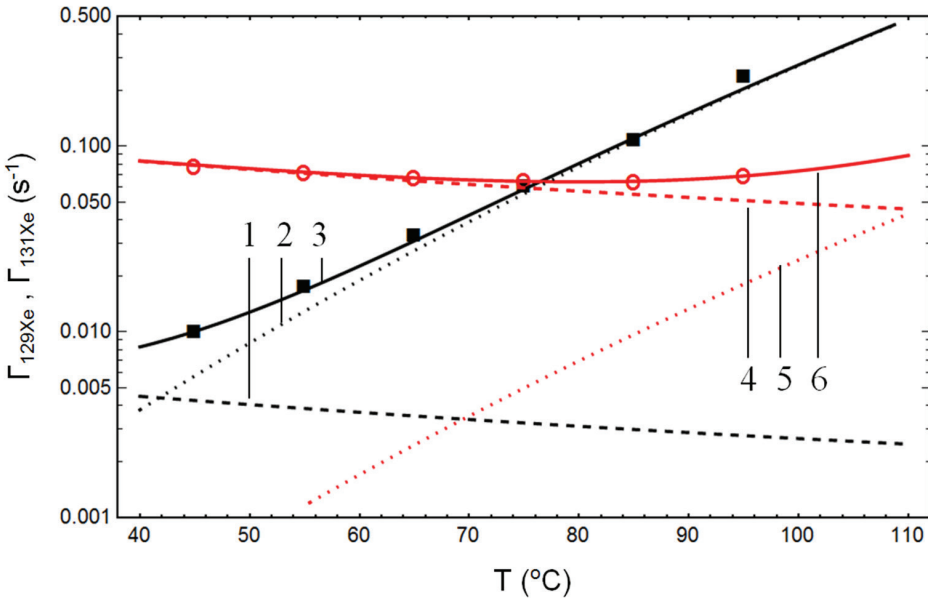


Рис. 1. Зависимость скоростей релаксации изотопов Хе в исследуемой ячейке от температуры. Квадратами обозначены экспериментально измеренные скорости релаксации  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$ .

- 1, 4 – расчетные значения скоростей пристеночной релаксации  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$  соответственно;
- 2, 5 – расчетные значения скоростей объемной релаксации  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$ ;
- 3, 6 – расчетные значения суммарных скоростей релаксации  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$

Данных, приведенных на рис. 1, достаточно для того, чтобы разделить вклады объемной и пристеночной релаксации для обоих изотопов Хе и в дальнейшем варьировать в модели величину суммарного давления  $P$  при сохранении отношения парциальных давлений  $P_{N_2}$  и  $P_{Xe}$ . Расчетные значения скоростей релаксации получены подбором параметров в выражениях (2)–(5). Величины коэффициентов, обеспечивающие наилучшее согласие с экспериментом, приведены в таблице.

Т а б л и ц а

Величина	Значение для $^{129}\text{Xe}$	Значение для $^{131}\text{Xe}$	Единицы
$kv$	$1,18 \cdot 10^{-32}$	$1,06 \cdot 10^{-33}$	$\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$
$kw$	$4,6 \cdot 10^{-6}$	$8,5 \cdot 10^{-5}$	–
$E$	0,11	0,11	эВ

Отметим, что величина энергии адгезии  $^{131}\text{Xe}$  на поверхности ячейки (материал – боросиликатное стекло Ругех) лежит в пределах, указанных в [26].

### 3. Моделирование зависимости ИС от размера ячейки

Данные, приведенные в предыдущем разделе, позволили нам модифицировать численную модель, описанную в [15], и дополнить ее зависимостями скоростей релаксации Хе от температуры ячейки и суммарного давления газовой смеси. Модифицированная модель позволяет в одномерном приближении рассчитать зависимости ИС  $\delta B_A$  и скоростей релаксации  $\Gamma_{iXe}$  изотопов от температуры ячейки  $T$ , ее линейного размера  $L$ , суммарного давления газовой смеси  $P$  и внешнего градиента  $dB/dz$ . Вдоль оси  $z$ , направление которой определяется внешним магнитным полем  $B_0$ , ячейка делится на  $N = 25 \dots 50$  слоев толщиной  $\Delta z = L/N$ , внутри каждого из них распределение всех параметров системы считается однородным. Интенсивность накачки  $I_p(j)$  и число ориентированных атомов цезия  $Ncs_j = Ncs(j)$  в каждом слое  $j = 1 \dots N$  вычисляется с учетом нелинейности поглощения в оптически плотной среде. При этом предполагается полная релаксация Cs на стенках ячейки. Шаг моделирования по времени  $\Delta t$  берется равным времени диффузии Хе через слой толщиной  $\Delta z$ :  $\Delta t = (\Delta z / D_{iXe})^{1/2}$ . Распределение поляризованных ядер ксенона  $Nxe_{ij} = Nxe_i(j)$  описывается массивом комплексных чисел  $|Nxe_{ij}| \cdot \exp(i\varphi_{ij})$ , где  $\varphi_{ij}$  – мгновенная фаза прецессии изотопа Хе<sub>*i*</sub> в слое  $j$ . Численно решается задача эволюции фазы одного «поколения» ансамбля поляризованных ядер за период от момента их ориентации до нескольких времен их релаксации. На каждом шаге  $n$  вычисляется усредненная по ячейке фаза  $\varphi_{i,n}$  прецессии атомов Хе<sub>*i*</sub>, причем учитывается, что вклад каждого слоя  $j$  в общую фазу Хе<sub>*i*</sub>, регистрируемую атомами Cs, пропорционален числу ориентированных атомов Cs в этом слое:  $\varphi_{i,n} = \text{Arg}[(1/N) \sum_j Nxe_{i,j,n} \cdot Ncs_j]$ .

Далее мы учли, что первым и наиболее важным следствием изменения размера ячейки является изменение ее оптической плотности, определяемой как натуральный логарифм отношения интенсивности излучения накачки, входящего в ячейку, к интенсивности излучения, прошедшего ячейку. Для оптимизации параметров сигнала магнитного резонанса при оптической накачке требуется поддерживать



оптическую плотность на постоянном уровне. Как показано, например, в [28], оптимальные значения оптической плотности для датчика, использующего один луч и для накачки, и для детектирования сигнала резонанса, лежат в пределах 1,6-1,7, что соответствует 18-20-процентному пропусканию света накачки ячейкой. При расчетах поглощения света накачки в ячейке мы использовали выражение, учитывающее просветление среды лучом оптической накачки [29]. Согласно этому выражению, при учете просветления накачкой мощностью порядка 10–30 мВт/см<sup>2</sup> пропускание света накачки ячейкой возрастает до 60-80%, что положительно сказывается на однородности параметров излучения в ячейке. При постоянной интенсивности света накачки в ячейках с парами ЩМ удельное поглощение резонансного света накачки однозначно обуславливается концентрацией паров ЩМ, которая, в свою очередь, определяется температурой рабочей ячейки, поэтому для ячейки каждого размера может быть вычислена оптимальная рабочая температура. Мы ее вычисляли по критерию пропускания 75% света накачки при интенсивности накачки 23 мВт/см<sup>2</sup> (вставка на рис. 2). Это дало нам возможность для каждого размера ячейки ограничить расчеты оптимальной температурой и температурами, близкими к ней.

Наш расчет показал ускорение релаксации обоих изотопов Хе при уменьшении размеров ячейки (рис. 2). Скорость релаксации изотопа <sup>131</sup>Хе, как и следовало ожидать, при этом растет наиболее быстро за счет возрастания роли пристеночной релаксации по сравнению с релаксацией в объеме ячейки. Поскольку с уменьшением размера растет оптимальная температура, возрастает и скорость релаксации <sup>129</sup>Хе, но недостаточно быстро, чтобы скомпенсировать ускорение релаксации <sup>131</sup>Хе. Уже из этого можно сделать вывод, что с уменьшением размера ячейки обнуление ИС будет требовать все больших отклонений основных параметров ячейки от их оптимальных значений.

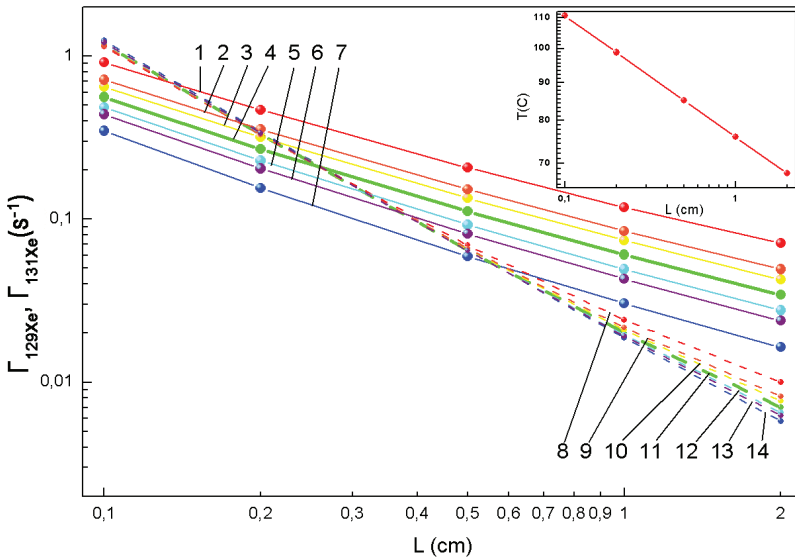


Рис. 2. Зависимость скорости релаксации от размера ячейки при оптимальных температурах и температурный разброс в диапазоне ±10°C. Сплошные линии – <sup>129</sup>Хе, пунктирные – <sup>131</sup>Хе. Для <sup>129</sup>Хе: 1 – T<sub>opt</sub> –10°C, 2 – T<sub>opt</sub> –5°C, 3 – T<sub>opt</sub> –3°C, 4 – T<sub>opt</sub>, 5 – T<sub>opt</sub> +3°C, 6 – T<sub>opt</sub> +5°C, 7 – T<sub>opt</sub> +10°C. Для <sup>131</sup>Хе: 8 – T<sub>opt</sub> –10°C, 9 – T<sub>opt</sub> –5°C, 10 – T<sub>opt</sub> –3°C, 11 – T<sub>opt</sub>, 12 – T<sub>opt</sub> +3°C, 13 – T<sub>opt</sub> +5°C, 14 – T<sub>opt</sub> +10°C. Вставка: зависимость оптимальной температуры от длины ячейки

Этот вывод подтверждается численным расчетом, результаты которого представлены на рис. 3. Если для ячейки с длиной ребра 0,5 см обнуление ИС достигается при температуре, близкой к оптимальной, то для обнуления ИС в ячейке с ребром 0,3 см необходимо превышение температуры более чем на 5°C над оптимумом, а обнуление ИС в ячейках с ребром  $\leq 0,2$  см требует превышения над оптимумом более чем на 10°C.

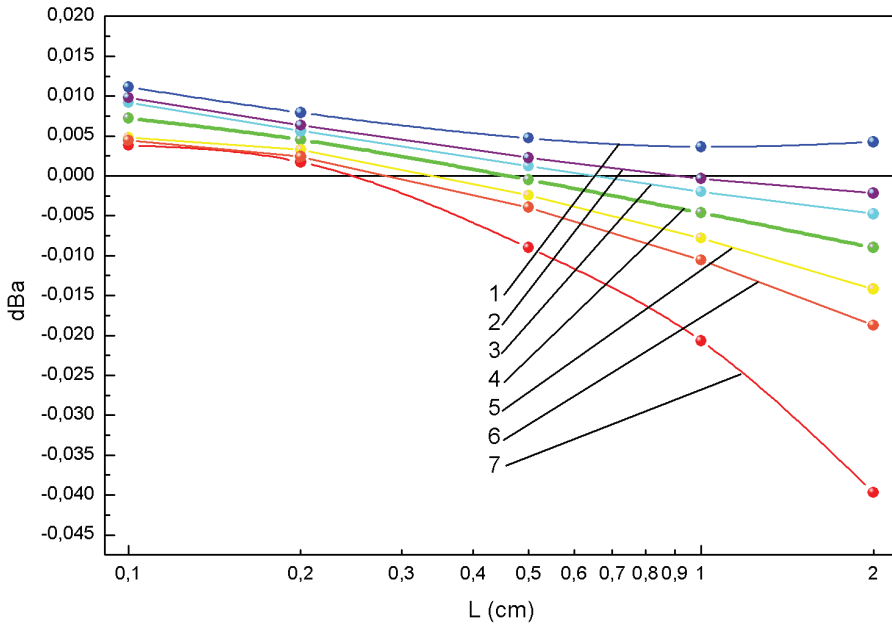


Рис. 3. Зависимости параметра ИС ( $\delta B_{в}$ ) от размера ячейки в диапазоне температур  $T_{opt} \pm 10^{\circ}C$ .  
 1 –  $T_{opt} - 10^{\circ}C$ , 2 –  $T_{opt} - 5^{\circ}C$ , 3 –  $T_{opt} - 3^{\circ}C$ , 4 –  $T_{opt}$ , 5 –  $T_{opt} + 3^{\circ}C$ , 6 –  $T_{opt} + 5^{\circ}C$ , 7 –  $T_{opt} + 10^{\circ}C$

Как было показано ранее [14, 15], величиной ИС также можно управлять при помощи приложенного к ячейке градиента внешнего магнитного поля, компенсирующего градиент поля внутреннего. Эта возможность была исследована численно применительно к ячейкам разного размера. На рис. 4 показана расчетная зависимость внутреннего поля и линейной составляющей его градиента от размера ячейки при оптимальной для данного размера температуре. Очевидно, что постоянство оптической плотности ячейки при уменьшении размера должно обеспечиваться за счет увеличения концентрации паров ЦМ, которое, в свою очередь, приводит к увеличению как внутреннего поля, так и его градиента. Из графика следует, что в диапазоне размеров  $L = (0,2-2,0)$  см градиент внутреннего поля примерно пропорционален  $L^{3/2}$ , поэтому для его компенсации в малых ячейках требуется прикладывать все больший градиент внешнего поля. Кроме того, в ячейках малого размера все большую роль начинают играть градиенты внутреннего поля второго и более высоких порядков, возникающие в результате релаксации ЦМ на стенках ячейки.

На рис. 5 показана зависимость ИС от полной неоднородности внешнего поля  $\Delta B = L \cdot (dB/dz)$  для ячеек разных размеров (при оптимальной для каждого размера температуре). Как можно видеть, компенсация градиента внутреннего поля возможна для ячеек сравнительно крупных размеров – 0,5 см и выше. Для ячеек размером



менее 0,5 см компенсация внешним градиентом при разумных значениях приложенной неоднородности внешнего поля невозможна.

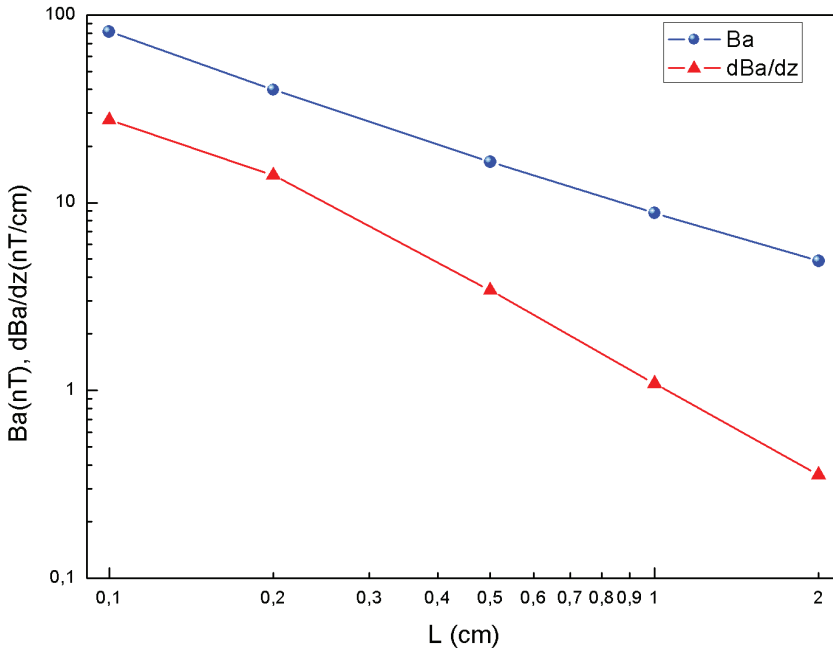


Рис. 4. Зависимость внутреннего поля  $B_a$  (окружности) и его градиента  $dB_a/dz$  (треугольники) от размера ячейки

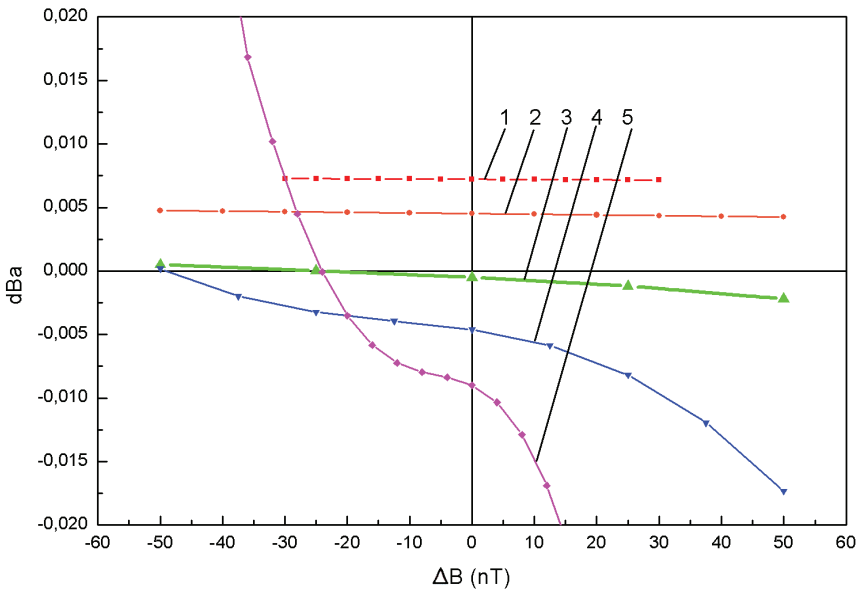


Рис. 5. Зависимости ИС от приложенного к ячейке внешнего градиента ( $\Delta B = L \cdot dB/dz$ ).  
 1 – для ячейки со стороной 1 мм, 2 – 2 мм, 3 – 5 мм, 4 – 10 мм, 5 – 20 мм

Таким образом, по мере уменьшения размера ячейки сложность компенсации ИС возрастает за счет увеличения вклада пристеночной релаксации как  $^{131}\text{Xe}$ , так и

ЩМ. Эти эффекты можно устранить, если по мере уменьшения размера ячейки увеличивать давление газовой смеси  $P$ , поддерживая среднее время диффузии атомов к стенкам на постоянном уровне.

Для поддержания на постоянном уровне скоростей пристеночной релаксации, поскольку  $D_{iXe} \sim 1/P$ , необходимо обеспечить  $P \sim 1/L^2$ . Для обеспечения равенства скоростей релаксации двух изотопов, однако, также необходим учет температурной зависимости скоростей их объемной релаксации, что приводит к усложнению расчетов. Выше уже упоминалось, что скорости объемной релаксации  $\Gamma_{iXe}$  считаются прямо пропорциональными давлению газовой смеси, а это допустимо только в ограниченном диапазоне давлений (см. раздел 1, комментарий к формуле (1)). В связи с этим последующие расчеты носят в основном качественный иллюстративный характер.

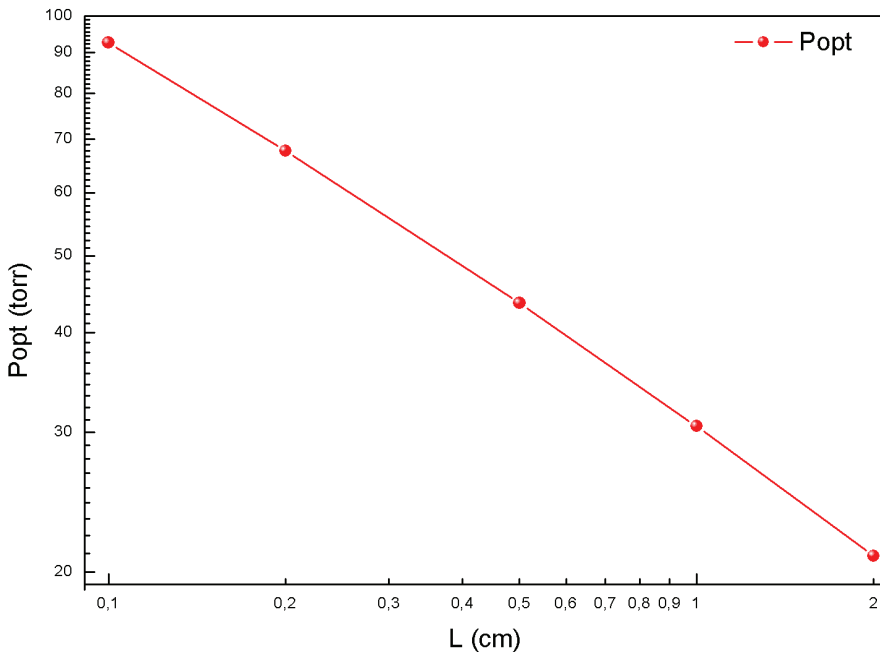


Рис. 6. Зависимость оптимального давления от длины ячейки

На рис. 6 показана зависимость оптимального (то есть суммарного, обеспечивающего равенство скоростей релаксации двух изотопов) давления от длины ячейки при температуре, оптимальной для каждой длины.

На рис. 7 показаны зависимости параметра ИС от размера ячейки в диапазоне температур  $T_{opt} \pm 10^\circ\text{C}$ . Этот график отличается от рис. 3 тем, что на нем ИС в каждой точке вычислен при оптимальном суммарном давлении. Видно, что при давлениях, обеспечивающих равенство скоростей релаксации, не происходит обнуления ИС. Это в первую очередь обусловлено высокой неоднородностью внутреннего поля в маленьких ячейках и связанным с этой неоднородностью уширением линии магнитного резонанса  $^{129}\text{Xe}$ .

На рис. 8 показаны зависимости ИС от размера ячейки при оптимальных температурах и при давлениях, отличающихся от оптимальных на фиксированную величину. Из рис. 7, 8 следует, что, варьируя одновременно температуру и давление, можно обнулить или снизить величину ИС практически во всем диапазоне давлений.

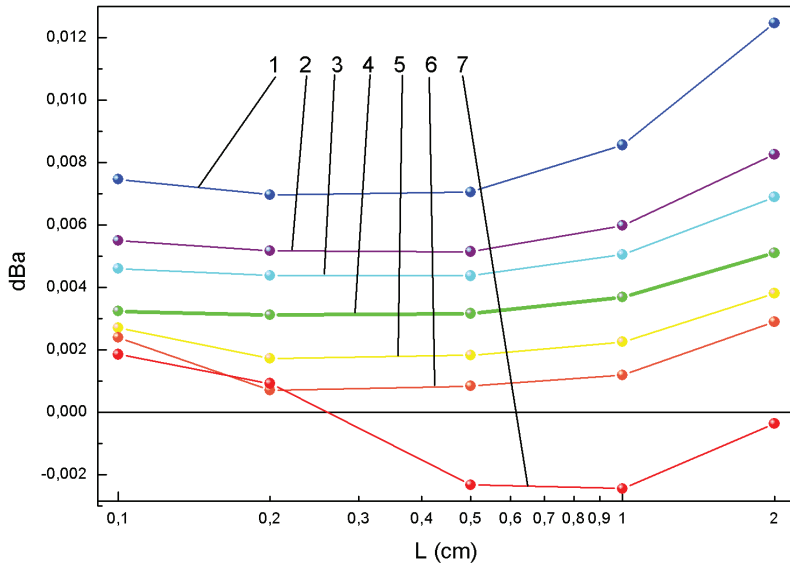


Рис. 7. Зависимости параметра ИС ( $\delta B_a$ ) от размера ячейки в диапазоне температур  $T_{opt} \pm 10^\circ C$  при оптимальных давлениях.

1 –  $T_{opt} - 10^\circ C$ , 2 –  $T_{opt} - 5^\circ C$ , 3 –  $T_{opt} - 3^\circ C$ , 4 –  $T_{opt}$ , 5 –  $T_{opt} + 3^\circ C$ , 6 –  $T_{opt} + 5^\circ C$ , 7 –  $T_{opt} + 10^\circ C$

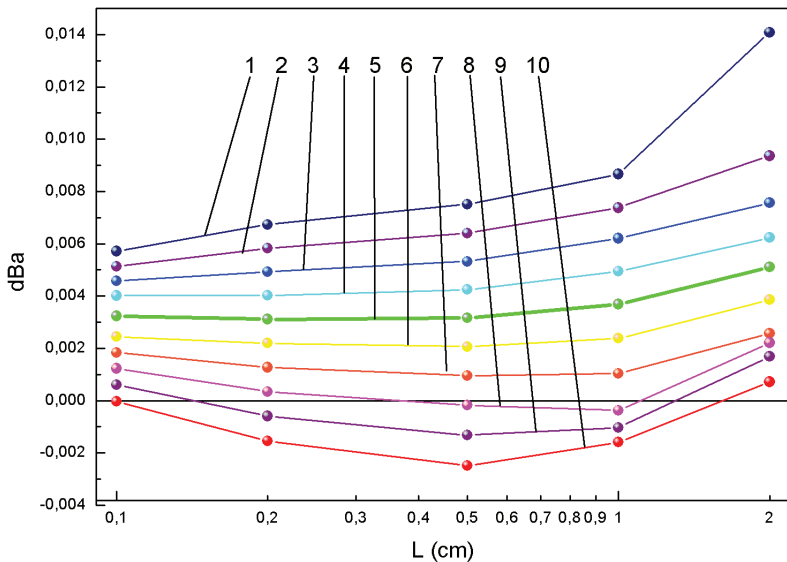


Рис. 8. Зависимости параметра ИС ( $\delta B_a$ ) от размера ячейки в диапазоне давлений  $P_{opt} \pm 25/-20$  torr при оптимальных температурах.

1 –  $P_{opt} - 20$  torr, 2 –  $P_{opt} - 15$  torr, 3 –  $P_{opt} - 10$  torr, 4 –  $P_{opt} - 5$  torr, 5 –  $P_{opt}$ , 6 –  $P_{opt} + 5$  torr, 7 –  $P_{opt} + 10$  torr, 8 –  $P_{opt} + 15$  torr, 9 –  $P_{opt} + 20$  torr, 10 –  $P_{opt} + 25$  torr

Здесь, однако, следует отметить, что абсолютный сдвиг показаний балансного датчика пропорционален величине  $\delta B_A \cdot B_a$  [8], поэтому рост величины  $B_a$  с уменьшением размера ячейки (рис. 4) приводит к увеличению сдвига. Кроме того, при расчете ошибки датчика следует учитывать не только абсолютную величину ИС, но и величины частных производных по всем параметрам датчика [5]. Представленная в данной статье модель позволяет получить численную оценку всех этих факторов.

Так, из рис. 3 следует, что при длине  $L = 0,1$  см и оптимальной температуре ожидаемое значение параметра ИС  $\delta B_A = 0,007$ . Внутреннее поле  $B_a$  при этом составляет 81,3 нТл. При концентрации металла  $n_{Me} = 2,8 \cdot 10^{13}$  см<sup>3</sup> и величине  $B_a = 81,3$  нТл сдвиг резонансной частоты  $^{129}\text{Xe}$  ( $\gamma/2\pi = 1.186 \cdot 10^7$  Гц/Тл) эффективным внутренним полем составит  $\Delta f_1 = \gamma/2\pi \cdot B_a = 0,964$  Гц или (в пересчете на единицы, используемые в гироскопии)  $\Delta\Omega_1 = 1,25 \cdot 10^6$  °/час. Тогда полный сдвиг в балансной схеме оценивается величиной  $\Delta\Omega = \delta B_A \cdot \Delta\Omega_1 \approx 8750$  °/час. Согласно [24], относительное изменение концентрации металла  $n_T = (dn_{Me}/dT)/n_{Me}$  в этих условиях равно  $n_T \approx 0,058$  К<sup>-1</sup>. Поскольку полный сдвиг пропорционален внутреннему полю  $B_a$ , а оно, в свою очередь, пропорционально концентрации металла  $n_{Me}$ , сдвиг нуля при изменении температуры составит  $\partial\Omega/\partial T \approx n_T \cdot \Delta\Omega \approx 0,51$  °/час/мК. Таким образом, уменьшение линейного размера ячейки в 5 раз привело к увеличению температурной зависимости сдвига нуля почти на порядок по сравнению с оценкой, приведенной в [5].

### Выводы

На основе экспериментально полученных данных о температурной зависимости скоростей релаксации ксенона построена модификация численной модели изотопического сдвига, позволяющая расширить область применения модели на ячейки различных размеров при различных суммарных давлениях газовой смеси. Помимо величины ИС, модель позволяет вычислить значения скоростей релаксации изотопов ксенона, среднего по ячейке внутреннего поля и его градиента. Показано, что уменьшение размеров рабочей ячейки приводит к увеличению изотопического сдвига. При этом метод компенсации сдвига градиентом внешнего магнитного поля становится все менее действенным. Тем не менее компенсация эффекта изотопического сдвига возможна за счет подбора комбинации температуры и давления газовой смеси в рабочей ячейке.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Virgincar, R.S., Cleveland, Z.I., Sivaram, K.S., Freeman, M.S., Nouls, J., Cofer, G.P., Martinez-Jimenez, S., He, M., Kraft, M., Wolber, J., Page McAdams, H., Driehuys, B.**, Quantitative analysis of hyperpolarized  $^{129}\text{Xe}$  ventilation imaging in healthy volunteers and subjects with chronic obstructive pulmonary disease, *NMR in Biomedicine*, 2013, vol. 26, no. 4, pp. 424–435.
2. **Chang, Y.V., Quirk, J.D., Ruset, L.C., Atkinson, J.J., Hersman, F.W., Woods, J.C.**, Quantification of human lung structure and physiology using hyperpolarized  $^{129}\text{Xe}$ : Xenon MR of Human Lung, *Magnetic Resonance in Medicine*, 2014, vol. 71, no. 1, pp. 339–344.
3. **Kanegsberg, E.**, A Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Gyro With Optical Magnetometer Detection, *SPIE*, San Diego, United States, 1978, vol. 0157, pp. 73–80.
4. **Walker, T., Larsen, M.**, Chapter eight—spin-exchange-pumped NMR gyros, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 2016, vol. 65, pp. 373–401.
5. **Вершовский А.К., Литманович Ю.А., Пазгалев А.С., Пешехонов В.Г.** Гироскоп на ядерном магнитном резонансе: предельные характеристики // Гироскопия и навигация. 2018. Т. 26. №1 (100). С. 55–80.
6. **Попов Е.Н., Баранцев К.А., Ушаков Н.А., Литвинов А.Н., Лиюкумович Л.Б., Шевченко А.Н., Скляр Ф.В., Медведев А.В.** Характер сигнала оптической схемы квантового датчика вращения на основе ядерного магнитного резонанса // Гироскопия и навигация. 2018. Т. 26. №1 (100). С. 93–106.
7. **Gemmel, C., Heil, W., Karpuk, S., Lenz, K., Ludwig, Ch., Sobolev, Yu., Tullney, K., Burghoff, M., Kilian, W., Knappe-Grüneberg, S., Müller, W., Schnabel, A., Seifert, F., Trahms, L., Baeßler, St.**, Ultra-

- sensitive magnetometry based on free precession of nuclear spins, *The European Physical Journal D*, 2010, vol. 57, no. 3, pp. 303–320.
8. **Bulatowicz, M., Griffith, R., Larsen, M., Mirijanian, J., Fu, C.B., Smith, E., Snow, W.M., Yan, H., Walker, T.G.**, Laboratory Search for a Long-Range T-Odd, P-Odd Interaction from Axionlike Particles Using Dual-Species Nuclear Magnetic Resonance with Polarized  $^{129}\text{Xe}$  and  $^{131}\text{Xe}$  Gas, *Physical Review Letters*, 2013, vol. 111, no. 10, p. 102001.
  9. **Allmendinger, F., Heil, W., Karpuk, S., Kilian, W., Scharth, A., Schmidt, U., Schnabel, A., Sobolev, Yu., Tullney, K.**, New Limit on Lorentz-Invariance- and CPT-Violating Neutron Spin Interactions Using a Free-Spin-Precession  $^3\text{He}$ - $^{129}\text{Xe}$  Comagnetometer, *Phys. Rev. Lett.*, 2014, vol. 112, no. 11, p. 110801.
  10. **Grossetête, F.**, Relaxation par collisions d'échange de spin, *Journal de Physique*, 1964, vol. 25, no. 4, pp. 383–396.
  11. **Herman, R.M.**, Theory of Spin Exchange between Optically Pumped Rubidium and Foreign Gas Nuclei, *Physical Review*, 1965, vol. 137, no. 4A, pp. A1062–A1065.
  12. **Walker, T.G., Korver, A., Thrasher, D., Bulatowicz, M.**, Synchronously pumped NMR gyro, *IEEE*, 2015, pp. 1–4.
  13. **Thrasher, D.A., Sorensen, S.S., Weber, J., Bulatowicz, M., Korver, A., Larsen, M., Walker, T.G.**, Continuous comagnetometry using transversely polarized Xe isotopes, *Physical Review A*, 2019, vol. 100, no. 6.
  14. **Вершовский А.К., Пазгалёв А.С., Петров В.И.** Природа эффекта рассогласования частот прецессии ядер  $^{129}\text{Xe}$  и  $^{131}\text{Xe}$  при спин-обменной накачке атомами щелочного металла // Журнал технической физики. 2018. Т. 44. № 7. С. 88.
  15. **Petrov, V.I., Puzgalev, A.S., Vershovskii, A.K.**, Isotope Shift of Nuclear Magnetic Resonances in  $^{129}\text{Xe}$  and  $^{131}\text{Xe}$  Caused by Spin-Exchange Pumping by Alkali Metal Atoms, *IEEE Sensors Journal*, 2020, vol. 20, no. 2, pp. 760–766.
  16. **Кнаппе, S.**, MEMS Atomic Clocks, *Comprehensive Microsystems*, 2007, vol. 3, pp. 571–612.
  17. **Eklund, E.J., Shkel, A.M., Knappe, S., Donley, E., Kitching, J.**, Glass-blown spherical microcells for chip-scale atomic devices, *Sensors and Actuators A: Physical*, 2008, vol. 143, no. 1, pp. 175–180.
  18. **Мейер Д., Ларсен М.** Гироскоп на ядерном магнитном резонансе для инерциальной навигации // Гироскопия и навигация. 2014. №1 (84). С. 3–13.
  19. **Bouchiat, M.A., Brossel, J.**, Relaxation of Optically Pumped Rb Atoms on Paraffin-Coated Walls, *Phys. Rev.*, 1966, vol. 147, no. 1, pp. 41–54.
  20. **Happer, W.**, Optical Pumping, *Rev. Mod. Phys.*, 1972, vol. 44, no. 2, pp. 169–249.
  21. **Zeng, X., Miron, E., Van Wijngaarden, V.A., Schreiber, D., Happer, W.**, Wall relaxation of spin polarized  $^{129}\text{Xe}$  nuclei, *Physics Letters A*, 1983, vol. 96, no. 4, pp. 191–194.
  22. **Happer, W., Miron, E., Schaefer, S., Schreiber, D., Van Wijngaarden, V.A., Zeng, X.**, Polarization of the nuclear spins of noble-gas atoms by spin exchange with optically pumped alkali-metal atoms, *Phys. Rev. A*, 1984, vol. 29, no. 6, pp. 3092–3110.
  23. **Zeng, X., Wu, Z., Call, T., Miron, E., Schreiber, D., Happer, W.**, Experimental determination of the rate constants for spin exchange between optically pumped K, Rb, and Cs atoms and  $^{129}\text{Xe}$  nuclei in alkali-metal – noble-gas van der Waals molecules, *Phys. Rev. A*, 1985, vol. 31, no. 1, pp. 260–278.
  24. **Hsu, J., Wu, Z., Happer, W.**, Cs induced  $^{129}\text{Xe}$  nuclear spin relaxation in  $\text{N}_2$  and He buffer gases, *Physics Letters A*, 1985, vol. 112, no. 3–4, pp. 141–145.
  25. **Wu, Z., Schaefer, S., Cates, G.D., Happer, W.**, Coherent interactions of the polarized nuclear spins of gaseous atoms with the container walls, *Phys. Rev. A*, 1988, vol. 37, no. 4, pp. 1161–1175.
  26. **Wu, Z., Happer, W., Kitano, M., Daniels, J.**, Experimental studies of wall interactions of adsorbed spin-polarized  $^{131}\text{Xe}$  nuclei, *Phys. Rev. A*, 1990, vol. 42, no. 5, pp. 2774–2784.
  27. **Несмеянов А.Н.** Давление пара химических элементов. Москва: Издательство Академии Наук СССР, 1961. 396 с.
  28. **Вершовский А.К., Пазгалёв А.С.** Оптимизация фактора качества магнитного Мх-резонанса в условиях оптической накачки // ЖТФ. 2007. № 5. С. 116–124.
  29. **Seltzer, S.J.**, Developments in Alkali-Metal Atomic Magnetometry: Ph.D. Thesis. Princeton, NJ, USA: Princeton University, 2008. 312 p.

**Vershovskii, A.K.** (Ioffe Institute, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg), **Petrov, V.I.** (Concern CSRI Elektropribor, JSC, St. Petersburg)

Modeling of the Dimensional Dependence of NMR Isotope Shift in Xenon, *Giroskopiya i Navigatsiya*, 2020, vol. 28, no. 2 (109), pp. 11–24.

**Abstract.** Reduction of optical quantum sensors in size, including nuclear magnetic resonance (NMR) gyroscopes, implies primarily downsizing of the working gas cell. This paper considers the dependence of isotope shift in the balanced scheme based on NMR in xenon isotopes on the dimensions of the gas cell. With this aim in view, an experimental and theoretical studies of the factors affecting the relaxation rate of xenon isotopes have been carried out. The proposed numerical model allows predicting the magnitude of the isotope shift for cells of various sizes with variations in their basic parameters, namely, temperature and pressure of the gas mixture. Based on the results of the numerical simulation, recommendations are given for optimizing the basic parameters of the gas cell by changing its dimensions.

**Key words:** nuclear magnetic gyroscope, nuclear magnetic resonance, optical pumping, spin exchange, Fermi contact amplification, isotope shift, small-size cell.

Материал поступил 22.04.2020