

付録 H アルカリ原子の超微細構造とゼーマン分裂

H.1 アルカリ原子の微細構造および超微細構造

一般に、原子の全電子スピン \mathbf{S} と全軌道角運動量 \mathbf{L} との間には、スピン-軌道相互作用

$$\hat{H}_{fs} = \xi(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \quad (\text{H.1})$$

が存在する。係数 ξ は、アルカリ原子の P 軌道の場合正であることが知られている。ここで、 \mathbf{S} と \mathbf{L} を結合した角運動量演算子 $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$ を考えると、相互作用ハミルトニアンは、

$$\hat{H}_{fs} = \xi \frac{\mathbf{J}^2 - \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2}{2} \quad (\text{H.2})$$

と表せる。このハミルトニアンは \mathbf{J}^2 および J_z と交換するので、 \mathbf{J}^2 および J_z の固有状態 $|J, M\rangle$ は \hat{H}_{fs} の固有状態になっている。 P 軌道 ($L=1, S=1/2$) の場合、 \mathbf{J} の大きさ J は、 $J=1/2$ ($P_{1/2}$)、 $J=3/2$ ($P_{3/2}$) の 2 種類があり*、それぞれの相互作用エネルギーは

$$\begin{aligned} \langle J, M | \hat{H}_{fs} | J, M \rangle &= \frac{\xi \hbar^2}{2} [J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)] \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2} \hbar^2 \xi & (P_{3/2}) \\ -\hbar^2 \xi & (P_{1/2}) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{H.3})$$

となる。この P 状態のエネルギー準位の分裂は**微細構造**と呼ばれる。 $S_{1/2}$ 状態 ($S=1/2, L=0, J=1/2$) には微細構造はない。

アルカリ原子は必ず核スピンを持ち、この核スピン \mathbf{I} と電子系の合成スピン \mathbf{J} との間には核スピン-電子スピン相互作用

$$\hat{H}_{hfs} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + B \frac{6(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + 3\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} - 2I(I+1)J(J+1)}{2I(I-1)2J(J-1)} \quad (\text{H.4})$$

* 角運動量合成の一般則：角運動量演算子 $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ を合成した新しい演算子 $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ も角運動量の演算子としての性質を満たし、その大きさ J として許される値は $J = |J_1 - J_2|, \dots, J_1 + J_2$.

が存在する[108] . A は磁気双極子結合定数、 B は電気四重極子結合定数 (付録 L) である . $S_{1/2}$ 状態の場合、 $B=0$ である . ここで先程と同様、 I と J を結合した全角運動量演算子 $F = I+J$ と、その固有状態 $|F, m_F\rangle$ ($F = |I-J|, \dots, I+J$ 、 $m_F = -F, \dots, 0, \dots, F$) を考えると、状態 $|F, m_F\rangle$ の相互作用エネルギーは、

$$\langle F, m_F | \hat{H}_{\text{hfs}} | F, m_F \rangle = AK + B \frac{6K^2 + 3K - 2I(I+1)J(J+1)}{2I(I-1)2J(J-1)} \quad (\text{H.5})$$

ただし

$$K = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (\text{H.6})$$

と表される . このエネルギー準位の分裂は**超微細構造**と呼ばれる . ^{87}Rb 原子 ($I=3/2$) の微細構造、及び超微細構造分裂の様子を図 H.1(a) に示す .

H.2 超微細構造のゼーマン分裂

z 方向の磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ が存在する場合の超微細構造ハミルトニアンは、 J が良い量子数である場合 (ゼーマンエネルギーが微細構造のエネルギー間隔に比べ十分小さい場合)

$$\hat{H}_{\text{hfs}} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + B \frac{6(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + 3\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} - 2I(I+1)J(J+1)}{2I(I-1)2J(J-1)} + \mu_B (g_J J_z + g_I) B_z \quad (\text{H.7})$$

と表される[108] . ここで $\mu_B \equiv e\hbar/2m_e c$ (1.39962 [MHz/G]) はボーア磁子、 g_I は核スピンの I の g 因子である* . g_J は電子系の全スピン J の g 因子で

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (\text{H.8})$$

と表される[109] . $S_{1/2}$ 状態なら $g_J=2$ 、 $P_{3/2}$ 状態なら $g_J=4/3$ である . ゼーマンエネルギーの項の存在により \hat{H}_{hfs} はもはや F と交換しないので、 F の固有状態 $|F, m_F\rangle$ は \hat{H}_{hfs} の固有状態ではない . \hat{H}_{hfs} の固有状態を求めるには、 I と J の固有状態の直積 $|I, m_I\rangle \otimes |J, m_J\rangle$ を基底にして \hat{H}_{hfs} を再び対角化しなくてはならない . はしご演算子 $I_{\pm} = I_x \pm iI_y$ 、

* g_I は核種に依存するが 10^{-3} のオーダーの値を持つ . よって、パッシェンバック効果の起こらないような弱い磁場強度におけるゼーマン分裂を考える場合、通常無視できる

† はしご演算子の性質 : $J_{\pm} |J, M\rangle = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} |J, M \pm 1\rangle$

$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ を用いると、 $I \cdot J = (I_+ J_- + I_- J_+)/2 + I_z J_z$ と表せるので、 \hat{H}_{hfs} は $m_F = m_I + m_J$ の値を変えない。よって、対角化は $m_F = m_I + m_J$ が同じ状態間で行えばよい。 $S_{1/2}$ 状態と $P_{1/2}$ 状態の場合、 m_J は $1/2$ と $-1/2$ の二通りしかないので、 2×2 行列の固有値問題に帰着する。 $P_{3/2}$ 状態の場合、 $I=1/2$ なら 2×2 行列、 $I>1/2$ でも (m_J は四通りのみなので) 4×4 行列の固有値問題に帰着する。 ^{87}Rb 原子 $S_{1/2}$ 状態の場合についてゼーマンシフトを計算した結果を図 H.1 (b) に示す。一般に、磁場が小さいとき各磁気副準位は線形にゼーマンシフトする。このときの各磁気副準位のエネルギーシフトは

$$\Delta E = g_F \mu_B m_F B \tag{H.9}$$

と表せる。ここで、

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \tag{H.10}$$

は磁場が小さいときのみ有効な全角運動量 F の g 因子である[109]。 ^{87}Rb : $S_{1/2}$ 状態の場合、 $F=1$ 、 $F=2$ それぞれの g 因子は $g_F = 1/2, +1/2$ であり、大きさは同じだが符号が異なる。磁場を大きくしていくと I と J の結合が崩れ、ゼーマンシフトが線形的でなくなる。(パッシェンバック効果)。

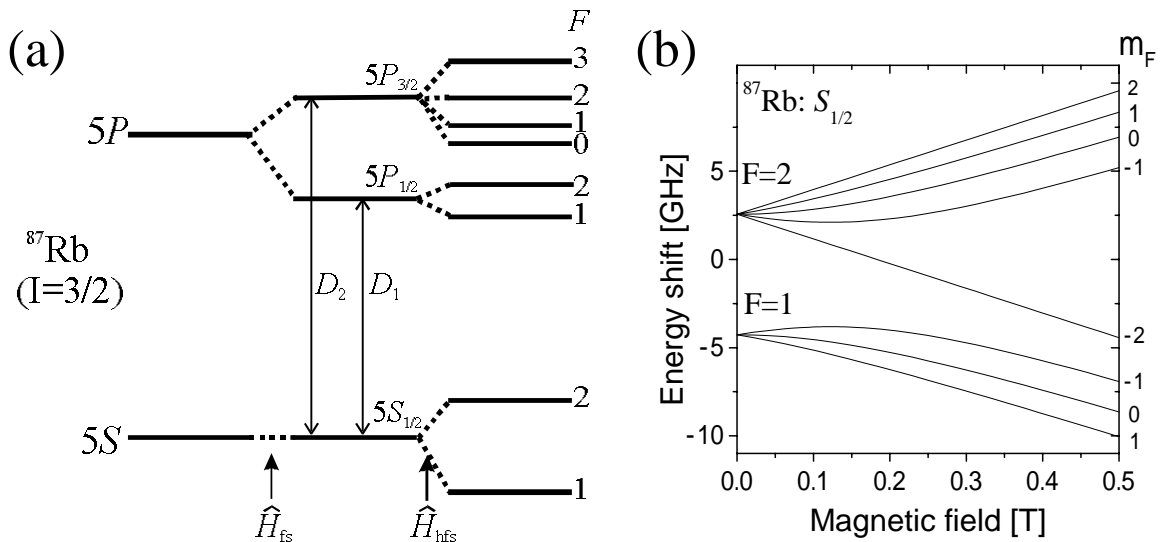


図 H.1 (a) ^{87}Rb 原子の微細構造および超微細構造。(b) ^{87}Rb : $S_{1/2}$ 状態ゼーマン分裂。磁場が 0.05T 以下では、各磁気副準位はほぼ線形にゼーマンシフトする。このときの $F=2$ 、 $F=1$ それぞれの g 因子は $1/2, -1/2$ 。

