

${}^6\text{Li}$ 原子の超微細構造

A. Tamii

ver 1.1 22-NOV-2004

1 序

ここでは、中性 ${}^6\text{Li}^{3+}$ 原子の超微細構造 (hyper-fine structure) に関して概説する。対象となるのは、 $2S_{1/2}F_{1/2,3/2}$ および $2P_{1/2}F_{1/2,3/2}$ の各状態である。

なお ${}^6\text{Li}$ 原子核のスピンは 1 である。

2 Hyperfine Structure

2.1 相互作用

対象となっている状態に関しては、最外殻電子と核の間の相互作用の内、1 次の磁気双極子相互作用、および外部一様磁場 (H) に対する最外殻電子と核の相互作用のみを考慮すれば良い¹。

相互作用は下記の様に表わされる。

$$H_{\text{hfs}} = hA\vec{I} \cdot \vec{J} + (g_J J_z \mu_B + g_I I_z \mu_N) B_z \quad (1)$$

ここで、 \vec{J} は電子の全角運動量ベクトル、 \vec{I} は核のスピンベクトル、 A は超微細構造相互作用係数、 g_J は電子の全角運動量の g 因子で、 $g_I = +0.822$ は原子核の g 因子である。それぞれボーア磁子 $\mu_B = 5.79 \times 10^{-11}$ MeV/T および核磁子 $\mu_N = 3.15 \times 10^{-14}$ MeV/T の係数としている²。 B は外部磁場で、磁場と逆方向に z 軸にとっている。

2.2 Hyperfine Splitting

低磁場中では、電子の全角運動量 J および 核スピン I は良い量子数ではなく、原子の全角運動量 F

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \quad (2)$$

が良い量子数となる。

hyperfine splitting はゼロ磁場中での 2 つの F の軌道のエネルギー差として定義される。

¹ 原子核のスピンが $I \geq 1$ であるため、 $J \geq 1$ の状態、例えば $2P_{3/2}$ 状態に対しては 2 次の電気 4 重極相互作用が関与する。

² 参考文献 [1] では、 g_I をボーア磁子の係数として定義しており、原子物理ではこの方が一般的である。また、[1] では、核の g 因子を原子核の磁気モーメント μ_I と逆符号にとる定義となっており注意が必要 ([1] pp. 33 脚注)。

表 1: ${}^6\text{Li}$ 原子の各レベルの A 値、 g_J の実験値 (参考文献 [1] より)、および hyperfine splitting ($\Delta W/h$)、臨界磁場 (B_c) の計算値。

軌道	A [MHz]	$\Delta W/h$ [MHz]	g_J	B_c [Gauss]
$2S_{1/2}$	152.1368407(20)	228.2052611(30)	2.0023010(7)	81.5
$2P_{1/2}$	17.375(18)	26.063(27)	0.6668(20)	27.9

hyperfine 相互作用によるエネルギーシフトは式 (1) より、

$$\begin{aligned} W_{\text{hf}} &= hA\vec{I} \cdot \vec{J} \\ &= \frac{1}{2}hAK \end{aligned} \quad (3)$$

$$K \equiv F(F+1) - J(J+1) - I(I+1) \quad (4)$$

であるから、hyperfine splitting ΔW は、 $2S_{1/2}$ 軌道、 $2P_{1/2}$ 軌道の場合で同じく

$$\Delta W = \frac{1}{2}hA\{1 - (-2)\} = \frac{3}{2}hA \quad (5)$$

となる。但し A の値は軌道によって異なる。

A の値は、 $l=0$ の s 軌道電子に関しては下記の接触相互作用によって表わされる [1]。

$$A = \frac{1}{h} \frac{16\pi}{3} \frac{\mu_0}{4\pi} \mu_B g_I \mu_N |\Psi_s(0)|^2 \quad \text{for } l=0 \quad (6)$$

μ_0 は真空の透磁率、 $\Psi_s(0)$ は、核の位置における電子の波動関数である。

$l > 0$ の場合には、電子の軌道運動および磁気モーメントと原子核の磁気双極子相互作用によって表わされ、

$$A = -\frac{1}{h} \frac{\mu_0}{4\pi} \mu_B \frac{2l(l+1)}{J(J+1)} g_I \mu_N \langle r^{-3} \rangle_{nl} \quad \text{for } l > 0 \quad (7)$$

となる。 $\langle r^{-3} \rangle$ は最外殻電子の波動関数に関する r^{-3} の平均値である。

殻中の電子による遮蔽の効果があり電子軌道の計算は容易ではないが、実験値が存在する。表 1 に、各軌道の A の値の実験値を掲げる。

2.3 低磁場中での hyperfine 準位

低磁場中では、原子の全角運動量 F が良い量子数である。 m_I と m_J による基底をとると、Hamiltonian の非対角項が大きく、エネルギー固有状態は複数の基底の混合状態となる。

F, m_F による基底をとると、磁場中での hyperfine 準位のエネルギーシフト ΔE は m_F に比例し、下記の様に表わされる。

$$\Delta E = g_F \mu_B m_F B \quad (8)$$

g_F は原子の g 因子で、下記の式から計算できる [2]。

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{\mu_N}{\mu_B} \frac{F(F+1) - J(J+1) + I(I+1)}{2F(F+1)} \quad (9)$$

表 2: 各 hyperfine 準位の g 因子の計算値と低磁場中でのエネルギーシフト

state	g_J	g_F	$\frac{\Delta E}{m_F B}$ [MHz/Gauss]
$2S_{1/2}, F=1/2$	2	-0.666	-0.933
$2S_{1/2}, F=3/2$	2	+0.666	+0.933
$2P_{1/2}, F=1/2$	2/3	-0.222	-0.311
$2P_{1/2}, F=3/2$	2/3	+0.222	+0.311

$$\begin{aligned}
g_J &= g_L \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)} + g_S \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \\
&= 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \\
&\quad (g_L = 1, g_S = 2.00)
\end{aligned} \tag{10}$$

g_J の計算式は Landé の式と呼ばれる [3]。 g_J に関する実験値を表 1 に記載するが、実用上は式 (10) の計算値と十分一致している。

各 hyperfine 準位に関する g_F の計算値を表 2 に掲げる。

2.4 高磁場中での hyperfine 準位

高磁場中では電子の全角運動量は外磁場の周りを歳差運動すると近似して良い。一方、Li 程度の原子では、原子核の感じる磁場の大きさは外磁場に比べて電子が生成する磁場の方が大きいため、原子核のスピンは電子の磁気モーメントの周り即ち電子の全角運動量の周りを歳差運動する。ただし、電子の全角運動量は原子核のスピンの歳差運動に比べて速い周期で外部磁場の周りを回転しているため、実質的には、原子核の歳差運動も外部磁場の周りで回転していると見做してよい。

したがって、 m_I と m_J がそれぞれ良い量子数となる。この脱結合の目安となる磁場を臨界磁場 B_c と呼ぶ。

m_I, m_J による基底をとると、磁場中での hyperfine 準位のエネルギーシフト ΔE は下記の式で表わされる。

$$\Delta E = hA m_I m_J + g_J \mu_B m_J B \tag{11}$$

2.5 磁場中での hyperfine 準位の計算

中間状態を含めた低磁場から高磁場までの hyperfine 準位のエネルギー変化および波動関数の変化は、以下の手続きによって計算することができる。

式 (1) を下記の形式に書き直すことができる。

$$H_{\text{hfs}} = hA I_z J_z + h \frac{A}{2} (I_+ J_- + I_- J_+) + (g_J J_z \mu_B + g_I I_z \mu_N) B_z \tag{12}$$

$$I_{\pm} \equiv I_x \pm iI_y \tag{13}$$

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y \tag{14}$$

I_z 、 J_z に関する固有状態 $|m_I m_J\rangle$ をとり、下記の順序でラベル付けする。

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & +1 & +\frac{1}{2} & \rangle \\ | & 0 & +\frac{1}{2} & \rangle \\ | & -1 & +\frac{1}{2} & \rangle \\ | & -1 & -\frac{1}{2} & \rangle \\ | & 0 & -\frac{1}{2} & \rangle \\ | & +1 & -\frac{1}{2} & \rangle \end{pmatrix} \quad (15)$$

式の簡略化の為、下記の変数を導入すると、

$$\alpha \equiv hA \quad (16)$$

$$\beta \equiv g_I \mu_N Bz \quad (17)$$

$$\gamma \equiv g_J \mu_B Bz \quad (18)$$

$$x \equiv \frac{\gamma - \beta}{\Delta W} = \frac{2\gamma - \beta}{3\alpha} \quad (19)$$

式 (12) の Hamiltonian は以下のような行列式で表わされる。

$$H_{\text{hfs}} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{2} + \beta + \frac{\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\frac{\alpha}{2} - \beta + \frac{\gamma}{2} & 0 & \frac{\alpha}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\alpha}{2} - \beta - \frac{\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\alpha}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{\gamma}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\alpha}{2} + \beta - \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \quad (20)$$

磁場中の固有状態を求めることは、下記の永年方程式を解くことに帰着する。

$$H_{\text{hfs}} \Psi = E \Psi \quad (21)$$

最終的に下記の固有状態と固有値 (エネルギー) が得られる。

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \phi_1 \\ \Psi_2 &= \left\{ \left(+1 + 3x - 3\sqrt{1 + \frac{2}{3}x + x^2} \right)^2 + 8 \right\}^{-\frac{1}{2}} \left\{ 2\sqrt{2}\phi_2 + \left(+1 + 3x - 3\sqrt{1 + \frac{3}{2}x + x^2} \right) \phi_6 \right\} \\ \Psi_3 &= \left\{ \left(-1 + 3x - 3\sqrt{1 - \frac{2}{3}x + x^2} \right)^2 + 8 \right\}^{-\frac{1}{2}} \left\{ 2\sqrt{2}\phi_2 + \left(-1 + 3x - 3\sqrt{1 - \frac{3}{2}x + x^2} \right) \phi_6 \right\} \\ \Psi_4 &= \phi_4 \\ \Psi_5 &= \left\{ \left(-1 + 3x + 3\sqrt{1 - \frac{2}{3}x + x^2} \right)^2 + 8 \right\}^{-\frac{1}{2}} \left\{ 2\sqrt{2}\phi_2 + \left(-1 + 3x + 3\sqrt{1 - \frac{3}{2}x + x^2} \right) \phi_6 \right\} \\ \Psi_6 &= \left\{ \left(+1 + 3x + 3\sqrt{1 + \frac{2}{3}x + x^2} \right)^2 + 8 \right\}^{-\frac{1}{2}} \left\{ 2\sqrt{2}\phi_2 + \left(+1 + 3x + 3\sqrt{1 + \frac{3}{2}x + x^2} \right) \phi_6 \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

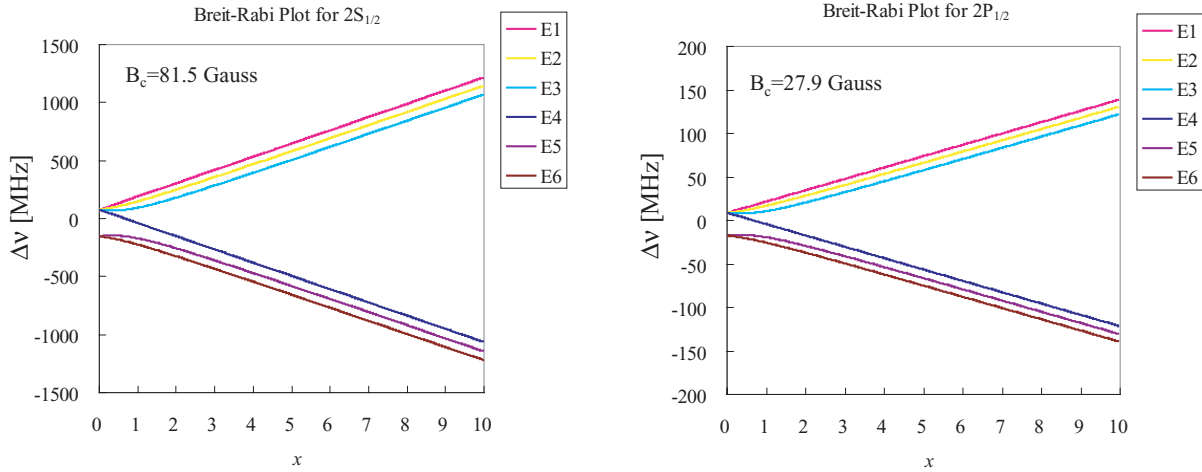


図 1: hyperfine 準位エネルギーの磁場に対する変化 (Breit-Rabi 図)。横軸に外部磁場の臨界磁場に対する比 (x)、縦軸にエネルギー変化をとる。左は $2S_{1/2}$ 状態についてのプロット、右は $2P_{1/2}$ 状態についてのプロット。

	at $x \ll 1$	at $x \gg 1$
$E_1 = +\frac{\alpha}{2} + \frac{3}{4}\alpha x + \frac{3}{2}\beta$	$\simeq +\frac{3}{4}\alpha x + \frac{\alpha}{2}$	$\simeq +\frac{3}{4}\alpha x + \frac{\alpha}{2}$
$E_2 = -\frac{\alpha}{4} + \frac{3}{4}\alpha\sqrt{1 + \frac{2}{3}x + x^2} + \frac{1}{2}\beta$	$\simeq +\frac{1}{4}\alpha x + \frac{\alpha}{2}$	$\simeq +\frac{3}{4}\alpha x$
$E_3 = -\frac{\alpha}{4} + \frac{3}{4}\alpha\sqrt{1 - \frac{2}{3}x + x^2} - \frac{1}{2}\beta$	$\simeq -\frac{1}{4}\alpha x + \frac{\alpha}{2}$	$\simeq +\frac{3}{4}\alpha x - \frac{\alpha}{2}$
$E_4 = +\frac{\alpha}{2} - \frac{3}{4}\alpha x - \frac{3}{2}\beta$	$\simeq -\frac{3}{4}\alpha x + \frac{\alpha}{2}$	$\simeq -\frac{3}{4}\alpha x + \frac{\alpha}{2}$
$E_5 = -\frac{\alpha}{4} - \frac{3}{4}\alpha\sqrt{1 - \frac{2}{3}x + x^2} - \frac{1}{2}\beta$	$\simeq +\frac{1}{4}\alpha x - \alpha$	$\simeq -\frac{3}{4}\alpha x$
$E_6 = -\frac{\alpha}{4} - \frac{3}{4}\alpha\sqrt{1 + \frac{2}{3}x + x^2} + \frac{1}{2}\beta$	$\simeq -\frac{1}{4}\alpha x - \alpha$	$\simeq -\frac{3}{4}\alpha x - \frac{\alpha}{2}$

(23)

リチウム原子の場合、 β の項は他の項に比較して十分小さい為、無視しても構わない。臨界磁場 B_c は、 $x=1$ となる磁場で定義される。

$$B_c \equiv \frac{3}{2} \frac{hA}{g_J \mu_B - g_I \mu_N} \quad (24)$$

臨界磁場 B_c の計算値を表 1 に記載する³。

各 hyperfine 準位のエネルギーシフトの x 依存性を図 1 にプロットする (Breit-Rabi 図)。

2.6 まとめ

⁶Li 原子の hyperfine 準位に関して得られた情報を図 2 にまとめる。

³ $2S_{1/2}$ に対する B_c 値は、Heidelberg の論文 [4] の記述 8.2mT に一致。低磁場での準位のエネルギー変化は、FSU の PhD Thesis[5] の Breit-Rabi 図 (pp. 44) に一致。

Hyperfine Structure of the ${}^6\text{Li}$ atom

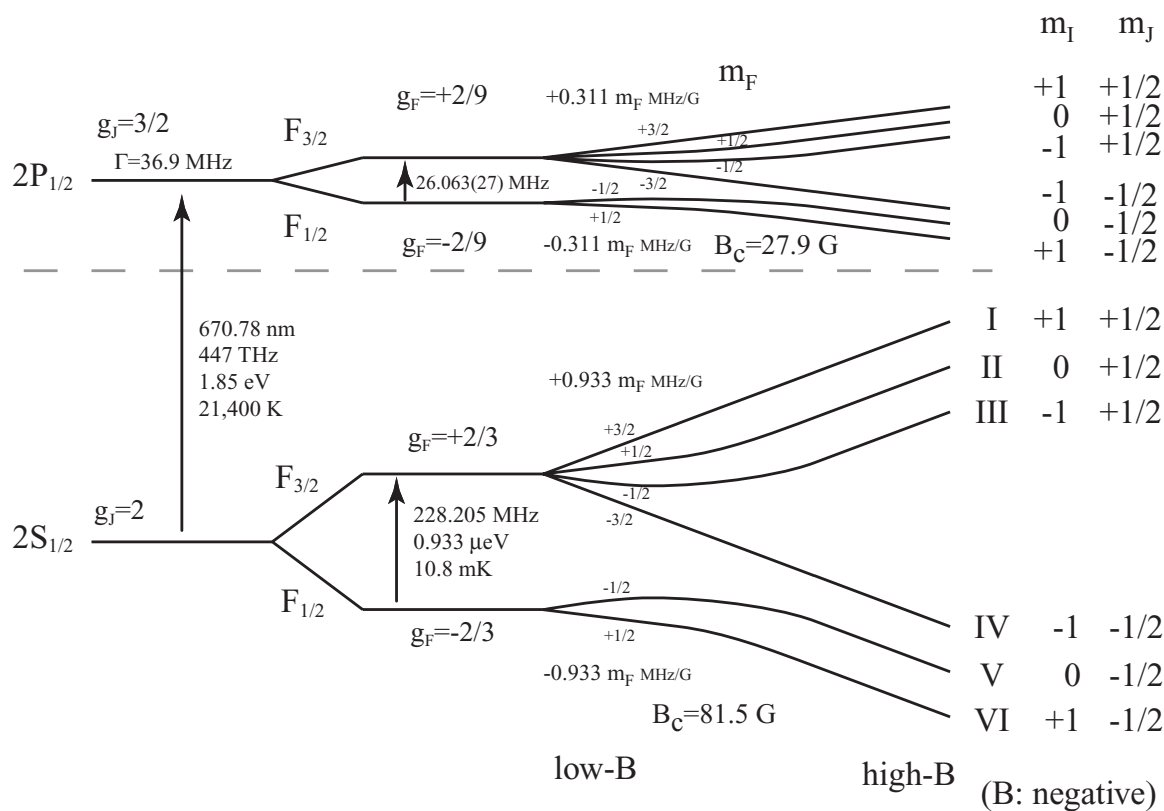


図 2: ${}^6\text{Li}$ 原子の hyperfine 準位。

参考文献

- [1] E. Arimondo *et al.*, Rev. Mod. Phys. **49** (1977)31.
- [2] 久保、鹿取、「スピンと偏極」、培風館、1994.
- [3] 白土、「原子物理学II」、日本理工出版会、1984.
- [4] E. Steffens *et al.*, Nucl. Instru. and Methods. in Phys. Res. **143** (1977) 409, pp. 412.
- [5] A.J. Mendez, Phd Thesis, Florida State Univ., 1993, unpublished.