

超微細構造のゼーマン分裂の計算方法

Ver.1(2020/7/15)大阪市立大学レーザー量子物理学教室 堀越

Ver.1.1(2020/10/5)大阪市立大学レーザー量子物理学教室 堀越

Ver.2.0(2021/8/30)大阪市立大学レーザー量子物理学教室 堀越

Ver.2.1(2021/9/24)大阪市立大学レーザー量子物理学教室 堀越

目的

Breit-Rabi の式が使えないアルカリ原子超微細構造のゼーマンシフトの計算方法を紹介する。

電子の全角運動量を \mathbf{J} 、核スピンを \mathbf{I} とし、これらの合成角運動量を

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I} \quad (1)$$

とする。 \mathbf{J} と \mathbf{I} が結合している基底を、

$$|(J, I) F, m_F\rangle \quad (2)$$

で表す。この基底は $\{J^2, I^2, F^2, F_z\}$ の角運動量演算子に対し同時固有状態である。

超微細相互作用ハミルトニアンは[1]、

$$H_{\text{hfs}} = A_{\text{hfs}}(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}) + B_{\text{hfs}} \frac{3(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + \frac{3}{2}(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)} + C_{\text{hfs}} \frac{10(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^3 + 20(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + 2(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})[-3I(I+1)J(J+1) + I(I+1) + J(J+1) + 3] - 5I(I+1)J(J+1)}{I(I-1)(2I-1)J(J-1)(2J-1)} \quad (3)$$

であり、磁気双極子相互作用ハミルトニアンは、

$$H_{\text{mag}} = -\boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{B} - \boldsymbol{\mu}_I \cdot \mathbf{B} = g_J \mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} + g_I \mu_B \mathbf{I} \cdot \mathbf{B} \quad (4)$$

である。ボーア磁子は、 $\mu_B = 1.39962449361$ MHz/Gauss。ここでは磁場はz軸に沿って与えられているとする。この二つの相互作用ハミルトニアンの和、

$$H = H_{\text{hfs}} + H_{\text{mag}} \quad (5)$$

を $|(J, I) F, m_F\rangle$ 基底で対角化し、任意の磁場中での超微細構造の固有値を計算する。ここで A_{hfs} は磁気双極子定数 ($I, J > 0$ の場合有効)、 B_{hfs} は電気四重極定数 ($I, J > 1/2$ の場合有効)、 C_{hfs} は磁気八重極定数 ($I, J > 1$ の場合有効) である。

計算方法

(3)式のハミルトニアンの行列要素は Wigner 3-j, 6-j シンボルを用いて以下の関数、

$$X_k(I, J, F) = (-1)^{J+I+F} \frac{\begin{Bmatrix} F & J & I \\ k & I & J \end{Bmatrix}}{\begin{pmatrix} J & k & J \\ -J & 0 & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & k & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \quad (6)$$

を定義すると、

$$H_{\text{hfs}}(F, m_F, F', m'_F) \equiv \langle (J, I) F, m_F | H_{\text{hfs}} | (J, I) F', m'_F \rangle = \left(A_{\text{hfs}} I J X_1 + \frac{B_{\text{hfs}}}{4} X_2 + C_{\text{hfs}} X_3 \right) \delta_{FF'} \delta_{m_F m'_F} \quad (7)$$

となる[2]。

(4)式のハミルトニアン of 行列要素は Wigner-Eckart 定理を用いると、

$$\begin{aligned}
 H_{\text{mag}}(F, m_F, F', m'_F, B) &= \mu_B B \langle (J, I) F, m_F | (g_J I_{q=0}^{(k=1)} + g_I I_{q=0}^{(k=1)}) | (J, I) F', m'_F \rangle \\
 &= \mu_B B (-1)^{F-m_F+J+I+1} \sqrt{(2F+1)(2F'+1)} \begin{pmatrix} F & 1 & F' \\ -m_F & 0 & m'_F \end{pmatrix} \\
 &\times \left[g_J (-1)^{F'} \sqrt{J(J+1)(2J+1)} \begin{Bmatrix} J & 1 & J \\ F' & I & F \end{Bmatrix} + g_I (-1)^F \sqrt{I(I+1)(2I+1)} \begin{Bmatrix} I & 1 & I \\ F' & J & F \end{Bmatrix} \right] \delta_{m_F m'_F} \quad (8)
 \end{aligned}$$

となる。 $J_0^{(1)}$ と $I_0^{(1)}$ は量子化軸に対する磁気量子数を変化させないため、

$$m_F = m'_F \quad (9)$$

を満たす準位間でのみ行列要素が存在している。(8)式の赤字で書いた箇所は間違いやすいので要注意。論文によっては両者が同じ量子数になっており、その場合 Breit-Rabi の式の計算結果とずれてしまいます。

以上より任意の磁場における行列要素は(7),(8)式より、

$$H(F, m_F, F', m'_F) = H_{\text{hfs}}(F, m_F, F', m'_F) + H_{\text{mag}}(F, m_F, F', m'_F, B) \quad (10)$$

で与えられ、この固有値を数値的に計算すればよい。計算結果は、 $J=1/2$ の場合 Breit-Rabi の式による計算結果と一致する。

計算結果の例(サンプルプログラムを実行)

セシウム 133 原子、 $6^2P_{3/2}$ 状態の場合

(左図の黒線が全ての m_F 成分、緑点線が弱磁場極限の(33)式、赤点線が強磁場極限の(38)式。右図がそれぞれの m_F 成分ごとの様子で、非対角項による準位間の反発が見えている)

$$J = 3/2;$$

$$I = 7/2;$$

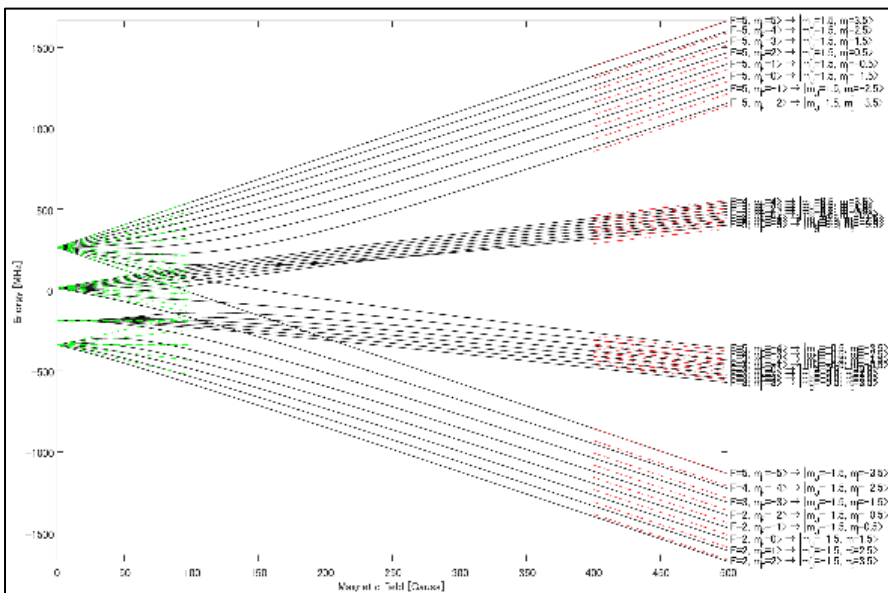
$$g_J = 1.334;$$

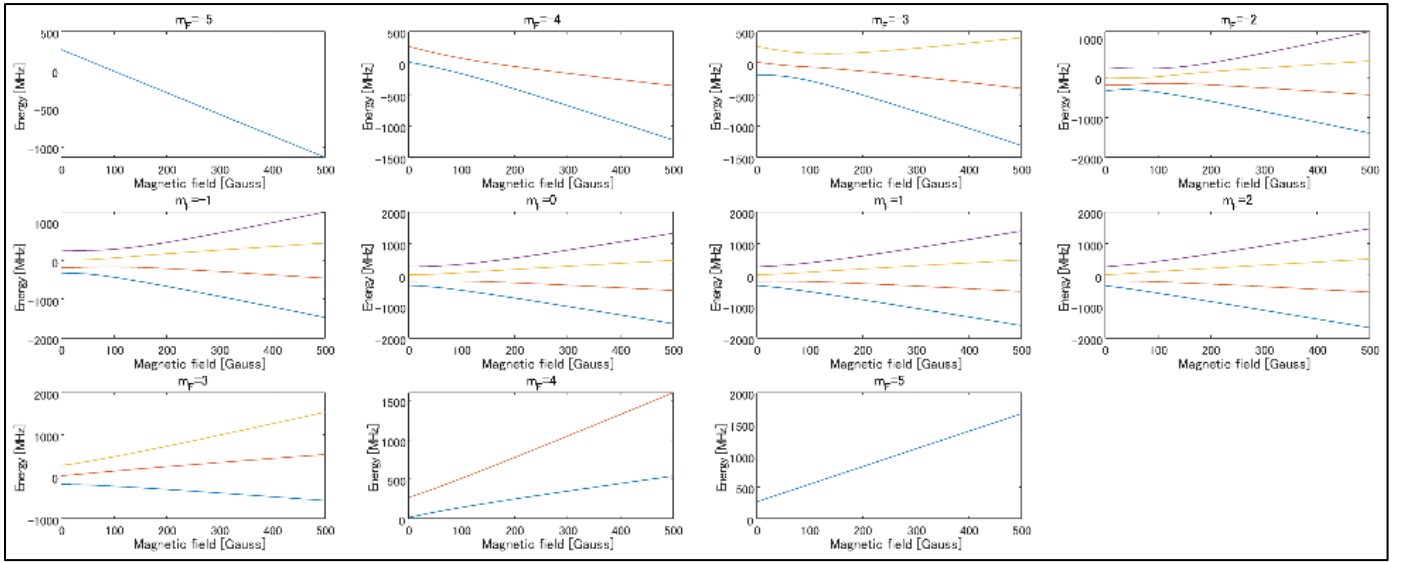
$$g_I = -0.00039885395;$$

$$A_{\text{hfs}} = 50.28827; [\text{MHz}]$$

$$B_{\text{hfs}} = -0.4934; [\text{MHz}]$$

$$C_{\text{hfs}} = 0.560 * 10^{-3}; [\text{MHz}]$$





補足 1 : 角運動量演算子、Wigner-Eckart 定理、Wigner 3-j, 6-j シンボル

ここでは一般的な合成角運動量を $J = J_1 + J_2$ とし $|J_1 J_2 J m\rangle = |J m\rangle$ 基底を考える。 $\mathbf{T}_q^{(k)}$ と $\mathbf{U}_q^{(k)}$ はそれぞれ J_1 か J_2 のみに作用するランク k 、磁気量子数 q の非換算テンソル演算子とする。丸括弧と中括弧はそれぞれ Wigner 3-j, 6-j シンボルである。以下では $\hbar = 1$ としている。

基本的な角運動量演算子：

$$J^2 |J m\rangle = J(J+1) |J m\rangle \quad (11)$$

$$J_z |J m\rangle = m |J m\rangle \quad (12)$$

$$J_{\pm} = j_x \pm i j_y \quad (13)$$

$$J_{\pm} |J m\rangle = \sqrt{J(J+1) - m(m \pm 1)} |J m \pm 1\rangle \quad (14)$$

Wigner-Eckart 定理：

$$\langle J m | \mathbf{X}_q^{(k)} | J' m' \rangle = (-1)^{J-m} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle J || \mathbf{X}^{(k)} || J' \rangle, \mathbf{X} = \mathbf{T} \text{ or } \mathbf{U} \quad (15)$$

$$\langle J || \mathbf{J}^{(1)} || J' \rangle = \sqrt{J(J+1)(2J+1)} \delta_{JJ'} \quad (16)$$

$$\langle (J_1 J_2) J || \mathbf{T}^{(k)} || (J'_1 J'_2) J' \rangle = (-1)^{J'+J_1+J_2+k} \sqrt{(2J'+1)(2J+1)} \begin{Bmatrix} J'_1 & k & J'_2 \\ J_1 & & J_2 \end{Bmatrix} \langle J_1 || \mathbf{T}^{(k)} || J'_1 \rangle \delta_{J_2 J'_2} \quad (17)$$

$$\langle (J_1 J_2) J || \mathbf{U}^{(k)} || (J'_1 J'_2) J' \rangle = (-1)^{J'+J_1+J_2+k} \sqrt{(2J'+1)(2J+1)} \begin{Bmatrix} J'_2 & k & J'_1 \\ J_2 & & J_1 \end{Bmatrix} \langle J_2 || \mathbf{U}^{(k)} || J'_2 \rangle \delta_{J_1 J'_1} \quad (18)$$

(17)式と(18)式の赤で示した箇所が、(8)式の赤で示した箇所の起源である。

非換算テンソル演算子のエルミート共役：

$$\mathbf{T}_q^{(k)\dagger} = (-1)^{-q} \mathbf{T}_q^{(k)} \quad (19)$$

Wigner 3-j シンボルは偶数回の列を入れ替えは不変であり、奇数回の入れ替えは位相因子が付く。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} J_2 & J & J_1 \\ m_2 & m & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & J_1 & J_2 \\ m & m_1 & m_2 \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J_2 & J_1 & J \\ m_2 & m_1 & m \end{pmatrix} = (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J_1 & J & J_2 \\ m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J & J_2 & J_1 \\ m & m_2 & m_1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (20)$$

当然、

$$(-1)^{J_1+J_2+J} = (-1)^{-(J_1+J_2+J)} \quad (21)$$

である。

さらに磁気量子数の符号の変化に対して以下の関係がある。

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ -m_1 & -m_2 & -m \end{pmatrix} \quad (22)$$

Wigner 6-j シンボルは列を入れ替えても不変である。

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_2 & J_3 & J_1 \\ J_5 & J_6 & J_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_3 & J_1 & J_2 \\ J_6 & J_4 & J_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_2 & J_1 & J_3 \\ J_5 & J_4 & J_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_1 & J_3 & J_2 \\ J_4 & J_6 & J_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_3 & J_2 & J_1 \\ J_6 & J_5 & J_4 \end{Bmatrix} \quad (23)$$

さらに2つの行を入れ替えに対しても不変である。

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_1 & J_5 & J_6 \\ J_4 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} \quad (24)$$

今回は以下の関係式を用いている [3]

$$\begin{pmatrix} J & J & 1 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} = (-1)^{J-m} \frac{m}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \quad (25)$$

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ 1 & J_3 & J_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_3 & 1 & J_3 \\ J_2 & J_1 & J_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{J_1+J_2+J_3} \frac{J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1) - J_3(J_3+1)}{2\sqrt{J_2(J_2+1)(2J_2+1)J_3(J_3+1)(2J_3+1)}} \quad (26)$$

補足 2：磁気双極子相互作用ハミルトニアン of 行列要素 (弱磁場極限)

(8)式の対角成分は、

$$\begin{pmatrix} F & 1 & F \\ -m_F & 0 & m_F \end{pmatrix} = (-1)^{F-m_F} \frac{m_F}{\sqrt{F(F+1)(2F+1)}} \quad (27)$$

$$\begin{Bmatrix} J & 1 & J \\ F & I & F \end{Bmatrix} = (-1)^{J+I+F} \frac{I(I+1) - F(F+1) - J(J+1)}{2\sqrt{F(F+1)(2F+1)J(J+1)(2J+1)}} \quad (28)$$

$$\begin{Bmatrix} I & 1 & I \\ F & J & F \end{Bmatrix} = (-1)^{J+I+F} \frac{J(J+1) - F(F+1) - I(I+1)}{2\sqrt{F(F+1)(2F+1)I(I+1)(2I+1)}} \quad (29)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \langle (J, I) F, m_F | H_{\text{mag}} | (J, I) F, m_F \rangle &= \mu_B B m_F \left(g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{F(F+1) - J(J+1) + I(I+1)}{2F(F+1)} \right) \\ &= \mu_B g_F m_F B \end{aligned} \quad (30)$$

となる。ここで、

$$g_F(J, I, F) \equiv g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{F(F+1) - J(J+1) + I(I+1)}{2F(F+1)} \quad (31)$$

と定義した。

別の方法として、

$$\begin{aligned} \langle F, m_F | \mu_B g_J \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} + \mu_B g_I \mathbf{I} \cdot \mathbf{B} | F, m_F \rangle &= \langle F, m_F | \mu_B g_J \frac{(\mathbf{J} \cdot \mathbf{F})(\mathbf{F} \cdot \mathbf{B})}{\mathbf{F}^2} + \mu_B g_I \frac{(\mathbf{I} \cdot \mathbf{F})(\mathbf{F} \cdot \mathbf{B})}{\mathbf{F}^2} | F, m_F \rangle \\ &= \langle F, m_F | \mu_B g_J \frac{\frac{1}{2}(\mathbf{F}^2 + \mathbf{J}^2 - \mathbf{I}^2)(\mathbf{F} \cdot \mathbf{B})}{\mathbf{F}^2} + \mu_B g_I \frac{\frac{1}{2}(\mathbf{F}^2 - \mathbf{J}^2 + \mathbf{I}^2)(\mathbf{F} \cdot \mathbf{B})}{\mathbf{F}^2} | F, m_F \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \mu_B g_J \frac{\frac{1}{2}(F(F+1) + J(J+1) - I(I+1))(m_F B)}{F(F+1)} + \mu_B g_I \frac{\frac{1}{2}(F(F+1) - J(J+1) + I(I+1))(m_F B)}{F(F+1)} \\
&= \mu_B g_F m_F B
\end{aligned} \tag{32}$$

としても同じ結果を得る。

故にエネルギー固有値の近似解は、

$$E(F, m_F) \sim \left(A_{\text{hfs}} I J X_1 + \frac{B_{\text{hfs}}}{4} X_2 + C_{\text{hfs}} X_3 \right) + \mu_B g_F m_F B \tag{33}$$

となる。

補足 3：強磁場極限

強磁場極限では \mathbf{J} と \mathbf{I} 結合が弱まり量子化軸に対して独立に歳差運動している独立基底、

$$|J m_J, I, m_I\rangle \tag{34}$$

が良い量子状態である。この基底は $\{J^2, J_z, I^2, I_z\}$ の角運動量演算子に対し同時固有状態である。

この基底での超微細相互作用ハミルトニアンの行列要素の対角成分は

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = I_z J_z + I_x J_x + I_y J_y = I_z J_z + \frac{I_+ J_- + I_- J_+}{2} \tag{35}$$

を用いて最低次まで計算すると以下のようになる。

$$H_{\text{hfs}}(m_J, m_I) \equiv \langle J m_J, I, m_I | H_{\text{hfs}} | J m_J, I, m_I \rangle = A_{\text{hfs}} m_J m_I \tag{36}$$

磁気双極子ハミルトニアンの行列要素は対角成分のみで、

$$H_{\text{mag}}(m_J, m_I) = \mu_B B \langle J m_J, I, m_I | (g_J J_0^{(1)} + g_I I_0^{(1)}) | J' m'_J, I', m'_I \rangle = \mu_B B (g_J m_J + g_I m_I) \tag{37}$$

である。

故にエネルギー固有値の近似解は、

$$E(m_J, m_I) \sim A_{\text{hfs}} m_J m_I + \mu_B (g_J m_J + g_I m_I) B \tag{38}$$

となる。

補足 4：超微細相互作用ハミルトニアンの行列要素(別の表式)

$(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})$ の演算子は(1)式より

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{J}^2 - \mathbf{I}^2) \tag{39}$$

であり、 $|(J, I) F, m_F\rangle$ は $\{J^2, I^2, F^2, F_z\}$ の演算子に対し同時固有状態であるので、

$$\langle (J, I) F, m_F | \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} | (J, I) F', m'_F \rangle = \frac{K}{2} \delta_{FF'} \delta_{m_F m'_F} \tag{40}$$

となり、対角成分のみが値を持つ事がわかる。ここで、

$$K(J, I, F) \equiv F(F+1) - J(J+1) - I(I+1) \tag{41}$$

である。故に、

$$\begin{aligned}
\langle (J, I) F, m_F | H_{\text{hfs}} | (J, I) F, m_F \rangle = & A_{\text{hfs}} \frac{K}{2} + B_{\text{hfs}} \frac{3 \left(\frac{K}{2}\right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{K}{2}\right) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)} \\
+ C_{\text{hfs}} \frac{10 \left(\frac{K}{2}\right)^3 + 20 \left(\frac{K}{2}\right)^2 + 2 \left(\frac{K}{2}\right) [-3I(I+1)J(J+1) + I(I+1) + J(J+1) + 3] - 5I(I+1)J(J+1)}{I(I-1)(2I-1)J(J-1)(2J-1)} & \quad (42)
\end{aligned}$$

となる。これは(7)式と一致する。

参考文献

- [1] Lloyd Armstrong, Jr., Theory of the Hyperfine Structure of Free Atoms (Wiley-Interscience, New York, 1971).
- Gerginov, Vladislav, Andrei Derevianko, and Carol E. Tanner. "Observation of the Nuclear Magnetic Octupole Moment of Cs 133." Physical Review Letters 91.7 (2003): 072501.
- [2] Beloy, Kyle, Andrei Derevianko, and W. R. Johnson. "Hyperfine structure of the metastable P 3 2 state of alkaline-earth-metal atoms as an accurate probe of nuclear magnetic octupole moments." Physical Review A 77.1 (2008): 012512.
- [3] Zare, Richard N. Angular momentum. Vol. 33. Wiley, New York, 1988.