

# 実験 3 : レーザー分光

外部共振器型半導体レーザーを用いた  
Rb の吸収分光

# 目次

<b>1章 序論</b>	4
1.1 歴史的背景	4
1.2 目的	4
<b>2章 遷移スペクトル</b>	5
2.1 遷移の選択則	5
2.2 スペクトルの幅	5
<b>3章 実験法</b>	8
3.1 吸収分光法	8
<b>4章 実験装置</b>	10
4.1 外部共振器型半導体レーザー ( External Cavity Laser Diode: ECLD )	10
4.2 偏光板	12
4.3 偏光ビームスプリッター ( Polarization Beam Splitter: PBS )	13
4.4 フォトダイオード ( Photo Diode: PD )	13
4.5 試料	13
4.6 アイソレータ	13
<b>5章 Rb 原子の基礎データ</b>	14
<b>6章 実験手順</b>	15
6.1 ECLD の特性	15
6.2 吸収スペクトルの観測	15
6.3 周波数構成	16
6.4 ドップラー広がり温度依存性	16

<b>7章 課題およびレポート評価</b>	17
<b>付録 A 自然幅の古典モデル</b>	18
<b>付録 B 軌道角運動量の量子化</b>	20
<b>付録 C 微細構造 (<i>LS</i> 結合)</b>	21
<b>付録 D 超微細構造 (Hyperfine Structure)</b>	22
<b>付録 E ゼーマン効果</b>	24

# 1章 序論

## 1.1 歴史的背景

レーザー分光の研究は、主に原子・分子を対象としておこなわれてきた。歴史的背景には、1970年代に、発振波長を広範囲変化できる色素レーザー、半導体レーザーなどが開発されたことが大きな変化のきっかけとなった。特に、半導体レーザーは他のレーザーと比べ、小型、安価、線幅が狭い、高効率、操作が容易であるという理由から、現在は半導体レーザーが多く使用されている。しかし、色素レーザーも完成度が高く、色素を交換することにより、可視～近赤外の全域をカバーできるという利点から、まだ広い用途に使用されている。これらの波長可変レーザーが利用されてから、レーザー分光の研究は飛躍的に進歩し、その対象も大きく広がった。

## 1.2 目的

装置が最も基本的な吸収分光法を用いて、Rb（アルカリ原子）の光学遷移を測定する。遷移測定では熱や磁場を印加して測定することで、熱平衡や電磁場中の原子の性質を理解し、また、光学装置の原理を理解する。

## 2章 遷移スペクトル

### 2.1 遷移の選択則

超微細構造を持つ原子にレーザー光をあて、微細構造準位間の電気双極子遷移をおこさせる場合、起こりうる遷移の選択則は、 $DJ = 0, \pm 1$  かつ  $DF = 0, \pm 1$  (ただし、 $J_g = 0 \rightarrow J_e = 0$  と  $F_g = 0 \rightarrow F_e = 0$  のときは、禁止遷移) である。

### 2.2 スペクトルの幅

高分解能な実験装置で観測されたスペクトルは、単純な幅のない幾何学的な線ではなく、ある周波数範囲にわたって強度分布をもっていることがわかる。

スペクトルに幅を生じる主な原因には励起状態の寿命が有限であることによる自然広がり、気体を構成する原子分子が運動していることによるドップラー広がり、共存する別の気体原子分子との衝突によるローレンツ広がり、特定の気体原子分子と同種の原子分子によるホルツマルク広がり、電子またはイオンとの衝突によるシュタルク広がりなどが挙げられる。

$10^{-2}$  Torr 以下程度の圧力のもとで電氣的に励起されていない気体ではシュタルク広がり とホルツマルク広がりは無視でき、さらに共存する多種の気体の圧力を 5 Torr 以下にするならば、ローレンツ広がりを小さくすることができる。ここでは、前文の 3 つの広がりを無視できる高真空の場合で、問題となる自然幅とドップラー幅について記述する。

スペクトルの自然幅は、不確定性原理を用いて求めることができる。スペクトルのエネルギー幅  $DE$ 、励起準位の寿命  $Dt$  とすると、

$$DE \cdot Dt \geq \hbar \quad (2.2.1)$$

また、上式(2.2.1)の  $DE$  と同じエネルギーを周波数  $D$  で表すと、

$$DE = hD \quad (2.2.2)$$

であるので、式(2.2.1)、(2.2.2)より、

$$D \geq \frac{1}{2pDt} \quad (2.2.3)$$

となる。このような自然幅を与えるスペクトルの式は、観測される周波数  $\nu$ 、共鳴周波数  $\nu_0$ 、励起状態の寿命  $t$  の逆数  $\Gamma = 1/t$  で表されるローレンツ分布から求まる。そのローレンツ分布  $L(\nu)$  は、

$$L(\nu) = \frac{\frac{1}{2} \left( \frac{\Gamma}{2} \right)}{4\nu^2 \left( \nu - \nu_0 \right)^2 + \left( \frac{\Gamma}{2} \right)^2} \quad (2.2.4)$$

で表され、 $\nu = \nu_0$  を中心に半値全幅 ( Full Width of Half Maximum: FWHM ) は、

$$2 \left| \nu - \nu_0 \right| = \frac{\Gamma}{2\nu} \quad (2.2.5)$$

となる。

運動している原子において、原子が吸収する光の周波数は、本来、共鳴する光の周波数からずれて吸収される。これはドップラー効果によるものである。周波数  $\nu$  は、周波数  $\nu_0$  の光で共鳴する原子は、光軸の方向に対して、 $\theta$  の角度をなして速度  $v$  で運動しているとする、次式のように表すことができる。

$$\nu = \nu_0 \left( 1 + \frac{v}{c} \cdot \cos \theta \right) \quad (2.2.6)$$

上式(2.2.6)より、 $v$  が正ならば原子が吸収する周波数は  $\nu_0$  よりも高くなり、 $v$  が負ならば吸収する周波数は  $\nu_0$  よりも低くなることからわかる。よって、

$$\nu - \nu_0 = \frac{v}{c} \cdot \cos \theta \cdot \nu_0 \quad (2.2.7)$$

だけではずれた周波数で吸収が起こる。ところが、気体原子はある速度分布をもっている。気体が熱平衡にあればマクスウェル - ボルツマン分布となる。簡単にするため速度成分は、光軸方向 1 次元  $v_z = v \cos \theta$  で考えると、マクスウェル - ボルツマン分布  $f(v_z)$  は、質量  $m$  の原子が  $v_z$  と  $v_z + dv_z$  の間にある分布で、

$$f(\nu) = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp\left( -\frac{m \nu^2}{2k_B T} \right) \quad (2.2.8)$$

と表せる。ここで  $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は絶対温度である。ここで、ドップラー効果で定まる  $\nu$  の値を用いて表すとガウス分布は上式(2.2.8)から、

$$G(\nu) = \exp\left\{ -\frac{m}{2k_B T} \left( \frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} \right)^2 c^2 \right\} \quad (2.2.9)$$

と表され、 $\nu = \nu_0$  を中心に FWHM は、

$$2 \left| \nu - \nu_0 \right| = \frac{2 \nu_0}{c} \left( \frac{2k_B T \ln 2}{m} \right)^{1/2} \quad (2.2.10)$$

となる。

### 3章 実験法

#### 3.1 吸収分光法

原子の準位間と等しいエネルギーのレーザー光を照射すると、原子はレーザー光を吸収し励起する。励起された原子はある特定の寿命を経て、蛍光しながら基底状態や準安定状態へ遷移する。この吸収を利用し、透過光強度を検出する最も基本的な方法として、吸収分光法がある。この分光法は、主に、可視域、紫外域、近赤外域で多用されている。

原子スペクトルが超微細構造によって分岐する場合、その分岐エネルギーは数十MHz ~ 数GHz 程度である。通常、気体原子に分光をおこなうと、そのスペクトルは原子の熱運動により数百MHz ~ 数GHz のドップラー幅をもつ。つまり、超微細構造によって分岐した原子スペクトルは、ドップラー幅に埋もれてしまう。それゆえに、Rb の吸収分光法では、基底状態の超微細構造以外は観測することはできない。

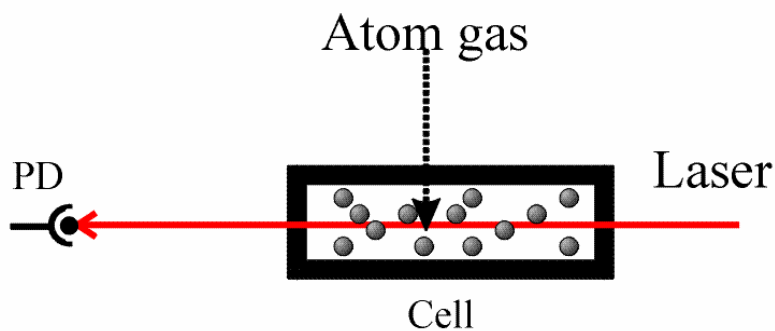


Fig3.1

吸収分光法とは、Fig3.1 のように、レーザー光は試料（この場合は、セル）を透過させ、その透過光強度をフォトディテクターで検出する方法である（1次元の分光）。



吸収スペクトル：

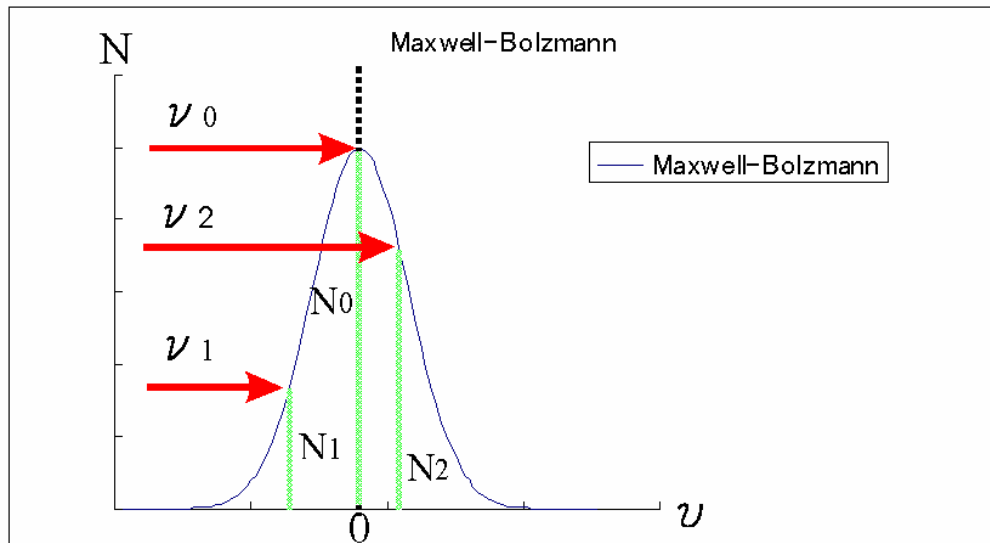


Fig3.2

実際に見られる、吸収スペクトルは Fig3.2 グラフを使い説明する。熱平衡状態にある原子は 2.2 節で説明したように、Fig3.2 のグラフのような原子の速度ベクトル に対応するマクスウェルボルツマン分布する。そこへ、共鳴周波数からややずれた光  $\nu_1$  をセルに入れたとする。ずれた周波数分に相当する速度（ドップラーシフト）を持つ原子は、その光を吸収する。そのときの原子の個数を  $N_1$  個とし、共鳴周波数  $\nu_0$  に近づけていくと、光を吸収する原子は  $N_0$  へと増加していく。さらに共鳴周波数  $\nu_0$  から  $\nu_2$  に遠ざけていくと、吸収する原子は  $N_0$  から  $N_2$  に減少していく。

こうして、フォトディテクターで検出される透過光強度は  $N_0$  を軸対称に  $\nu_0$  で極小を持ち、そのスペクトルは、ドップラー広がりを反転させたような形になる（Fig3.3）。

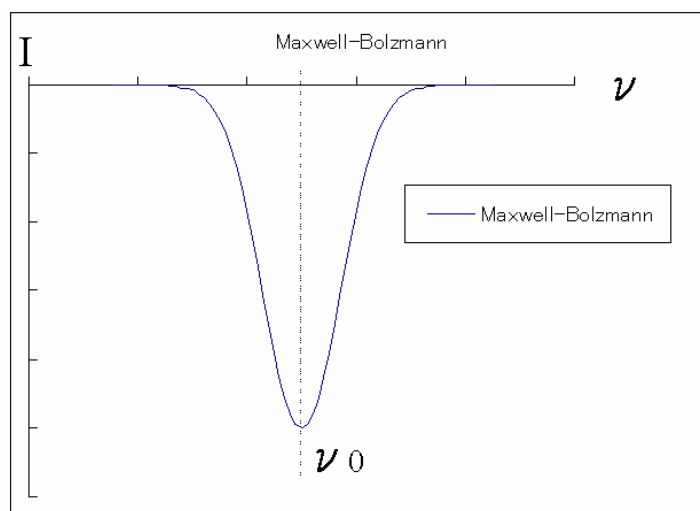


Fig3.3

## 4章 実験装置

### 4.1 外部共振器型半導体レーザー (External Cavity Laser Diode: ECLD)

#### 半導体レーザー (Laser Diode: LD):

GaAs などの半導体結晶を、波長の短い光や電子線などで励起すると結晶固有の蛍光を発する。励起を十分強くすると、Fig4.1 のように、伝導体にくみ上げられた電子、価電子帯につくられた正孔の密度が大きくなり、反転分布の状態になる。反転分布の状態では、蛍光に近い波長の光が外からきたときに、外来光誘導された発光、誘導放射が起こるようになる。誘導放射が起これば、光の増幅が可能で、増幅された光をフィードバックする機構を付加すれば、光発振器すなわちレーザーができるようになる。誘導放射を生ずる条件は、外来光のエネルギー  $h$  について、

$$W_g < h < W_{fc} - W_{fv} \quad (4.1.1)$$

である。ここで、 $W_g$  は半導体のバンドギャップエネルギー、 $W_{fc}$ 、 $W_{fv}$  はそれぞれ励起状態における伝導帯または価電子帯の擬フェルミ・エネルギーである。すなわち反転分布の条件、 $W_g < W_{fc} - W_{fv}$  が成り立っている場合に、上式(4.1.1)に示す値の  $h$  をもつ外来光に対しては、誘導放射  $h'$  の確率が、吸収のそれよりも大きくなることを示している。

### Laser Diode

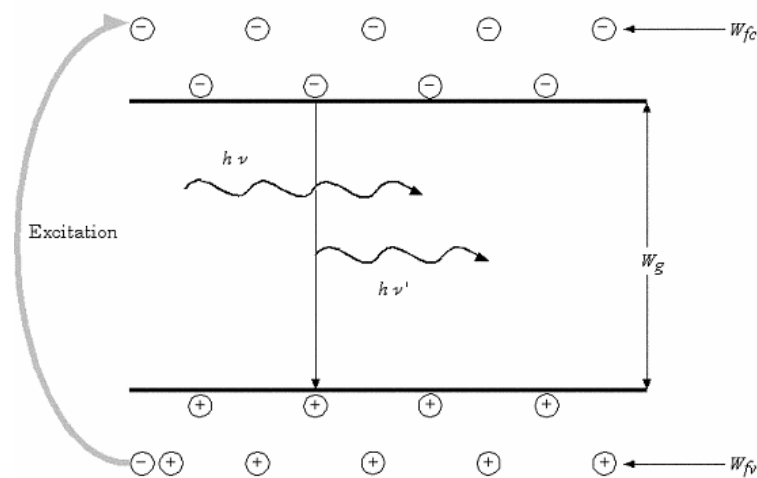


Fig4.1

### 外部共振器型半導体レーザー (ECLD) :

ECLD は、広い波長可変領域と非常に狭い発振線幅及び、高い安定性などの特徴がある。その構造によって主に、外部に回折格子を置き、レーザーの1次の回折光をLD素子に直接戻す Littrow 型と、レーザー光を浅い角度で外部の回折格子に照射させ、回折された1次光をミラーに反射させてLD素子に間接的に戻す Littman-Metcalf 型の2つがある。

前者は共振器長が短く安定したモードを得やすい。一方後者は前者に比べ、レーザー光が回折格子に照射する面積が広いために分解能が高く、波長を変える際に、出力光の射出方向が変化しないという利点がある。

Fig4.2、Fig4.3 に Littrow 型、Littman-Metcalf 型の主な構成図を示す。

レーザー光が干渉し発振する条件は、 $q_1$  を入射角、 $q_2$  を回折角、 $m$  を干渉次数、 $d$  を格子定数、 $l$  を波長とすると、

$$d(\sin q_1 + \sin q_2) = ml \tag{4.1.2}$$

である。

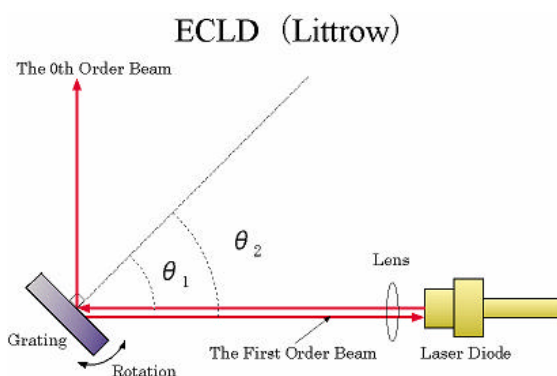


Fig4.2

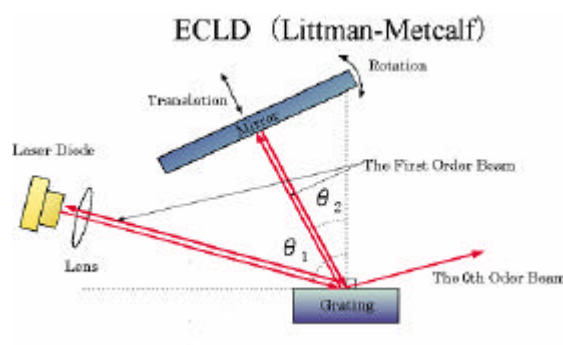


Fig4.3

本実験では Littrow 型を使用する ( Fig4.2 )。以下 Littrow 型で説明していく。本実験で使用する半導体 LD 素子は、市販の 780nm 付近のもので、出力されたレーザー光をコリメーションレンズで平行光にした後、回折格子(  $d=1/1800\text{mm}$  )入射にさせる( Fig4.4 )。780nm 付近の光源を使う場合、式(4.1.2) ( Littrow なので  $q_1 \sim q_2$  ) から、回折格子への入射角度を  $45^\circ$  付近に合わせると、1 次光はもとのパスに戻り共振器を形成する。共振器が形成されると、その共振器で許されるモードのみが LD 素子から発振する。回折格子に接着させた圧電素子 ( PZT ) に電圧を加えることにより回折格子を動かし、共振器長を微調することで周波数を振ることができる。

LD は温度や電流量で周波数が変わる。安定した発振を得るには、電流と温度ともに安定している必要がある。このため、電源には、精密電流電源を用い、温度はサーミスタで測った電圧を、LD の底に敷いてあるペルチェ素子にフィードバックすることで安定化させて

いる。LD の波長は温度、電流値に敏感であり、これと PZT の電圧をあわせることで、ほしい波長が得られる。

LD のビームプロファイルは楕円形で、偏光はその短軸方向に向いている。この偏光が垂直になるようにあわせると、回折格子の反射率は 80% となり、強度の強いビーム(数十 mW)を取り出すことができる。

このようにして発振されたレーザー光は、自然幅より十分小さい数百 kHz 程度の線幅となるので、レーザー分光による超微細構造の観測が可能になる。

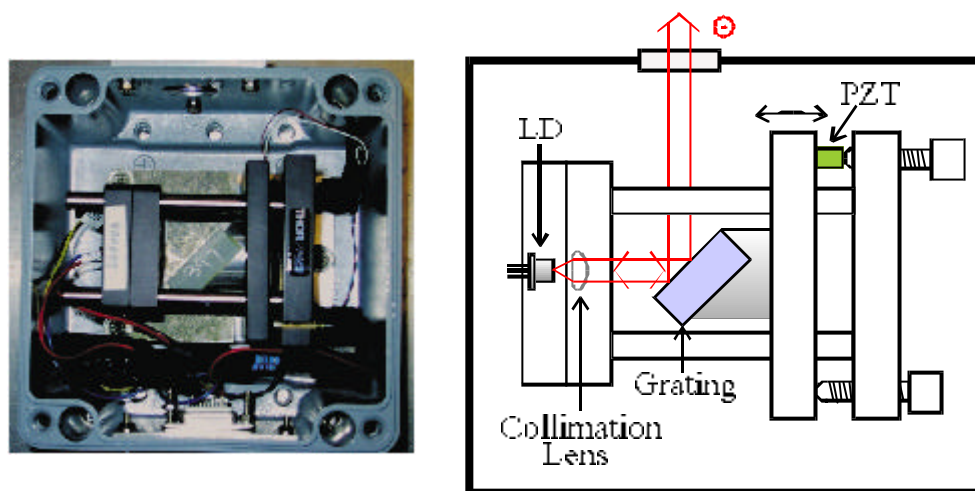


Fig4.4

## 4.2 偏光板

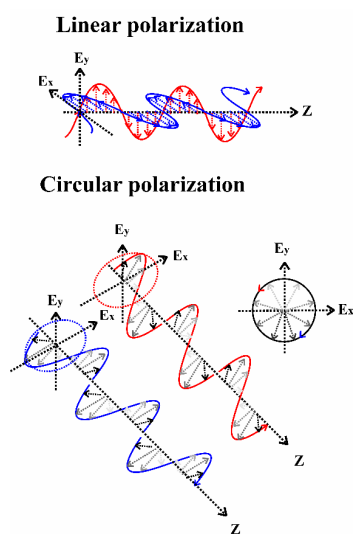


Fig4.5

偏光板には  $1/2$  板と  $1/4$  板がある。  $1/2$  板は、光の偏光を直線偏光にし、  $1/4$  板は、直線偏光を円偏光に、円偏光を直線偏光にすることができる。偏光の向きは偏光板を回すことで調整が可能である。Fig4.5 に直線偏光と円偏光について示す。

Fig4.5 の直線偏光は、赤が x 方向、青が y 方向に変更されたもので式で表すと、

$$\begin{aligned} E_{lin\_red} &= E_0 \hat{x} \sin(\omega t + kz + f_{lin\_red}) \\ E_{lin\_blue} &= E_0 \hat{y} \sin(\omega t + kz + f_{lin\_blue}) \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

となる。ここで  $\omega$  は光の周波数、  $k$  は波数、  $\hat{x}$ 、  $\hat{y}$  はそ

それぞれの偏光方向の単位ベクトル、 $\hat{e}_\pm$  は位相差である。

Fig4.5 の円偏光は、反時計回りの赤が  $\hat{e}_+$  円偏光、時計回りの青が  $\hat{e}_-$  円偏光であり、完全な円偏光をなすとき、式で表すと、

$$\begin{aligned} E_{lin\_red} &= E_0 \hat{x} \sin(\omega t - kz + \mathbf{f}) + E_0 \hat{y} \sin(\omega t - kz + \mathbf{f} + \mathbf{p} / 2) \\ E_{lin\_blue} &= E_0 \hat{x} \sin(\omega t + kz + \mathbf{f}) + E_0 \hat{y} \sin(\omega t + kz + \mathbf{f} - \mathbf{p} / 2) \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

となる。この式からもわかるように、円偏光は x、y 方向の直線偏光の重ね合わせである。つまり、直線偏光を重ねて円偏光を作ることにも可能である。

### 4.3 偏光ビームスプリッター (Polarization Beam Splitter: PBS)

PBS は、偏光によってビームを反射、透過させる。具体的には、Fig4.6 のような反射と透過をする。

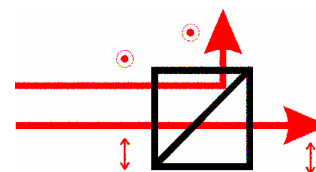


Fig4.6

### 4.4 フォトダイオード (Photo Diode: PD)

基本的には LD と反対の現象で、光の検出器として利用できる。PD に光が入ると正孔の密度が変化し、電圧差ができる。そして、この電圧から、光強度を知ることができる。

### 4.5 試料

本実験で使用する試料は、 $^{85}\text{Rb}$  と  $^{87}\text{Rb}$  の安定同位体で、ガラスセルに封入された原子気体である。このとき、常温でほんのりガラスセルの内側に飽和して付着するぐらいの Rb 原子を封入しておく。このガラスセル内は、ある程度の真空になっていて、Rb 以外の原子・分子が極微量だが入っている。

### 4.6 アイソレータ

レーザーの偏光を利用し、レーザーを 1 方向にしか通さないもので、主に、戻り光による LD の破損などを防ぐために用いられる。透過率は製品によるがおよそ 6~7 割程度である。

## 5章 Rb 原子の基礎データ

### $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ (780nm) 遷移の吸収スペクトルと遷移図

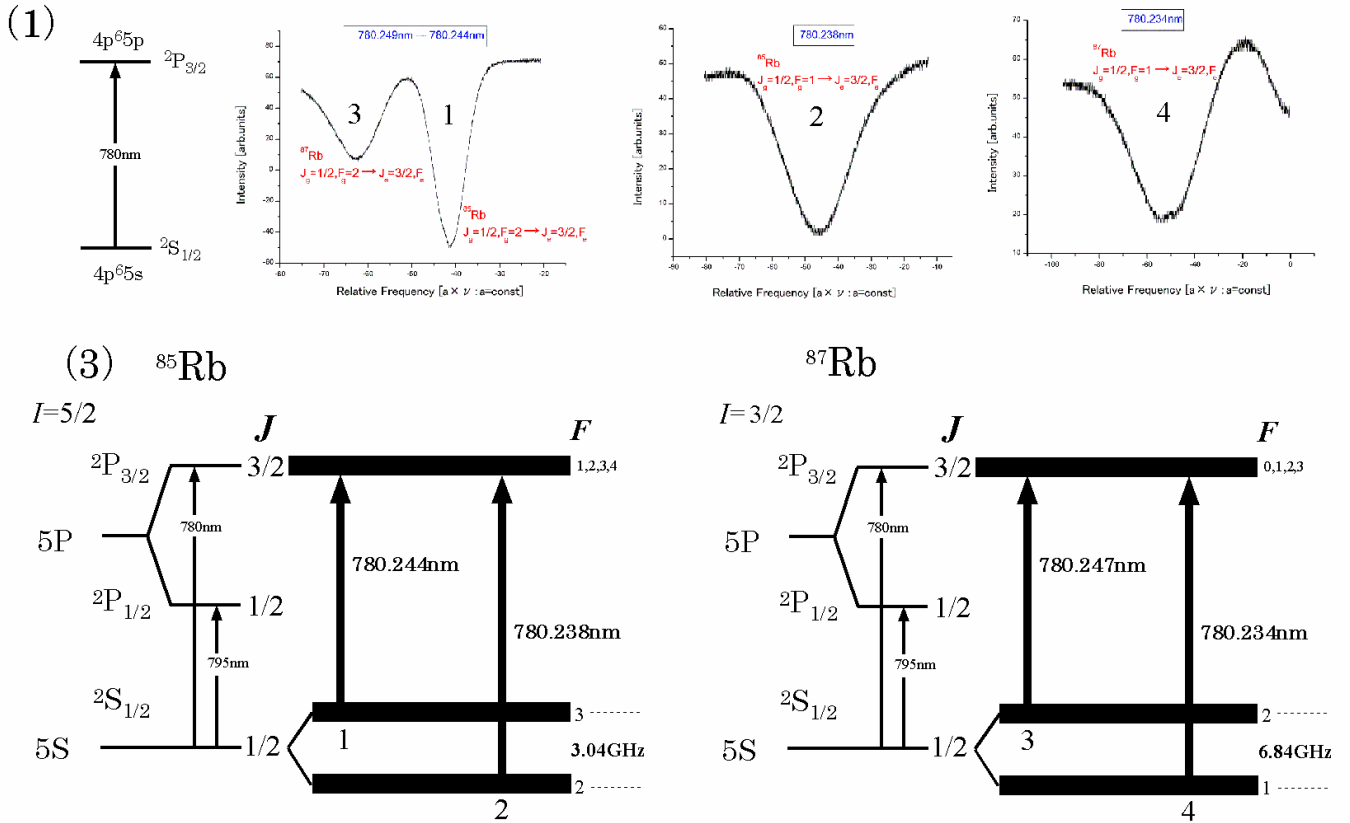


Fig5.1

\*  $L = 0, 1, 2, 3, \dots$  は  $L = S, P, D, \dots$  に対応し、微細構造準位は  $n^{2S+1}L_J$  とあらわすこともある。

\* Fig5.1 のスペクトルは収分光法で観測したスペクトルで、励起準位の超微細構造は、ドップラー広がりには埋もれるが（縮退）基底準位の超微細構造はドップラー広がりに対して間隔が広いので分離して観測される。

\* Rb 原子において、795nm 遷移を D1 遷移、780nm 遷移を D2 遷移と呼ぶこともある。

原子番号	核スピン	原子質量	存在比[%]	自然幅[MHz] (D2遷移)	寿命[ns] (D2遷移)
$^{85}\text{Rb}$	5/2	84.9118	72.17	5.98	26.63
$^{87}\text{Rb}$	3/2	86.9097	27.83		

Fig5.2

## 6章 実験手順

### 6.1 ECLD の特性

ECLD は流す電流によってレーザーパワーが変わるが、あるしきい値をもつ。単色光の強度が計測できるパワーメータを使用し、精密電流電源の値によりレーザーパワーがどのような変化をするか計測する。(特にしきい値を調べる。)

波長計を用いて、LD の波長を測定する。このとき、PZT コントローラ、温度コントローラ、精密電流電源のうち 2 つを固定し、1 つの値を変えることで波長がどのように変化するか測定する。

\* 精密電流電源の電流値は 100mA 以上にならないようにすること (LD が壊れる)。

\* PZT の電圧値は 100V 以上にならないようにすること (PZT が壊れる)。

### 6.2 吸収スペクトルの観測

吸収分光のスペクトルを観測するために、実験装置を Fig6.1 のように設置する。

スペクトルの見える波長にレーザー周波数を合わせ、ファンクションジェネレータを使い PZT の値を (電圧は時間に対して比例) 振ることでレーザー周波数を振る。

観測したスペクトルはプリントアウトとデータ保存しておく (レポート時に使用するため)。

ファンクションジェネレータの電圧から横軸相対電圧、縦軸透過光強度のグラフを書く。

\* **スペクトルの見える波長は  $^{87}\text{Rb}$  で 780.247nm、780.234nm、 $^{85}\text{Rb}$  で 780.244nm、780.238nm ぐらいの位置にある。(確かではなく大体である)**

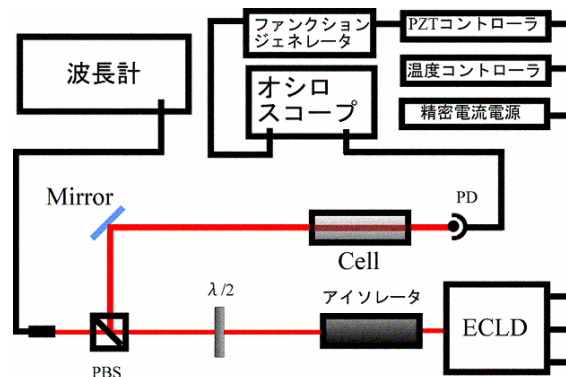


Fig6.1

### 6.3 周波数校正

吸収スペクトルが見えるところでの波長、温度を測定し、そこから、レーザーの波長に対する原子のドップラー広がり FWHM を計算する。

観測したスペクトルはプリントアウトとデータ保存しておく（レポート時に使用するため）

観測した吸収スペクトルを横軸相対電圧、縦軸透過光強度の関係のグラフに置き換えて書く。

のグラフにマクスウェルボルツマン分布の関数にフィッティングをし、そこから、相対電圧での FWHM を出す。

ファンクションジェネレータが正確に電圧  $V$  を時間に対して比例するように振っているならば、ECLD の周波数  $\nu$  の電圧に比例するので、 $\nu$  と  $V$  の計算結果から単位電圧あたりの周波数を計算する。

の結果から、 $\nu$  のグラフを、相対周波数と透過光強度の関係のグラフに置き換える。

#### \*6.4 のことを考えると 780.247nm の遷移で測定するのがよいと思われる。

### 6.4 ドップラー広がり温度依存性

セルの周りにリボンヒーターを巻き温度計をさしておく。

まずは、初期の温度（室温）と、そのときの吸収スペクトルを観測しておく。

観測したスペクトルはプリントアウトとデータ保存しておく（レポート時に使用するため）

次に、温度を変えるために、リボンヒーターにかける電圧を 5V 間隔で、吸収スペクトルを測定する。ただし、温度が安定（熱平衡）になってから測定するため、電圧を変えたら 5 分程度、放置してから測定すること。

観測した吸収スペクトルを横軸相対電圧、縦軸透過光強度の関係のグラフに置き換えて書く。

6.3 で得た単位電圧あたりの周波数から、 $\nu$  のグラフを相対周波数と透過光強度の関係のグラフに置き換える。



## 7章 課題およびレポート評価

### 課題について：

- ECLD の電流値とレーザーパワーの関係のグラフ（常温）
- 吸収分光の相対電圧と透過光強度の関係のグラフ（常温）
- 吸収分光の相対周波数と透過光強度の関係のグラフ（常温）
- 温度変化させた吸収分光の相対電圧と透過光強度の関係のグラフ
- 温度変化させた吸収分光の相対周波数と透過光強度の関係のグラフ
- 温度を変数とした、温度と波長から求まるドップラー幅の計算値と実測値の表

### レポート評価について：

3年生には理論的に難しいものなので、レポートは、このテキストをもとに書いてもかまわず、その点の評価は十分考慮する。普通に実験をしていれば課題はできるはずなので課題を全部こなすことで平均点とし、実験結果がおかしくとも実験方法、計算方法があつていれば減点の対象にはしないものとする。

実験に対する考察や自分なりの考えなどの工夫が見られるものには、それなりの考慮をし、加点する。

例えば・・・

- 誤差評価
- 存在比
- 基底状態の超微細構造の幅
- 磁場を印加した場合
- 蛍光分光法の場合

## 付録 A 自然幅の古典モデル

光の吸収により、基底状態から励起された原子は、減衰振動しながら光子を自然放出し、基底状態に戻るといふモデルを考える。このモデルは微分方程式、

$$\ddot{x}(t) + g \dot{x}(t) + \omega_0 x(t) = 0 \quad (\text{A.1})$$

ここで、 $\omega_0$  は  $k/m$  である。これは、バネの減衰振動となんら変わりはなく、微分方程式を解くと、

$$x(t) = x_0 e^{-\frac{g}{2}t} \cos(\omega_0 t) \quad (\text{A.2})$$

となる。ここから、角周波数  $\omega$  に関する強度  $I(\omega)$  を導出する。(A.2)を、

$$x(t) = \frac{1}{2\sqrt{2p}} \int_0^{\infty} A(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (\text{A.3})$$

と置き換え、フーリエ変換を施すと、

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2p}} \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2p}} \int_0^{+\infty} x_0 e^{-\frac{g}{2}t} \cos(\omega_0 t) \cdot e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{8p}} \left[ \frac{1}{i(\omega - \omega_0) + g/2} + \frac{1}{i(\omega + \omega_0) + g/2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

となる。強度  $I(\omega)$  は、 $A(\omega) \cdot A^*(\omega)$  であり、 $(\omega - \omega_0)^2 \ll \omega_0^2$  とすれば、 $\omega + \omega_0$  の項は無視され、

$$I(\omega - \omega_0) = \frac{C}{(\omega - \omega_0)^2 + (g/2)^2} \quad (\text{A.5})$$

と表される。ここで  $C$  は定数である。さらに、正規化分布で表すと

$L(\mathbf{w} - \mathbf{w}_0) = I(\mathbf{w} - \mathbf{w}_0)/I_0$  で、 $\int_0^\infty L(\mathbf{w} - \mathbf{w}_0) d\mathbf{w} = 1$  より、

$$L(\mathbf{w} - \mathbf{w}_0) = \frac{1}{2p} \frac{\mathbf{g}}{(\mathbf{w} - \mathbf{w}_0)^2 + (\mathbf{g}/2)^2} \quad (\text{A.6})$$

となる。これはローレンツ型の輪郭で、その幅（自然幅）は、

$$2|\mathbf{w} - \mathbf{w}_0| = \frac{\mathbf{g}}{2p} \quad (\text{A.7})$$

で、(3.2.5)と一致する。また、励起準位の寿命  $t$  とすると、不確定性原理から

$$t \cdot \mathbf{g} \sim \hbar \quad (\text{A.3})$$

の関係がある。

## 付録 B 軌道角運動量の量子化

角運動量は古典力学において、 $L = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  で定義されるので、量子力学では、

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla) \quad (\text{B.1})$$

で定義する。これを極座標で書き、 $L^2$  を計算すると

$$L^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left( \sin \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right) - \frac{1}{\sin^2 \mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{j}^2} \right\} \quad (\text{B.2})$$

であるが、これを球面関数  $Y$  に作用させると、

$$L^2 Y = L(L+1)\hbar^2 Y \quad (\text{B.3})$$

となる。よって  $L^2$  の固有値は  $L(L+1)$  であり、 $|L|$  の観測値は、

$$|L| = \sqrt{L(L+1)}\hbar \quad (\text{B.4})$$

であることがわかる。

## 付録 C 微細構造 (LS 結合)

一般に、原子の電子には、スピン・軌道相互作用が存在する。その相互作用により、分岐するエネルギー準位が微細構造 (LS 結合) である。

電子系の全角運動量  $J$  は、電子系の全軌道角運動量  $L$  と電子系の全スピン角運動量  $S$  との合成によりできる。すなわち、

$$J = L + S \quad (\text{C.1})$$

である。 $L$ 、 $S$  の大きさを表す量子数を  $L$ 、 $S$  とすると、 $J$  の大きさを表す量子数  $J$  の取りうる値は、

$$J = |L + S|, |L + S - 1|, \dots, |L - S| \quad (\text{C.2})$$

で  $2S + 1$  個 ( $S \leq L$ ) または、 $2L + 1$  個 ( $S > L$ ) のエネルギー準位に分岐し微細構造が生じる。

スピン・軌道相互作用ハミルトニアンは、

$$\hat{H}_{FS} = \alpha(L \cdot S) \quad (\text{C.3})$$

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

$$\hat{H}_{FS} = \alpha \frac{J^2 - S^2 - L^2}{2} \quad (\text{C.4})$$

と表せる。このハミルトニアンは  $J$  と交換するので、 $J$  の固有状態は  $\hat{H}_{FS}$  の固有状態である。

式(2.1.3)から、微細構造の固有状態を  $|J, L, S\rangle$  とすると相互作用エネルギーは、

$$\langle J, L, S | \hat{H}_{FS} | J, L, S \rangle = \frac{\alpha \hbar^2}{2} [J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)] \quad (\text{C.5})$$

となる。

## 付録 D 超微細構造 ( Hyperfine Structure )

原子の原子核が核スピンをもつとき、電子と原子核の間には電磁相互作用が存在する。それらの相互作用により、分岐するエネルギー準位が超微細構造である。

原子全体の量子化された全角運動量  $F$  は、電子系の全角運動量  $J$  と、原子核の核スピン  $I$  との合成によりできる。すなわち、

$$F = J + I \quad (D.1)$$

である。  $J$ 、  $I$  の大きさを表す量子数をそれぞれ  $J$ 、  $I$  とすると、  $F$  の大きさを表す量子数  $F$  の取りうる値は、

$$F = |J + I|, |J + I - 1|, \dots, |J - I| \quad (D.2)$$

で、  $2I + 1$  個 ( $I \leq J$ ) または、  $2J + 1$  個 ( $I > J$ ) の非常に接近したエネルギー準位に分岐し超微細構造が生じる。

超微細構造の相互作用の一般的なハミルトニアンは、

$$\hat{H}_{HFS} = \sum_k \hat{H}_{HFS}^{(k)} \quad (D.3)$$

で表せる。  $k$  が偶数の項は電氣的相互作用、  $k$  が奇数の項は磁氣的相互作用を示す。

超微細構造の固有状態を  $|F, J, I\rangle$  とすると超微細相互作用エネルギーは、

$$\langle F, J, I | \hat{H}_{HFS} | F, J, I \rangle = \sum_k \langle F, J, I | \hat{H}_{HFS}^{(k)} | F, J, I \rangle \quad (D.4)$$

となる。

$k = 1$  の項は、磁気双極子相互作用であり、磁気双極子相互作用とは、電子が原子核の位置に作る磁場と原子核の磁気双極子モーメントとの相互作用で、  $I \geq 1/2$  かつ  $J \geq 1/2$  のときあらわれる。その相互作用ハミルトニアンは、

$$\hat{H}_{HFS}^{(1)} = A(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}) \quad (D.5)$$

で表せる。  $A$  は磁気双極子超微細構造定数とよばれる。

$k = 2$  の項は、電気四極子相互作用であり、電子が原子核の位置につくる電場勾配と原子核の電気四極子モーメントとの相互作用で、 $I \geq 1$  かつ  $J \geq 1$  のときあらわれる。その相互作用エネルギーは、

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

で表せる。  $B$  は電気四極子超微細構造定数とよばれる。

さらに、 $k = 3, 4, 5, \dots$  と続くが、通常のレーザー分光精度において、 $k \geq 3$  の相互作用は無視できる。

以上より、超微細構造の相互作用エネルギーは、

$$\langle F, J, I | \hat{H}_{HFS} | F, J, I \rangle = AK + B \frac{6K^2 + 3K - 2I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)2J(2J-1)} \quad (\text{D.7})$$

$$K = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (\text{D.8})$$

となる。ただし、式(D.7)は、 $I \geq 1$  かつ  $J \geq 1$  のとき成立する式で、 $1/2 \leq I$  かつ  $J = 1/2$  のときは、第1項のみである。

## 付録 E ゼーマン効果

原子を磁場中に置くと、原子の磁気モーメントと外部磁場との相互作用によりエネルギー準位が分岐する。

微細準位が外部磁場（非常に強い場合を除く）により分岐する場合、その分岐した準位は磁気量子数  $M_J$  で特徴づけられる。その取りうる値は、

$$M_J = J, J-1, \dots, -J \quad (\text{E.1})$$

であり、 $2J+1$ 個に分岐する。

外部磁場が弱い場合、ゼーマン効果として扱われる。そのときの微細相互作用エネルギーは、近似的に、

$$\begin{aligned} W_{FS}^{ze} &= W_{FS} - \boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{H}_{ex} \\ &\approx \frac{\hbar^2}{2} [(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))] + m_B M_J g_J H_{ex} \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

と表せる。ここで、 $m_B$  はボーア磁子、 $M_J$  は原子の磁気量子数、 $g_J$  はランダウの  $g$  因子、 $H_{ex}$  は外部磁場である。ここで、 $g_J$  は、

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (\text{E.3})$$

で与えられる。

また、電子の磁気モーメント  $\mathbf{m}_J$  は、

$$\mathbf{m}_J = -m_B g_J J \quad (\text{E.4})$$

で表すことができる。

これは、超微細構造にも核磁気モーメントから、同様に、この効果は表れる。