3P005

 半導体レーザー分光による
BiO ラジカル A₂⁴Π_{1/2} - X₁²Π_{1/2}遷移での超微細構造の解析 (東工大院・理工)○山口 直,金森 英人

Analysis of Hyperfine Structure of BiO radical in the $A_2^{\ 4}\Pi_{1/2}$ - $X_1^{\ 2}\Pi_{1/2}$ Transition by Diode Laser Spectroscopy

(Tokyo Institute of Technology) OSunao Yamaguchi, Hideto Kanamori

【序論】近年、BiO ラジカルは²⁰⁹Bi 原子の相対論効果に伴う強い分子内電場のエンハンス効果を持っため、分子を使った電子 EDM 測定[1]での有力な候補分子の一つとして注目されている。また、BiO ラジカルは *S=1/2、I=9/2* を有するので実験で決まる微細および超微細構造定数は相対論的 *ab initio* 計算の精度の試金石としても有用である。

これまで BiO の $X_1^2 \Pi_{1/2}$ 状態, $X_2^2 \Pi_{3/2}$ 状態については超微細構造を含む詳細な解析が行われた [2]が、 $A_2^4 \Pi_{1/2}$ 状態の超微細構造については未だ解析がなされていない。 A_2 状態では可視のフーリ エ分光などによって 16000cm⁻¹付近での $A_2^4 \Pi_{1/2} v = 3 \cdot X_1^2 \Pi_{1/2} v = 0$ 遷移が報告されている [3][4] が、回転状態の解析までしか報告されていなかった。電子 EDM 測定においては、レーザーを使っ て単一 F 状態を特定の初期分極状態に準備する必要があるため[1]、超微細構造の知見が必須となる。 今回我々は A_2 状態の超微細構造を含めた解析を行うことを目的として、高分解能の可視光半導体レ ーザー分光法を用いて、BiO の $A_2^4 \Pi_{1/2} v = 3 \cdot X_1^2 \Pi_{1/2} v = 0$ 電子振動回転遷移の超微細構造の測定を 行った。

【実験】BiO ラジカルの生成には Bi 金属を炉で蒸発させ、それをホローカソード内の酸素放電に伴う O₂励起状態と反応させる方法を用いた。放電注入ガス条件は Ar:350mTorr,O₂:30mTorr、炉温度 は 800℃である。BiO の吸収測定には White セルを用いて光路長をのばし、また半導体レーザーに 周波数変調を掛けることで微弱信号の高感度検出を行った。周波数軸はヨウ素の周波数アトラス[5] およびエタロンを用いた補間によって較正した。



【結果と考察】図1にBiO ラジカルの吸収スペクトルを示す。Biの核スピンは9/2 であるため、超 微細構造によりエネルギー準位は10本に分裂する。これに起因する10本のスペクトル線が図1に 見える。量子数 J,Fに対する帰属は既知の X_1 状態のエネルギー準位[2]を参照し、例えば共通する A_2 状態の回転状態への二つの遷移、例えば R_f (11.5)と P_f (13.5)の波数の差が X_1 状態のエネルギー差 に対応することを Fごとに確認することで帰属を確定した。確定した Fの帰属を図 2 に示す。f 状 態では図 2 のように低波数側で Fが大きくなった。



遷移の帰属決定から A_2 状態のエネルギー準位を求めた結果が図 3 である。 $A_2^4 \Pi_{1/2}$ 状態は超微細構造分裂が $X_1^2 \Pi_{1/2}$ 状態に比べ 1/4 程度 に小さくなることが分かった。

Hund's case (a)で表すと $A^4\Pi$ 状態はスピン軌道相互作用により4つの状態に分裂するが、実際は $A_1^4\Pi_{3/2}, A_2^4\Pi_{1/2}$ 状態しか観測させていない[4]。また図1からも分かるように A型2重項分裂が回転準位以上に大きく分裂していることから、今回観測したこのため超微細構造の解析においては電子状態として $A_2^4\Pi_{1/2}$ 状態のみを考慮し、effective な超微細構造定数を決めることとする。超微細構造の解析は $X_1^2\Pi_{1/2}$ 状態の解析[2]で使われた Hamiltonian を基に以下の Hamiltonian を用いる。



図 3. A₂, X₁状態の エネルギー準位 (X₁状態は[2]より引用)

$$\mathbf{H}_{\rm hfs} = aI_zL_z + b_F\mathbf{I}\cdot\mathbf{S} + c(I_zS_z - \frac{\mathbf{I}\cdot\mathbf{S}}{3}) + \frac{d}{2}(\Lambda_+^2I_-S_- + \Lambda_-^2I_+S_+) + \frac{eQq(3I_z - \mathbf{I}^2)}{4I(2I - 1)} + \frac{eQq_2}{2}(I_+I_- + I_-I_+)$$

この Hamiltonian においては核スピン・回転相互作用 C_I I・N は無視している。これは、X 状態 での核スピン・回転相互作用係数 C_I は 0.16797(93)MHz[2]であり、今回の半導体レーザー分光の精 度 100MHz より十分に小さいためである。当日この Hamiltonian での超微細構造定数について報告 する。

【参考文献】

[1] J. J. Hudson, D. M. Kara, I. J. Smallman, B. E. Sauer, M. R. Tarbutt and E. A. Hinds, Nature **473** (2011) 493-497

[2] E.A. Cohen, D.M. Goodridge, K. Kawaguchi, E.H. Fink and K.D. Setzer, Journal of Molecular Spectroscopy 239 (2006)16-23

[3] R. F. Barrow, W. J. M. Gissane and D. Richards, Proc. R. Soc. Lond. A 300 (1967) 469-486

[4] O. Shestakov, R. Breidohr, H. Demes, K. D. Setzer, and E. H. Fink, Journal of Molecular Spectroscopy **190** (1998) 28-77

[5] S.Gerstenkorn and P.Luc, "Atlas du Spectre d'Absorption de la molecule d'Iodine" (1978)