

核スピン5/2エネルギー準位 $\pm 3/2 \sim \pm 5/2$ 間の遷移に もとづく粉末核四極共鳴ゼーマン効果の研究

—吸収信号波形計算とシミュレーション—

恵下 斂

**Powder Zeeman NQR Study on the Transition of the Energy Levels
between $\pm 3/2$ and $\pm 5/2$ for a Nuclear Spin of $5/2$
- A Calculation of the Absorption Signal Wave Form and its Simulation -**

Osamu EGE

要 旨

核スピン5/2を含む試料の核四極共鳴 (NQR) では、エネルギー準位 $\pm 1/2 - \pm 3/2$ 間と $\pm 3/2 - \pm 5/2$ 間の2本の吸収線があるので、その共鳴振動数を測定するだけで、核四極結合定数(E)と核の位置における電場勾配の非対称定数()を求めることができる。

また、粉末試料を用いた場合、2本の吸収線うちの低いほうの1本の吸収線とそのゼーマン効果を測ることで、吸収線の形から、Eと が求まることがわかっている。

ここでは高いほうの1本 (準位 $\pm 3/2 - \pm 5/2$ 間の遷移) について、粉末試料NQRゼーマン効果 (PZNR) の予測吸収波形の計算とコンピュータシミュレーションを行い、 と波形の関係について考察した。

その結果、 $\theta = 0$ で静磁場 H_0 と振動磁場 H_r の角度 $B = 0$ °の場合、伏せ御椀型の波形の中央に一つのピークが生じ、 B が大きくなるとそれにともないピークが二つに分かれて離れていくことがわかった。また $B = 90$ °の場合は、ピークを少し残しながら両サイドに二つの肩を持つ鞍型波形を作ることがわかった。

For the nuclear quadrupole resonance of a sample with a spin $5/2$, there exists two absorption lines due to the energy levels between $\pm 1/2 - \pm 3/2$ and $\pm 3/2 - \pm 5/2$, so that it is able to determine the quadrupole coupling constant (E) and the asymmetry parameter () at a nuclear cite only from the observation of the resonance frequencies.

In this issue, for the higher one (due to the transition levels between $\pm 3/2$ and $\pm 5/2$) of two frequencies, we calculated for the expected absorption wave forms of a Powder Zeeman NQR (PZNR) and made its computer simulation, and discussed the wave forms concerning .

As a result, it is found that a peak appears at the middle of a bowl-type wave form under two magnetic fields (a static magnetic field and an oscillating magnetic field) in

a same direction, and splits into two peaks as wide as the magnitude of . In the case that the two magnetic fields are set at right angle, the wave form has shoulders at the both sides of the wave form like a saddle leaving the small peaks.

1. はじめに

粉末試料核四極共鳴 (PZNQR) について、これまで多くの研究がなされているが、ここで取り扱う内容に係る文献として例えば[1]-[10]が挙げられる。

核スピン5/2の核についての核四極共鳴 (NQR) の場合は、NQR吸収線が一つの核種について2本存在するので、ゼーマン効果を補助的に測定しなくても、その2本の吸収線の振動数を測定するだけで、核四極結合定数 (E) と核の位置の電場勾配の非対称定数 () を同時に求めることができる。

また、 が比較的小さい (約0.4以下) 場合は、2本の吸収線のうちの振動数が低い方の吸収線 (エネルギー準位 $\pm 1/2 - \pm 3/2$ の遷移) だけを用い、そのゼーマン効果を測ることで、スピン3/2のPZNQRのときと同様にEと を求めることができる[4]-[8]。

今回は2本の吸収線のうち高い方 (準位 $\pm 3/2 - \pm 5/2$ の遷移) について、PZNQRの波形計算とコンピュータシミュレーションを行って、 と波形との関連を検討した。

吸収波形の計算方法としてはこれまでと同様に、量子力学的摂動論により に関する2次の項まで求めることにより、エネルギーと波動関数を近似的に求め、シミュレーションに使用した[6]-[9]。

PZNQR (powder Zeeman NQR) すなわち粉末核四極共鳴の考え方としては、粉末結晶つまりいろいろな方向を向く多結晶に対して一つの方向から静磁場 H_0 が加えることを、逆に一つの単結晶に対してあらゆる方向から (空間的に均一になるように多方向から) 静磁場 H_0 が加えられていることと等価であると考え。そのように考えるとコンピュータプログラミングすなわちシミュレーションが可能になる。

2. 計算

【1】核四極共鳴エネルギー

スピン5/2を持つ核種のPZNQRでエネルギー準位 $\pm 3/2 - \pm 5/2$ 間の遷移の波形計算については、基本的なところは準位 $\pm 1/2 - \pm 3/2$ の遷移についての計算[9]と同じとなるので重複をさけるため前半分についてはかなりの部分を省略した。後半部分は異なってくるので省略しないようにしている。

まずNQRのエネルギー演算子 \hat{H}_Q であるが、スピン演算子を \hat{I} , 各スピン成分演算子を $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$, 非対称定数を とし、 $A = \frac{e^2 Qq}{4I(2I-1)}$ とすると、

$$\hat{H}_Q = A(3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2) + \eta A(3\hat{I}_x^2 - \hat{I}_y^2) \dots\dots\dots (1)$$

である。

\hat{H}_Q の固有関数を Ψ_m と書き、固有値を E_m とし、 による摂動計算で2次摂動項まで求めると、次のように近似的固有値と固有関数が得られる。

$$E \cong A \left\{ 3m^2 - I(I+1) \right\} + 0 + A\eta^2 \left\{ \frac{f(I, m-1)}{12(m-1)} - \frac{f(I, m+1)}{12(m+1)} \right\} \dots\dots\dots (2)$$

$$\Psi_m \cong a_{m-4} \Psi_{m-4}^{(0)} + a_{m-2} \Psi_{m-2}^{(0)} + a_m \Psi_m^{(0)} + a_{m+2} \Psi_{m+2}^{(0)} + a_{m+4} \Psi_{m+4}^{(0)} \dots\dots\dots (3)$$

ここで $\Psi_m^{(0)}$ は球調和関数で、各項の係数は

$$a_m = 1 - \frac{1}{288} \left\{ \frac{f(I, m-1)}{(m-1)^2} + \frac{f(I, m+1)}{(m+1)^2} \right\}$$

$$a_{m\pm 2} = \mp \frac{\eta f^{\frac{1}{2}}(I, m\pm 1)}{12(m\pm 1)} \dots\dots\dots (4)$$

$$a_{m\pm 4} = \frac{\eta^2 f^{\frac{1}{2}}(I, m\pm 1) f^{\frac{1}{2}}(I, m\pm 3)}{288(m\pm 1)(m\pm 2)}$$

であり、ここで使われる略記号として、次のような効率的な記法 $f(I, m)$ が用いられている[1][2]。

$$\left\langle m+1 \left| \hat{H} \right| m-1 \right\rangle = A\eta \frac{1}{2} \sqrt{(I^2 - m^2) \{ (I+1)^2 - m^2 \}} = A\eta f^{\frac{1}{2}}(I, m)$$

$$\left(\text{ここで, } f(I, m) = \frac{1}{4} (I^2 - m^2) \{ (I+1)^2 - m^2 \} \right) \dots\dots\dots (5)$$

したがって、核スピン5/2の場合のNQRエネルギー準位は

$$E_{\pm 5/2} = A \left(10 + \frac{5}{9} \eta^2 \right) \dots\dots\dots (6)$$

$$E_{\pm 3/2} = A \left(-2 + 3\eta^2 \right) \dots\dots\dots (7)$$

$$E_{\pm 1/2} = A \left(-8 - \frac{32}{9} \eta^2 \right) \dots\dots\dots (8)$$

となる。ここで

$$A = \frac{e^2 Q q}{40} \dots\dots\dots (9)$$

したがって準位間の差は

$$E_{\pm 5/2} - E_{\pm 3/2} = \frac{3e^2 Q q}{10} \left(1 - \frac{11}{54} \eta^2 \right) \dots\dots\dots (10)$$

$$E_{\pm 3/2} - E_{\pm 1/2} = \frac{3e^2 Q q}{20} \left(1 + \frac{59}{54} \eta^2 \right) \dots\dots\dots (11)$$

となり、周波数や遷移確率を計算するための基底関数は(3)(4)より

$$\Psi_{5/2} = a_{-3/2} \Psi_{-3/2}^{(0)} + a_{1/2} \Psi_{1/2}^{(0)} + a_{5/2} \Psi_{5/2}^{(0)} + a_{9/2} \Psi_{9/2}^{(0)} + a_{13/2} \Psi_{13/2}^{(0)}$$

$$= \frac{\sqrt{5}}{36} \eta^2 \Psi_{-3/2}^{(0)} + \frac{\sqrt{10}}{18} \eta \Psi_{1/2}^{(0)} + \left(1 - \frac{5}{324} \eta^2 \right) \Psi_{5/2}^{(0)} \dots\dots\dots (12)$$

以下同様に

$$\Psi_{3/2} = -\frac{\sqrt{5}}{12} \eta^2 \Psi_{-5/2}^{(0)} + \frac{\sqrt{2}}{2} \eta \Psi_{-1/2}^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{4} \eta^2 \right) \Psi_{3/2}^{(0)} \dots\dots\dots (13)$$

$$\Psi_{1/2} = -\frac{\sqrt{2}}{2} \eta \Psi_{-3/2}^{(0)} + \left(1 - \frac{43}{162} \eta^2 \right) \Psi_{1/2}^{(0)} - \frac{\sqrt{10}}{18} \eta \Psi_{5/2}^{(0)} \dots\dots\dots (14)$$

$$\Psi_{-1/2} = -\frac{\sqrt{10}}{18} \eta \Psi_{-5/2}^{(0)} + \left(1 - \frac{43}{162} \eta^2 \right) \Psi_{-1/2}^{(0)} - \frac{\sqrt{2}}{2} \eta \Psi_{3/2}^{(0)} \dots\dots\dots (15)$$

$$\Psi_{-\frac{3}{2}} = \left(1 - \frac{1}{4}\eta^2\right)\Psi_{-\frac{3}{2}}^{(0)} + \frac{\sqrt{2}}{2}\eta\Psi_{\frac{1}{2}}^{(0)} - \frac{\sqrt{5}}{12}\eta^2\Psi_{\frac{5}{2}}^{(0)} \quad \dots\dots\dots(16)$$

$$\Psi_{-\frac{5}{2}} = \left(1 - \frac{5}{324}\eta^2\right)\Psi_{-\frac{5}{2}}^{(0)} + \frac{\sqrt{10}}{18}\eta\Psi_{-\frac{1}{2}}^{(0)} + \frac{\sqrt{5}}{36}\eta^2\Psi_{\frac{3}{2}}^{(0)} \quad \dots\dots\dots(17)$$

と得られる。

ここで、基底関数を構成する球調和関数に対する各スピン成分演算子の行列要素は以下の表のようになるので、

表 1 : 球調和関数を基底とした \hat{L}_x の行列

	$\Psi_{-\frac{5}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{-\frac{3}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{-\frac{1}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{\frac{1}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{\frac{3}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{\frac{5}{2}}^{(0)}$
$\Psi_{-\frac{5}{2}}^{(0)}$	0	$\frac{\sqrt{5}}{2}$	0	0	0	0
$\Psi_{-\frac{3}{2}}^{(0)}$	$\frac{\sqrt{5}}{2}$	0	$\sqrt{2}$	0	0	0
$\Psi_{-\frac{1}{2}}^{(0)}$	0	$\sqrt{2}$	0	$\frac{3}{2}$	0	0
$\Psi_{\frac{1}{2}}^{(0)}$	0	0	$\frac{3}{2}$	0	$\sqrt{2}$	0
$\Psi_{\frac{3}{2}}^{(0)}$	0	0	0	$\sqrt{2}$	0	$\frac{\sqrt{5}}{2}$
$\Psi_{\frac{5}{2}}^{(0)}$	0	0	0	0	$\frac{\sqrt{5}}{2}$	0

表 2 : 球調和関数を基底とした \hat{L}_y の行列

	$\Psi_{-\frac{5}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{-\frac{3}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{-\frac{1}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{\frac{1}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{\frac{3}{2}}^{(0)}$	$\Psi_{\frac{5}{2}}^{(0)}$
$\Psi_{-\frac{5}{2}}^{(0)}$	0	$-\frac{\sqrt{5}}{2}i$	0	0	0	0
$\Psi_{-\frac{3}{2}}^{(0)}$	$\frac{\sqrt{5}}{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0	0	0
$\Psi_{-\frac{1}{2}}^{(0)}$	0	$\sqrt{2}i$	0	$-\frac{3}{2}i$	0	0
$\Psi_{\frac{1}{2}}^{(0)}$	0	0	$\frac{3}{2}i$	0	$-\sqrt{2}i$	0
$\Psi_{\frac{3}{2}}^{(0)}$	0	0	0	$\sqrt{2}i$	0	$-\frac{\sqrt{5}}{2}i$
$\Psi_{\frac{5}{2}}^{(0)}$	0	0	0	0	$\frac{\sqrt{5}}{2}i$	0

表3：球調和関数を基底とした \hat{I}_z の行列

	$\Psi_{-5/2}^{(0)}$	$\Psi_{-3/2}^{(0)}$	$\Psi_{-1/2}^{(0)}$	$\Psi_{1/2}^{(0)}$	$\Psi_{3/2}^{(0)}$	$\Psi_{5/2}^{(0)}$
$\Psi_{-5/2}^{(0)}$	$-\frac{5}{2}$	0	0	0	0	0
$\Psi_{-3/2}^{(0)}$	0	$-\frac{3}{2}$	0	0	0	0
$\Psi_{-1/2}^{(0)}$	0	0	$-\frac{1}{2}$	0	0	0
$\Psi_{1/2}^{(0)}$	0	0	0	$\frac{1}{2}$	0	0
$\Psi_{3/2}^{(0)}$	0	0	0	0	$\frac{3}{2}$	0
$\Psi_{5/2}^{(0)}$	0	0	0	0	0	$\frac{5}{2}$

これらの表を使い、(12) - (17)式を基底関数として、 $\langle \Psi_m | \hat{I}_x | \Psi_n \rangle = I_{xmn}$ のように各スピン成分演算子 \hat{I}_x , \hat{I}_y , \hat{I}_z の行列要素の計算をする。

例えば $I_{x \frac{5}{2} \frac{3}{2}}$ については、 $I_{x \frac{5}{2} \frac{3}{2}} \cong \frac{\sqrt{5}}{2} + \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2$ (η^3 以上の項は省略) のように求められる、以下同様にして、

$$\begin{aligned}
 I_{x \frac{5}{2} \frac{1}{2}} &= -\frac{\sqrt{10}}{6} \eta - \frac{\sqrt{10}}{36} \eta^2 ; I_{x \frac{5}{2} \frac{5}{2}} = \frac{5}{27} \eta^2 ; I_{x \frac{3}{2} \frac{1}{2}} = \sqrt{2} + \frac{11\sqrt{2}}{18} \eta - \frac{329\sqrt{2}}{324} \eta^2 ; \\
 I_{x \frac{3}{2} \frac{3}{2}} &= 2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 ; I_{x \frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \frac{3}{2} - 2\eta - \frac{14}{27} \eta^2 ; I_{y \frac{5}{2} \frac{3}{2}} = \frac{\sqrt{5}}{2} - \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 ; \\
 I_{y \frac{5}{2} \frac{1}{2}} &= -\frac{\sqrt{10}}{6} \eta + \frac{\sqrt{10}}{36} \eta^2 ; I_{y \frac{5}{2} \frac{5}{2}} = \frac{5}{27} \eta^2 ; I_{y \frac{3}{2} \frac{1}{2}} = \sqrt{2} - \frac{11\sqrt{2}}{18} \eta - \frac{329\sqrt{2}}{324} \eta^2 ; \\
 I_{y \frac{3}{2} \frac{3}{2}} &= 2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 ; I_{y \frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \frac{3}{2} + 2\eta - \frac{14}{27} \eta^2 ; I_{z \frac{5}{2} \frac{5}{2}} = \frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 ; I_{z \frac{5}{2} \frac{1}{2}} = -\frac{\sqrt{10}}{9} \eta ; \\
 I_{z \frac{5}{2} \frac{3}{2}} &= -\frac{2\sqrt{5}}{9} \eta^2 ; I_{z \frac{3}{2} \frac{3}{2}} = \frac{3}{2} - \eta^2 ; I_{z \frac{3}{2} \frac{1}{2}} = -\sqrt{2} \eta ; I_{z \frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \frac{1}{2} - \frac{76}{81} \eta^2 \dots\dots\dots(18)
 \end{aligned}$$

のように求められ、それらはまた以下の表のように行列で表される。それらの表から、たとえば $\langle \Psi_{-5/2} | \hat{I}_x | \Psi_{-1/2} \rangle = I_{x \frac{-5}{2} \frac{-1}{2}} = 0$ のように要素がゼロであるものが交互に現れることがわかる。

表 4 : \widehat{I}_x の行列

	$\Psi_{-\frac{5}{2}}$	$\Psi_{-\frac{3}{2}}$	$\Psi_{-\frac{1}{2}}$	$\Psi_{\frac{1}{2}}$	$\Psi_{\frac{3}{2}}$	$\Psi_{\frac{5}{2}}$
$\Psi_{-\frac{5}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{5}{2}}$
$\Psi_{-\frac{3}{2}}$	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$	0	$I_{x\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}$	0
$\Psi_{-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$
$\Psi_{\frac{1}{2}}$	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0
$\Psi_{\frac{3}{2}}$	0	$I_{x\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}$	0	$I_{x\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$
$\Psi_{\frac{5}{2}}$	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{5}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$I_{x\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$	0

表 5 : \widehat{I}_y の行列

	$\Psi_{-\frac{5}{2}}$	$\Psi_{-\frac{3}{2}}$	$\Psi_{-\frac{1}{2}}$	$\Psi_{\frac{1}{2}}$	$\Psi_{\frac{3}{2}}$	$\Psi_{\frac{5}{2}}$
$\Psi_{-\frac{5}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{5}{2}-\frac{5}{2}}$
$\Psi_{-\frac{3}{2}}$	$iI_{y\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}$	0
$\Psi_{-\frac{1}{2}}$	0	$iI_{y\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$
$\Psi_{\frac{1}{2}}$	$iI_{y\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$iI_{y\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0
$\Psi_{\frac{3}{2}}$	0	$iI_{y\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}$	0	$iI_{y\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$-iI_{y\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$
$\Psi_{\frac{5}{2}}$	$iI_{y\frac{5}{2}-\frac{5}{2}}$	0	$iI_{y\frac{5}{2}-\frac{1}{2}}$	0	$iI_{y\frac{5}{2}-\frac{3}{2}}$	0

(ただし i は虚数単位)

表 6 : \hat{I}_z の行列

	$\Psi_{-\frac{5}{2}}$	$\Psi_{-\frac{3}{2}}$	$\Psi_{-\frac{1}{2}}$	$\Psi_{\frac{1}{2}}$	$\Psi_{\frac{3}{2}}$	$\Psi_{\frac{5}{2}}$
$\Psi_{-\frac{5}{2}}$	$-I_{z\frac{5}{2}\frac{5}{2}}$	0	$-I_{z\frac{5}{2}\frac{1}{2}}$	0	$-I_{z\frac{5}{2}\frac{3}{2}}$	0
$\Psi_{-\frac{3}{2}}$	0	$-I_{z\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$	0	$-I_{z\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$	0	$I_{z\frac{5}{2}\frac{3}{2}}$
$\Psi_{-\frac{1}{2}}$	$-I_{z\frac{5}{2}\frac{1}{2}}$	0	$-I_{z\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$	0	$I_{z\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$	0
$\Psi_{\frac{1}{2}}$	0	$-I_{z\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$	0	$I_{z\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$	0	$I_{z\frac{5}{2}\frac{1}{2}}$
$\Psi_{\frac{3}{2}}$	$-I_{z\frac{5}{2}\frac{3}{2}}$	0	$I_{z\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$	0	$I_{z\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$	0
$\Psi_{\frac{5}{2}}$	0	$I_{z\frac{5}{2}\frac{3}{2}}$	0	$I_{z\frac{5}{2}\frac{1}{2}}$	0	$I_{z\frac{5}{2}\frac{5}{2}}$

【2】 静磁場が加わった場合（ゼーマン効果）

静磁場が加えられたときに生じるゼーマン効果のエネルギーを H_M とすると、NQRを含めた全エネルギー H は演算子表示で

$$\hat{H} = \hat{H}_Q + \hat{H}_M \dots\dots\dots (19)$$

である。ここで

$$\hat{H}_M = \gamma \hbar \hat{I} \cdot H = \gamma \hbar (\hat{I}_x H_x + \hat{I}_y H_y + \hat{I}_z H_z) \dots\dots\dots (20)$$

であり、 γ は核の磁気回転比、 \hbar はディラック h 、 \hat{I} は核スピンベクトル演算子、 H と H_x, H_y, H_z はそれぞれ外部静磁場ベクトルと電場勾配主軸に対するその磁場成分である。

E_{Qm} と $E_{M\pm m}$ について具体的にまとめると

$$E_{Qm} : E_{Q\frac{5}{2}} = E_{\pm\frac{5}{2}} = A \left(10 + \frac{5}{9} \eta^2 \right) \dots\dots\dots (21)$$

$$E_{Q\frac{3}{2}} = E_{\pm\frac{3}{2}} = A \left(-2 + 3\eta^2 \right) \dots\dots\dots (22)$$

$$E_{Q\frac{1}{2}} = E_{\pm\frac{1}{2}} = A \left(-8 - \frac{32}{9} \eta^2 \right) \dots\dots\dots (23)$$

$$E_{M\pm m} : E_{M\pm\frac{5}{2}} = \pm \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(-\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (24)$$

$$E_{M\pm\frac{3}{2}} = \pm \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (25)$$

$$E_{M\pm\frac{1}{2}} = \pm \left\{ \left(-\frac{1}{2} + \frac{76}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{3}{2} - 2\eta - \frac{14}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{3}{2} + 2\eta - \frac{14}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (26)$$

これらの対角化を許した基底関数を $\xi_{\pm m}$ とすると、それらは

$$\begin{aligned}\xi_m &= a_m \Psi_m + b_m \Psi_{-m} \\ \xi_{-m} &= a_{-m} \Psi_m + b_{-m} \Psi_{-m} \dots\dots\dots (27)\end{aligned}$$

であり、その係数 $a_{\pm m}$, $b_{\pm m}$ については次のように公式化できる。

$$a_m a_m^* + b_m b_m^* = 1 \text{ (規格化)} \dots\dots\dots (28)$$

$$a_m^* = b_{-m}; a_{-m}^* = -b_m; b_m^* = -a_{-m}; b_{-m}^* = a_m \dots\dots\dots (29)$$

$$a_m a_m^* - b_m b_m^* = \frac{I_{zmm} H_z}{E_{M+m}} \dots\dots\dots (30)$$

$$a_m b_m^* + a_m^* b_m = \frac{I_{xm-m} H_x}{E_{M+m}} \dots\dots\dots (31)$$

$$a_m b_m^* + a_m^* b_m = \frac{i I_{ym-m} H_y}{E_{M+m}} \dots\dots\dots (32)$$

これらの式は後で遷移強度の計算に用いる。

【3】共鳴周波数

ここからは[9]と異なる。すなわち準位 $\pm 3/2$ と $\pm 5/2$ にかぎってみると、(21)(22)(24)(25)式より次ぎの4つのエネルギーの準位が求まる。

$$\begin{aligned}E_4 &= E_{Q\frac{5}{2}} + E_{M+\frac{5}{2}} \\ &= A \left(10 + \frac{5}{9} \eta^2 \right) + \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (33)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E_3 &= E_{Q\frac{5}{2}} + E_{M-\frac{5}{2}} \\ &= A \left(10 + \frac{5}{9} \eta^2 \right) - \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (34)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E_2 &= E_{Q\frac{3}{2}} + E_{M+\frac{3}{2}} \\ &= A \left(-2 + 3\eta^2 \right) + \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (35)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E_1 &= E_{Q\frac{3}{2}} + E_{M-\frac{3}{2}} \\ &= A \left(-2 + 3\eta^2 \right) - \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (36)\end{aligned}$$

準位 $E_1 \rightarrow E_4$, $E_2 \rightarrow E_4$, $E_1 \rightarrow E_3$, $E_2 \rightarrow E_3$ に対する遷移周波数を $\nu_{14}, \nu_{24}, \nu_{13}, \nu_{23}$ とし、さらに共鳴周波数の中心は常に $E_{Q\frac{5}{2}} - E_{Q\frac{3}{2}}$ (zero-field周波数) であるので、これを0とした換算周波数 ν' を導入すると、もっと簡単に表せて (hも省略して)

$$\begin{aligned}\nu'_{14} &= E_{M+\frac{5}{2}} - E_{M-\frac{3}{2}} = E_{M+\frac{5}{2}} + E_{M+\frac{3}{2}} \\ &= \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (37) \\ &\quad + \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\nu'_{24} &= E_{M+\frac{5}{2}} - E_{M+\frac{3}{2}} = E_{M+\frac{5}{2}} + E_{M-\frac{3}{2}} \\ &= - \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (38) \\ &\quad + \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nu'_{13} &= E_{M-\frac{5}{2}} - E_{M-\frac{3}{2}} = -E_{M+\frac{5}{2}} + E_{M+\frac{3}{2}} \\ &= \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3}\eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3}\eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (39) \\ &\quad - \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81}\eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27}\eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27}\eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nu'_{23} &= E_{M-\frac{5}{2}} - E_{M+\frac{3}{2}} = -E_{M+\frac{5}{2}} - E_{M+\frac{3}{2}} \\ &= - \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3}\eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3}\eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (40) \\ &\quad - \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81}\eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27}\eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27}\eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

となる。さらに、静磁場によってゼーマン分裂した最近接準位間のエネルギー（通常この間での遷移はない）を、それぞれ ν'_{34}, ν'_{12} とすると

$$\nu'_{34} = E_{M+\frac{5}{2}} - E_{M-\frac{5}{2}} = 2 \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81}\eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27}\eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27}\eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (41)$$

$$\nu'_{12} = E_{M+\frac{3}{2}} - E_{M-\frac{3}{2}} = 2 \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3}\eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3}\eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \dots (42)$$

となり、これらをそれぞれ $E_{\frac{5}{2}}, E_{\frac{3}{2}}$ と書くと、後述の F_{Mmn} は $F_{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}}$ と書かれて、次のようになる。

$$F_{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}} = \frac{1}{E_{\frac{5}{2}} \cdot E_{\frac{3}{2}}} \dots\dots\dots (43)$$

【4】吸収強度

時間に依存する摂動論によって、共鳴周波数 ν_{kl} （あるいは換算周波数 ν'_{kl} ）に対応する遷移確率の相対強度（吸収強度） T_{kl} が次のように求められる。

$$\begin{aligned} T_{kl} &= \left| \langle \xi_k | \gamma \hbar \hat{I}_r H_r | \xi_l \rangle \right|^2 = \gamma^2 \hbar^2 \left| \langle \xi_k | \hat{I}_x H_{rx} + \hat{I}_y H_{ry} + \hat{I}_z H_{rz} | \xi_l \rangle \right|^2 \\ &= \gamma^2 \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\langle \xi_k | \hat{I}_x H_{rx} + \hat{I}_y H_{ry} + \hat{I}_z H_{rz} | \xi_l \rangle \langle \xi_l | \hat{I}_x H_{rx} + \hat{I}_y H_{ry} + \hat{I}_z H_{rz} | \xi_k \rangle \dots\dots\dots (44) \right. \\ &\quad \left. + \langle \xi_l | \hat{I}_x H_{rx} + \hat{I}_y H_{ry} + \hat{I}_z H_{rz} | \xi_k \rangle \langle \xi_k | \hat{I}_x H_{rx} + \hat{I}_y H_{ry} + \hat{I}_z H_{rz} | \xi_l \rangle \right) \\ &= \gamma^2 \hbar^2 \sum_{i,j} H_{ri} H_{rj} \frac{1}{2} \left(\langle \xi_k | \hat{I}_i | \xi_l \rangle \langle \xi_l | \hat{I}_j | \xi_k \rangle + \langle \xi_l | \hat{I}_i | \xi_k \rangle \langle \xi_k | \hat{I}_j | \xi_l \rangle \right) \end{aligned}$$

(ここで $i, j = x, y, z$)

$$= \gamma^2 \hbar^2 \sum_{i,j} H_{ri} H_{rj} J_{ij}(k, l) \quad (J_{ij}(k, l) \text{ は遷移能率と呼ばれる}) \dots\dots\dots (45)$$

ここで $k, l = 1, 2, 3, 4$ の4つがあるが、実際には $T_{24} = T_{13}, T_{14} = T_{23}$ なので2つの場合を計算すればよいことになる。

遷移能率について見ていくと、たとえば J_{xx} で $k = \pm m \rightarrow l = \pm n$ では

$$\begin{aligned} J_{xx}(\pm m, \pm n) &= \frac{1}{2} \left(\langle \xi_{\pm m} | \hat{I}_x | \xi_{\pm n} \rangle \langle \xi_{\pm n} | \hat{I}_x | \xi_{\pm m} \rangle + \langle \xi_{\pm n} | \hat{I}_x | \xi_{\pm m} \rangle \langle \xi_{\pm m} | \hat{I}_x | \xi_{\pm n} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\langle a_{\pm m} \Psi_m + b_{\pm m} \Psi_{-m} | \hat{I}_x | a_{\pm n} \Psi_n + b_{\pm n} \Psi_{-n} \rangle \langle a_{\pm n} \Psi_n + b_{\pm n} \Psi_{-n} | \hat{I}_x | a_{\pm m} \Psi_m + b_{\pm m} \Psi_{-m} \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle a_{\pm n} \Psi_n + b_{\pm n} \Psi_{-n} | \hat{I}_x | a_{\pm m} \Psi_m + b_{\pm m} \Psi_{-m} \rangle \langle a_{\pm m} \Psi_m + b_{\pm m} \Psi_{-m} | \hat{I}_x | a_{\pm n} \Psi_n + b_{\pm n} \Psi_{-n} \rangle \right) \dots\dots\dots (46) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left\{ (a_{\pm m}^* a_{\pm n} \langle \Psi_m | \hat{I}_x | \Psi_n \rangle + a_{\pm m}^* b_{\pm n} \langle \Psi_m | \hat{I}_x | \Psi_{-n} \rangle \right. \\
&\quad + b_{\pm m}^* a_{\pm n} \langle \Psi_{-m} | \hat{I}_x | \Psi_n \rangle + b_{\pm m}^* b_{\pm n} \langle \Psi_{-m} | \hat{I}_x | \Psi_{-n} \rangle) \\
&\quad \cdot (a_{\pm n}^* a_{\pm m} \langle \Psi_n | \hat{I}_x | \Psi_m \rangle + a_{\pm n}^* b_{\pm m} \langle \Psi_n | \hat{I}_x | \Psi_{-m} \rangle) \\
&\quad + b_{\pm n}^* a_{\pm m} \langle \Psi_{-n} | \hat{I}_x | \Psi_m \rangle + b_{\pm n}^* b_{\pm m} \langle \Psi_{-n} | \hat{I}_x | \Psi_{-m} \rangle) \\
&\quad + (a_{\pm n}^* a_{\pm m} \langle \Psi_n | \hat{I}_x | \Psi_m \rangle + a_{\pm n}^* b_{\pm m} \langle \Psi_n | \hat{I}_x | \Psi_{-m} \rangle) \\
&\quad + b_{\pm n}^* a_{\pm m} \langle \Psi_{-n} | \hat{I}_x | \Psi_m \rangle + b_{\pm n}^* b_{\pm m} \langle \Psi_{-n} | \hat{I}_x | \Psi_{-m} \rangle) \\
&\quad \cdot (a_{\pm m}^* a_{\pm n} \langle \Psi_m | \hat{I}_x | \Psi_n \rangle + a_{\pm m}^* b_{\pm n} \langle \Psi_m | \hat{I}_x | \Psi_{-n} \rangle) \\
&\quad \left. + b_{\pm m}^* a_{\pm n} \langle \Psi_{-m} | \hat{I}_x | \Psi_n \rangle + b_{\pm m}^* b_{\pm n} \langle \Psi_{-m} | \hat{I}_x | \Psi_{-n} \rangle \right\}
\end{aligned}$$

$\langle \Psi_{\pm m} | \hat{I}_x | \Psi_{\pm n} \rangle = I_{x \pm m \pm n}$ であったので, $J_{xx}(\pm m, \pm n) = J_{xx}(\pm)$ とし, (18) を使って具体的に以下ようになる。

$$\begin{aligned}
J_{xx}(\pm) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5}}{2} + \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 \right)^2 \left[1 \pm F_{\frac{5}{2} \frac{3}{2}} \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right) \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right) H_z^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) H_x^2 - \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) H_y^2 \right\} \right] \dots\dots\dots (47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{yy}(\pm) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5}}{2} - \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 \right)^2 \left[1 \pm F_{\frac{5}{2} \frac{3}{2}} \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right) \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right) H_z^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) H_x^2 - \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) H_y^2 \right\} \right] \dots\dots\dots (48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{zz}(\pm) &= \frac{1}{2} \left(\frac{2\sqrt{5}}{9} \eta^2 \right)^2 \left[1 \pm F_{\frac{3}{2} \frac{1}{2}} \left\{ - \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right) \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right) H_z^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) H_y^2 \right\} \right] \dots\dots\dots (49)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{xy}(\pm) &= \pm \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5}}{2} + \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 \right) \left(\frac{\sqrt{5}}{2} - \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 \right) \\
&\quad \left\{ - \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) - \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) \right\} F_{\frac{5}{2} \frac{3}{2}} H_x H_y \dots\dots\dots (50)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{yz}(\pm) &= \pm \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5}}{2} - \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 \right) \left(-\frac{2\sqrt{5}}{9} \eta^2 \right) \left\{ - \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right) \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) \right\} F_{\frac{5}{2} \frac{3}{2}} H_y H_z \dots\dots\dots (51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{zx}(\pm) &= \pm \frac{1}{2} \left(-\frac{2\sqrt{5}}{9} \eta^2 \right) \left(\frac{\sqrt{5}}{2} + \frac{\sqrt{5}}{9} \eta - \frac{4\sqrt{5}}{81} \eta^2 \right) \left\{ - \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right) \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right) \right. \\
&\quad \left. + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right) \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right) \right\} F_{\frac{5}{2} \frac{3}{2}} H_z H_x \dots\dots\dots (52)
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
F_{\frac{5}{2} \frac{3}{2}} &= \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{3}{2} - \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(2\eta + \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(2\eta - \frac{1}{3} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \\
&\quad \cdot \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{5}{2} - \frac{5}{81} \eta^2 \right)^2 H_z^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_x^2 + \left(\frac{5}{27} \eta^2 \right)^2 H_y^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (53)
\end{aligned}$$

である。

(47) - (52)の $J(\pm)$ の (+)のものについては $T_{24} = T_{13}$ の遷移 (inner pair) に対応し, (-)のものについては $T_{14} = T_{23}$ (outer pair) に対応している。

(47) - (53)に現れる H_x, H_y, H_z については, 電場勾配の主軸に対する静磁場 H_0 の成分であり, コンピュータプログラムでは

$$H_x = \sin \theta \cos \phi, H_y = \sin \theta \sin \phi, H_z = \cos \theta \quad \dots\dots\dots (54)$$

として, 粉末試料の場合には θ, ϕ をあらゆる方向で空間的に均等になるようにとって計算する。

他方, (45)(46)に現れる H_{rx}, H_{ry}, H_{rz} は振動磁場 (ラジオ波) H_1 の成分であり, 試料コイルを静磁場 H_0 と同軸平行にとる場合は(54)と同じ θ, ϕ でよいが, 角度をもたせるときは, 別の θ', ϕ' を設定しなければならない。

ここでは6本の H_i が均等に H_0 の周りを囲むように, しかもその角度が 0° から 90° まで変化できるようにしてある。

(47) - (52)からなる吸収強度を示す(46)とそれらの θ, ϕ に対応する周波数を示す(37) - (40)を計算するコンピュータ・プログラムを作成する。その際に, 磁場 H_0 の向きを示す θ, ϕ が空間的にあらゆる方向から加えられ, H_0 とその一つ一つを取り囲み, 一定の角度 B をもった H_i が均一に分布するようにプログラミングしている。

3. シミュレーションの結果

θ, ϕ 及び θ', ϕ' から計算される換算周波数とそれらに対する遷移強度を示す素点は以下の各図のaとcに当たる。各図とも横軸は換算周波数を示しており, 縦軸はそれらに対する遷移強度となっている (今回は横軸も縦軸も波形と重なるので省略)。実験測定で得られる波形はこの素点でなく, 素点が一つずつガウス分布をもつとして計算し直したもので, それらはbとdで示される。しかしその計算は通常時間がかかりすぎるので, ここではBrooker等の便利な方法[3]を用いて能率的に行っている。

つまり各図において, a, bは $B = 0^\circ (H_Q // H_r)$ のものであり, c, dは $B = 90^\circ (H_Q \perp H_r)$ のものである。またa, cは吸収強度の素点を表し, b, dはそれにガウス関数をかけたエンベロープであり実際に観測される波形に近いものと思われる。

1図は非常に小さい ($\beta = 0.00001$) の粉末波形であり, 御椀型波形の中央にユニコーン型の角のようなピークが見られる。Varty等の結果[10]ではこのピークはなく, 逆に鋭い凹みになっているが, これはガウス分布をかけていないため, それはこの図のaによく似ている。図2, 図3, 図4には $\beta = 0.1, 0.2, 0.4$ のシミュレーション波形を示す。 β が大きくなるにつれて1本のピークが2つに分かれ, 間隔がひろがっていくさまが見てとれる。

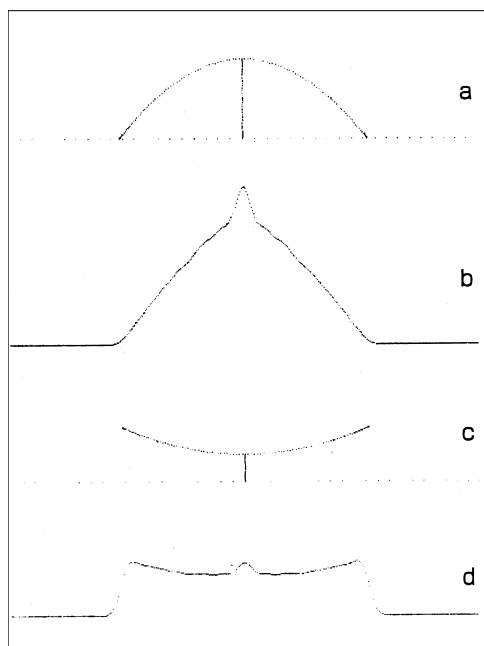


図 1 = 0.00001

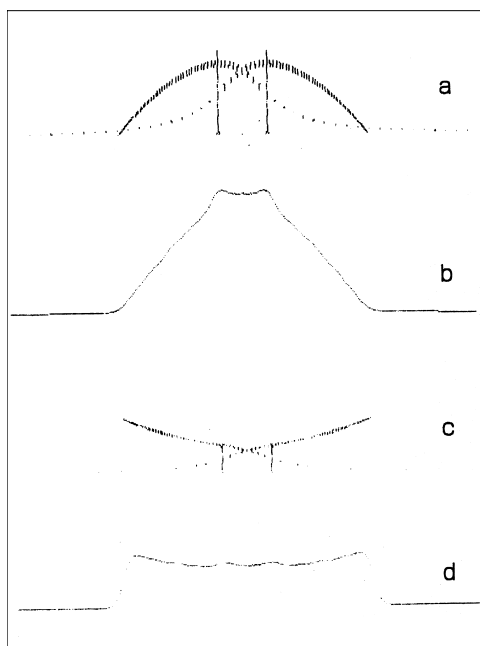


図 2 = 0.1

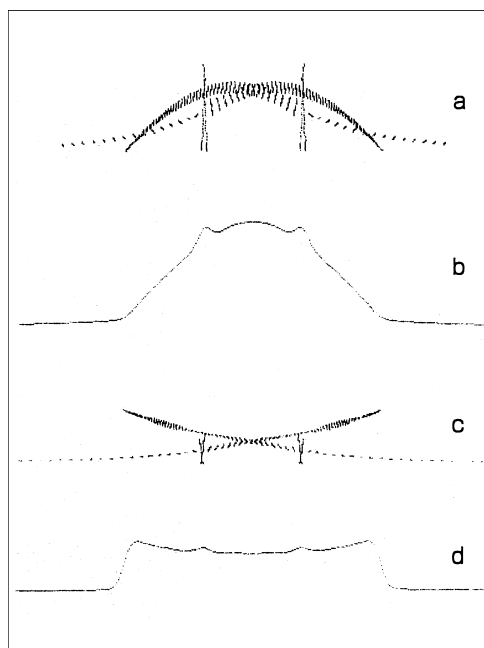


図 3 = 0.2

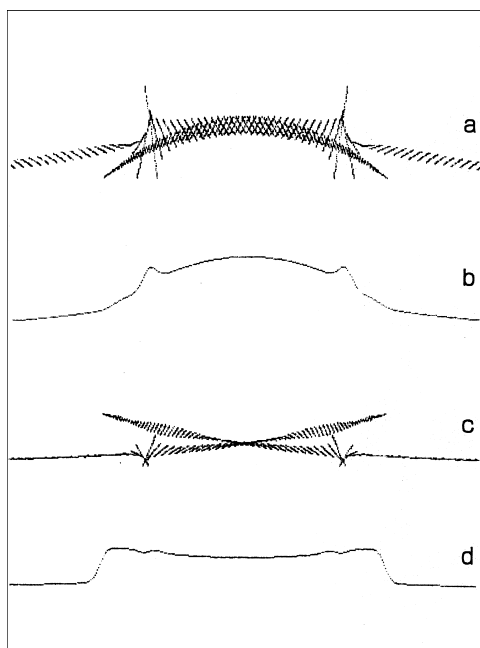


図 4 = 0.4

4. まとめ

図にあるエンベロープ波形(b,d)にある二つのピークの換算周波数は（低いほうから） $-2\eta - \frac{4}{27}\eta^2$, $2\eta + \frac{4}{27}\eta^2$ となっているので、ピークの周波数を測定すれば に関する情報を得ることはできると思われる。しかしながらVarty等が「あまりよい情報は得られない」と指摘しているように[10], を求めるためには ゼロフィールドにおける2本の吸収線から求める方法,あるいは 低いほうの1本とそのゼーマン効果から求める方法があって,特に高いほうの1本を使わなければならないという必然性もないように思われる。

文 献

- [1] M. Toyama, J. Phys. Soc. Jpn., 14, 1727(1959).
- [2] Y. Morino and M. Toyama, J. Chem. Phys., 35, 1289(1961).
- [3] H. R. Brooker and R. B. Creel, J. Chem.Phys., 61, 3658(1974).
- [4] O. Ege, J. Sci. Hiroshima Univ., A46, 21(1982).
- [5] O. Ege and H. Negita, Z. Naturforsch., 45a, 599(1990).
- [6] O. Ege, S. Hamai, and H. Negita, Z. Naturforsch., 47a, 401(1992).
- [7] O. Ege, S. Hamai, and H. Negita, J. Mol. Struct., 345, 139(1995).
- [8] O. Ege, S. Nishijima, E. Kimura, H. Akiyama, S. Hamai, and H. Negita, Z. Naturforsch., 53a, 314 (1998).
- [9] O. Ege, M. OKUNO, S. INO, S. TAKAO, and H. AKIYAMA, Mem. Fac. Educ. Miyazaki Univ., Nat. Sci., 86, 13(1999).
- [10] T. Varty, R. Julian, C. Brawn, and F. P. Temme, Z. Naturforsch., 45a, 550(1990).

(2006年9月30日受理)