

# 用伪谱方法计算磁场中的氢原子能谱<sup>y</sup>

邹远川, 乔豪学

(中国科学院武汉物理与数学研究所, 湖北 武汉 430071)

摘要: 介绍了用伪谱方法计算磁场中的氢原子, 通过对氢原子能级的计算, 可以看出其精度高, 收敛快, 并可用来计算任意强的均匀电场和磁场中的其它原子.

关键词: 伪谱; 能级; 氢原子

中图分类号: O32.60.+i; 31.20.Di 文献标识码: A

## 1 引言

均匀磁场中的氢原子体系由于受到两种对称性不同的力的作用(即球对称的库仑力和柱对称的磁力)而使其为一个不可完全分离变量的系统, 从而导致准确求解该体系薛定谔方程的困难. 人们为此作了大量工作, R 9 sner 等<sup>[1]</sup>在弱场和过渡区( $B \leq 4.7 \times 10^5 \text{T}$ )和强场区( $B > 4.7 \times 10^5 \text{T}$ )分别用球谐函数展开和朗道波函数展开法; Ivanov<sup>[2]</sup>用有限差分法改进了 R 9 sner 在过渡区的结果; Kaschier 等<sup>[3]</sup>和 Sherzer<sup>[4]</sup>采用了有限元方法; 习金华等<sup>[5]</sup>和饶建国等<sup>[6]</sup>用  $B$  样条有限基矢集计算了磁场 ( $B \leq 4.7 \times 10^8 \text{T}$ ) 中氢原子基态和一系列激发态.

本文采用伪谱方法计算了  $B \leq 4.7 \times 10^5 \text{T}$  中氢原子基态和激发态, 并和已有结果作了比较.

## 2 理论和方法

采用原子单位, 球坐标系, 能量用里德堡单位, 均匀磁场中的氢原子的薛定谔方程可写为:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r} - \frac{1}{2} \beta^2 r^2 \sin^2 \theta \right] \psi = E \psi, \quad (1)$$

式中  $\beta = B/B_0$ ,  $B$  为磁场强度,  $B_0 = 4.7 \times 10^5 \text{T}$ . 作如下映射:

$$r = r(x) = R_0 \frac{1+x}{1+2\alpha-x}, \quad y = \cos \theta, \quad (2)$$

其中  $\alpha = R_0/R_{\max}$ ,  $R_0$  和  $R_{\max}$  为映射参数<sup>[7]</sup>. 令

$$\Psi(x, y, \varphi) = \phi[r(x), \theta, \varphi] r(x) \sqrt{r'(x)}, \quad (3)$$

方程可写为:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{r'(x)} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} \frac{1}{r'(x)} + \frac{L^2}{2r^2(x)} - \frac{1}{r(x)} - \frac{1}{2} \beta r^2(x) (1-y^2) \right] \Psi = E \Psi, \quad (4)$$

此处  $\varphi$  方向量子数  $m$  为好量子数, 取  $m=0$ , 只剩二维, 波函数  $\Psi(x, y)$  展开如下:

$$\Psi(x, y) = \sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=1}^{N_2+1} f_i(x) g_j(y) \Psi(x_i, y_j), \quad (5)$$

其中  $f_i(x) = \frac{1}{N_1(N_2+1)P_{N_1}(x_i)}$ .

$$\frac{(x^2-1)P'_{N_1}(x)}{x-x_i}, \quad (6)$$

$$g_j(y) = \frac{1}{P'_{N_2+1}(y_j)} \frac{P_{N_2+1}(y)}{y-y_j}, \quad (7)$$

格点  $\{x_i\}$  和  $\{y_j\}$  分别为  $P'_{N_1}(x)$  和  $P_{N_2+1}(y)$  的零点,  $P_N(x)$  为勒让德多项式. 伪谱法的一个重要特征是方程(4)在格点  $(x_i, y_j)$  上严格成立, 可导出下述本征值问题:

$$W(N_1, x_1) W(N_2, y_j) \cdot$$

$$\sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=1}^{N_2+1} \hat{O}(x, y) f_i(x) g_j(y) \Psi(x_i, y_j) \Big|_{x=x_i, y=y_j} = \epsilon_j W(N_1, x_1) W(N_2, y_j) r'^2(x) \cdot$$

<sup>y</sup> 收稿日期: 2002 - 03 - 05; 修改日期: 2002 - 05 - 31

\* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目

作者简介: 邹远川(1979-), 男(汉族), 湖北宜昌人, 硕士研究生, 从事简单原子的强外场效应研究.

$$\sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=1}^{N_2+1} f_i(x) g_j(y) \Psi(x_i, y_j) \Big|_{x=x_i, y=y_j}, \quad (8)$$

矩阵形式:

$$A \Psi = EB \Psi, \quad (9)$$

上式可写为  $(N_1-1)(N_2+1) \times (N_1-1)(N_2+1)$  维 其中

$$A_{ij, IJ} = \left| \frac{1}{6} \frac{N_1(N_1+1)}{1-x_i^2} + \frac{r'^2(x_i)}{r^2(x_i)} \frac{(N_2+1)(N_2+2)}{6} - \frac{r'^2(x_i)}{r^2(x_i)} + \frac{r'^2(x_i)}{r^2(x_i)} \frac{1}{3(y_i^2-1)} \right| \cdot$$

$$W(N_1, x_i) W(N_2, y_j) \delta_I \delta_J + (-1)^{i+I} W(N_2, y_j) \sqrt{W(N_1, x_i) W(N_1, x_I)} \cdot$$

$$\frac{1}{(x_i-x_I)^2} \delta_J \xi(i, I) + (-1)^{j+J} W(N_1, x_i) \sqrt{(1-y_j^2)(1-y_J^2)} \frac{r'^2(x_i)}{r^2(x_i)} \frac{1}{(y_j-y_J)^2} \cdot$$

$$\sqrt{W(N_2, y_j) W(N_2, y_J)} \delta_I \xi(j, J) + \frac{1}{2} \beta^2 r'^2(x_i) r'^2(x_i) (1-y_j^2) \cdot$$

$$W(N_1, x_i) W(N_2, y_j) \delta_I \delta_J, \quad (10)$$

$$B_{ij, IJ} = r'^2(x_i) W(N_1, x_i) W(N_2, y_j) \delta_I \delta_J, \quad (11)$$

$\xi(n, m)$  定义为:

$$\xi(n, m) = \begin{cases} 1, & n \neq m \\ 0, & n = m \end{cases} \quad (12)$$

### 3 结果与讨论

本文计算了氢原子在均匀磁场 ( $0 \leq \beta \leq 1$ ) 的基态和几个激发态的能级, 所取参数值分别为  $N_1=101, N_2=19, R_0=250, R_{\max}=3\,600$ . 并与 Rösner 等<sup>[1]</sup>和饶建国等<sup>[6]</sup>的部分结果作了比较, 如表 1 所示. 从表中可看出, 在弱场区能级和前二者符合得很好. 特别是在取磁场为零时, 其能级几乎严格遵循解析解:  $1/n^2$ , 直到等于 40 时,  $E=0.000\,624\,9$  Ry, 增加  $r$  方向格点数,  $n$  可准确计算到更高. 而

在取上述参数时, 在一台普通微机上计算任意磁场强度的能级都只需几分钟, 可见在相同精度要求下伪谱法的计算量相对较小. 同时, 在过渡区该方法却不能够胜任, 如磁场为 1 ato. unit 时, 较高激发态的计算就不对了. 这是因为越在壳层外, 磁场强度越强, 磁场相对电场的作用越明显, 而库仑势是球对称的, 磁场所引起的能量偏移是柱对称的. 此时需要用柱坐标系中的伪谱方法<sup>[7]</sup>. 这是所有方法都不可避免的. 仅从相对库仑势较弱的场的结果看, 该方法在精度和速度方面都有其优越性. 由于该方法只需将势函数简单地代入, 若将其再应用于柱坐标中, 即可计算各种场强中的各种原子和离子的能级和波函数.

表 1 不同磁场下  $m=0$  束缚态的能级值

$\beta$	态	Rösner 等 <sup>[1]</sup>	饶建国等 <sup>[6]</sup>	本文
$1.0 \times 10^{-4}$	1s	1.000 200	1.000 200	1.000 199 980 0
	2p	0.250 199 9	0.250 199 9	0.250 199 880 0
	2s	0.250 199 7	0.250 199 7	0.250 199 720 0
	3d	0.111 310 7	0.111 310 7	0.111 310 697 4
	3p	0.111 310 4	0.111 310 4	0.111 310 391 1
	3s	0.111 309 5	0.111 309 5	0.111 309 544 9
	4s	0.062 694 78	0.062 694 77	0.062 694 774 5
$5.0 \times 10^{-4}$	1s	1.000 999		1.000 999 500 0
	2p	0.250 997		0.250 997 000 1
	2s	0.250 993 0		0.250 993 000 3
	3d	0.112 100 8		0.112 100 770 2
	3p	0.112 093 1		0.112 093 118 2

	3s	0.112 072 0		0.112 071 970 0
	4s	0.063 369 63		0.063 369 625 6
$1.0 \times 10^{-3}$	1s	1.001 988		1.001 998 000 0
	2p	0.251 988 0		0.251 988 001 3
	2s	0.251 972 0		0.251 972 005 1
	3d	0.113 069 8		0.113 069 771 7
	3p	0.113 039 2		0.113 039 223 7
	3s	0.112 954 7		0.112 954 737 5
	4s	0.063 981 70		0.063 981 702 8
$5.0 \times 10^{-3}$	1s	1.009 950		1.009 950 005 5
	2p	0.259 700 8		0.259 700 831 7
	2s	0.259 303 1		0.259 303 142 7
	3d	0.120 095 8		0.120 095 843 8
	3p	0.011 937 57		0.119 375 739 9
	3s	0.117 338 7		0.117 338 659 1
	4s	0.061 274 73		0.061 274 731 7
$1.0 \times 10^{-2}$	1s	1.019 800	1.019 800	1.019 800 088 2
	2p	0.268 812 9	0.268 812 9	0.268 812 932 0
	2s	0.267 248 4	0.267 248 4	0.267 248 355 0
	3d	0.127 233 9	0.127 233 9	0.127 233 870 9
	3p	0.124 757 1	0.124 757 1	0.124 757 123 8
	3s	0.117 268 5	0.117 268 5	0.117 268 467 8
	4s	0.047 966 96/8	0.048 614 47	0.048 614 462 1
$5.0 \times 10^{-2}$	1s	1.095 053		1.095 052 960 8
	2p	0.324 820 2		0.324 820 156 8
	2s	0.296 178 3		0.296 178 311 6
	3d	0.149 876 0		0.149 876 042 6
	3p	0.139 783 4		0.139 783 362 1
	3s	0.087 133 37		0.087 125 485 8
	4s			0.034 673 153 7
$1.0 \times 10^{-1}$	1s	1.180 763		1.180 763 130 1
	2p	0.370 368 1		0.370 368 082 1
	2s	0.297 973 4		0.297 973 356 0
	3d	0.145 113 9		0.145 108 644 6
	3p	0.149 850 9		0.149 846 573 9
	3s			0.145 108 644 6

## 参 考 文 献:

- [1] Rösner W, Wuner G, Herold H, *et al.* Hydrogen Atoms in Arbitrary Magnetic Fields. I. Energy Levels and Wavefunctions[J]. J Phys, 1984, **B17**: 29.
- [2] Ivanov M V. The Hydrogen Atom in a Magnetic Field of Intermediate Strength[J]. J Phys, 1988, **B21**: 447.
- [3] Kaschiev M S, Vinitzky S I, Vukajlovic F R. Hydrogen Atom H and H<sup>+</sup> 2 Molecule in Strong Magnetic Fields[J]. Phys Rev, 1980, **A22**: 557.

- [4] Shertzer J. Finite element Analysis of Hydrogen in Superstrong Magnetic Fields[J]. Phys Rev, 1989, **A39**: 3 833.
- [5] 习金华, 吴礼金. B-splines 有限基矢集用于多体微扰计算[J]. 物理学报, 1992, **41**: 1 759.
- [6] 饶建国, 习金华, 刘 鸿等. B-splines 有限基矢集用于计算磁场中氢原子能级[J]. 物理学报, 1994, **43**: 1 056.
- [7] Qiao Haoxue, Li Baiwen. Spectral Properties of Endohedrally Confined Hydrogen Atom and Hydrogen-like Ions Obtained by Using B-Spline Basis Set[J]. Commun Theor Phys, 2002, **37**: 15.

## Spectrum Calculations of Hydrogen in Magnetic Fields with Pseudospectral Method<sup>\*</sup>

ZOU Yuan chuan, QIAO Hao xue

(Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Science, Wuhan 430071, China)

**Abstract:** We use pseudospectral method in spherical coordinate to calculate the energy levels of hydrogen in magnetic fields up to  $10^4\text{T}$ . The results have high numerical accuracy and fast convergence. This method can be used in calculating other atoms in arbitrary electronic and magnetic fields.

**Key words:** pseudospectral; energy level; hydrogen

---

\* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China