

文章编号: 1007-4627(2002)02-0095-03

## 铍原子的能级和超精细结构的研究\*

王 菲, 苟秉聪, 俞开智

(北京理工大学应用物理系, 北京 100081)

**摘 要:** 采用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法, 并考虑相对论修正、质量极化效应等, 获得了铍原子低激发态  $1s^2 2s 2p \ ^3P^o$  和  $1s^2 2p^2 \ ^3P$  高精度的相对论能量. 同时还计算了铍原子超精细结构常数, 与其他理论和实验结果符合得很好.

**关键词:** 铍原子; 低激发态; 超精细结构

**中图分类号:** O562.1      **文献标识码:** A

近年来, 随着高分辨率束泊技术和原子束磁共振技术的发展, 以及许多理论方法<sup>[1-7]</sup>的广泛应用, 类铍四电子系统激发态的能级和超精细结构研究越来越引起实验和理论工作者<sup>[1-8]</sup>的广泛关注. 铍原子是四电子的复杂原子系统, 电子关联效应十分复杂. 这种系统的研究对发展多电子原子激发态理论和阐明电子间的关联效应等具有重要学术意义, 并对等离子体理论、天体物理及核聚变等领域均有重要应用价值. 众所周知, 原子能级的超精细结构, 是原子中的电子和原子核的电磁多极矩之间的相互作用引起的. 由于超精细结构的理论计算对电子间的关联效应和相对论效应都十分敏感, 因此通过对原子能级超精细结构的研究可以对各种理论方法作出严格的检验. 近年来, 国际上该研究领域十分活跃, 不断有新的进展. 例如, Cheng 等<sup>[1]</sup>首先用 MCDF 方法计算了类铍离子激发态的能量, Jonsson 等<sup>[2]</sup>采用 MCHF 方法报导了铍原子低激发态的超精细结构数据等. 但是, 据我们所知, 四电子系统的能级和超精细结构的实验和理论数据甚少, 有待进一步开展此项工作.

在 LS 表象中, 四电子离子系统的基态波函数可表示为

$$\Psi_b(1, 2, 3, 4) = A \sum_i C_i \phi_{n(i), l(i)} \cdot (R) Y_{l(i)}^M(\Omega) X_{SS_z}, \quad (1)$$

式中  $A$  为反对称化算符. 径向部分波函数采用 Slater 型径向波函数展开. 为简便计, 将角动量波函数表示为:  $l(i) = [(l_1, l_2) l_{12}, l_3] l_{123}, l_4$ . 同样, 自旋波函数也可表示为  $X_{SS_z} = [(s_1, s_2) s_{12}, s_3] s_{123}, s_4$ . 对于每个  $l(i)$ , 均有一组不同的非线性参数集  $\alpha_j$ . 非相对论能量  $E_b$  由 Rayleigh-Ritz 变分法, 对非线性参数  $\alpha_j$  以及线性参数  $C$  变分优化能量极小得到. 为了获得高精度波函数, 我们进一步饱和束缚函数空间, 采用截断变分方法得到能量改进量  $\Delta E_{RV}$ <sup>[3]</sup>, 总的非相对论能量为  $E_{nonrel} = E_b + \Delta E_{RV}$ . 此外, 我们进一步考虑质量极化效应和相对论效应<sup>[3]</sup>, 相对论效应包括  $P^4$  项、Darwin 项、电子与电子相互作用项和轨道与轨道相互作用项, 获得了高精度的相对论能量值.

对原子超精细结构的研究, 通常关注的是超精细结构的耦合及非耦合系数, 在原子单位下, 它们分别为<sup>[7]</sup>

$$\alpha_c = \langle LSLS | \sum_{i=1}^N 8\pi\delta^3(r_i) s_0(i) | LSLS \rangle, \quad (2)$$

(Fermi contact)

$$\alpha_{sd} = \langle LSLS | \sum_{i=1}^N 2C_0^{(2)}(i) s_0(i) r_i^{-3} | LSLS \rangle, \quad (3)$$

(spin-dipolar)

$$\alpha_l = \langle LSLS | \sum_{i=1}^N l_0(i) r_i^{-3} | LSLS \rangle, \quad (4)$$

(orbital)

收稿日期: 2002-02-27; 修改日期: 2002-04-09

\* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10074006)

作者简介: 王 菲(1977-), 男(汉族), 陕西大荔人, 博士研究生, 从事原子结构和光谱理论研究.

$$b_q = \langle LSLS | \sum_{i=1}^N 2C_0^{(2)}(i)r_i^{-3} | LSLS \rangle, \quad (5)$$

(electric quadrupole)

和

$$A_J = \frac{\mu_I}{I} \frac{1}{[J(J+1)(2J+1)]^{1/2}} \cdot \langle \gamma J \| T^{(1)} \| \gamma J \rangle, \quad (6)$$

$$A_{J-1,J} = \frac{\mu_I}{I} \frac{1}{[J(2J-1)(2J+1)]^{1/2}} \cdot \langle \gamma J - 1 \| T^{(1)} \| \gamma J \rangle, \quad (7)$$

$$B_J = 2Q \left[ \frac{2J(J-1)}{(2J+1)(2J+2)(2J+3)} \right]^{1/2} \cdot \langle \gamma J \| T^{(2)} \| \gamma J \rangle, \quad (8)$$

这里  $\mu_I$  是核磁矩.

铍原子是四电子复杂原子系统, 各电子间关联效应大. 研究铍原子的能级和超精细结构, 要求选取质量最好的波函数.  $1s^2 2s 2p^3 P^0$  态是奇宇称, 可能的重要角动量系列应是  $[l_1 l_2 l_3 l_4]$ :  $[00(l-1), l]$ ,  $[01 l, l]$ ,  $[11 l, l+1]$ ,  $[02 l+1, l+2]$ ,  $[12 l+1, l+1]$ ,  $[12 l+1, l+3]$ ,  $[22 l+1, l+2]$  等.  $1s^2 2p^2^3 P$  态是偶宇称, 可能的重要角动量系列应是  $[l_1 l_2 l_3 l_4]$ :  $[00 l, l]$ ,  $[01 l, l+1]$ ,  $[11 l, l]$ ,  $[02 l+1, l+1]$ ,  $[11 l, l+2]$ ,  $[02 l+1, l+3]$  等. 对这两种情况,  $l$  的初始值为 1, 最大值为 9,  $l > 9$

的由于能量贡献小于  $0.5 \times 10^{-7}$  atomic unit 而被忽略. 为确保所有重要的贡献都包含在本征波函数中, 我们进一步通过截断变分来饱和波函数空间. 对于每一组轨道角动量  $l_1, l_2, l_3$  和  $l_4$ , 都有几种耦合方法以获得总轨道角动量. 在铍原子  $1s^2 2s 2p^3 P^0$  和  $1s^2 2p^2^3 P$  态中, 各种对能量有明显贡献的角动量自旋耦合分波较多, 我们的波函数含有线性参数分别为 906 个和 891 个, 角度自旋分波数分别为 48 个和 47 个. 从表 1 可以看出, 我们计算所得的相对论能量值均比其它理论值更低更好, 比 Jonsson 等<sup>[5]</sup>用 MCHF 方法计算的  $1s^2 2s 2p^3 P^0$  和  $1s^2 2p^2^3 P$  态的能量值分别改进了  $2.066 \times 10^{-6}$  和  $1.163 \times 10^{-6}$  atomic unit. 与实验值相比较, Safronova 等<sup>[4]</sup>使用 MBPT 方法得到的  $1s^2 2s 2p^3 P^0$  和  $1s^2 2p^2^3 P$  态的能量项值误差分别为 6.2% 和 2.6%; 而我们计算结果的误差仅分别为: 0.3% 和 0.4%, 与实验结果更为符合. 结果表明, 我们选取的波函数有足够高的精确度. 在此基础上, 我们对铍原子低激发态的超精细结构进行了研究, 并与其它理论及实验值进行了对比, 超精细结构的非耦合系数和耦合系数的计算结果列于表 2 和表 3 中. 由于要求实验高分辨率, 理论计算高精度, 据我们所知, 四电子系统超精细结构数据仍很少, 我们的计算结果对将来的实验和理论工作将是有意义的.

表 1 铍原子低激发态  $1s^2 2s 2p^3 P^0$  和  $1s^2 2p^2^3 P$  的相对论能量  $\times 10^{-6}$  atomic unit

激发态	$E_{\text{total}}$		$T/\text{cm}^{-1}$		
	本工作	Jonsson <sup>[5]</sup>	本工作	Safronova <sup>[4]</sup>	实验值 <sup>[4]</sup>
$1s^2 2s 2p^3 P^0$	-14 568 154	-14 566 088	22 044	20 613	21 981
$1s^2 2p^2^3 P$	-14 395 399	-14 394 236	59 957	58 140	59 696

表 2 铍原子低激发态  $1s^2 2s 2p^3 P^0$  和  $1s^2 2p^2^3 P$  的超精细结构非耦合系数 (atomic unit)\*

激发态	方法	$a_c$	$a_{sd}$	$a_l$	$b_q$
$1s^2 2s 2p^3 P^0$	本工作	9.241 3	-0.065 18	0.301 80	-0.115 72
	MCHF <sup>[2]</sup>	9.241 6	-0.065 87	0.303 29	-0.115 70
	HF+SDCI <sup>[6]</sup>	9.273 8	-0.066 56	0.300 14	-0.109 7
$1s^2 2p^2^3 P$	本工作	-1.395 5	0.064 65	0.310 71	0.116 75

\* 计算  $Q=0.053 0 \text{ b}=0.0530 \times 10^{-24} \text{ cm}^2, \mu_I=-1.177 492 \text{ nm}, I=3/2^{[7]}$ .

表 3 铍原子低激发态  $1s^2 2s 2p^3 P^o$  和  $1s^2 2p^2^3 P$  的超精细结构耦合系数

激发态	方法	$A_2$ /MHz	$A_1$ /MHz
$1s^2 2s 2p^3 P^o$	本工作	-124.349	-139.012
	MCHF <sup>[2]</sup>	-124.50	-139.35
	HF+SDCI <sup>[6]</sup>	-124.76	-139.77
	Experiment <sup>[8]</sup>	-124.536 8	-139.373
$1s^2 2p^2^3 P$	本工作	338.083(-2)	179.230(-1)

## 参 考 文 献:

- [1] Cheng K T, Kim Y K, Desclaux J P. *At Data Nucl Data Tables*, 1979, **24**: 111.
- [2] Jonsson P, Fischer C F. Large-scale Multiconfiguration Hartree-Fock Calculations of Hyperfine-Interaction Constants for Low-lying States in Beryllium, Boron, and Carbon[J]. *Phys Rev*, 1993, **A48**(6): 4 113.
- [3] Chung K T, Gou B C. Energies and Lifetimes of Triply Excited States of Lithium[J]. *Phys Rev*, 1995, **A52**: 3 669.
- [4] Safronova M S, Johnson W R, Safronova U I. Relativistic Many-body Calculations of the Energies of  $n=2$  States for the Berylliumlike Isoelectronic Sequence[J]. *Phys Rev*, 1996, **A53**: 4 036.
- [5] Jonsson P, Fischer C F, Godefroid M R. MCHF Calculations of Isotope Shifts and Oscillator Strengths for Transitions between Low-lying States in Be-like Systems and Neutral Magnesium[J]. *J Phys*, 1999, **B32**: 1 233.
- [6] Beck D R, Nicolaides C A. Fine and Hyperfine Structure of the Two Lowest Bound States of Be and Their First Two Ionization Thresholds[J]. *Int J Quantum Chem Symp*, 1984, **18**: 467.
- [7] Yang H Y, Chung K T. Energy, Fine-structure and Hyperfine-structure Studies of the Core-excited States  $1s^2 2p^2^5 P$  and  $1s^2 2p^3^5 S^o$  for Be-like Systems[J]. *Phys Rev*, 1995, **A51**: 3 621.
- [8] Blachman A G, Lurio A. *Phys Rev*, 1967, **153**: 164.

## Energy and Hyperfine Structure Studies of Excited State for Beryllium\*

WANG Fei, GOU Bing-cong, YU kai-zhi

(Department of Applied Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract:** The Rayleigh-Ritz variational method is used with a multiconfiguration-interaction function and restricted variation method to obtain the relativistic energies of  $1s^2 2s 2p^3 P^o$  and  $1s^2 2p^2^3 P$  in beryllium, including the mass polarization and relativistic corrections. Hyperfine structure is also studied to compared with theoretical and experiment data in the literature.

**Key words:** beryllium atom; low-lying excited state; hyperfine structure

\* Foundation item, National Natural Science Foundation of China (10074006)