

# 氦原子单激发和双激发态里德伯系列的 的相对论能量计算\*

吴晓丽<sup>†</sup> 秉聪 刘义东

(北京理工大学理学院物理系, 北京 100081)  
(2003 年 4 月 9 日收到, 2003 年 5 月 8 日收到修改稿)

采用 Rayleigh-Ritz 变分方法和组态相互作用方法, 并进一步考虑相对论修正和质量极化效应, 研究了氦原子单激发和双激发态里德伯系列的相对论能量, 计算结果与其他理论和实验符合得很好. 此外, 还计算了该系统之间的振子强度、辐射跃迁率及跃迁波长, 振子强度三个规范的计算结果显示得很好的一致性.

关键词: 氦原子, 变分计算, 振子强度, 辐射跃迁率

PACC: 3150, 3130J

## 1. 引言

氦原子作为最简单的多电子原子, 是研究多体问题的典型系统. 但是即使是非相对论量子力学也不能给出氦原子的精确解, 因此氦原子为原子物理和量子力学中的各种近似技术提供了一个理想的检测平台. 无论是实验光谱的测量还是理论研究, 氦原子的研究都是原子物理和量子力学中的基本问题. 20 年来, 相关的实验和理论研究不断取得进展. 一方面, 很多激光光谱实验对氦原子系统的辐射跃迁波长的测量都达到了非常高的精度<sup>[1-6]</sup>. 另一方面, 两电子原子能级的理论计算一直是理论工作者的兴趣所在<sup>[7-16]</sup>, 各种不同的理论方法在氦原子的研究中得到了应用, 比如变分方法<sup>[7-10]</sup>, 有限元方法<sup>[11]</sup>, 关联超球谐函数方法<sup>[12]</sup>以及超球密耦方法<sup>[13, 14]</sup>等. 近来 Drake 等人<sup>[17]</sup>使用含有双 Hylleraas 基的变分方法, 系统地研究了氦原子的单激发态结构和光谱, 给出了国际上公认的与实验符合得最好的结果. 但是, 至今国际上对于氦原子高双激发态的报道仍然较少, 有待进一步的理论研究.

本文采用 Rayleigh-Ritz 变分法和组态相互作用方法计算了氦原子单激发和双激发态里德伯系列的非相对论能量, 并考虑相对论修正和质量极化效应, 进一步获得了相对论能量值. 我们还计算了该系统

之间的振子强度、辐射跃迁率和跃迁波长. 通过与实验数据和 Drake 等人<sup>[17]</sup>关于氦原子单激发态的精确结果对比, 验证了本文所使用方法的有效性. 本工作进一步研究了氦原子双激发态里德伯系列, 我们的理论计算数据对其他的理论和实验工作将是有意义的.

## 2. 理论与方法

在 LS 耦合表象中, 氦原子的非相对论 Hamiltonian 为

$$H_0 = \sum_{i=1}^2 \left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{2}{r_i} \right] + \frac{1}{r_{12}}. \quad (1)$$

闭通道波函数为

$$\Psi_b(1, 2) = A \sum_i C_i \phi_{\kappa(i), \lambda(i)}(R) Y_{\kappa(i)}^M(\Omega) \chi_{ss_i} \quad (2)$$

其中  $A$  是反对称算符, 径向波函数采用 Slater 型

$$\phi_{\kappa(i), \lambda(i)}(R) = \prod_{j=1}^2 r_j^{\alpha_j} \exp(-\alpha_j r_j), \quad (3)$$

轨道角动量部分为

$$Y_{\kappa(i)}^M(\Omega) = \sum_{m_j} l_1 l_2 m_1 m_2 \mid LM \prod_{j=1}^2 Y_{l_j m_j}(\Omega_j), \quad (4)$$

其中

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2}$$

\* 国家自然科学基金(批准号: 10074006)和教育部博士点基金(批准号: 20020007036)资助的课题.

<sup>†</sup>E-mail: xdlwu@bit.edu.cn

$$\times P_l^m(\cos\theta) \exp(im\varphi). \quad (5)$$

对每一个角度分波  $[l_1, l_2]$  有一组不同的  $\alpha_j$  ( $j = 1, 2$ ). 非相对论能量  $E_b$  由 Rayleigh-Ritz 变分法, 通过对线性参数  $C_i$  和非线性参数  $\alpha_j$  变分优化能量极小确定.

为进一步获得高精度的能量计算值, 还必须考虑相对论修正和质量极化效应. 在 Breit-Pauli 近似下, 相对论能量微扰算符包括动能修正项  $H_k$ , Darwin 项  $H_D$ 、电子与电子相互作用项  $H_{ee}$  以及轨道与轨道相互作用项  $H_{oo}$ :

$$H_k = -\frac{1}{8c^2} \sum_{i=1}^2 p_i^4, \quad (6)$$

$$H_D = \frac{\pi}{c^2} \sum_{i=1}^2 \delta(\mathbf{r}_i), \quad (7)$$

$$H_{ee} = -\frac{\pi}{c^2} \left(1 + \frac{8}{3} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2\right) \delta(\mathbf{r}_{12}), \quad (8)$$

$$H_{oo} = -\frac{1}{2c^2} \frac{1}{r_{12}} \left[ \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 + \frac{\mathbf{r}_{12}(\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{p}_2}{r_{12}^2} \right]. \quad (9)$$

质量极化算符为

$$H_{mp} = -\frac{1}{M} \nabla_1 \cdot \nabla_2, \quad (10)$$

其中  $M$  是核质量, 常数  $c = 137.0360$ ,  $s_i$  和  $p_i$  分别是第  $i$  个电子的自旋角动量和动量. 除质量极化算符计算到无穷级外, 其他的相对论微扰算符计算到一级. 则相对论能量修正为

$$E_{rel} = \langle \Psi_b | H_k + H_D + H_{ee} + H_{oo} | \Psi_b \rangle. \quad (11)$$

质量极化效应为

$$E_{mp} = \langle \Psi_b | H_{mp} | \Psi_b \rangle. \quad (12)$$

为与 Duan<sup>[18]</sup>和 Hesse<sup>[19]</sup>等人的理论数据进行比较, 本文的非相对论能量包括了质量极化效应, 即  $E_{nonrel} = E_b + E_{mp}$ . 进一步考虑相对论效应后, 总能量为  $E_{total} = E_{nonrel} + E_{rel}$ .

辐射跃迁率及振子强度运用以下公式计算

$$A_{\text{sptol}}(\gamma'L', \gamma L) = \frac{4\omega^3}{3c^3} \frac{1}{2L+1} |\langle \gamma'L' | \mathbf{D} | \gamma L \rangle|^2, \quad (13)$$

$$f(\gamma L \rightarrow \gamma'L') = \frac{2}{3} \frac{\omega}{2J+1} |\langle \gamma'L' | \mathbf{D} | \gamma L \rangle|^2, \quad (14)$$

其中振子强度运用三种规范来计算:

$$\langle \gamma'L' | \sum_i \mathbf{r}_i | \gamma L \rangle \quad (\text{长度规范}), \quad (15)$$

$$\langle (E' - E)^{-1} \gamma'L' | \sum_i \nabla_i | \gamma L \rangle \quad (\text{速度规范}), \quad (16)$$

$$\langle (E' - E)^{-2} \gamma'L' | \sum_i \nabla_i V | \gamma L \rangle \quad (\text{加速度规范}), \quad (17)$$

振子强度三种规范的计算结果在理论上应该是一致的, 但如果波函数不够精确, 它们会出现差别, 因此通过比较振子强度三种规范的计算结果的一致性程度, 可以判定波函数的精确程度.

### 3. 结果与讨论

本文采用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法对氦原子的十个里德伯系列的能量进行了计算. 它们是  $1sns\ 1^3S^e$ ,  $1snp\ 1^3P^o$ ,  $1snd\ 1^3D^e$ ,  $2pnp\ 1^3P^o$  和  $2pnd\ 1^3D^o$  ( $n \leq 6$ ). 表 1 给出了这些态的非相对论能量和相对论能量的计算值, 并与其他理论和实验数据进行了比较. 由于两电子之间的关联效应较大, 波函数中需要包括所有重要的角动量自旋耦合, 从而获得精确的能量值. 在我们的计算中, 能量贡献大于  $1.0 \times 10^{-6}$  a. u. 的角度自旋分波  $l_1, l_2$  [ $l_1, l_2 \leq 9$ ] 均被包含在波函数中. 其他  $l_1, l_2 > 9$  的角度自旋分波因为对能量的贡献均小于  $1.0 \times 10^{-6}$  a. u. 而被忽略.

从表 1 可以看出, 本文计算的非相对论能量低于 Duan<sup>[18]</sup>和 Hesse<sup>[19]</sup>的理论结果. 相对于 Duan<sup>[18]</sup>的计算结果, 本文的能量改进范围从  $20\mu\text{a. u.}$  到  $2401\mu\text{a. u.}$ . 相对于 Hesse<sup>[19]</sup>的计算结果, 本文的能量改进范围从  $73\mu\text{a. u.}$  到  $321\mu\text{a. u.}$ . 这是由于本工作中波函数采用 Slater 型基函数, 并考虑了总波函数的正交、归一化要求, 总波函数含有线性参数数目从 85 到 253, 角度自旋分波数从 5 到 10, 对应不同的角度自旋分波有一组不同的非线性参数集. 这些线性和非线性参数由变分优化能量极小获得, 而且质量极化计算到无穷级, 所以本工作在计算能量方面可以达到很高的精度. 从表 1 还可以看出, 沿着每一个  $1snl\ 1^3S^e$ ,  $1^3P^o$  和  $1^3D^e$  里德伯系列, 本文对 Duan<sup>[18]</sup>的计算结果的改进量随着  $n$  增加而增大. 例如, 在  $1sns\ 1^3S^e$  系列中, 本文对  $1s^2\ 1^3S^e$  态的改进量是  $321\mu\text{a. u.}$ , 对  $1s4s\ 1^3S^e$  态的改进量是  $2353\mu\text{a. u.}$ . 这说明我们的理论方法在计算高位激发态方面显示出优越性.

表 1 氦原子里德伯系列  $1sn$  ( $n = 1-6$ ) 和  $2pn$  ( $n = 2-6$ ) 激发态的非相对论能量  $E_{\text{nonrel}}$  [ a. u. ] 相对论修正  $E_{\text{rel}}$  [ $\mu\text{a. u.}$ ] 和相对论能量项值 [ eV ]

$n$	$-E_{\text{nonrel}}$			$-E_{\text{rel}}$	相对论能量项值		
	本工作	Duarf <sup>[18]</sup>	Hesse <sup>[19]</sup>		本工作	Drake <sup>[17]</sup>	实验值 <sup>[20,21]</sup>
(1) $1sns \ ^1S^e$							
1	2.90362594	2.90330456	2.90330456	101.90			
2	2.14594631	2.14567858	2.14567859	108.05	20.6165	20.6158	20.616
3	2.06125255	2.06095295	2.06098908	106.87	22.9208	22.9203	22.92
4	2.03357076	2.031218		106.59	23.6740	23.6736	23.67
5	2.02116590			106.50	24.0115	24.0112	24.01
6	2.01455479			106.43	24.1914	24.1912	24.19
(2) $1sns \ ^3S^e$							
2	2.17522650	2.17493019	2.17493019	115.15	19.8196	19.8196	19.820
3	2.06868760	2.0683993	2.06840524	108.82	22.7185	22.7185	22.72
4	2.03651012	2.035420		107.40	23.5940	23.5940	23.59
5	2.02261791			106.91	23.9720	23.9720	23.97
6	2.01537442			106.68	24.1691	24.1690	24.17
(3) $1snp \ ^1P^o$							
2	2.12383042	2.12354564	2.12354565	108.49	21.2182	21.2180	21.218
3	2.05513864	2.05483507	2.05486266	107.13	23.0872	23.0870	23.09
4	2.03106509	2.029143		106.76	23.7421	23.7421	23.74
5	2.01990028			106.54	24.0459	24.0458	24.05
6	2.01383010			106.50	24.2111	24.2110	24.21
(4) $1snp \ ^3P^o$							
2	2.13317111	2.13288064	2.13288064	104.65	20.9641	20.9641	20.964
3	2.05807565	2.05778447	2.05780149	105.98	23.0073	23.0071	23.01
4	2.03231585	2.0307414		106.31	23.7081	23.7079	23.71
5	2.02053403			106.31	24.0287	24.0282	24.03
6	2.01414973			106.36	24.2024	24.2008	24.20
(5) $2pnp \ ^1P^o$							
3	0.58024446	0.58016577	0.58016577	17.09	63.2180		63.219 <sup>a</sup>
4	0.54004043	0.5399670	0.53996718	16.15	64.3119		
5	0.52417812			15.84	64.7435		
6	0.51620711			15.70	64.9604		
(6) $2pnp \ ^3P^o$							
2	0.71049137	0.71039665	0.71039646	17.92	59.6743		59.674 <sup>a</sup>
3	0.56780725	0.5677868	0.56773387	16.16	63.5564		63.555 <sup>a</sup>
4	0.53586187			15.80	64.4256		
5	0.52224904			15.67	64.7960		
6	0.51515377			15.61	64.9890		

表 1(续)

$n$	$-E_{\text{nonrel}}$			$-E_{\text{rel}}$	相对论能量项值		
	本工作	Duarf <sup>[18]</sup>	Hesse <sup>[19]</sup>		本工作	Drake <sup>[17]</sup>	实验值 <sup>[20,21]</sup>
(7) $1snd\ ^1D^e$							
3	2.05562014	2.05530605		106.53	23.0741	23.0741	23.07
4	2.03127813	2.0288772		106.48	23.7364	23.7363	23.74
5	2.02001482			106.45	24.0428	24.0428	24.04
6	2.01389762			106.43	24.2092	24.2093	24.21
(8) $1snd\ ^3D^e$							
3	2.05563523	2.0553229		106.52	23.0737	23.0737	23.07
4	2.03128719	2.0289701		106.48	23.7361	23.7361	23.74
5	2.02001993			106.45	24.0427	24.0427	24.04
6	2.01390066			106.43	24.2092	24.2092	24.21
(9) $2pnd\ ^1D^o$							
3	0.56380137	0.5637256		14.73	63.6655		63.673 <sup>a</sup>
4	0.53457577	0.5345003		15.31	64.4606		
5	0.52164782			15.44	64.8124		
6	0.51481196			15.49	64.9983		
(10) $2pnd\ ^3D^o$							
3	0.55932398	0.5592482		15.51	63.7873		63.787 <sup>a</sup>
4	0.53267143	0.5325974		15.55	64.5124		64.514 <sup>a</sup>
5	0.52070117			15.56	64.8381		64.834 <sup>a</sup>
6	0.51428288			15.55	65.0127		65.019 <sup>a</sup>

a. 文献 [21].

为进一步改进能量值, 本文还采用一级微扰理论计算了相对论效应. 相对论微扰算符包括动能修正项、Darwin 项、电子与电子相互作用项、轨道与轨道相互作用项. 为便于与 Drake<sup>[17]</sup> 的计算结果以及实验数据<sup>[20,21]</sup> 进行比较, 表 1 将本工作计算所得的以 a. u. 为单位的能量值按照  $1\text{ a. u.} = 27.20767\text{ eV}$  换算为以 eV 为单位的能量项值, 该能量项值是相对于  $1s^2\ ^1S^e$  基态的能量, 其中氦原子  $1s^2\ ^1S^e$  基态的能量取  $79.0056\text{ eV}$ <sup>[20]</sup>. Drake<sup>[17]</sup> 的工作中包含了 QED 修正和高阶相对论修正且引入了双 Hylleraas 基, 因此 Drake<sup>[17]</sup> 的单激发态计算结果是当前国际上公认的最为精确的结果. 由于对于核电荷数相对小的氦原子, 这些高阶相对论修正项对能量的改进很小, 表 1 显示出我们的计算结果与 Drake<sup>[17]</sup> 的理论结果和实验数据<sup>[20,21]</sup> 均符合得很好, 也表明本工作所采用的方法在两电子体系的理论计算中可获得足够高的精度. 尽管 Drake<sup>[17]</sup> 采用的 Hylleraas 基的波函数可以获得更精确的能量值, 但因为其包含了两电子的关联项, 所以很难推广应用到更多电子的复杂原子, 而

我们的变分方法可以很容易地应用于三电子和四电子系统<sup>[22-25]</sup>. 对于双激发态里德伯系列, 由于在 Drake<sup>[17]</sup> 的文献中未查出相关的理论计算值, 我们仅与少量已有的实验数据进行了比较. 从表 1 中可以看出, 我们的计算结果与实验值符合得很好, 这些理论数据对其他的理论和实验工作将是有意義的.

表 2 给出了利用波函数  $\Psi_0$  所计算的部分单激发和双激发态里德伯系列之间的辐射跃迁率和振子强度. 从表 2 中可以看出, 本文计算所得的振子强度与 Drake<sup>[17]</sup> 的理论数据符合得很好. 文献 [17] 中只给出了一种规范的振子强度的计算结果, 而我们同时给出了用三种规范计算的振子强度的理论值. 尽管振子强度的加速度规范对于波函数的变化很敏感, 但我们用三种规范计算的振子强度仍显示出令人满意的合理的一致性. 这表明本工作采用的非相对论波函数相当精确. 本文进一步计算了这些激发态之间的辐射跃迁波长并与实验数据<sup>[20,21]</sup> 进行了比较, 所有的误差均在 2% 之内, 这些计算结果对今后的实验工作是有意义的.

表 2 氦原子里德伯系列的振子强度( $f_l, f_v, f_a$ ) 辐射跃迁率  $A$  ( $10^{10} \text{s}^{-1}$ ) 及跃迁波长 (nm)

跃迁	振子强度				辐射跃迁率			跃迁波长	
	$f_l$	$f_v$	$f_a$	$f^{[17]}$	$A_l$	$A_v$	$A_a$	本工作	实验值 <sup>[20, 21]</sup>
(1) $1s^2 \ ^1S^e \rightarrow$									
$1s2p \ ^1P^o$	0.2748893	0.2759139	0.2762388	0.2761647	0.5370870	0.5390889	0.5397237	58.439	58.433
$1s3p \ ^1P^o$	0.0736798	0.0732931	0.0705766	0.0734349	0.1704383	0.1695438	0.1632601	53.708	53.703
$1s4p \ ^1P^o$	0.0299965	0.0298003	0.0287355	0.0298629	0.0733821	0.0729022	0.0702974	52.226	52.221
$1s5p \ ^1P^o$	0.0151554	0.0151810	0.0149991	0.0150393	0.0380304	0.0380947	0.0376382	51.566	51.56 <sup>a</sup>
$1s6p \ ^1P^o$	0.0087183	0.0087606	0.0087185	0.0086277	0.0221789	0.0222865	0.0221795	51.214	
(2) $1s2s \ ^3S^e \rightarrow$									
$1s2p \ ^3P^o$	0.5390754	0.5390909	0.5386372	0.5390861	0.0030648	0.0030649	0.0030623	1083.302	1083.034
$1s3p \ ^3P^o$	0.0638686	0.0643345	0.0708142	0.0644612	0.0028165	0.0028371	0.0031228	388.956	388.865
$1s4p \ ^3P^o$	0.0261899	0.0256637	0.0223278	0.0257689	0.0017186	0.0016841	0.0014652	318.851	318.774
$1s5p \ ^3P^o$	0.0125332	0.0120889	0.0043997	0.0124906	0.0009636	0.0009295	0.0003383	294.568	294.511
$1s6p \ ^3P^o$	0.0063641	0.0050942	0.0023474	0.0069822	0.0005305	0.0004247	0.0001957	282.893	
(3) $1s2p \ ^1P^o \rightarrow$									
$1s3d \ ^1D^e$	0.7092479	0.7094355	0.7353923	0.7101641	0.0106031	0.0106059	0.0109939	668.062	667.815
$1s4d \ ^1D^e$	0.1223166	0.1202277	0.1196907	0.1202704	0.0033666	0.0033091	0.0032943	492.360	492.193
$1s5d \ ^1D^e$	0.0433581	0.0431816	0.0426090	0.0432576	0.0015015	0.0014954	0.0014755	438.943	438.793
$1s6d \ ^1D^e$	0.0208464	0.0209049	0.0202651	0.0209485	0.0008095	0.0008118	0.0007869	414.519	
(4) $1s2p \ ^3P^o \rightarrow$									
$1s3d \ ^3D^e$	0.6075318	0.6096440	0.6151899	0.6102252	0.0117306	0.0117714	0.0118785	587.743	587.562
$1s4d \ ^3D^e$	0.1262883	0.1229637	0.1204582	0.1228469	0.0042107	0.0040999	0.0040164	447.282	447.148
$1s5d \ ^3D^e$	0.0478115	0.0469421	0.0453338	0.0432576	0.0019663	0.0019305	0.0018644	402.742	402.619
$1s6d \ ^3D^e$	0.0237038	0.0233876	0.0225335	0.0234692	0.0010831	0.0010687	0.0010297	382.079	381.961
(5) $2p3p \ ^1P^e \rightarrow$									
$2p3d \ ^1D^o$	0.3881357	0.3882015	0.3824691		0.0003373	0.0003374	0.0003324	2770.980	
$2p4d \ ^1D^o$	0.0935542	0.0937164	0.0972129		0.0006270	0.0006281	0.0006515	997.801	
$2p5d \ ^1D^o$	0.0407756	0.0402503	0.0337517		0.0004499	0.0004441	0.0003724	777.668	
$2p6d \ ^1D^o$	0.0205797	0.0200226	0.0128168		0.0002831	0.0002754	0.0001763	696.426	
(6) $2p^23P^e \rightarrow$									
$2p3d \ ^3D^o$	0.4533521	0.4534068	0.4533637		0.0332872	0.0332912	0.0332881	301.449	301.37 <sup>a</sup>
$2p4d \ ^3D^o$	0.1391582	0.1387615	0.1359700		0.0141385	0.0140982	0.0138145	256.267	256.1 <sup>a</sup>
$2p5d \ ^3D^o$	0.0621569	0.0620848	0.0614431		0.0071940	0.0071857	0.0071114	240.104	240.2 <sup>a</sup>
$2p6d \ ^3D^o$	0.0333749	0.0330892	0.0315845		0.0041285	0.0040931	0.0039070	232.250	231.9 <sup>a</sup>

a. 文献 [21].

[1] Shiner D, Dixon R and Zhao P 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1802[2] Adams C S, Riis E, Ferguson A I and Rowley W R C 1992 *Phys. Rev. A* **45** R2667[3] Sansonetti C J and Gillaspay J D 1992 *Phys. Rev. A* **45** R1[4] Lichten W, Shiner D and Zhou Z X 1991 *Phys. Rev. A* **43** 1663[5] Sansonetti C J, Gillaspay J D and Cromer C L 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2539[6] Hlousek L, Lee S A and Fairbank W M Jr 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 328[7] Korobov V I 2000 *Phys. Rev. A* **61** 064503

- [ 8 ] Cann N M and Thakkar A J 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5397
- [ 9 ] Kono A and Hattori S 1984 *Phys. Rev. A* **29** 2981
- [ 10 ] Bhatia A K 1970 *Phys. Rev. A* **2** 1667
- [ 11 ] Ackermann J 1995 *Phys. Rev. A* **52** 1968
- [ 12 ] Haftel M I and Mandelzweig V B 1994 *Phys. Rev. A* **49** 3338
- [ 13 ] Zhou B ,Lin C D ,Tang J Z ,Watanabe S and Matsuzawa M 1993 *J. Phys. B* **26** 2555
- [ 14 ] Zhou B and Lin C D 1993 *J. Phys. B* **26** 2575
- [ 15 ] Gou B C ,Chen Z and Lin C D 1991 *Phys. Rev. A* **43** 3260
- [ 16 ] Gou B C ,Chen X Y and Chen Z 1995 *Science in China A* **38** 52
- [ 17 ] Drake G W F 1996 *Atomic Molecular and Optical Physics Handbook* ( New York :American Institute of Physics )Chaps. 11
- [ 18 ] Duan B ,Gu X Y and Ma Z Q 2002 *Eur. Phys. J. D* **19** 9
- [ 19 ] Hesse M and Baye D 2001 *J. Phys. B* **34** 1425
- [ 20 ] Radzig A A and Smirnov B M 1985 *Reference Data on Atoms ,Molecules ,and Ions* ( Springer-Verlag Berlin Springer Series in Chemical Physics 31 )Chaps. 5 and 7
- [ 21 ] Bashkin S and Stoner J O Jr 1975 *Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams* ( Amsterdam :North-Holland Publishing Company )Vol. 1
- [ 22 ] Han L H ,Gou B C and Wang F 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2139 [ in Chinese ] 韩利红、秉聪、王菲 2000 物理学报 **49** 2139 ]
- [ 23 ] Wang F ,Gou B C and Han L H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1685 [ in Chinese ] 王 菲、秉聪、韩利红 2001 物理学报 **50** 1685 ]
- [ 24 ] Han L H ,Gou B C and Wang F 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1681 [ in Chinese ] 韩利红、秉聪、王菲 2001 物理学报 **50** 1681 ]
- [ 25 ] Gou B C 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 403 [ in Chinese ] 秉聪 1998 物理学报 **47** 403 ]

## Relativistic energies of the singly excited and doubly excited Rydberg series in helium \*

Wu Xiao-Li Gou Bing-Cong Liu Yi-Dong

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

( Received 9 April 2003 ; revised manuscript received 8 May 2003 )

### Abstract

The Rayleigh-Ritz variational method is used with a multiconfiguration-interaction function to study the energies of singly excited and doubly excited Rydberg series in helium atom , including the mass polarization and relativistic corrections. The oscillator strengths , the transition rates , and the wavelengths are also calculated. The results are compared with other theoretical and experimental data in the literatures.

**Keywords** : helium atom , variational calculation , oscillator strength , transition rate

**PACC** : 3150 , 3130J

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10074006 ) and the Doctorate Foundation of the Ministry of Education of China ( Grant No. 20020007036 ).