

## 强磁场中氢原子的能级结构\*

曾思良<sup>1)</sup> 倪飞飞<sup>2)</sup> 何建锋<sup>2)</sup> 邹士阳<sup>1)†</sup> 颜君<sup>1)3)‡</sup>

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

2) (北京理工大学理学院, 北京 100081)

3) (北京大学应用物理与技术研究中心, 北京 100087)

(2010年5月7日收到; 2010年6月21日收到修改稿)

发展了一套简单高效的非微扰理论方法研究强磁场中的原子能级结构. 作为例子, 给出了磁场强度从 0 到 1000 个原子单位, 氢原子基态和低激发态的结合能以及四极矩等重要原子能级结构参数. 结果表明: 相对于其他的高精度计算方法, 该方法不仅能计算出高精度的能级位置而且可方便给出精确的电子波函数. 此外, 该法还具有很强的普适性, 可直接推广到原子与任意方向的交叉电磁场相互作用的研究.

**关键词:** 强磁场, CWDVR 谱方法, 氢原子能级结构, 四极矩

**PACS:** 32.60.+i, 02.70.Hm, 32.70.Cs

## 1. 引言

自量子理论诞生以来, 原子在磁场中的能级结构与各种复杂的动力学特性一直是人们研究和关注的问题<sup>[1-3]</sup>. 考虑磁场效应的原子、分子物理参数在天文和天体物理<sup>[4]</sup>、原子分子光谱学<sup>[5]</sup>、固体物理<sup>[6]</sup>和等离子体物理<sup>[7]</sup>等诸多领域都具有非常重要的应用. 另一方面, 从基础研究的角度来看, 均匀磁场中的原子体系由于电子受到库仑力(具有球对称性)和磁力(具有轴对称性)的共同作用使其成为一个不可分离变量的系统, 从而导致精确求解该体系的 Schrödinger 方程变得非常困难, 也使得这一问题极富基础研究的挑战性<sup>[8]</sup>.

实验室中可产生稳恒强磁场的强度一般在几十个特斯拉(T)的水平. 对于这个强度的磁场, 传统的微扰理论模型可以对实验观测给出较好的描述. 其原因是: 当由于外部磁场导致的抗磁项, 远远小于电子-核之间的库仑相互作用项时, 具有轴对称性的抗磁项可以当成微扰处理或者忽略不计, 所以传统的微扰理论还是适用的. 但随着磁场强度的增

强, 抗磁作用与原子中的库仑作用可以相比拟时, 两者均不能单独作为微扰处理, 特别是随着 20 世纪 70 年代的天文观测中发现在白矮星( $10^2$ — $10^5$  T)和中子星( $10^7$ — $10^9$  T)上存在着非常强的磁场, 发展非微扰方法同时精确处理中心对称的库仑作用和轴对称的磁场效应成为研究的重点.

在过去的 20 余年中, 人们已经发展了包括: finite-element<sup>[9]</sup>, Kantorovich<sup>[10]</sup>, 半经典闭合轨道理论<sup>[11]</sup>, finite basis expansion<sup>[12-15]</sup>, 和 power series expansion<sup>[16,17]</sup>等非微扰方法研究强磁场中的原子能级结构、辐射跃迁等动力学过程. 这些先进的非微扰理论方法不仅被应用于计算用于模拟强磁场天体大气需要的原子能级结构参数<sup>[18,19]</sup>, 而且开始在 Z 箍缩和激光驱动惯性约束聚变等离子体诊断中发挥重要的作用<sup>[7]</sup>. 然而, 在上述方法中电子波函数的计算通常非常繁琐, 难以完成整套 Z 箍缩、惯性约束聚变和白矮星大气等强磁场中的等离子体研究所需的大量的原子参数计算<sup>[7]</sup>. 另外, 这些方法也不容易推广到原子与交叉电磁场相互作用的情况<sup>[20]</sup>.

与原子的能级, 振子强度, 光电离截面的研究

\* 国家自然科学基金(批准号:10904006, 10878008, 10875017, 10734140), 国家重点基础研究发展计划(批准号:2005CB724500), 中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号:2009B0102011, 2009A0102006)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: zou\_shiyang@iapcm.ac.cn

‡ E-mail: yan\_jun@iapcm.ac.cn

相比,关于磁场中原子的四极矩研究相对少了很多. 我们知道,四极矩  $Q_{\text{op}}$  是一个重要的物理量,可以用以衡量体系偏离球对称性的程度<sup>[21]</sup>. 在一定条件下,四极矩  $Q_{\text{op}}$  能够显著地影响原子-原子之间的相互作用. 例如,分子间常见的 Van der Waals 吸引力主要来源于原子-原子间的四极矩相互作用而不是偶极相互作用<sup>[22]</sup>. 此外,四极矩的计算精度对波函数的精度特别敏感,可以用于对波函数进行更严格的检验<sup>[23]</sup>.

本文将发展一套简单、高效、高精度的非微扰量子理论方法求解强磁场中的 Schrödinger 方程,并将其用于研究强磁场中的原子能级结构问题. 以氢原子与强磁场的相互作用为例,计算了磁场范围为  $0-2.35 \times 10^9$  T 之间氢原子基态和低激发态的能级结构和四极矩.

## 2. 理论方法

采用原子单位(如无特殊声明,下文均统一使用原子单位),均匀强磁场中氢原子非相对论哈密顿量<sup>[24]</sup>可以表示为

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \xi \mathbf{L}_z + \frac{1}{8} \xi^2 r^2 \sin^2 \theta, \quad (1)$$

式中,前两项是无外场时氢原子的哈密顿;第三项表示原子-磁场间的顺磁作用;第四项表征抗磁作用;无量纲数  $\xi = B/B_0$ ,  $B_0 = 2.3505 \times 10^5$  T 为一个原子单位的磁场强度. 我们假定稳恒磁场的方向为  $z$  方向,质子质量相对于电子质量是无穷大,忽略了磁场对体系质心运动的修正<sup>[24]</sup>. 这里还忽略了电子自旋-磁场相互作用项,因为该相互作用仅仅导致相同的能量零点平移<sup>[24]</sup>. 由方程(1)可知,除了体系的总能量以外,还有另外两个守恒量即:轨道角动量的  $z$  分量和  $z$  宇称. 因此可以分别研究不同磁量子数  $m$  和宇称  $\pi_z = \pm 1$  的氢原子本征态的能量和本征波函数.

首先,将方程(1)中总的哈密顿量  $H$  分解为

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + V_1 + V_2, \quad (2)$$

这里,  $\mathbf{H}_0 = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r}$  为不含外场的零级项. 磁场和原子相互作用导致的顺磁作用项为

$$V_1 = \frac{1}{2} \xi \mathbf{L}_z, \quad (3)$$

抗磁作用项为

$$V_2 = \frac{1}{8} \xi^2 r^2 \sin^2 \theta. \quad (4)$$

注意到顺磁作用  $V_1$  与零级哈密顿量  $H_0$  对易,在谱表象(spectral representation, SR)里可以表示为对角矩阵,记为

$$\langle n'l'm' | V_1^{\text{SR}} | nlm \rangle = \frac{1}{2} \xi m \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{m'm}, \quad (5)$$

这里,  $|nlm\rangle$  是氢原子在无外场环境下的本征函数,记为

$$|nlm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{u_{nl}(r)}{r} P_{lm}(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad (6)$$

其中  $P_{lm}(\cos\theta)$  为归一化的连带勒让德函数,  $u_{nl}(r)$  是径向 Schrödinger 方程的本征函数,满足

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r). \quad (7)$$

在实际的计算中,  $u_{nl}(r)$  可以通过矩阵对角化的方式得到,并利用有限个平方可积的谱函数构造 SR 表象的基矢. 在此表象下,零级哈密顿量  $\mathbf{H}_0$  的矩阵元可表示为

$$\langle n'l'm' | \mathbf{H}_0^{\text{SR}} | nlm \rangle = E_{nl} \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (8)$$

为了构造完整的哈密顿矩阵元,还需要计算矩阵元  $\langle n'l'm' | V_2 | nlm \rangle$ . 如果直接在 SR 表象下计算这个矩阵元需要求两重积分(因为这里  $m$  是好量子数,省略了一重积分). 为了得到收敛的结果,当磁场较强时所需展开基矢的数目将非常可观. 对于矩阵对角化的计算而言,耗费的机时基本上与基矢的数目为平方标度关系. 这对于大规模计算强磁场中的原子参数而言是难以承受的. 考虑到抗磁作用项  $V_2$  在坐标表象(coordinate representation, CR)下可表示成一对角矩阵. 我们将分别在 SR 表象和 CR 表象下计算  $V_1$  和  $V_2$  相互作用矩阵元,利用快速的表象变换避免费时的直接双重积分,使得计算效率得以提高.

在 CR 表象下,将波函数离散在三维网格点上<sup>[25,26]</sup>

$$\psi = \sum_{\alpha\beta\gamma} \psi_{\alpha\beta\gamma}^{\text{CR}} | \alpha \rangle | \beta \rangle | \gamma \rangle,$$

这里  $| \alpha(r) \rangle$ ,  $| \beta(\theta) \rangle$  和  $| \gamma(\phi) \rangle$  分别是坐标  $r, \theta$  和  $\phi$  的本征函数,相应的本征值为  $r_\alpha, \theta_\beta$  和  $\phi_\gamma$ . 将与方位角  $\phi$  相关的运动展开在基函数  $| m \rangle = e^{im\phi} / \sqrt{2\pi}$  上. 相应的谱重叠积分  $\langle m' | m \rangle$  可以通过快速 Fourier 积分来计算. CR 表象和 SR 表象间相应的转换矩阵元  $\Phi_{\gamma m}$  可以定义如下:

$$\Phi_{\gamma m} = \frac{1}{\sqrt{N_\phi}} e^{im\phi_\gamma}, \quad (9)$$

这里,  $N_\phi$  是方位角的网格点的数目;  $\phi_\gamma = 2\gamma\pi/N_\phi$ ;  $\gamma = 0, 1, 2, \dots, N_\phi - 1$ . 同样, 极角  $\theta$  的运动可以展开在谱的基函数  $|P_{lm}\rangle$  上. 相应的谱重叠积分  $\langle P_{l'm'} | P_{lm}\rangle$  可以通过 Gauss-Legendre 积分来计算

$$\langle P_{l'm'} | P_{lm}\rangle = \sum_{\beta=1}^{N_\theta} \bar{\omega}_\beta P_{l'm'}(\cos\theta_\beta) P_{lm}(\cos\theta_\beta), \quad (10)$$

这里,  $N_\theta$  是极角  $\theta$  的网格点的数目;  $\cos\theta_\beta$  和  $\bar{\omega}_\beta$  分别是 Gauss-Legendre 积分的格点和积分权重. 那么, CR 表象和 SR 表象间相应的转换矩阵元  $\Theta_{\beta l}^m$  可以定义如下:

$$\Theta_{\beta l}^m = \sqrt{\bar{\omega}_\beta} P_{lm}(\cos\theta_\beta), \quad (11)$$

这就是所谓的二维 Gauss-Legendre-Fourier<sup>[27,28]</sup> 格点.

为了精确而且有效率的描述库仑长程相互作用和处理库仑奇点问题, 将径向部分  $|\alpha(r)\rangle$  离散在 CWDVR<sup>[25,26]</sup> (the Coulomb wave discrete variable representation) 格点上. 使用正能态的库仑波函数  $v(r)$ <sup>[29]</sup> 来构造 CWDVR 表象.  $v(r)$  满足如下方程:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z}{r} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right] v(r) = \varepsilon v(r), \quad (12)$$

这里,  $\varepsilon$ ,  $Z$  和  $\lambda$  分别表示参考体系的能量、核电荷数和角动量.  $\lambda$  在我们的计算中, 选为 0.

首先定义 CWDVR 基准函数

$$\chi_\alpha(r) = \frac{1}{\sqrt{w_\alpha}} \frac{1}{v'(r_\alpha)} \frac{v(r)}{r - r_\alpha}, \quad (13)$$

这里  $r_\alpha$  是  $v(r)$  的位于正半轴上的零点;  $w_\alpha = \frac{\pi}{a_\alpha}$ ,  $a_\alpha = v'(r_\alpha)$  是  $v(r)$  的一阶导数在  $r = r_\alpha$  处的值. 在 CWDVR 坐标表象中, 约化的径向哈密顿算符可以写为

$$\hat{H}_0^l = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V_c^l(r), \quad (14)$$

这里,  $V_c^l(r) = V_c(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}$ . 将动能算符和势能算符在 CWDVR 坐标表象中表示出来, 可以得到

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{0,\alpha\alpha'}^l &= \delta_{\alpha\alpha'} \left[ -\frac{c_\alpha}{6a_\alpha} + V_c^l(r_\alpha) \right] \\ &+ (-1)^{\alpha+\alpha'} (1 - \delta_{\alpha\alpha'}) \frac{1}{(r_\alpha - r_{\alpha'})^2}. \end{aligned} \quad (15)$$

将 CWDVR 表象下的哈密顿矩阵对角化, 得到的本征值定义成谱函数的能量, 相应的本征矢量  $R_{\alpha n}^l$  定义成 CWDVR 和 SR 能谱表象间相应的转换矩阵

$$u_{nl}(r) = \sum_{\alpha} R_{\alpha n}^l \chi_\alpha(r), \quad (16)$$

在 CWDVR 表象中, 抗磁作用  $V_2$  为对角矩阵, 其矩阵元为

$$\begin{aligned} \langle \alpha'\beta'\gamma' | V_2^{\text{DVR}} | \alpha\beta\gamma \rangle &= \frac{1}{8} \xi^2 r_\alpha^2 (1 - \cos^2\theta_\beta) \\ &\times \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \delta_{\gamma\gamma'}. \end{aligned} \quad (17)$$

至此, 强磁中氢原子总的哈密顿量在 SR 表象中记为

$$\mathbf{H}^{\text{SR}} = \mathbf{H}_0^{\text{SR}} + V_1^{\text{SR}} + L^+ V_2^{\text{DVR}} L, \quad (18)$$

在 CWDVR 表象中记为

$$\mathbf{H}^{\text{DVR}} = L\mathbf{H}_0^{\text{SR}}L^+ + LV_1^{\text{SR}}L^+ + LL^+ V_2^{\text{DVR}}LL^+, \quad (19)$$

这里,  $L$  为三维 SR 表象和 CWDVR 坐标表象间的变换矩阵, 记为

$$\mathbf{L}_{nlm,\alpha\beta\gamma}^+ = R_{n\alpha}^{l+} \Theta_{l\mu}^{m+} \Phi_{m\gamma}^+. \quad (20)$$

这样, 通过使用快速的表象变换替换了原先费时的双重积分. 值得一提的是, CWDVR 是一个非均匀网格, 其在原子核附近具有更多更密的格点, 而在远区 CWDVR 给出近似均匀的网格. 令  $\kappa = \sqrt{2\varepsilon}$ ;  $\eta = \frac{Z}{\kappa}$ . 针对不同体系, 可以调节不同的  $\kappa$ ,  $\eta$  值, 使得构造的 CWDVR 基矢最优化.  $\kappa$  决定了远区网格点的分布和所能表示的最大的能量范围.  $\eta$  影响近核区的网格点的分布密度. 在文献[26]的算例中可以看到: 仅需很少的网格点便可对原子结构给出非常精确的描述, 是处理含库仑奇点问题的理想网格. 这里径向的 CWDVR 网格和角向的 Gauss-Legendre-Fourier 网格构成了三维空间直积表示, 使得 SR 表象和 CR 表象间的三维变换矩阵可以分解为三个一维空间变换矩阵的乘积, 从而极大地提高了计算的效率. 在三维直积空间网格上, 哈密顿量是一个稀疏矩阵, 其本征值和本征矢可由迭代方法利用优化程序包 ARPACK 并行高速求出. 其计算量与空间网格或基矢数目基本为线形标度关系.

将方程(18)中的谱表象哈密顿量或方程(19)中的坐标表象哈密顿量对角化, 可得强磁场中的氢原子能级和波函数. 为了和文献上的结果相比较, 下面给出的氢原子各个束缚态的结合能  $E_b$  等于总的哈密顿量对角化后的各个本征值减去相应的朗道能级<sup>[16,17]</sup>

$$E_b = \frac{1}{2} (|m| + m + 1) \xi - E. \quad (21)$$

得到了体系的电子波函数, 可以计算所有可观测量的平均值, 比如: 四极矩  $Q_{\alpha\beta}$ . 由于我们定义磁场的方向沿着  $Z$  轴, 所以, 四阶张量  $Q_{\alpha\beta}$  的各个分量满足以下关系:

$$Q_{xy} = Q_{zx} = Q_{yz} = 0, \quad (22)$$

$$Q_{xx} = Q_{yy} = -\frac{1}{2}Q_{zz} = \langle z^2 \rangle - \langle x^2 \rangle, \quad (23)$$

利用恒等式  $\langle r^2 \rangle \equiv \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$ , 可知在球坐标下

$$-Q_{zz} = \langle r^2(3\cos^2\theta - 1) \rangle. \quad (24)$$

上述的理论方法并不需要对场的具体形式进行特别的限定, 所以可直接推广到原子与任意方向的交叉电磁场相互作用的研究, 具有很强的普适性. 实际上, 我们已经将该方法成功地应用于激光与原子相互作用的研究<sup>[25,26]</sup>.

### 3. 结果与分析

#### 3.1. 收敛性计算

CWDVR 基函数有 4 个可优化的参数  $n, l, \kappa$  和  $\eta$ . 如何优化这些参数, 快速得到计算收敛的结果是一个值得研究的问题. 下面以  $\xi = 10$  氢原子能级结构计算为例, 具体说明我们发展的快速收敛的计算方法. 在 4 个参数中,  $n, l$  的大小决定了整个展开基矢的数目或者说希尔伯特空间的大小. 选取的  $n, l$  的数目越大, 意味着展开的基矢越趋向完备, 但是由于计算量和基矢数目的平方成正比, 即意味计算效率越低. 如前所述,  $\kappa$  决定了远区 CWDVR 网格点的分布和该网格所能表示最大的能量.  $\kappa$  越大, 该 CWDVR 网格点对高能的部分描述的更准确.  $\eta$  的绝对值越大, 近核区的网格点的分布越密, 对于离核附近的波函数刻画得更为准确. 基于 4 个 CWDVR 参数的特点, 本文提出了一套确实可行的能够快速得到收敛结果的计算方法. 具体如下:

首先, 根据具体的情况和经验, 选定初始的 4 个参数. 基本的原则是:  $n, l$  的大小要合适. 如果  $n, l$  选择过大, 将降低优化过程的效率. 如果  $n, l$  选择过小, 则得不到收敛的结果. 对于这个特定的例子 ( $\xi = 10$ ), 结合实际的计算资源, 初始的  $n = 100, l = 20, \eta$  和  $\kappa$  分别取  $-16.0, 5.00$ . 固定参数  $n, l$ , 分别单独变化参数  $\kappa$  和  $\eta$  直至得到收敛的结果. 如表 1 所示, 随着参数  $\kappa$  从 5 增大到 20, 氢原子基态的结合能  $E_b$ , 四极矩  $Q_{zz}$  和  $\langle r^2 \rangle$  的数值在第 13 位有效数字上已经收敛. 将  $\eta$  的绝对值增到 32 (相当于增加了近核区间的网格点) 结果收敛. 使用联想的微机 (CPU 主频 2.83GHz, 3G 的内存), 串行地完成每一次计算, 耗时不超过 10 s.

其次, 固定 3 个参数  $n, \kappa$  和  $\eta$ , 单独变化参数  $l$  直至得到收敛的结果. 这里先优化参数  $l$  的原因是:  $\xi = 10$  的磁场即便是对于氢原子基态而言也是比较强的, 体系的对称性更趋向于轴对称, 需要考虑更多的分波. 相对于参数  $n$  来说, 参数  $l$  的变化对计算结果更为敏感. 例如: 当  $l$  从 20 变为 30 时, 结合能  $E$  在第 7 位有效数字上有差异;  $Q_{zz}$  和  $\langle r^2 \rangle$  的数值分别第 3—2 位有效数字上有差异. 当  $l$  逐渐增加, 分别取 30, 50 和 70 时,  $E_b, Q_{zz}$  和  $\langle r^2 \rangle$  的数值逐步收敛. 由此也能发现,  $Q_{zz}$  和  $\langle r^2 \rangle$  对波函数的精度更为敏感. 当  $l$  从 50 增加到 70 后,  $E_b$  数值的差异在第 12 位有效数字上;  $Q_{zz}$  和  $\langle r^2 \rangle$  的数值差异分别第 9 位和第 8 位有效数字上. 进一步增加  $l$  的取值到 100, 三组数值没有显著的变化. 这时暂时将  $l$  的值固定为 70.

最后, 固定 3 个参数  $l = 70, \kappa = 20$  和  $\eta = -32$ , 单独检验参数  $n$  的收敛性. 当  $n$  的数目增加到 130 时,  $E_b, Q_{zz}$  和  $\langle r^2 \rangle$  的数值已经收敛, 有 11 位有效数字的精度. 至此, 对于这个磁场强度, 我们得到了一组优化的基矢. 对于实际的应用, 并不需要对于每一个磁场强度都进行这样的基组优化. 可以选择一个恰当大的磁场范围, 对该范围内最大、最小两个磁场强度同时进行统一的优化. 如果优化出来的基组对于这两个磁场强度都能得到令人满意的精度, 那么经过优化的基组可以适用于整个磁场范围内的所有计算.

#### 3.2. 强磁场中氢原子的能级结构

表 2 给出了氢原子基态的结合能  $E_b, \langle r^2 \rangle$  以及四极矩  $Q_{zz}$  随磁场强度的变化. 其中“**A**”是本文的数值结果. “**A**”右上角标的数字表示不同的 CWDVR 展开基矢. 表中括号里面的数字表示取不同的分波数, 数值结果的差异. “**B**”是 Zhao 等人使用 B-splines 方法计算得到的磁场中氢原子  $E_b$  的结果<sup>[13]</sup>. “**C**”表示 Kravchenko 和 Liberman 使用幂级数展开的方法得到的氢原子能级结构<sup>[17]</sup>; “**D**”是 Potekhin 和 Turbiner 计算的磁场中氢原子的四极矩  $Q_{zz}$ <sup>[21]</sup>; “**E**”表示 Baye 等人基于 Lagrange mesh 方法得到的能级结构和四极矩  $Q_{zz}$ <sup>[23]</sup>. 如表 2 所示, 本文的数值结果  $E_b, \langle r^2 \rangle$  和  $Q_{zz}$  均达到了 10 到 12 位有效数字的精度, 和其他的高精度计算结果非常好地符合. 值得指出的是,  $\langle r^2 \rangle$  和  $Q_{zz}$  相对于结合能  $E_b$ , 对波函数的数值精度更加敏感, 所以表 2 的结果同时表

明:我们的波函数精度得到了更为严格的检验.

表1  $\xi = 10$  氢原子基态结合能  $E_b, \langle r^2 \rangle$  和四极矩  $Q_{zz}$

CWDVR 参数( $n, l, \eta, \kappa$ )	$E_b/a. u.$	$\langle r^2 \rangle/a. u.$	$Q_{zz}/a. u.$
100, 20, -16, 5	1. 7477933124836	0. 48654855188	0. 4448886863
100, 20, -16, 10	1. 7477933124616	0. 48654855190	0. 4448886863
100, 20, -16, 20	1. 7477933124619	0. 48654855190	0. 4448886863
100, 20, -32, 20	1. 7477933124623	0. 48654855190	0. 4448886863
100, 30, -32, 20	1. 7477971449142	0. 48664638592	0. 4450864781
100, 50, -32, 20	1. 7477971637137	0. 48664739658	0. 4450885129
100, 70, -32, 20	1. 7477971637166	0. 48664739676	0. 4450885132
100, 100, -32, 20	1. 7477971637158	0. 48664739675	0. 4450885132
130, 70, -32, 20	1. 7477971637161	0. 48664739677	0. 4450885132

表2 不同磁场强度下,氢原子基态的结合能  $E_b, \langle r^2 \rangle$  以及四极矩  $Q_{zz}$

$\xi$		$E_b/a. u.$	$\langle r^2 \rangle/a. u.$	$Q_{zz}/a. u.$
0. 01	A <sup>1</sup>	0. 5049750027592 (1)	2. 99946283956547 (9)	0. 0002498080348 (1)
	B	0. 504975002759 (2)	—	—
	C	0. 504975002759	—	—
注: A <sup>1</sup> : $n=20; l=8; \eta=-16; \kappa=1$				
0. 1	A <sup>2</sup>	0. 5475264804010 (9)	2. 9493369057131 (2)	0. 0232712794679 (2)
	B	0. 547526480401 (4)	—	—
	C	0. 547526480401	—	—
	D		—	0. 0235
注: A <sup>2</sup> : $n=20; l=16; \eta=-16; \kappa=1$				
1. 0	A <sup>3</sup>	0. 8311688967331 (4)	1. 8163272212180 (0)	0. 4176542449381 (7)
	B	0. 831168896733 (20)	—	—
	C	0. 831168896733	—	—
	D		—	0. 4155
	E	0. 83116889673315	1. 81632722121	0. 41765424493
注: A <sup>3</sup> : $n=30; l=30; \eta=-16; \kappa=2$				
10	A <sup>4</sup>	1. 74779716371 (6)	0. 4866473967 (7)	0. 4450885132 (5)
	B	1. 747797163715 (50)	—	—
	C	1. 747797163714	—	—
	D		—	0. 447
	E	1. 7477971637141	0. 48664739677	0. 44508851323
注: A <sup>4</sup> : $n=130; l=70; \eta=-32; \kappa=20$				

当  $\xi = 0-1.0$  时,相对于其他高精度计算方法而言,CWDVR 谱方法的计算效率更高. 比如:  $\xi$  为 0. 01 时,使用很小的基组规模 ( $n = 20, l = 8$ ) 便可得到收敛的结果. 即便是磁场强度增强到 1. 0,所需的基矢规模也不大 ( $n = 30, l = 30$ ). 这是由于该方法自身的特点决定的. 在构造 CWDVR 基矢的时候,利

用了正能态的库仑波函数来构造基准函数,所以该方法能内禀的处理库仑奇点问题. 此外,DVR 方法能够在保证计算精度的前提下,大幅节省数值计算的网格点<sup>[30]</sup>. 当库仑相互作用比较强,磁的作用相对比较弱的时候,CWDVR 基矢是一个精度很高而且非常有效率的选择. 在表 2 中,  $\xi = 0.01-1.0$  时,

$\langle r^2 \rangle$ 以及四极矩  $Q_{zz}$ 高精度的结果为首次给出. 当磁场强度非常强的时候, 体系基态的对称性从原来的球对称逐渐偏向轴对称, 这种方法需要较大

规模的基组才能得到收敛的结果. 如文献[20]所述, 对于超强磁场选用半抛物坐标系是更简单有效的选择.

表3 不同磁场强度下, 氢原子  $3d_{-2}$  的结合能  $E_b, \langle r^2 \rangle$  以及四极矩  $Q_{zz}$

$\xi$		$E_b/a. u.$	$\langle r^2 \rangle/a. u.$	$Q_{zz}/a. u.$
0.01	$A^1$	0.0692471834028(1)	119.00160259829(6)	-66.96074062684(2)
	C	0.069247183403	—	—
注: $A^1: n=40; l=20; \eta=-8; \kappa=1$				
0.1	$A^2$	0.1378395154628(1)	48.2546507544(3)	-19.9631179233(0)
	C	0.137839515462	—	—
注: $A^2: n=60; l=40; \eta=-16; \kappa=1$				
1.0	$A^3$	0.3530480251495(3)	8.17114338666(4)	0.11086123099(5)
	C	0.353048025149	—	—
	E	0.3530480251497	8.1711433865	0.1108612307
注: $A^3: n=80; l=80; \eta=-8; \kappa=3$				
10	$A^4$	0.90821477549(9)	1.3545578262(4)	0.952594570(6)
	C	0.9082147755	—	—
	E	0.908214775499	1.35455782625	0.9525945705
注: $A^4: n=100; l=100; \eta=-32; \kappa=10$				

表3给出了磁场中氢原子  $m = -2$  能量最低量子态的结合能  $E_b, \langle r^2 \rangle$  以及四极矩  $Q_{zz}$ . 为了统一起见, 和表2的标识一样, “A”表示本文的数值结果. “A”右上角标的数字表示不同的 CWDVR 展开基矢.  $\xi = 1.0$  和  $10$  时, 本文自身收敛的结果(氢原子  $m = -2$  能量最低量子态的结合能  $E_b, \langle r^2 \rangle$  和  $Q_{zz}$ ) 分别有 11 和 10 位有效数字, 同样和其他高精度的计算结果非常好地符合. 在表3中,  $\xi = 0.01-1.0$ ,  $\langle r^2 \rangle$  以及四极矩  $Q_{zz}$  高精度的结果也是首次给出.

相同的磁场强度下, 相对于  $m = 0$  能量最低的量子态  $1s_0, m = -2$  能量最低量子态的  $3d_{-2}$  的波函数在位型空间拓展的更远. 比如:  $\xi = 0.01$  时,  $1s_0$  的  $\langle r^2 \rangle$  约为  $3a. u.$ ;  $3d_{-2}$  的  $\langle r^2 \rangle$  约为  $119a. u.$ . 所以在保证计算精度相当的前提下, 需要更大规模的基组.

图1和图2展示了氢原子的低激发态结合能  $E_b$  随磁场强度  $\xi$  变化的关系. 如方程(21)所示, 我们选择  $\frac{1}{2}(|m| + m + 1)\xi$  作为体系的能量零点(如图1中红实线所示). 如两幅图所示, 各个能级的结合能均随着磁场强度的增强而增加. 一般来说, 主量子数较低的能级, 由于自身束缚能比较大, 磁场对其的影响较小. 当  $\xi$  约为  $0.31$  时,  $3d_{-1}$  的结合能

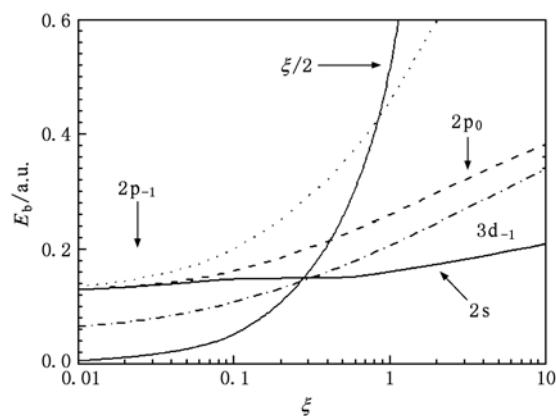


图1 氢原子的低激发态结合能  $E_b$  随磁场强度的变化

已经和  $2s$  的结合能相当. 磁场强度为  $0$  时, 氢原子的  $2s, 2p_0$  和  $2p_{-1}$  能量简并. 在磁场的作用下, 能级发生退简并. 随着磁场的增强, 可以观察到轨道角动量  $l$  较大的能级, 更容易受到磁场的影响; 相同的  $n, l, |m|$  越大, 结合能对磁场强度的变化更为敏感. 从图2中也能观察到类似的规律.

随着磁场强度的增强, 能级的标识是一个值得注意的问题. 本文采用零级哈密顿  $H_0$  本征的波函数作为展开的基矢能有效地解决这个问题. 图3展示了不同的磁场强度下, 氢原子  $m = 0$  体系第六个最

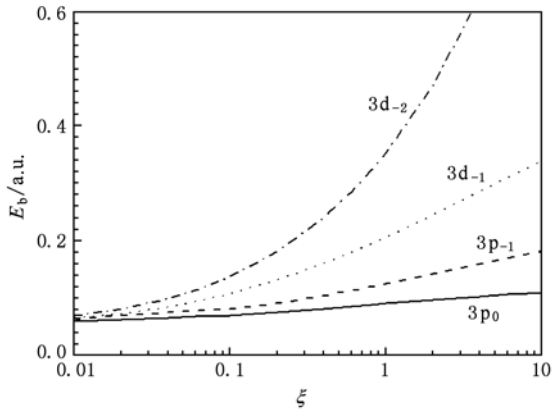


图2 氢原子主量子数  $n=3$  的低激发态结合能  $E_b$  随磁场强度的变化

低能级的基矢展开系数. 无外场时, 这个能级的展开系数不为 0 的基矢只有一项:  $3s$ , 相应的展开系数为 1. 随着磁场的增强,  $3d_0$  等其他基矢的展开系数从 0 逐渐增加. 由于对称性的关系, 对于  $m=0$  的体系,  $m$  不等于 0 的基矢展开系数恒等于 0. 实际上, 对于这个体系, 我们也仅仅使用这些  $m=0$  的基矢进行展开. 同理, 由于对称性的原因,  $\Delta l$  为奇数的基矢展开系数也是严格为 0 的. 磁场强度为 0.001 时, 基矢  $3s$  的展开系数降低到 0.82;  $3d_0$  的展开系数增加到 0.17; 其他基矢的展开系数太小, 不能在图 3 中展示出来. 随着场强的增强,  $3s$  的展开系数不断地降低; 其它基矢的展开系数不断增加. 当磁场强度为 0.1 时,  $4d_0$  的展开系数增加到 0.38 而  $3s$  的展开系数降低到 0.08. 这时氢原子  $m=0$  体系第六个最低能级的标识应当由原先的  $3s$  改为  $4d_0$ . 随着磁场的进一步增强, 基矢  $3s$  在各个能级中所占的比重均不是主要的,  $3s$  已经无法用于能级的标识.

图 4 展示了不同的磁场强度下, 基矢  $3d_0$  的展开系数. 这里展开系数小于 0.05 的基矢没有展示出来. 磁场强度比较低的时候, 可以用  $3d_0$  标识氢原子  $m=0$  体系第 4 个最低能级. 随着磁场的增强, 基矢  $3d_0$  的展开系数从 1 逐渐降低. 磁场强度增加到 0.2 时,  $m=0$  体系第 4 个最低能级中展开系数最大的基矢变为  $3p_0$ , 所以不能使用  $3d_0$  对该能级进行标识. 在图 4 中, 磁场强度为 0.2 和 0.25 时, 展示的是体系第 5 个最低能级中比重最大的基矢展开系数. 在这个磁场范围内, 体系第 5 个最低能级可以用  $3d_0$  标识.

图 5 展示了氢原子 ( $m=0$ ) 能量最低能级的四极矩  $Q_{zz}$  随磁场强度的变化规律. 其中黑色实心球是

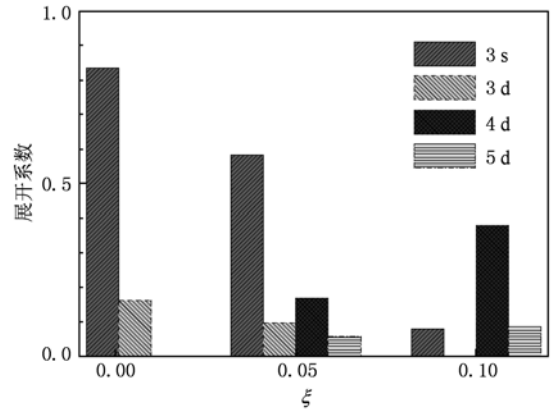


图3 氢原子 ( $m=0$ ) 第六个最低能级基矢展开系数随磁场强度的变化

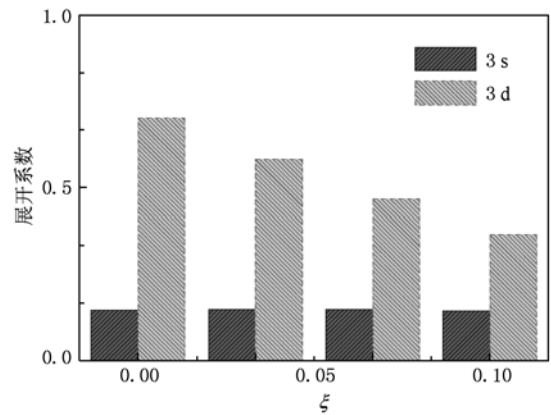


图4 氢原子 ( $m=0$ ) 基矢  $3d_0$  的展开系数随磁场强度的变化

本文的计算结果; 红色的虚线是 Alexander Potekhin 和 Alexander Turbiner<sup>[21]</sup> 给出的拟合公式的结果; 空心的正三角表示 Baye 等人的计算结果<sup>[23]</sup>. 从比较的结果来看, 本文的结果和 Baye 等人的高精度计算结果符合得很好.  $\xi = 1-10$ , 两组计算有 9 位以上有效数字一致. 即使到了超强的磁场区域 ( $\xi = 1000$ ), 两组计算仍然有 5 位以上有效数字一致. 图 5 的结果和文献[21]中拟合公式的结果最大的差距是 2%. 从图中, 还可以观察到:  $\xi \rightarrow 0$  时,  $1s$  的  $Q_{zz}$  渐近行为趋向  $2.5 \times \xi^2$  (蓝线); 随着磁场强度的增强,  $Q_{zz}$  由无外场时的 0 逐渐增大. 当  $\xi$  约为 2.4 时,  $Q_{zz}$  的结果达到最大值 0.5.  $\xi \rightarrow \infty$  时,  $Q_{zz} \rightarrow (\log_{10}\xi)^{-2}$  (绿线). 这里顺便指出文献[21]中一处笔误“ $\xi \rightarrow \infty$  时,  $Q_{zz} \rightarrow (\ln\xi)^{-2}$ ”.

图 6(a) 和 (b) 两图给出了  $\xi = 0.0001-1000$ , 氢原子 ( $m = -1$  和  $m = -2$ ) 能量最低能级的四极矩  $Q_{zz}$  随磁场强度的变化规律. 其中, 实线是本文  $m$

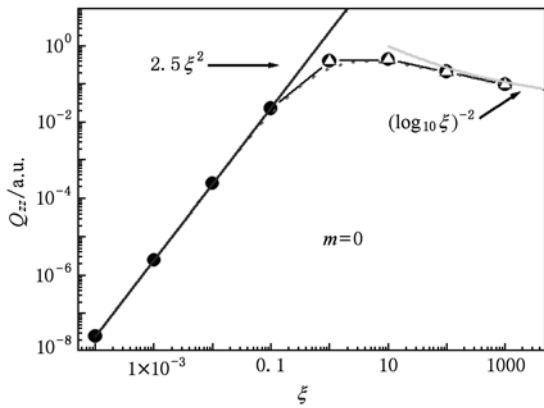


图5 氢原子( $m=0$ )能量最低能级的四极矩  $Q_{zz}$  随磁场强度的变化

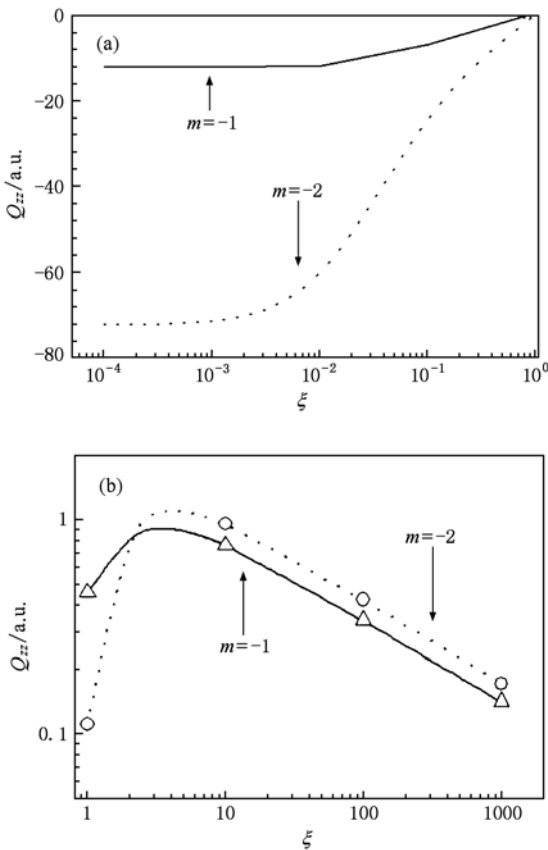


图6 氢原子能量最低能级的四极矩  $Q_{zz}$  随磁场强度的变化  
(a)  $\xi = 0.0001-1$ ; (b)  $\xi = 1-1000$

$m = -1$  的结果;虚线是本文  $m = -2$  的结果;空心的正三角形和圆圈分别表示 Baye 等人  $m = -1$  和  $m = -2$  的计算结果<sup>[23]</sup>. 从比较的结果来看,本文的结果和 Baye 等人的结果符合的很好.  $\xi = 1-10$ , 两组计算有 9 位以上有效数字一致. 即使到了超强的磁场区域( $\xi = 1000$ ), 两组计算仍然有 3 位以上有效

数字一致. 图 6(a) 中给出了  $\xi$  小于 1,  $Q_{zz}$  精确的结果. 从图中,还可以观察到:在低磁场强度的时候,  $m = -1$  的  $Q_{zz}$  的绝对值比  $m = -2$  的情形大了将近 7 倍. 两种情形  $Q_{zz}$  的数值均随着场强的增强而增大, 其中  $m = -2$  的情形对磁场强度变化更加敏感. 当  $\xi$  接近 2.1 时,  $m = -2$  和  $m = -1$  的  $Q_{zz}$  数值已经基本相当. 随着磁场强度进一步增强,  $m = -2$  的  $Q_{zz}$  的数值反而超过了  $m = -1$  的  $Q_{zz}$ .  $\xi$  为 3 时,  $m = -1$  时  $Q_{zz}$  的数值达到了最大值 0.91;  $\xi$  为 4 时,  $m = -2$  时  $Q_{zz}$  的数值达到了最大值 1.1.

图 7 展示了  $\xi = 0.0001-1000$ , 氢原子( $m = 0$ ,  $m = -1$  和  $m = -2$ ) 能量最低能级的  $\langle r^2 \rangle$  随磁场强度的变化规律. 其中,实线是本文  $m = 0$  的结果;点划线是本文  $m = -1$  的结果;虚线是本文  $m = -2$  的结果;空心的正三角形表示 Baye 等人  $m = 0$  的计算结果<sup>[23]</sup>. 从比较的结果来看,本文的结果和 Baye 等人的结果很好地符合,数值精度和  $Q_{zz}$  的计算精度基本相当. 从图中,可以看到  $\langle r^2 \rangle$  的数值随着磁场强度的增强而减少. 这个结果反映了这样一个物理现象:随着磁场的增强,由于电子受磁场的箍缩,致使其空间分布变得更加局域. 从中也能看到,  $m$  的绝对值越大,与磁场强度的依赖关系愈敏感.

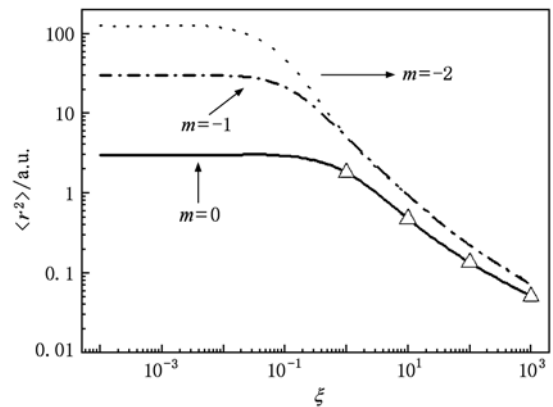


图7 氢原子能量最低能级的  $\langle r^2 \rangle$  随磁场强度的变化

#### 4. 结 论

本文发展了一套简单、高效、高精度的非微扰量子理论方法求解强磁场中的 Schrödinger 方程. 以氢原子为例,计算了  $\xi = 0.0001-1000$ , 基态和低激发态的能级结构和四极矩等物理参数,并和其他高精度方法的结果进行了比较研究. 其中,部分低场强的高精度数据为我们首次给出. 目前,实验室里



能够产生的磁场强度范围大致在  $\xi = 0-0.05$ . 在这个磁场强度范围内, 相对于其他高精度计算方法而言, 本文提出的计算方法具有相当高的计算精度和非常高的计算效率, 并且有很强的普适性, 可以满

足提供相关实验模拟所需的原子参数应用需求.

王建国教授对本文工作提出了许多有益的建议. 作者在此谨表谢意.

- [1] Canuto V, Ventura J 1977 *Fundam. Cosm. Phys.* **2** 203
- [2] Garstang R H 1977 *Rep. Prog. Phys.* **40** 105
- [3] Ruder H, Wunner G, Erold H, Geyer F 1994 *Atoms in Strong Magnetic Fields* (Springer, Berlin)
- [4] Potekhin A Y, Pavlov G G 1993 *Astrophys. J.* **407** 330
- [5] Cacciani P, Luc - Koenig E, Pinard J, Thomas C, Liberman S 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 1124
- [6] Korolev A V, Liberman M A 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 270
- [7] Braams B J 1991 *Plasma Phys. Control. Fusion.* **33** 715
- [8] Zakrzewski J, Dupret K, Delande D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 522
- [9] Shertzer J 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3833
- [10] Dimova M G, Kaschiev M S, Vinitzky S I 2005 *J. Phys. B* **38** 2337
- [11] Deng S H, Gao S, Li Y P, Pei Y C, Lin S L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 826 (in Chinese) [邓善红、高嵩、李永平、裴云昌、林圣路 2010 物理学报 **59** 826]
- [12] Wang J H, Hsue C S 1995 *Phys. Rev. A* **52** 4508
- [13] Zhao L B, Stancil P C 2007 *J. Phys. B* **40** 4347
- [14] Meng H Y, Kang S, Shi T Y, Zhan M S 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3198 (in Chinese) [孟慧艳、康帅、史庭云、詹明生 2007 物理学报 **56** 3198]
- [15] Kang S, Liu Q, Zhong Z X, Zhang X Z, Shi T Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3380 (in Chinese) [康帅、刘强、钟振祥、张现周、史庭云 2006 物理学报 **55** 3380]
- [16] Kravchenko Y P, Liberman M A, Johansson B 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 619
- [17] Kravchenko Y P, Liberman M A, Johansson B 1996 *Phys. Rev. A* **54** 287
- [18] Mori K, Hailey C J 2002 *Astrophysical Journal* **564** 914
- [19] Potekhin A Y, Chabrier G 2003 *Astrophysical Journal* **585** 955
- [20] Guan X 2006 *Phys. Rev. A* **74** 023413
- [21] Potekhin A Y, Turbiner A V 2001 *Phys. Rev. A* **63** 065402
- [22] Lozovik Y E, Klyuchnik A V 1978 *Phys. Lett. A* **66** 282
- [23] Baye D, Vincke M, Hesse M 2008 *J. Phys. B* **41** 055005
- [24] Bethe H A, Salpeter E 1977 *Quantum Mechanics of One- and Two-electron Atom* (Plenum, New York)
- [25] Zeng S L, Zou S Y, Yan J 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 053202
- [26] Zeng S L, Zou S Y, Wang J G, Yan J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58**, 8180 (in Chinese) [曾思良、邹士阳、王建国、颜君 2009 物理学报 **58** 8180]
- [27] Feit M D, Fleck J A 1983 *J. Chem. Phys.* **78** 301
- [28] Feit M D, Fleck J A, Steiger A 1982 *J. Comp. Phys.* **47** 412
- [29] Abramowitz M, Stegun I A 1965 *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York)
- [30] Gregory C C, Tromp J W 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 1812

## Calculations of low-lying states of hydrogen atom in strong magnetic field by generalized pseudospectral method<sup>\*</sup>

Zeng Si-Liang<sup>1)</sup> Ni Fei-Fei<sup>2)</sup> He Jian-Feng<sup>2)</sup> Zou Shi-Yang<sup>1)†</sup> Yan Jun<sup>1)3)‡</sup>

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

2) (*School of Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

3) (*Center for Applied Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China*)

(Received 7 May 2010; revised manuscript received 21 June 2010)

### Abstract

A very simple and highly accurate method of investigating the behavior of atomic system in a strong magnetic field has been developed based on the generalized pseudospectral discretization. As examples, we present the calculations of the binding energies and quadruple moments for the ground and low-lying excited states of the hydrogen atom in a magnetic field ranging from zero up to 1000 a. u. . The obtained results are found to be in excellent agreement with other high-accuracy theoretical calculations. The present method may be straightforwardly applied to cross electric-magnetic field in an arbitrary orientation.

**Keywords:** strong magnetic field, CWDVR generalized pseudospectral method, energy level, quadrupole moment

**PACS:** 32.60.+i, 02.70.Hm, 32.70.Cs

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10904006, 10878008, 10875017, 10734140), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2005CB724500), Science and Technology Funds of China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. 2009B0102011, 2009A0102006).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: zou\_shiyang@iapcm.ac.cn

<sup>‡</sup> E-mail: yan\_jun@iapcm.ac.cn