

采用相对论多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法对 Mg 原子同位素位移的理论研究

余庚华 刘鸿 赵朋义 徐炳明 高当丽 朱晓玲 杨维

Theoretical calculations on isotope shifts of Mg I by using relativistic multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method

Yu Geng-Hua Liu Hong Zhao Peng-Yi Xu Bing-Ming Gao Dang-Li Zhu Xiao-Ling Yang Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 113101 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.113101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.113101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

理论研究 B_2 分子 $X^3\Sigma_g^-, ^3\Pi_u$ 态的光谱性质

Study on spectroscopic properties of B_2 ($X^3\Sigma_g^-, A^3\Pi_u$) molecule

物理学报.2012, 61(20): 203101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.203101>

镁原子碰撞激发微分截面和 Stokes 参数的理论研究

A theoretical study on electron impact excitation differential cross sections and Stokes parameters of Mg atom

物理学报.2012, 61(10): 103102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.103102>

相对论效应对类锂离子能级结构及辐射跃迁性质的影响

The effect of relativity on the structures and transition properties of Li-like ions

物理学报.2012, 61(9): 093106 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.093106>

采用相对论多组态Dirac-Hartree-Fock方法对Mg原子同位素位移的理论研究*

余庚华^{1)†} 刘鸿¹⁾ 赵朋义²⁾ 徐炳明³⁾ 高当丽⁴⁾ 朱晓玲¹⁾ 杨维¹⁾

1)(成都大学信息科学与工程学院, 成都 610106)

2)(湖北师范大学物理与电子科学学院, 黄石 435002)

3)(中国海洋大学信息科学与工程学院, 青岛 266100)

4)(西安建筑科技大学理学院, 西安 710055)

(2017年1月12日收到; 2017年3月21日收到修改稿)

利用相对论多组态Dirac-Hartree-Fock方法研究了Mg原子基态到低激发态 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 两条跃迁谱线的同位素位移参数, 包括正常质量位移系数, 特殊质量位移系数和场位移因子, 并计算了 ^{24}Mg , ^{25}Mg 和 ^{26}Mg 三个稳定同位素的同位素位移. 在计算中采用了一种受限制的双电子激发模式, 并将同位素位移计算结果与已有的实验测量和理论计算结果进行了对比. 结果表明, 用本文的研究方法计算的Mg原子同位素位移与其他理论结果和实验测量值十分符合. 本文的计算结果可以为 $^{20-40}\text{Mg}$ 同位素位移测量实验提供必要的参考, 所用的计算方法也可以应用到其他类Mg体系(核外电子数等于12的离子)等多电子离子的光谱结构计算和同位素位移的研究中.

关键词: 同位素位移, 多组态相互作用, 自洽场, 镁原子

PACS: 31.30.Gs, 31.15.am, 21.10.Gv, 32.10.Bi

DOI: 10.7498/aps.66.113101

1 引言

同位素位移(isotope shift, IS)的理论和实验研究是原子分子物理领域的热点研究内容之一, 在原子分子精密谱、冷原子物理、量子物理理论检验以及原子核物理等领域都有广泛的应用^[1-6]. 通过研究同位素位移, 可以获得原子核电荷分布、核自旋、超精细结构、磁偶极矩以及电四极矩等信息^[7-10]. 同位素位移是由于同位素之间原子核质量和电荷分布不同产生的能级跃迁频率的移动, 理论上一般处理方式是将组态相互作用(configuration interaction, CI)与Breit近似、多体微扰论(many-body perturbation theory, MBPT)、

相对论效应、Dirac-Fock-Sturm(DFS)方法以及Dirac-Hartree-Fock(DHF)方法结合起来, 由此发展起来的CI+MBPT和CI+DFS等计算方法^[11,12]在类Li离子、类Na离子等的同位素位移计算中取得了比较好的结果. 近年来关于Mg原子及Mg离子同位素位移的研究吸引了越来越多的关注^[13-15]. Mg原子(核电荷数 $Z=12$)核外有12个电子, 包括2个价电子和10个内壳层电子, 电子数更多, 其同位素位移计算也更复杂. 且Mg原子有丰富的同位素, 除了三个稳定的同位素 $^{24-26}\text{Mg}$ 可以用于光频标和精密测量研究外, 还有十几个半衰期在几十毫秒至几十小时的同位素 $^{20-23}\text{Mg}$ 及 $^{27-40}\text{Mg}$, 覆盖了幻中子数 $N=8, 18, 28$ 的范围, 这些短寿命同位素是反转岛附近原子核奇特性质

* 国家自然科学基金(批准号: 11304093, 11604253)、陕西省青年科技新星项目(批准号: 2015KJXX-33)和四川省教育厅科研基金(批准号: 14ZB0375)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: genghuayu@aliyun.com

的重要研究对象。

我们选择 Mg 原子基态到低激发态 1S_0 - 1P_1 和 1S_0 - 3P_1 两条跃迁谱线作为研究对象, 如图 1 所示, 计算其同位素位移。这两条跃迁谱线对应的波长分别为 285.2 和 457.1 nm, 不仅是激光冷却和囚禁 Mg 稳定原子同位素的常用跃迁, 也可以很方便地用于测量短寿命 Mg 原子同位素位移, 进而获得核自旋、电荷分布、超精细结构等诸多原子数据。在计算中我们采用多组态 Dirac-Hartree-Fock (multi-configuration Dirac-Hartree-Fock, MCDHF) 方法开展同位素位移计算, 采用电子波函数用自洽场 (self-consistent field, SCF) 和相对论组态相互作用 (relativistic configuration interaction, RCI) 方法进行优化, 并且在 RCI 计算中引入 Breit 近似。

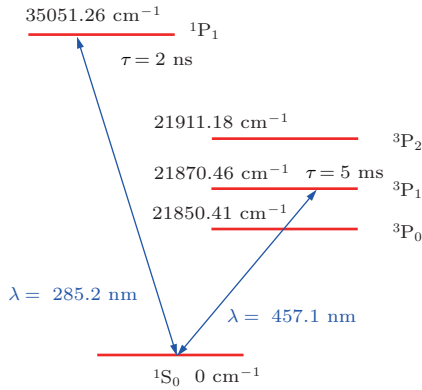


图 1 Mg 原子低激发态能级图

Fig. 1. The diagram of low lying energy levels of Mg.

2 理论方法

2.1 同位素位移一般理论

原子跃迁谱线的同位素位移来自两个方面, 一个是由原子核的有限电荷分布引起的位移, 称为场位移 (field shift, FS); 另一个是由原子核的有限质量引起的位移, 称为质量位移 (mass shift, MS). 质量位移可以分为正常质量位移 (normal mass shift, NMS) 和特殊质量位移 (specific mass shift, SMS). 对于质量数分别为 A 和 A' 的两个同位素, 对应能量分别为 E_u 和 E_l 的两个原子能级 u 和 l 之间跃迁 $h\nu = E_u - E_l$ ($E_u > E_l$, ν 为跃迁频率) 的同位素位移可以表示为^[14,16-20]

$$\delta\nu^{A,A'} = (\Delta K^{\text{NMS}} + \Delta K^{\text{SMS}}) \left(\frac{1}{M} - \frac{1}{M'} \right) + F\delta\langle r^2 \rangle^{A,A'}, \quad (1)$$

式中 M 和 M' 分别为同位素 A 和 A' 对应的原子核质量, $\delta\langle r^2 \rangle^{A,A'}$ 为同位素 A 和 A' 原子核方均根电荷半径之差, ΔK^{NMS} , ΔK^{SMS} 和 F 分别表示原子跃迁的正常质量位移系数、特殊质量位移系数和场位移因子。

正常质量位移系数计算公式为

$$\Delta K^{\text{NMS}} = -\frac{\nu}{1823}, \quad (2)$$

式中 1823 是原子质量单位与电子质量的比值。

特殊质量位移算子 H_{SMS} 可以表示为

$$H_{\text{SMS}} = \frac{1}{2M} \sum_{i \neq j}^N \left\{ \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j - \frac{\alpha Z}{r_i} \left[\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_j + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_i) \mathbf{r}_i}{r_i^2} \cdot \mathbf{p}_j \right] \right\}, \quad (3)$$

式中 Z 为核电荷数, $\boldsymbol{\alpha}_i$ 为 4×4 狄拉克矩阵, α 为精细结构常数, \mathbf{p}_i 和 \mathbf{p}_j 分别为第 i 个和第 j 个电子的动量, \mathbf{r}_i 是第 i 个电子的位置矢量。

对于原子能级 i ($i = l, u$), 波函数为 $|\Psi_i\rangle$, 则其特殊质量位移系数为

$$K_i^{\text{SMS}} = M \langle \Psi_i | H_{\text{SMS}} | \Psi_i \rangle, \quad (4)$$

则

$$\Delta K^{\text{SMS}} = K_u^{\text{SMS}} - K_l^{\text{SMS}}. \quad (5)$$

对于给定的原子跃迁 $l \leftrightarrow u$ ($E_u > E_l$), 场位移因子 F 与原点处电子概率幅密度的变化成正比,

$$F = \frac{2\pi}{3h} Z \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \Delta |\Psi(0)|^2, \quad (6)$$

$$\Delta |\Psi(0)|^2 = \Delta \rho^e(0) = \rho_u^e(0) - \rho_l^e(0), \quad (7)$$

式中 $\rho_i^e(0)$ ($i = l, u$) 为原点处电子的荷密度。

用上述公式分别计算 NMS, SMS 和 FS 的贡献, 可以得到相应原子跃迁的同位素位移。

2.2 MCDHF 数值计算方法

在 MCDHF 计算方法中, 原子态波函数可以写成组态函数的线性叠加^[19-21]:

$$|\Psi_{PJM_J}\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} |\Phi(\gamma_{\mu} P J M_J)\rangle, \quad (8)$$

式中 J 为角动量量子数, M_J 为角动量 J 的 z 分量, P 为宇称, $\{c_{\mu}\}$ 为叠加系数, $\{\gamma_{\mu}\}$ 为标识组态函数的其他量子数。用 RCI 方法开展计算, 仅允许叠加系数变化, 通过一个 SCF 过程可以得到叠加系数。一直重复 SCF 和 RCI 耦合过程直到收敛得到原子态波函数 ((8) 式)。

我们在计算中应用双参数费米模型来描述原子核的电荷分布,因而可以用一阶微扰方法计算场位移^[22]. 双参数费米模型为

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp[(r - c)/a]}, \quad (9)$$

式中 c 为半密度半径, a 为与原子核皮厚度相关的参数, ρ_0 为归一化系数.

我们采用最新 GRASP2K 原子结构计算程序包和改进的相对论同位素位移计算程序包 RIS3^[16,19,20] 进行计算. GRASP2K 程序包可以系统地计算电子关联效应,包括价电子和内层电子之间的关联以及原子核与核外电子之间的关联等. 对于 Mg 原子同位素位移的计算,我们用受限制的双激发模式来展开组态函数,其中,最里层 $1s^2$ 两个电子不激发,从最外层 $3s^2$ 两个电子中激发一个电子,从 $2s^2 2p^6$ 八个电子中再激发一个电子. 组态函数对应的主量子数 $n = 3, 4, 5, \dots$, 轨道量子数 l 为 s, p, d, \dots . 计算中最大的主量子数 $n_{\max} = 10$, 最大的轨道量子数 l_{\max} 为 g . 通过 MCDHF 方法展开波函数并优化叠加系数,在 RCI 计算过程中考虑了 Breit 相互作用.

3 镁原子同位素位移计算结果

我们首先计算了 Mg 原子 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 两条谱线的跃迁能量,以波数 (cm^{-1}) 为单位,并与美国国家标准研究院 (The National Institute of Standards and Technology, NIST) 原子光谱数据库^[23] (atomic spectra database, ASD) 的结果进行对比,如表 1 所示. 表 1 还列出了用其他理论方法计算得到的结果^[24-26],以 NIST ASD 的数值为参考,各个理论计算结果的相对百分差 (percent of

difference) 也一并列出. 文献^[23] 使用 MCDHF 方法,与我们所用的方法基本相同,对谱线跃迁能量的计算结果也相近;文献^[24] 采用 CI+MBPT 方法,计算结果的误差范围与我们的结果在同一水平;文献^[25] 采用的是 CI 结合全阶 (all-order, AO) 方法,并用量子电动力学 (quantum electrodynamics, QED) 进行修正处理,这种方法计算原子结构能达到更高的精度. 我们的计算结果在误差范围内与 NIST ASD 的结果以及其他理论值较为符合.

Mg 原子 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 跃迁的 NMS 系数、SMS 系数和 FS 因子的计算结果如表 2 所示. 其中 NMS 系数 ΔK^{NMS} 根据 (2) 式计算,表 2 中 NMS 和 SMS 系数 ΔK 的单位为 $\text{GHz}\cdot\text{u}$, 其中 u 为原子质量单位,FS 因子 F 的单位为 $\text{MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$. 我们的 SMS 系数计算结果与 CI+MBPT 方法^[25,27] 的结果十分符合,文献^[23] 在计算 SMS 系数时有比较大的偏差,但是 FS 因子与我们的结果很相近.

用表 2 中的同位素位移参数可以计算 Mg 原子任意两个同位素 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 跃迁的同位素位移. Mg 原子的稳定同位素有三种, ^{24}Mg , ^{25}Mg 和 ^{26}Mg , 其原子质量分别为 $23.985041697(14)$, $24.985836976(50)$, $25.982592968(31)$ u ^[28], 对应的原子核方均根电荷半径分别为 $3.0570(7)$, $3.0290(7)$, $3.0340(26)$ fm ^[29]. 以 ^{24}Mg 作为参考同位素, Mg 三个稳定同位素 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 跃迁的同位素位移计算结果如表 3 所示. 表 3 中 NMS, SMS 和 FS 分别表示同位素位移的三个组成部分的贡献: 正常质量位移、特殊质量位移和场位移, MS 为 NMS 与 SMS 的和,表示质量位移, IS 为 MS 与 FS 的和,表示总的同位素位移. 表 3 中列出了其他理论计算值和实验测量值,并与我们的计算结果进行了对比.

表 1 Mg 原子 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 谱线的跃迁能量
Table 1. Transition energies for $^1S_0-^1P_1$ and $^1S_0-^3P_1$ of Mg.

	$^1S_0-^1P_1$		$^1S_0-^3P_1$	
	Energy/ cm^{-1}	Percent of difference/%	Energy/ cm^{-1}	Percent of difference/%
NIST ASD	35051		21870	
This work	35069	0.051	21788	0.370
Ref. [24]	35063	0.034	21780	0.410
Ref. [25]	35050	0.003	21794	0.350
Ref. [26]	35037	0.040	21862	0.040

表2 Mg原子 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 跃迁的NMS系数、SMS系数和FS因子
Table 2. The NMS coefficients, SMS coefficients and FS factors for the $^1S_0-^1P_1$ and $^1S_0-^3P_1$ transitions of Mg.

	$^1S_0-^1P_1$			$^1S_0-^3P_1$		
	$\Delta K^{NMS}/\text{GHz}\cdot\text{u}$	$\Delta K^{SMS}/\text{GHz}\cdot\text{u}$	$F/\text{MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$	$\Delta K^{NMS}/\text{GHz}\cdot\text{u}$	$\Delta K^{SMS}/\text{GHz}\cdot\text{u}$	$F/\text{MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$
This work	-576.8	133.9	-62.7	-359.9	-479.6	-78.0
Ref. [24]	-567	192	-58	-354	-417	-73
Ref. [25]		134			-491	
Ref. [27]	-575	130				

表3 Mg原子 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 跃迁的同位素位移计算结果, 包括NMS, SMS和FS等组成部分的独立贡献, 参考同位素为 ^{24}Mg , 同位素位移单位为MHz

Table 3. The results of Mg isotope shifts for the $^1S_0-^1P_1$ and $^1S_0-^3P_1$ transitions including the individual contributions of NMS, SMS and FS in the unit of MHz. The reference isotope is ^{24}Mg . The theoretical and experimental results available are compiled as well.

	$^1S_0-^1P_1$					$^1S_0-^3P_1$				
	NMS	SMS	MS	FS	IS	NMS	SMS	MS	FS	IS
^{25}Mg										
This work	963	-224	739	11	750	601	801	1402	13	1415
Ref. [27]			741					1397		
Ref. [30]					744(3)					
Ref. [31]										1405(1)
^{26}Mg										
This work	1850	-429	1421	9	1430	1153	1539	2692	11	2703
Ref. [24]	1814	-612	1202	8	1210	1135	1337	2472	10	2482
Ref. [25]	1848	-428	1420			1153	1573	2726		
Ref. [27]			1425					2686		
Ref. [30]					1415(5)					
Ref. [31]										2683(0)
Ref. [32]					1414(8)					
Ref. [33]					1412(21)					
Ref. [34]					1390(31)					

通过表3的对比可以发现, 我们的IS计算结果与实验测量值十分符合, 绝对误差为6—20 MHz, 相对误差为0.6%—1.3%. 与其他理论计算相比, 我们关于FS的计算结果与文献[23]一致, NMS, SMS和MS的计算结果与文献[24,26]很接近, 但是文献[24,26]没有涉及FS的计算. 文献[23]中关于SMS的计算结果存在较大的偏差, 由此导致MS和IS计算结果与实验值相差较大, 我们认为这种差异是由于外层电子(价电子)与内层电子和原子核相互作用的不同处理方式以及不同的电子激发模式造成的. 对于Mg原子其他短寿命同位素 $^{20-23}\text{Mg}$ 以及

$^{27-40}\text{Mg}$ 等, 也可以利用表2中的同位素位移参数, 结合各同位素的质量和电荷半径数据, 计算得到相应的同位素位移.

4 讨论

MCDHF是原子结构计算的常用方法, GRASP2K是基于MCDHF方法编写的在原子光谱相关计算中应用比较多的程序包之一. MCDHF方法的理论计算结果与实验值或真实值的相对误差通常在1%左右, 表1中我们计算Mg原子的跃迁

能量与 NIST ASD 的实验值相对误差在 0.4% 以内, 符合预期结果. 我们在计算中采用的是受限制的双电子激发模式, 一定程度上加快了原子态波函数的收敛, 提高了 MCDHF 方法的计算效率, 同时也能保证计算精度.

我们在计算 NMS 系数时用了近似计算公式 ((2) 式), 这样会引入一定的误差, 从表 2 的计算结果对比来看, 与 MCDHF 计算方法本身产生的计算结果不确定度相比, 采用 (2) 式引入的误差可以忽略不计. 另外, 在计算 IS 的时候, 我们用原子质量近似代替原子核质量, 这样的近似也会引入新的误差. 原子核的质量可以用原子质量扣除电子的质量再对电子与核的结合能进行修正得到 [24]:

$$M_{\text{nuclear}} = M_{\text{atom}} - Zm_e + B_{\text{el}}, \quad (10)$$

式中 M_{nuclear} 为原子核质量, M_{atom} 为原子质量, m_e 为电子质量, B_{el} 为结合能. 关于原子核质量的计算和修正可以参考文献 [35—38] 中的详细论述.

修正后的原子核质量与原子质量相差 0.025% 左右, 由此导致的 IS 计算结果的相对误差会增加大约 0.05%, 绝对误差会增加 0.3—1.5 MHz. 由于原子核质量修正而增加的误差在本文的计算中没有考虑在内, 主要原因在于用 MCDHF 方法计算 Mg 原子同位素位移的误差在几兆赫兹到几十兆赫兹范围内, 因而忽略了核质量修正带来的影响.

考虑到 MCDHF 方法的计算误差, 为了进一步提高同位素位移的理论计算精度, 还需要在计算中引入 QED 修正, 同时对原子核质量进行修正. 在 CI+MBPT 方法、CI+AO 方法以及 MCDHF 方法中引入 QED 修正处理后 [26,39—42], Li 原子、Be⁺ 离子和 Be 原子等少电子体系 [43,44] 的同位素位移计算精度可以提高一到两个数量级, 可以预计对 Mg 原子这样的多电子体系, 引入 QED 修正也会对同位素位移计算精度的提高有很大帮助. 我们将在后续的研究中考虑用 QED 修正方法来进一步提高 Mg 原子同位素位移的计算精度.

5 结 论

多电子体系的原子同位素位移理论计算是当前原子分子物理理论的难点之一, 我们用 MCDHF 方法计算了 Mg 原子 $^1S_0-^1P_1$ 和 $^1S_0-^3P_1$ 两条跃迁谱线的同位素位移参数以及 Mg 原子三个稳定同

位素 ^{24}Mg , ^{25}Mg 和 ^{26}Mg 之间的同位素位移, 在计算中采用受限制的双电子激发模式, 并用 SCF 和 RCI 方法进行优化, 计算结果与实验测量值十分符合. 我们的计算结果能为 Mg 原子同位素位移实验和理论的进一步研究提供参考, 用表 2 中 IS 参数计算结果可以快速计算出任意两个 Mg 原子同位素之间的 IS, 因此可以用于 Mg 原子短寿命同位素的光谱测量实验参考, 还可以利用 Mg 原子同位素开展反转岛附近奇异原子核特性研究等. 我们计算 Mg 原子 IS 的方法也可以用于其他类 Mg 多电子体系的原子或离子 (比如 Al⁺ 短寿命同位素位移的计算), 开展相应的光谱结构、能级跃迁和同位素位移的理论研究.

参考文献

- [1] Anders M, Trezzi D, Menegazzo R, Aliotta M, Bellini A, Bemmerer D, Broggini C, Caciolli A, Corvisiero P, Costantini H, Davinson T, Elekes Z, Erhard M, Formicola A, Fülöp Z, Gervino G, Guglielmetti A, Gustavino C, Gyürky G, Junker M, Lemut A, Marta M, Mazzocchi C, Prati P, Rossi-Alvarez C, Scott DA, Somorjai E, Straniero O, Szücs T 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 042501
- [2] Nörtershäuser W, Neff T, Sanchez R, Sick I 2011 *Phys. Rev. C* **84** 024307
- [3] Kozhedub Y S, Andreev O V, Shabaev V M, Tupitsyn I I, Brandau C, Kozhuharov C, Plunien G, Stöhlker T 2008 *Phys. Rev. A* **77** 032501
- [4] Hu M H, Wang Z W, Zeng F W, Wang T, Wang J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 083101
- [5] Pachucki K, Yerokhin V A 2015 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **44** 83
- [6] Xiong Z Y, Yao Z W, Wang L, Li R B, Wang J, Zhan M S 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 113201 (in Chinese) [熊宗元, 姚战伟, 王玲, 李润兵, 王谨, 詹明生 2011 物理学报 **60** 113201]
- [7] Borremans D, Balabanski D L, Blaum K, Geithner W, Gheysen S, Himpe P, Kowalska M, Lassen J, Lievens P, Mallion S, Neugart R, Neyens G, Vermeulen N, Yordanov D 2005 *Phys. Rev. C* **72** 044309
- [8] Drake G W F, Nörtershäuser W, Yan Z C 2005 *Can. J. Phys.* **83** 311
- [9] Nörtershäuser W, Tiedemann D, Žáková M, Andjelkovic Z, Blaum K, Bissell M L, Cazan R, Drake G W F, Geppert C, Kowalska M, Krämer J, Krieger A, Neugart R, Sánchez R, Schmidt-Kaler F, Yan Z C, Yordanov D T, Zimmermann C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 062503
- [10] Takamine A, Wada M, Okada K, Sonoda T, Schury P, Nakamura T, Kanai Y, Kubo T, Katayama I, Ohtani S, Wollnik H, Schuessler H A 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 162502

- [11] Paez E, Arnold K J, Hajiyev E, Porsev S G, Dzuba V A, Safronova U I, Safronova M S, Barrett M D 2016 *Phys. Rev. A* **93** 042112
- [12] Safronova M S, Safronova U I, Clark C W 2015 *Phys. Rev. A* **91** 022504
- [13] Sahoo B K 2010 *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **43** 231001
- [14] Berengut J C, Dzuba V A, Flambaum V V, Kozlov M G 2004 *Phys. Rev. A* **69** 044102
- [15] Steenstrup M P, Bruschi A, Jensen B B, Hald J, Thomsen J W 2010 *Phys. Rev. A* **82** 054501
- [16] Nazé C, Gaidamauskas E, Gaigalas G, Godefroid M, Jönsson P 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2187
- [17] Tupitsyn I I, Shabaev V M, López-Urrutia J R C, Draganic I, Orts R S, Ullrich J 2003 *Phys. Rev. A* **68** 022511
- [18] Yu G H, Geng Y G, Zhou C, Duan C B, Li L, Chai R P, Yang Y M 2015 *Chin. Phys. Lett.* **32** 073102
- [19] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [20] Jönsson P, Gaigalas G, Bierón J, Fischer C F, Grant I 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2197
- [21] Radžiūtė L, Gaidamauskas E, Gaigalas G, Li J G, Dong C Z, Jönsson P 2015 *Chin. Phys. B* **24** 043103
- [22] Parpia F A, Mohanty A K 1992 *Phys. Rev. A* **46** 3735
- [23] Kramida A, Ralchenko Y U, Reader J, NIST ASD Team 2015 *NIST Atomic Spectra Database* (Version 5.3) <http://physics.nist.gov/asd> [2016-07-02]
- [24] Filippin L, Godefroid M, Ekman J, Jönsson P 2016 *Phys. Rev. A* **93** 062512
- [25] Berengut J C, Flambaum V V, Kozlov M G 2005 *Phys. Rev. A* **72** 044501
- [26] Kononova E A, Kozlov M G 2015 *Phys. Rev. A* **92** 042508
- [27] Korol V A, Kozlov M G 2007 *Phys. Rev. A* **76** 022103
- [28] Coursey J S, Schwab D J, Tsai J J, Dragoset R A 2015 *Atomic Weights and Isotopic Compositions* (Version 4.1) <http://physics.nist.gov/Comp> [2016-05-27]
- [29] Yordanov D T, Bissell M L, Blaum K, de Rydt M, Gempert C, Kowalska M, Krämer J, Kreim K, Krieger A, Lievens P, Neff T, Neugart R, Neyens G, Nörtershäuser W, Sánchez R, Vingerhoets P 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 042504
- [30] Beverini N, Maccioni E, Pereira D, Strumia F, Vissani G, Wang Y Z 1990 *Opt. Commun.* **77** 299
- [31] Sterr U, Sengstock K, Müller J H, Ertmer W 1993 *Appl. Phys. B Photophys. Laser Chem.* **56** 62
- [32] Salumbides E J, Hannemann S, Eikema K S E, Ubachs W 2006 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **373** 41
- [33] Hallstadius L 1979 *Z. Phys. A* **291** 203
- [34] Boiteux S L, Klein A, Leite J R R, Ducloy M 1988 *J. Phys. France* **49** 885
- [35] Huang K N, Aoyagi M, Chen M, Crasemann B 1976 *At. Data Nucl. Data Tables* **18** 243
- [36] Lunney D, Pearson J M, Thibault C 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 1021
- [37] Liang Z Y, Liu J H, Liu M, Wang N 2011 *Nucl. Phys. Rev.* **28** 257 (in Chinese) [梁祚盈, 刘俊华, 刘敏, 王宁 2011 原子核物理评论 **28** 257]
- [38] Wang N, Liang Z Y, Liu M, Wu X Z 2010 *Phys. Rev. C* **82** 044304
- [39] Zhang P P, Zhong Z X, Yan Z C, Shi T Y 2015 *Chin. Phys. B* **24** 033101
- [40] Yan Z C, Drake G W F 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 113004
- [41] Mohr P J, Plunien G, Soff G 1998 *Physics Reports* **293** 227
- [42] Volotka A V, Glazov D A, Shabaev V M, Tupitsyn I I, Plunien G 2015 *Phys. Rev. Lett.* **112** 253004
- [43] Yan Z C, Drake G W F 2002 *Phys. Rev. A* **66** 042504
- [44] Yan Z C, Nörtershäuser W, Drake G W F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 243002

Theoretical calculations on isotope shifts of Mg I by using relativistic multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method*

Yu Geng-Hua^{1)†} Liu Hong¹⁾ Zhao Peng-Yi²⁾ Xu Bing-Ming³⁾ Gao Dang-Li⁴⁾
Zhu Xiao-Ling¹⁾ Yang Wei¹⁾

1) (School of Information Science and Engineering, Chengdu University, Chengdu 610106, China)

2) (College of Physics and Electronic Science, Hubei Normal University, Huangshi 435002, China)

3) (School of Information Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266100, China)

4) (School of Science, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

(Received 12 January 2017; revised manuscript received 21 March 2017)

Abstract

The isotope shift parameters for the atomic transitions $^1S_0-^1P_1$ and $^1S_0-^3P_1$ of Mg are calculated by the relativistic multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) method, including the normal mass shift (NMS) coefficients, the specific mass shift (SMS) coefficients and the field shift (FS) factors. The detailed calculations of the isotope shifts for the three stable isotopes ^{24}Mg , ^{25}Mg and ^{26}Mg are also carried out, in which the GRASP2K package is used together with another modified relativistic isotope shift computation code package RIS3. The two-parameter Fermi model is used here to describe the nuclear charge distribution in order to calculate the field shift by the first-order perturbation. A restricted double excitation mode is used in our calculations, one electron is excited from the two electrons in the 3s shell ($3s^2$), another electron is excited from the eight electrons in the 2s or 2p shells ($2s^22p^6$), and the two electrons in the 1s shell ($1s^2$) are not excited. The active configurations are expanded from the occupied orbitals to some active sets layer by layer, and each correlation layer is numbered by the principal quantum numbers n ($n = 3, 4, 5, \dots$) and contains the corresponding orbitals s, p, d, \dots . The active configurations with the mixing coefficients in the added layer can be optimized by the MCDHF calculations. In this work, the atomic state functions are optimized simultaneously by the self-consistent field method and the relativistic configuration interaction approach in which the Breit interaction is taken into account perturbatively as well. The maximum principal quantum number n equals 10 and the largest orbital quantum number l_{\max} is g. In our calculations, the NMS coefficients are -576.8 and -359.9 GHz-u, the SMS coefficients are 133.9 and -479.6 GHz-u, and the FS factors are -62.7 and -78.0 MHz-fm $^{-2}$ for the $^1S_0-^1P_1$ and $^1S_0-^3P_1$ transitions of Mg, respectively. The difference between our isotope shift calculations and the previous experimental measurements is in a range from 6 MHz to 20 MHz with the relative error range from 0.6% to 1.3%, which shows that our results are in good agreement with experimental values. Our calculations are also coincident with other theoretical results. The isotope shift parameters provided here can be applied to the quick calculations of isotope shifts for the short-lived Mg isotopes, including $^{20-23}\text{Mg}$ and $^{27-40}\text{Mg}$, and can be referred to for the corresponding isotope shift experiments. The methods used here can be applied to calculating the isotope shifts and the atomic spectroscopic structures for other Mg-like ions with twelve extranuclear electrons.

Keywords: isotope shift, multi-configuration interaction, self-consistent field, magnesium atom

PACS: 31.30.Gs, 31.15.am, 21.10.Gv, 32.10.Bi

DOI: 10.7498/aps.66.113101

* Project supported by the National Natural Science Foundations of China (Grant Nos. 11304093, 11604253), the Plan Project of Youth Science and Technology New Star of Shaanxi Province (Grant No. 2015KJXX-33), and the Fund of the Scientific Research Foundation of Sichuan Provincial Department of Education (Grant No. 14ZB0375).

† Corresponding author. E-mail: genghuayu@aliyun.com