

原子实极化效应对 ScII 离子 $3d^2$ 三重态 超精细相互作用的影响

刁 金 华 吴 礼 金

中国科学院武汉物理研究所波谱与原子分子物理开放研究实验室, 武汉, 430071

1991 年 3 月 13 日收到

本文采用 Rayleigh-Schrödinger 微扰方法计算钪离子 ScII $3d^2$ 的三重态 3P_2 和 3P_1 的超精细相互作用常数, 并与实验作比较. 计算结果表明, 原子实的极化(特别是自旋极化)效应对磁偶极常数有着决定性的影响.

PACC: 3130G, 3510F

一、引 言

原子的超精细相互作用一直是人们所关心的研究领域. 这不仅是因为通过计算原子的超精细相互作用有助于人们深入了解原子的内部结构, 而且, 由于原子超精细相互作用的计算需要精确的原子波函数, 从而也是对理论方法的一个很好的检验. 国外有关原子超精细相互作用的实验和理论研究都很多.

进行精确的原子结构计算目前主要有两种方法, 即变分方法和微扰方法. 变分法用于处理组态相互作用是很有效的. 但目前的变分计算大都采用自旋无关的径向函数, 这样, 这种方法处理原子实的极化(特别是自旋极化)效应就很困难. 采用微扰方法可以很有效地解决这一问题. 原子实的极化效应对原子的超精细相互作用有着相当大的影响, 所以微扰方法是作超精细相互作用计算的一个较为有效的方法.

Kelly 首先用多体微扰方法计算了 O^{17} 的超精细相互作用^[1,2], 并且得到非常好的结果. Chang 等人对碱金属原子基态和低激发态的超精细相互作用作了计算^[3-6]. Lindgren 等人采用求解耦合微分方程组的方法对碱金属原子的超精细相互作用进行了大量的讨论^[7-9]. 但是, 到目前为止, 有关过渡元素的超精细相互作用的研究还很少^[10,11]. 这是因为, 过渡元素如 $3d$ 壳层, $4d$ 壳层等, 这些原子的 d 电子(价电子)和 $4s$ 或 $5s$ 电子的轨道能量是近简并的, 这将导致微扰收敛困难. 我们用多体微扰方法计算了钪原子 Sc^{4s} 基态 ($3d^1$) 2D 的超精细相互作用^[12], 在构造完备基矢时, 选取合适的势函数, 消除 $3d$ 轨道和 $4s$ 轨道能量的近简并, 从而较好地解决收敛性问题.

钪离子 ScII $3d^2$ 态的特性与 Sc 原子 $3d^1$ 态有所不同. 由于外层有两个价电子, 对自旋平行的三重态, 原子实的极化效应要比单重态大得多, 比一个价电子的 Sc 原子 $3d^1$ 态

也要大得多。由于原子实没有 $4s$ 轨道, 所以原子实极化的收敛性会很好。但 $3d$ 轨道与虚轨道 $4s$ 的能量仍是近简并的, 所以, 部分电子关联效应的计算仍有可能出现收敛慢的现象, 这个问题将在以后讨论。

Young 等人^[13]测量了钪离子 ScII $3d^2, 3d4p$ 态的超精细相互作用常数, 并作了多组态 Dirac-Fock 计算。对单重态, 他们的理论计算结果与实验是符合的, 但对三重态, 两者相差甚远。其主要原因是, MCDF 方法很难处理原子实的极化效应。对 ScII $3d^2$ 的三重态 3P 的超精细相互作用作多体微扰计算, 得到与实验符合较好的结果。

二、理论方法

超精细相互作用的 Hamiltonian 为^[14]

$$h = \sum_k T^k \cdot M^k, \quad (1)$$

其中 T^k 为电子的多极相互作用算符, M^k 为原子核的多极相互作用算符。由于 T^k 是单体算符, 可写为如下形式:

$$T^k = \sum_{i=1}^N t_i^k, \quad (2)$$

其中 N 为价电子数目, t_i^k 仅对第 i 个价电子发生作用。电子的磁偶极算符 t^1 和电四极算符 t^2 定义为^[14]

$$t^1 = \alpha^2 \left[l r^{-3} - \sqrt{10} (s C^2)^1 r^{-3} + \frac{2}{3} r^{-2} \delta(r) s \right], \quad (3)$$

$$t^2 = -C^2 r^{-3}. \quad (4)$$

对一个开壳层的情况, 习惯上把 T 用径向参数来表示,

$$t^1 = \alpha^2 [a_l l - \sqrt{10} a_{sd} (s C^2)^1 + a_c s], \quad (5)$$

$$t^2 = -a_q C^2. \quad (6)$$

在零级近似下, 有

$$\begin{aligned} a_l &= a_{sd} = a_q = \langle r^{-3} \rangle_{nl} \quad l \neq 0; \\ a_c &= \frac{2}{3} \left\langle \frac{\delta(r)}{r^2} \right\rangle_{nl} \quad l = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

磁偶极相互作用常数 A 和电四极相互作用常数 B 定义为^[14]

$$A = \frac{\mu_I}{IJ} \frac{\langle \gamma_I J J | T_0^1 | \gamma_J J J \rangle}{\langle \gamma_I J J | \gamma_J J J \rangle}, \quad (8)$$

$$B = 2Q \frac{\langle \gamma_I J J | T_0^2 | \gamma_J J J \rangle}{\langle \gamma_I J J | \gamma_J J J \rangle}. \quad (9)$$

采用 Rayleigh-Schrödinger 微扰理论和 Goldstone 图示方法来处理原子的超精细相互作用(文献[15]对该理论作了专门论述)。

在非相对论近似下, 体系的 Hamiltonian 为

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{z}{r_i} \right] + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + h. \quad (10)$$

在中心场近似下,将 Hamiltonian 分解成两部分

$$H = H_0 + V, \quad (11)$$

其中

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

$$V = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N u(r_i) + h. \quad (13)$$

求解 H_0 的本征方程

$$H_0 \Psi_n = E_n \Psi_n. \quad (14)$$

H_0 的全部本征函数 $\{\Psi_n\}$ 构成一个正交完备集。将这组完备基矢分解成两个子集的直和,由它们张开的空间分别称为模型空间和正交空间,它们的投影算符 P, Q 满足

$$P + Q = 1, P^2 = P, Q^2 = Q, \quad (15)$$

其中模型空间由所考虑的实际组态所组成。在本文中,模型空间仅由 $(3d^2)^3P$ 态组成,空间的维数等于 1。模型空间中的准确波函数 Ψ 可通过算符 Q (称为波算符)由零级波函数 Ψ_0 求得

$$\Psi = Q\Psi_0, \quad (16)$$

而波算符则如下的 Bloch 方程给出:

$$[Q, H_0]P = VQP - QPVQP. \quad (17)$$

能量 E 由有效 Hamiltonian 及零级波函数 Ψ_0 求得

$$H_{\text{eff}}\Psi_0 = E\Psi_0, \quad (18)$$

其中

$$H_{\text{eff}} = PHQP. \quad (19)$$

利用 Bloch 方程,逐级展开 Q , 即可求得波函数和能量的逐级近似值,而利用 Goldstone 图解方法,作这种展开是非常方便的。

求解方程(14)时,需要首先确定中心场势 $u(r_i)$ 的形式,取 $u(r_i)$ 为 Sc II 剥去两个 3d 电子后的原子实 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ 的 Hartree-Fock (HF) 势。用这种势求得的轨道不同于 Sc II 的 HF 轨道,但选用这种势函数可以消去有效势的贡献(参阅文献[15],第 13 章),从而将计算简化。

选定势函数以后,就可用数值方法求解方程(14),对 core 态(原子实轨道),这是一个自洽场问题,对束缚虚态,只是一个本征值问题。对连续态,能量预先给定,但波函数的归一不同于束缚态,在原子外区(一般 50au 以外)电子只受到库仑势的作用,所以,连续态波函数的渐近形式应为库仑波,因而,应将波函数在大 r 处 ($r > 50\text{au}$) 与库仑波函数匹配,即将波函数归一到如下形式^[3,16]:

$$P(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin \left(kr + \frac{z_{\text{eff}}}{k} \ln 2kr - \frac{1}{2} l\pi + \delta \right), \quad (20)$$

其中 $k = \sqrt{2E}$, E 为连续态能量 (au), z_{eff} 为有效电荷数. 由于采用原子实的 HF 势, 所以, 对原子实轨道, $z_{\text{eff}} = z - N + 1$, 而对于虚轨道(包括连续轨道), $z_{\text{eff}} = z - N$. 其中 N 为原子实的总电荷数.

δ 为相移, 可通过如下方法确定: 设 r_n 为波函数 $P(r)$ 的第 n 个结点, $P(r_n) = 0$, 于是有

$$\delta = \left(n + \frac{1}{2} l \right) \pi - k r_n - \frac{z_{\text{eff}}}{k} \ln 2k r_n. \quad (21)$$

文献[17]中有对连续态归一的详尽讨论, 并且给出包括 $k = 0$ 在内的连续态波函数的归一方法,

$$P(r) = C \frac{\tilde{P}(r)}{B}, \quad (22)$$

$$C = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(k^2 + \frac{2z_{\text{eff}}}{r} \right)^{-1/4} \left\{ 1 + \frac{l(l+1)}{4 \left(k^2 + \frac{2z_{\text{eff}}}{r} \right) r^2} \right\}. \quad (23)$$

其中 $\tilde{P}(r)$ 为未归一的波函数, B 为 $\tilde{P}(r)$ 在大 r 处的振幅, C 为归一系数. 显然, 对 $k \neq 0$, $C \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \sqrt{2/\pi k}$, 与方程(20)的结果一致.

由于连续态波函数随 k 的增大振荡加快, 为保证计算精度, 一般在两个结点之间至少有 5, 6 个计算点. 这样, 两计算点之间的间距 $H = r_m - r_{m-1}$ 应满足

$$Hk \leq \pi/5 \approx 0.6. \quad (24)$$

如果 k 最大取到 30 (即最高能量为 450 au) 则 H 应不大于 0.02.

对所有的轨道都采用同一坐标网点, 如果以最大 $H = 0.02$ 计算, 对 $k = 30$, 两结点之间至少有 5 个计算点, 而对 $k = 20, 10, 5, \dots$, 两结点之间至少有 8, 16, 31, $\dots$ 个计算点. 采用的坐标网点为如下形式:

$$\rho = \alpha r + \beta \ln z r. \quad (25)$$

这里 ρ 取等步长, 步长大小由最大 r_{max} 值及两计算点之间 r 的最大间距 $H = r_{\text{max}} - r_{\text{max}-1}$ 来决定.

在超精细相互作用计算中, 包括三阶效应以下的所有 Goldstone 图的矩阵元都包含有原子实轨道或价电子轨道. 所有阶极化图都含有原子实轨道, 这样 r_{max} 可取为价电子轨道波函数的最大半径, 对 3d 轨道, 取 $r_{\text{max}} = 40$ 就足够.

对束缚虚轨道, 波函数最大半径大于 r_{max} , 故不能采用这种网点, 只能采用另外的网点 (重新选择 α, β 值) 求得轨道波函数后按连续态的网点作插值. 由于束缚态波函数变化平缓, 插值不会引入大的误差. 对连续态, 在 r_{max} 以外, 采用库仑势, 并以 H 作为步长继续计算至振幅稳定为止, 求出最大振幅, 以确定归一系数.

根据所采用的网点形式可知, 在近核区, 两格点的间距远远小于 H . 因而, 波函数两结点之间的格点数也就远大于上面列出的数字. 由于原子实轨道波函数在近核区变化大而在大 r 区域变化很平缓, 而连续态波函数在大 r 区是等振幅等频率振荡的. 因而两者的积分主要是小 r 范围的贡献, 大 r 区域的贡献基本抵消, 且 k 越大, 抵消也越大. 所以, 从直观上说, 本文所采用的积分网点是合理的. 足以保证计算精度, 试算表明, 进一步减

小步长,矩阵元的数值相对变化小于 10^{-3} ,但计算量却要增加很多倍。

计算完备基矢的程序是以 Fischer 的 MCHF 程序包^[18,19]为基础修改而成的,该程序包采用的对数坐标网点 $\rho = \ln zr$ 只能计算束缚轨道,本文将网点改成 $\rho = \alpha r + \beta \ln zr$ 形式,以计算连续态波函数。

在以下的多体微扰计算中,对各轨道的求和应理解为对束缚轨道的求和以及对连续轨道的积分,即对连续态,应作如下变换:

$$\sum_n \rightarrow \int_0^{E_{\max}} dE = \int_0^{k_{\max}} k dk. \quad (26)$$

将积分区间 $[0, k_{\max}]$ 分成多个子区间,子区间的间距不等,随 k 的增大而增大。对每个子区间,用 5 点高斯公式将积分转化成求和, $k_{\max}$ 的值可在计算过程中根据各个连续态的贡献进行判断,一般取 $k_{\max} = 30$ 已经很精确。

根据 Rayleigh-Schrödinger 微扰理论,超精细相互作用常数 A, B 可以用有效算符表示为

$$A = \frac{\mu_I}{IJ} \langle \gamma_I JJ | T_{\text{eff}}^I | \gamma_I JJ \rangle_0, \quad (27)$$

$$B = 2Q_0 \langle \gamma_I JJ | T_{\text{eff}}^2 | \gamma_I JJ \rangle_0, \quad (28)$$

其中 $|\gamma_I JJ\rangle_0$ 代表零级波函数, T_{eff}^I 为有效算符,由方程(19)求得。

采用 Goldstone 图示方法,可把一阶超精细相互作用表示为

$$\begin{array}{c} m \\ \updownarrow \\ n \end{array} \quad \langle h = a_m^+ a_n \langle m | h | n \rangle. \quad (29)$$

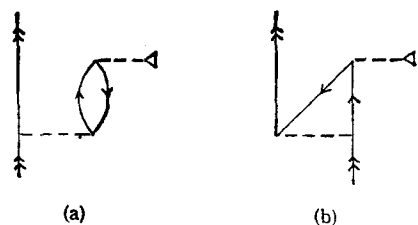


图 1 二阶单体超精细相互作用图,反映了原子实的一阶极化 每个图都有相应的反转图,其超精细相互作用线位于库仑作用线的下方

二阶超精细相互作用如图 1 所示,它们反映了原子实极化。

三阶图的数量很多,它们包含二阶原子实极化效应和一阶电子关联效应。由于原子实极化效应对超精细相互作用的贡献很大,所以极化效应计算至二阶(即三阶图)有时是不够的,但如果直接计算三阶或更高阶的贡献,其计算量非常大。目前采用较多的计入高阶极化效应的方法是求解一组耦合微分方程组。与此类似,采用原子实极化的一个递推关系,通过逐级迭代,从而求得全部的极化效应^[12]。

第 N 阶波算符可用第 $N-1$ 阶波算符表示为

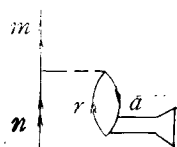
$$\begin{aligned} a_r^+ a_s h^N(a, r) &= a \begin{array}{c} \nearrow r \\ \text{---} \\ \searrow \end{array} (N) \\ &= a \begin{array}{c} \nearrow r \\ \text{---} \\ \searrow \\ \text{---} \\ \nearrow b \end{array} (N-1) + a \begin{array}{c} \nearrow r \\ \text{---} \\ \searrow \\ \text{---} \\ \searrow b \end{array} (N-1) \end{aligned} \quad (30)$$

从而有

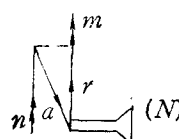
$$\begin{aligned} h^{(N)}(a, r) &= \frac{1}{\varepsilon_a - \varepsilon_r} \sum_{b_i} [\langle rb | r_{12}^{-1} | as \rangle - \langle rb | r_{12}^{-1} | sa \rangle] \cdot h^{(N-1)}(b, s) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_a - \varepsilon_r} \sum_{b_i} \langle rb | \mathcal{R} | as \rangle h^{(N-1)}(b, s), \end{aligned} \quad (31)$$

$$h^{(1)}(a, r) = \frac{1}{\varepsilon_a - \varepsilon_r} \langle r | h | a \rangle. \quad (32)$$

而第 N 阶原子实极化图可表示为



$$(N) = a_m^+ a_n \sum_r \langle ma | r_{12}^{-1} | nr \rangle h^{(N-1)}(a, r), \quad (33)$$



$$(N) = -a_m^+ a_n \sum_r \langle ma | r_{12}^{-1} | rn \rangle h^{(N-1)}(a, r) \quad (34)$$

在方程(31)中, 矩阵元 $\langle rb | \mathcal{R} | as \rangle$ 与阶数无关, 可以一次性计算并保留在计算机内存中或磁盘文件中, 这样, 就可以在基本不增加计算量的情况下求出全部的原子实极化效应。

三、计算结果与讨论

以钪离子原子实的 HF 势作为中心场势函数, 构造出一组包括束缚态和连续态的正交完备基矢。表 1 中列出原子实轨道及几个最低虚轨道的能量。很显然, 对 3p 和 3d 轨道其能量相距很远, 但对 3d 和 4s 轨道其能量是很接近的。由于原子实极化图的能量分母都含有原子实轨道。它与虚轨道的能量之差仍较大, 因而会具有较好的收敛性。本文计算结果也将证实这一点。但对于一部分关联图, 其能量分母是价电子 3d 轨道与虚

表 1 原子实及几个束缚虚轨道的能级 (au)

1s	-167.092155
2s	-20.296929
2p	-16.884077
3s	-3.714019
3p	-2.704585
3d	-0.853116
4s	-0.765055
4p	-0.607320
4d	-0.386350
4f	-0.282627
5s	-0.377666

轨道(如 4s 轨道)的能量之差。这个差值可能很小,因而这些图的收敛性要差一些。

以中心场近似下的波函数作为零级波函数,求得一阶径向参数为 $\langle r^{-3} \rangle_{3d} = 1.439133$, 由此求得的超精细相互作用常数已列于表 2 中,对电四极相互作用常数 B , 一阶理论结果与实验在数量级上是符合的,但磁偶极相互作用常数与实验相差甚远。对 3P_1 态,轨道项与自旋轨道项相互抵消,给出结果为 0,而实验为 -107.3。对 3P_2 态,理论值为 111.9,而实验值却为 -27.9。这些结果说明,原子实的自旋极化(即 contact 项 a_c) 将会有非常大的影响。

根据超精细相互作用的定义, contact 相互作用 a_c 定义为电子在原子核的密度。在中心场近似下,波函数在 $r \rightarrow 0$ 时的渐近形式为

$$P(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{l+1} \left(1 - \frac{z}{l+1} r + O(r^2) \right), \quad (35)$$

而电子在空间分布的概率密度为

$$R(r)^2 = \left(\frac{P(r)}{r} \right)^2. \quad (36)$$

显然,对 $l \neq 0$ 的轨道, $a_c = R(0)^2 = 0$, 因而没有 contact 相互作用。

如果考虑到电子之间的关联效应,情况就会不同。

由于与价电子自旋平行的内层 s 电子将和价电子发生相互吸引,从而使得同一 s 壳层的两个电子在原子核的密度不同,这等效于价电子轨道产生 contact 相互作用。对 Sc II 离子的 $3d^2$ 组态, 3d 轨道上有两个电子,对于单重态,两个 3d 电子自旋反平行,因而引起的 contact 作用相互抵消。但对三重态,两电子自旋平行,contact 作用会有很大的贡献。

表 2 超精细相互作用常数计算值与实验及理论的比较* (单位: MHz)

	磁偶极常数 A		电四极常数 B	
	3P_1	3P_2	3P_1	3P_2
一阶	0	111.733	-14.872	29.745
包括一阶极化	-126.397	-35.543	-14.444	28.890
包括全部极化	-132.779	-45.754	-14.053	28.105
包括低阶关联	-116.667	-12.442	-15.337	30.675
理论值 ^[13]	-1.8	85.9	-11.6	23.2
实验值	-107.3(6) ^[20]	-27.9(4) ^[13] -27.7(8) ^[20]	-9(3) ^[20]	19(6) ^[13] 3(8) ^[20]

* 为了与文献[13]的理论结果比较,磁矩和电四极矩的值取为 $\mu_I = 4.74875 \text{ nm}$, $Q = -0.22 \text{ b}$ 。

表 3 列出各阶原子实极化效应的计算结果。正如所预料,原子实的自旋极化效应 a_c 比轨道极化效应大了近一个数量级。其主要贡献来自 3s 壳层,其次是 2s 壳层,1s 壳层的影响很小。这是因为,2s 和 3s 壳层离价电子 3d 的距离近,因而极化程度高。磁偶极相互作用常数 a_l , a_{sd} 和 a_c 都由交换图(图 1(b)) 贡献,而电四极相互作用常数 a_q 还包含直接图(图 1(a)) 的贡献,两者符号相反,总的结果抵消很多。

考虑了原子实极化效应后的超精细相互作用常数 A 和 B 已在表 2 中列出,对常数 B , 极化效应的影响并不大,但对磁偶极常数 A 其结果却有实质性的改变。这说明,对钪离

表 3 原子实极化效应对超精细相互作用的影响

	a_l	a_{sd}	a_c	a_q
第一阶	-0.1540488	-0.2689497	-2.0684680	-0.0413933
第二阶	+0.0250054	-0.0403441	-0.1522417	-0.0249459
第三阶	-0.0044674	-0.0067100	-0.149720	-0.0100875
第四阶	+0.0008463	-0.0014197	-0.0017424	-0.0022679
第五阶	-0.0001645	-0.0002727	-0.0002210	-0.0005077
第六阶	+0.0000323	-0.0000527	-0.0000193	-0.0001078
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
总 和	-0.1328020	-0.3182616	-2.2376791	-0.0793383

子 ScII($3d^2$) 3P 态,磁偶极相互作用常数在很大程度上是由原子实自旋极化所决定的。

为了计入关联效应的影响,计算了全部的低阶关联效应,这种关联图一共有 66 个,图 2 列出几个典型的贡献较大的关联图,如前面所讨论的,由于 $3d$ 轨道和 $4s$ 轨道能量很接近,因而图 2(a) 和图 2(b) 的收敛性将会比极化图的收敛性差,但其它的关联图仍将具有与极化图相同的收敛性,总之,关联图的结果是基本可靠的。表 4 列出低阶关联效应的计算结果。

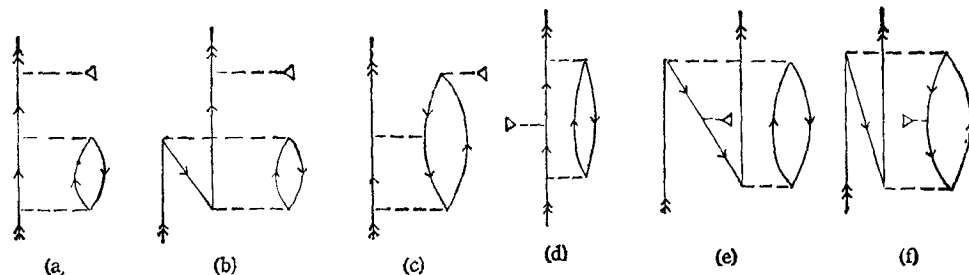


图 2 几个典型的三阶超精细相互作用图 它们反映了原子的电子关联效应;
每个图都有相应的库仑交换图,(a)~(c) 还有相应的反转图

表 4 三阶关联图对超精细相互作用的贡献

图	a_l	a_{sd}	a_c	a_q
3(a)	0.0946350	0.0946350	0	0.0946350
3(b)	-0.0331599	-0.0331599	0	-0.0331599
3(c)	0.0294652	0.0639178	0.1709402	-0.064096
3(d)	0.0373570	0.0348278	0.0154989	0.0348278
3(e)	0.0481076	0.0633761	0.0554354	0.0633761
3(f)	-0.0308977	-0.0163522	-0.0379042	0.0072276
其它	0.0078480	0.0142893	0.1132156	0.0214978
总和	0.1533552	0.2215339	0.3171859	0.1243084

注: 上表列举各图均包含相应的库仑交换图和反转图

从表 2 中看出,关联效应对理论结果并没有太大的改善。特别是对电四极常数 B , 其原因是,高阶的关联效应还有一定的影响。不过,即使如此,本文结果也已经足以说明,原子实极化效应对 Sc II $3d^2$ 3P 态的超精细相互作用所具有的实质性影响。

本工作得到本所波谱与原子分子物理开放研究实验室资助。

- [1] H. P. Kelly, *Phys. Rev.*, **173** (1968), 142.
- [2] H. P. Kelly, *Phys. Rev.*, **180** (1969), 55.
- [3] E. S. Chang, R. T. Pu and T. D. Das, *Phys. Rev.*, **174**(1968), 1.
- [4] J. D. Lyons, R. T. Pu and T. D. Das, *Phys. Rev.*, **178** (1969), 103.
- [5] T. Lee, N. C. Dutta and T. P. Das, *Phys. Rev.*, **A1**(1970), 995.
- [6] Mina Vajed-Samii, S. N. Ray and T. P. Das, *Phys. Rev.*, **A20** (1979), 1787.
- [7] S. Garpman, I. Lindgren, J. Lindgren and J. Morrison, *Phys. Rev.*, **A11** (1975), 758.
- [8] H. Lundberg, A-M. Martensson and S. Svanberg, *J. Phys. B*, **10** (1977), 1971.
- [9] I. Lindgren, *Phys. Rev.*, **A31**(1985), 1273.
- [10] H. Kelly and A. Ron, *Phys. Rev.*, **A2** (1970), 1261.
- [11] J. L. Heully, *Z. Phys.*, **A319** (1984), 253.
- [12] Jinhua Xi, Lijin Wu, Baiwen Li and Jiangyong Wang, *Phys. Lett.*, **152A** (1991), 401.
- [13] L. Young, W. J. Childs, T. Dinneen, C. Kurtz, H. G. Berry, L. Engström and K. T. Cheng, *Phys. Rev.*, **A37** (1988), 4213.
- [14] I. Lindgren and A. Rosen, *Case. Stud. Atom. Phys.*, **4** (1974), 93.
- [15] I. Lindgren and J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory*, Springer-Verlag, Berlin, (1982).
- [16] L. V. Chernysheva, N. A. Cherepkov and V. Radojevic, *Comp. Phys. Commun.*, **18**(1979), 87.
- [17] 董雁冰、王福恒, 原子分子物理学报, **5**(1988), 651.
- [18] C. F. Fischer, *The Hartree-Fock Method For Atoms, A Numerical Approach*, New York, Wiley, (1977).
- [19] C. F. Fischer, *Comp. Phys. Commun.*, **14** (1978), 145.
- [20] A. Arnesen, R. Hallin, C. Nordling, Ö. Staaf, L. Ward, B. Jelenkovic, M. Kisielinski, L. Lundin and S. Mannervik, *Astron. Astrophys.*, **106**(1982), 327.

EFFECTS OF THE CORE POLARIZATIONS ON THE HYPERFINE INTERACTION OF THE TRIPLET $(3d^2)^3P$ STATES OF ScII

XI JIN-HUA WU LI-JIN

Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics,

Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica, Wuhan, 430071

(Received 13 March 1991)

ABSTRACT

The hyperfine interaction constants of the triplet $(3d^2)^3P$ states of ScII are calculated using Rayleigh-Schrödinger perturbation method. The core polarizations are included to all orders using a recurrence formula and the correlations to low orders. The results are compared with experimental data and MCDF calculations of Young et al. It is found that the core polarization (especially the spin polarization) has drastic effects on the magnetic dipole interaction constant. Our results for constant A (MHz) are -116.667 and -12.442 for 3P_1 and 3P_2 states respectively, that of the experiments are $-107.3(6)$ and $-27.7(8)$, whereas the MCDF calculations of Young et al. obtained -1.8 and 85.9 .

PACC: 3130G; 3510F