物理学报 Acta Physica Sinica

Chinese Physical Society

Institute of Physics, CAS

Be^+离子和Li原子极化率和超极化率的理论研究

王婷 蒋丽 王霞 董晨钟 武中文 蒋军

Theoretical study of polarizabilities and hyperpolarizabilities of Be^+ ions and Li atoms

Wang Ting Jiang Li Wang Xia Dong Chen-Zhong Wu Zhong-Wen Jiang Jun

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 70, 043101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201386

在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.70.20201386

当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

共振线极化光实现原子矢量磁力仪的理论研究

Theory of atomic vector magnetometer using linearly polarized resonant light

物理学报. 2018, 67(6): 060701 https://doi.org/10.7498/aps.67.20172108

锂离子电池正极材料Li_2FeO_2的电子结构性质和Li扩散

Electronic structures and Li diffusion in cathode material Li_2FeO_2 of Li-ion batteries

物理学报. 2019, 68(15): 157201 https://doi.org/10.7498/aps.68.20190213

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

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

物理学报. 2017, 66(11): 113101 https://doi.org/10.7498/aps.66.113101

锂离子电池正极材料Li_2MnO_3稀土掺杂的第一性原理研究

First-principles study of rare-earth-doped cathode materials Li_2MnO_3 in Li-ion batteries

物理学报. 2019, 68(13): 138201 https://doi.org/10.7498/aps.68.20190509

相对论多组态相互作用方法计算Mg+离子同位素位移

Calculationof isotope shift of Mg+ ion by using the relativistic multi-configuration interaction method

物理学报. 2018, 67(1): 013101 https://doi.org/10.7498/aps.67.20171817

磁性硅烯超晶格中电场调制的谷极化和自旋极化

Valley and spin polarization manipulated by electric field in magnetic silicene superlattice

物理学报. 2018, 67(8): 086801 https://doi.org/10.7498/aps.67.20180080

Be^+离子和 Li 原子极化率和超极化率的理论研究*

王婷 蒋丽 王霞 董晨钟 武中文 蒋军†

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2020 年 8 月 24 日收到; 2020 年 10 月 12 日收到修改稿)

利用相对论模型势方法计算了 Be^+离子和 Li 原子的波函数、能级和振子强度, 进一步得到了基态的电偶极极化率和超极化率, 并详细地分析了不同中间态对基态超极化率的贡献. 对于 Be^+离子, 电偶极极化率和超极化率与已有的理论结果符合得非常好. 对于 Li 原子, 电偶极极化率与已有的理论结果符合得很好, 但是不同理论方法计算给出的超极化率差别非常大, 最大的差别超过了一个数量级. 通过分析不同中间态对 Li 原子基态超极化率的贡献, 解释了不同理论结果之间有较大差异的原因.

关键词: 电偶极极化率, 超极化率, Be^+离子, Li 原子, 相对论模型势方法

PACS: 31.15.ac, 31.15.ap **DOI**: 10.7498/aps.70.20201386

1 引 言

当原子处在静电场中时, 静态 Stark 效应导致的能级移动可以表示为[1]

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha^1 F_z^2 - \frac{1}{24}\gamma_0 F_z^4 - \cdots, \tag{1}$$

其中 F_z 是静电场沿 Z 轴的分量; α^1 为静态电偶极极化率; γ_0 为静态电偶极超极化率. 电偶极极化率和超极化率都是描述原子或分子因感受到外电场的作用使电子云偏离正常分布程度的物理量. 电偶极极化率在量子信息处理[2–5]、激光冷却[6,7]、原子钟[8,9]和洛伦兹不变性测试[10,11]等很多物理领域都有着十分重要的应用, 对极化率的研究一直是人们感兴趣的问题. 随着激光囚禁和冷却技术的快速发展, 原子钟的精度已达到了 10^{-17} 到 10^{-19} 量级[12–15], 原子的超极化率也需要精确确定. Brusch 等[16]、Barber 等[17]以及 Westergaard 等[18]分别在实验上研究了超极化率对 Sr, Yb 和 Hg 原子钟精度的影响, 他们指出魔幻囚禁的 Sr, Yb 和 Hg 原子钟实验中, 超极化率可以产生 10^{-17} 到 10^{-18} 不确定度[19–21]; Brewer 等[14]在实验上研究了超极化率对 Al^+量子逻辑钟精度的影响, 他们在激光同时囚禁 Al^+和 Mg^+的实验中指出超极化率可以产生 10^{-19} 不确定度. 因此, 为了得到高精度的原子钟, 高精度超极化率的理论数据是非常关键的原子参数.

目前, 理论上有很多种方法可以用于计算极化率和超极化率, 例如第一性原理的 Hylleraas 基展开方法[22–24]、相对论多体微扰方法 (RMBPT)[25]、耦合簇方法[1]和半经验赝势方法[26]等. 第一性原理的 Hylleraas 基展开方法可以非常精确地计算原子极化率, RMBPT 可以通过图解法直接表示出微扰矩阵元, 耦合簇方法不仅考虑了原子实电子之间的关联, 而且也考虑了原子实电子和价电子之间的关联, 但是第一性原理的 Hylleraas 基展开方法主要计算少电子体系的原子结构, 耦合簇方法和 RMBPT 方法适用于多电子体系, 计算过程十分复杂. 相对论模型势方法[27]用半经验模型势处理原子实和价电子的关联, 用组态相互作用来计算价电子与价电子的关联, 可以很好地计算高 Z 的单、双电子体系, 而且也减少了计算时间.

* 国家重点研发计划 (批准号: 2017YFA0402300) 和国家自然科学基金 (批准号: 11774292, 11804280, 11864036) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: phyjiang@yeah.net

© 2021 中国物理学会 Chinese Physical Society

Be^+离子和 Li 原子具有相似的原子结构, 其基态为 $1s^22s\ ^2S_{1/2}$. 精确测量这两个体系的跃迁光谱, 可以检验物理模型和计算方法的正确性. 因此, Be^+离子和 Li 原子是精密测量物理非常重要的研究体系[28,29]. 理论方面, 人们利用不同的理论方法, 分别计算了 Be^+离子和 Li 原子的电偶极极化率和超极化率. 尽管 Be^+离子和 Li 原子的基态相同, 但是不同的理论方法对 Be^+离子和 Li 原子得到的结论完全不一致. 例如: 对于 Be^+离子, Safronova 等[25]、Tang 等[22–24] 和 Yin 等[30] 分别用相对论多体微扰的方法、Hylleraas 基展开的变分法和有限场方法 (The finite field method) 计算了电偶极极化率和超极化率, 这些结果相互符合得非常好, 最大差别不超过 1%. 对于 Li 原子, 不同理论方法[1,26,31–34] 计算的电偶极极化率符合得很好, 但是超极化率相差却非常大, 如 Fuentealba 等用半经验赝势 (Semiempirical pseudopotentials) 方法计算的超极化率为 65000 a.u.[26], Kassimi 等[1]用耦合簇方法 (Coupled cluster method) 计算的超极化率为 1100 a.u., Tang 等[31] 用 Hylleraas 基展开的变分法计算的超极化率为 3060 a.u., Maroulis 等[34] 用相对论多体微扰法计算的超极化率为 4100 a.u., 不同理论方法计算的超极化率的差别可达 10 倍以上, 超出了目前所给出的超极化率的不确定度[1,31]. 目前有关这些差别在理论上还没有一个合理的解释[35], 因此理论上进一步详细研究 Li 原子和类 Li 离子的超极化率是必要的.

本文利用相对论模型势方法[27] (相对论组态相互作用模型势方法, RCICP), 计算了 Be^+离子和 Li 原子的能级、振子强度等结构参数, 进一步计算了相应基态的电偶极极化率和超极化率, 分析了不同中间态对 Be^+离子和 Li 原子基态超极化率的贡献, 并与现有理论和实验结果进行了比较, 解释了 Li 原子基态超极化率相差非常大的原因.

2 理论方法

2.1 相对论模型势方法

RCICP 方法的思想是将原子体系简化为原子实部分和价电子部分. Li 原子是最简单的碱金属原子, 1s 轨道的两个电子作为原子实部分, 剩余的电子是价电子部分. 对于原子实部分, 通过求解 Dirac-Fock 方程得到基态的轨道波函数. 原子实内的单电子波函数可以写为

$$\psi_{n\kappa m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r)\Omega_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{r}}) \\ iQ_{n\kappa}(r)\Omega_{-\kappa m}(\hat{\boldsymbol{r}}) \end{pmatrix}, \tag{2}$$

其中 κ 是相对论角量子数, 与总角动量量子数 j 和轨道角动量量子数 l 密切相关, 其表达式为

$$\kappa = l(l+1) - j(j+1) - 1/4, \tag{3}$$

$P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 分别代表径向波函数的大分量和小分量, $\Omega_{\kappa m}(r)$和 $\Omega_{-\kappa m}(r)$ 分别为相应的角向部分. 径向波函数 $P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$分别由 S-spinor 基展开,

$$P_{n\kappa}(r) = \sum_{i=1}^{N} p_i \phi_{i,\kappa}^{P}(r), \tag{4}$$

$$Q_{n\kappa}(r) = \sum_{i=1}^{N} q_i \phi_{i,\kappa}^{Q}(r), \tag{5}$$

其中上标 P 和 Q 分别表示 Dirac 自旋量的“大”和“小”分量, $\phi_{i,\kappa}^{P,Q}(r)$是未归一化的 S-spinor, S-spinor 基是 Slater 型轨道 (STO) 的相对论推广. 当 $\kappa < 0$ 时,

$$\phi_{i,k}^{P,Q}(r) = r^{\gamma}\mathrm{e}^{-\lambda_i r}, \tag{6}$$

当 $\kappa > 0$ 时,

$$\phi_{i,k}^{P,Q}(r) = Ar^{\gamma}\mathrm{e}^{-\lambda_i r} + \lambda r^{\gamma+1}\mathrm{e}^{-\lambda_i r}, \tag{7}$$

其中对于大分量, 系数 A 可以表示为

$$A_P = \frac{(\kappa+1-N_\kappa)(2\gamma+1)}{2(N_\kappa-\kappa)}, \tag{8}$$

对于小分量, 系数 A 可以表示为

$$A_Q = \frac{(\kappa-1-N_\kappa)(2\gamma+1)}{2(N_\kappa-\kappa)}, \tag{9}$$

其中 $N_\kappa = \sqrt{\kappa^2+2\gamma+1}$, $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - Z^2/c^2}$, $c = 137.035999074$ 是原子单位下的光速, Z 是原子序数.

对于价电子, 其哈密顿量可以表示为

$$\widehat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + (\beta-1)c^2 - \frac{Z}{r} + V_{\mathrm{core}}, \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 表示 4 × 4 的 Dirac 算符矩阵[36]; $\boldsymbol{p}$ 表示动量算符; V_{core} 表示原子实与价电子的相互作用势, 可以表示为

$$V_{\mathrm{core}} = V_{\mathrm{dir}}(\boldsymbol{r}) + V_{\mathrm{exc}}(\boldsymbol{r}) + V_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{r}), \tag{11}$$

$V_{\mathrm{dir}}(\boldsymbol{r})$ 和 $V_{\mathrm{exc}}(\boldsymbol{r})$ 分别表示原子实的电子与价电子之间的直接相互作用和交换相互作用; $V_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{r})$表示半经验极化势, 近似描述原子实和价电子之间的相

互作用, 可以表示为[37]

$$V_{\rm p}(\boldsymbol{r}) = -\sum_{k=1}^{3}\frac{\alpha_{\rm core}^{(k)}}{2r^{[2(k+1)]}}\sum_{l,j} g_{k,l,j}^{2}(r)\,|l,j\rangle\langle l,j|, \quad (12)$$

其中 l 和 j 分别是轨道角动量量子数和总角动量量子数; $\alpha_{\rm core}^{(k)}$ 表示 k 阶原子实的静态极化率, Be^{+} 离子和 Li 原子原子实的偶极静态极化率分别为 0.0523 a.u.和 0.1925 a.u.[38,39]. 用截断函数 $\rho_{l,j}$ 表示 $g_{k,l,j}^{2}(r) = 1-\exp\left[-r^{[2(k+2)]}/\rho_{l,j}^{[2(k+2)]}\right]$, 通过调节 $\rho_{l,j}$ 的值来保证极化势在原点处为有限值.

价电子轨道的波函数由 S-spinor 基和 L-spinor 基的线性组合表示, L-spinor 基是 Lagrange 型轨道 (LTO) 的相对论推广[40,41]. L-spinor 的表达形式为

$$\phi_{i,k}^{P}(r) = r^{\gamma}{\rm e}^{-\lambda_i r}\times\Big\{-(1-\delta_{n_i,0})L_{n_i-1}^{2\gamma} - 12(2\lambda_i r) + BL_{n_i}^{2\gamma}(2\lambda_i r)\Big\}, \quad (13)$$

$$\phi_{i,k}^{Q}(r) = r^{\gamma}{\rm e}^{-\lambda_i r}\times\Big\{-(1-\delta_{n_i,0})L_{n_i-1}^{2\gamma} - 12(2\lambda_i r) - BL_{n_i}^{2\gamma}(2\lambda_i r)\Big\}, \quad (14)$$

其中 L_n^{α} 是拉盖尔多项式, B 可以表示为

$$B=\frac{N_{n_i,\kappa}-\kappa}{n_i+2\gamma}, \quad (15)$$

n_i 是非负整数, $\kappa<0$ 时, $n_i\geqslant 0$; $\kappa>0$ 时, $n_i\geqslant 1$, $N_{n_i,\kappa}=\sqrt{n_i^2+2n_i\gamma+\kappa^2}$.

在价电子的计算中, 通常选择 $2N$ 阶 L-spinor 轨道 (包含 N 阶大分量轨道和 N 阶小分量轨道). 径向 Dirac 方程进一步可以简化成 $2N$ 阶矩阵形式. 对角化矩阵, 就可以得到相应价电子的能量本征值和波函数.

2.2 极化率和超极化率

根据二阶微扰理论, 原子基态的静态极化率可以表示为[22–24,31]

$$\alpha_0^k = \sum_i \frac{2\left|\langle n_i l_i j_i \left\|T^k\right\| n_0 l_0 j_0\rangle\right|^2}{(2k+1)(2j_0+1)\Delta E_{i\to 0}} = \sum_i \frac{f_{i\to 0}^{k}}{(\Delta E_{i\to 0})^2}, \quad (16)$$

其中 T^k 是 2^k-极跃迁算符, k =1 代表电偶极; i 是所有允许的向基态跃迁的激发态; 跃迁能 $\Delta E_{i\to 0}=E_i-E_0$, E_i 是不同中间态的能级, 从能级 $n_0l_0j_0$ 到能级 $n_il_ij_i$ 跃迁的吸收振子强度

$$f_{i\to 0}^{k} = \frac{2\left|\langle n_i l_i j_i \left\|T^k\right\| n_0 l_0 j_0\rangle\right|^2\Delta E_{i\to 0}}{(2j_0+1)(2k+1)}.$$

根据四阶微扰理论, 单价原子体系基态 $(n_0l_0j_0)$ 的标量超极化率可以表示为[25,31]

$$\begin{aligned}&\gamma_0(n_0l_0j_0)\\ &=\frac{24}{\sqrt{2j_0+1}}\sum_{n_1l_1j_1}\sum_{n_2l_2j_2}\sum_{n_3l_3j_3}\prod\nolimits_0(j_0,j_1,j_2,j_3)\\ &\quad\times\Upsilon(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3),\end{aligned} \quad (17)$$

其中 n_i, l_i 和 $j_i(i=1,2,3)$ 分别表示不同中间态的主量子数、轨道角动量量子数和总角动量量子数. $\prod_0$ 是 $\gamma_0(n_0l_0j_0)$ 的角向部分, 可以表示为

$$\begin{aligned}&\prod\nolimits_0(j_0,j_1,j_2,j_3)\\ &=\sum_{K_1}(-1)^{j_0-j_2+2K_1}\frac{(2K_1+1)}{\sqrt{(2j_0+1)}}\\ &\quad\begin{pmatrix}1&1&K_1\\0&0&0\end{pmatrix}^2\begin{Bmatrix}1&1&K_1\\j_0&j_2&j_1\end{Bmatrix}\\ &\quad\times\begin{Bmatrix}1&1&K_1\\j_0&j_2&j_3\end{Bmatrix},\end{aligned} \quad (18)$$

其中 K_1 为整数, 求和包含 $K_1=0$ 和 $K_1=2$ 两项. $\Upsilon(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3)$ 可以表示为

$$\begin{aligned}&\Upsilon(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3)\\ &=T(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3)\\ &\quad-\delta(j_0,j_2)(-1)^{2j_0-j_1-j_3}\\ &\quad\times\frac{\left|\langle n_0l_0j_0\left\|T^1\right\|n_1l_1j_1\rangle\right|^2}{(E_1-E_0)}\frac{\left|\langle n_0l_0j_0\left\|T^1\right\|n_3l_3j_3\rangle\right|^2}{(E_3-E_0)}.\end{aligned} \quad (19)$$

在 $\gamma_0(n_0l_0j_0)$ 的计算中, 最复杂的部分是对 $T(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3)$ 求和的计算, $T(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3)$ 可以表示为

$$\begin{aligned}&T(n_0l_0j_0,n_1l_1j_1,n_2l_2j_2,n_3l_3j_3)\\ &=\frac{\langle n_0l_0j_0\|T^1\|n_1l_1j_1\rangle\langle n_1l_1j_1\|T^1\|n_2l_2j_2\rangle\langle n_2l_2j_2\|T^1\|n_3l_3j_3\rangle\langle n_3l_3j_3\|T^1\|n_0l_0j_0\rangle}{(E_1-E_0)(E_2-E_0)(E_3-E_0)},\end{aligned} \quad (20)$$

对于类 Li 体系的基态 ($n_0l_0j_0 = 2\mathrm{s}_{1/2}$), 方程 (17) 可简化为[25]

$$\gamma_0(2\mathrm{s}_{1/2}) = 12\left[T(\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j''}) + T(\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_j,\mathrm{p}_{j''}) - \alpha_0^1\beta_0\right], \tag{21}$$

其中 α_0^1是基态的电偶极极化率; β_0是电偶极极化率的一阶非绝热修正[22], 可以表示为

$$\beta_0(2\mathrm{s}_{1/2}) = \frac{1}{6}\sum_i \frac{\left|\langle n_il_ij_i \left\|T^1\right\| 2\mathrm{s}_{1/2}\rangle\right|^2}{\left(E_{n_il_ij_i} - E_{2\mathrm{s}_{1/2}}\right)^2}, \tag{22}$$

$T(\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j''})$ 和$T(\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_j,\mathrm{p}_{j''})$ 可以表示为

$$T(\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j''}) = \sum_{n_1,n_2,n_3} \frac{\langle 2\mathrm{s}_{1/2} \left\|T^1\right\| n_1\mathrm{p}_{j'}\rangle \langle n_1\mathrm{p}_{j'} \left\|T^1\right\| n_2\mathrm{s}_{1/2}\rangle \langle n_2\mathrm{s}_{1/2} \left\|T^1\right\| n_3\mathrm{p}_{j''}\rangle \langle n_3\mathrm{p}_{j''} \left\|T^1\right\| 2\mathrm{s}_{1/2}\rangle}{(E_1 - E_{2\mathrm{s}_{1/2}})(E_2 - E_{2\mathrm{s}_{1/2}})(E_3 - E_{2\mathrm{s}_{1/2}})}, \tag{23}$$

$$T(\mathrm{s}_{1/2},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_j,\mathrm{p}_{j''}) = \sum_{n_1,n_2,n_3} \frac{\langle 2\mathrm{s}_{1/2} \left\|T^1\right\| n_1\mathrm{p}_{j'}\rangle \langle n_1\mathrm{p}_{j'} \left\|T^1\right\| n_2\mathrm{d}_j\rangle \langle n_2\mathrm{d}_j \left\|T^1\right\| n_3\mathrm{p}_{j''}\rangle \langle n_3\mathrm{p}_{j''} \left\|T^1\right\| 2\mathrm{s}_{1/2}\rangle}{(E_1 - E_{2\mathrm{s}_{1/2}})(E_2 - E_{2\mathrm{s}_{1/2}})(E_3 - E_{2\mathrm{s}_{1/2}})}. \tag{24}$$

3 结果与讨论

3.1 能 级

对于 Be^+离子, s 轨道采用 S-spinor 基 10 个、L-spinor 基 60 个, p_j, d_j, f_j, g_j轨道 L-spinor 基各 100 个; 对于 Li 原子, s 轨道采用 S-spinor 基 10 个、L-spinor 基 80 个, p_j, d_j 轨道 L-spinor 基各 80 个. 表 1 列出了 Be^+离子和 Li 原子的截断参数.

表 1 Be^+离子和 Li 原子的截断参数 $\rho_{l,j}$(单位: a.u.)
Table 1. Cut-off parameters $\rho_{l,j}$ of Be^+ ions and Li atoms (in a.u.).

State	j	$\rho_{l,j}$	
		Be^+	Li
2s	1/2	0.9552	1.40880
2p	1/2	0.8789	1.28466
	3/2	0.8775	1.28396
3d	3/2	0.1287	2.324
	5/2	0.1284	2.330

表 2 列出了用 RCICP 方法计算的 Be^+离子和 Li 原子基态和部分低激发态相对于原子实的能级和相应的实验值[42]. 在 RCICP 方法中, 通过调节表 1 中的截断参数 $\rho_{l,j}$ 可使得 2s, $2\mathrm{p}_j$ 和 $3\mathrm{d}_j$ 能级都非常接近于 NIST 值. 我们也可以发现, Be^+离子和 Li 原子 $n\mathrm{s}$ ($n \geqslant 3$)、$n\mathrm{p}_j$($n \geqslant 3$) 和 $n\mathrm{d}_j$($n \geqslant 4$) 等更高激发态能级的自旋轨道分裂值与实验的自旋轨道分裂值都符合得很好, 仅在小数点后第 6 位有差别. 例如, 对于 Li 原子, $3\mathrm{d}_j$ 和 $4\mathrm{d}_j$ 的自旋轨道能级分裂理论上分别是 0.0000004 和 0.0000001 a.u., 这与实验结果 0.0000002 和 0.0000001 a.u.符合得很好.

3.2 振子强度

基于我们计算的能级和波函数, 进一步得到了表 3 中的 Be^+离子基态和部分低激发态电偶极跃迁的振子强度, 并与相应 NIST 值[42] 以及包含了单、双和部分三激发的全阶的相对论多体方法 (all-order SDpT)[25] 的结果进行了对比. 结果表明, RCICP 方法计算的振子强度与 NIST 值[42] 符合得很好, 差别在 0.6% 以内, 只有 $2\mathrm{p}_j \rightarrow 4\mathrm{s}_{1/2}$ 跃迁的振子强度与 NIST 值的差别较大, 约为 1.6%. RCICP 方法的结果与 all-order SDpT[25] 的结果也符合得非常好, 所有振子强度的差别都小于 0.6%.

基于我们计算的能级和波函数, 进一步得到了表 4 中的 Li 原子基态和部分低激发态电偶极跃迁的振子强度. 从表 4 中可以看出, 除 $3\mathrm{d}_j \rightarrow 4\mathrm{p}_j$ 的跃迁外, 其余的跃迁振子强度与 NIST 值[42] 符合得很好, 差别在 1% 之间, $3\mathrm{d}_j \rightarrow 4\mathrm{p}_j$ 的跃迁振子强度与 NIST 值[42] 的差别约为 3%. RCICP 的结果与 all-order SDpT[29] 的结果也符合得很好, 除 $3\mathrm{d}_j \rightarrow 4\mathrm{p}_j$ 和 $2\mathrm{s}_{1/2} \rightarrow 3\mathrm{p}_j$ 的跃迁外, 其余跃迁振子强度的差别在 0.6% 以内, $3\mathrm{d}_j \rightarrow 4\mathrm{p}_j$ 和 $2\mathrm{s}_{1/2} \rightarrow 3\mathrm{p}_j$ 跃迁的振子强度与 all-order SDpT[29] 结果的差别小于 4%.

3.3 电偶极极化率和超极化率

3.3.1 Be^+离子的电偶极极化率和超极化率

表 5 列出了 Be^+离子基态的电偶极极化率 α_0^1

表 2 Be^+离子和 Li 原子基态和部分低激发态相对于原子实的能级, 实验值 (Exp.) 是来自于 NIST 的数据 (单位: a.u.)
Table 2. Energy levels of the ground state and some low-lying states of Be^+ ions and Li atoms relative to atomic core. Experimental values (Exp.) are from the NIST data (in a.u.).

State	j	Be^+		Li	
		RCICP	Expt.[42]	RCICP	Expt.[42]
2s	1/2	–0.66924767	–0.66924755	–0.1981419	–0.1981419
2p	1/2	–0.52376962	–0.52376949	–0.1302358	–0.1302358
	3/2	–0.52373967	–0.52373953	–0.1302343	–0.1302343
3s	1/2	–0.26719384	–0.26723337	–0.0741684	–0.0741817
3p	1/2	–0.22954214	–0.22958234	–0.0572264	–0.0572354
	3/2	–0.22953331	–0.22957356	–0.0572260	–0.0572354
3d	3/2	–0.22247809	–0.22247805	–0.0556055	–0.0556057
	5/2	–0.22247565	–0.22247565	–0.0556051	–0.0556055
4s	1/2	–0.14313397	–0.14315285	–0.0386096	–0.0386151
4p	1/2	–0.12811380	–0.12813485	–0.0319693	–0.0319744
	3/2	–0.12811009	–0.12813115	–0.0319691	–0.0319744
4d	3/2	–0.12512357	–0.12512455	–0.0308153	–0.0312735
	5/2	–0.12512257	–0.12512345	–0.0308152	–0.0312734
5s	1/2	–0.08905659	–0.08906605	–0.0236202	–0.0236365
5p	1/2	–0.08159826	–0.08160960	–0.0203583	–0.0203739
	3/2	–0.08159637	–0.08160765	–0.0203583	–0.0203739
5d	3/2	–0.08006698	–0.08006725	–0.0124153	–0.0200122
	5/2	–0.08006648	–0.08006670	–0.0124152	–0.0200122

和超极化率γ_0, 并与目前已有的理论数据进行了对比. 从表 5 中可以看出, 使用 RCICP 方法计算的电偶极极化率与 Hylleraas[22,24] 方法的结果相差 0.0074 a.u.和 0.015 a.u., 约为 0.03% 和 0.06%, RCICP 的结果与其它理论方法[25,44–47] 结果的差别都在 0.08% 以内. 另外, 从表 5 中也可以看出, 使用 RCICP 方法计算得到的超极化率与 Hylleraas[22] 的结果符合得非常好, 差别仅仅为 0.08%, 与相对论多体方法[25] 和 Hartree-Fock plus core polarization[22] 方法计算得到的结果也符合得很好, 差别在 0.3% 以内. 但是有限场方法[30] 的结果与我们计算以及其它理论的结果相差约为 1.5%.

根据 (21) 式, Be^+离子基态超极化率的计算可以分成三个部分: 第一部分是$T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s},\mathrm{p}_{j''})$, 根据中间激发态 p_j(p_j 可以取 $\mathrm{p}_{1/2}$ 和 $\mathrm{p}_{3/2}$) 的不同, 这部分又可以分解成四项, 分别为 T(s, $\mathrm{p}_{1/2}$, s, $\mathrm{p}_{1/2}$), T(s, $\mathrm{p}_{1/2}$, s, $\mathrm{p}_{3/2}$), T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, s, $\mathrm{p}_{1/2}$) 和 T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, s, $\mathrm{p}_{3/2}$); 第二部分$T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_j,\mathrm{p}_{j''})$又可以分解成五项, 分别为 T(s, $\mathrm{p}_{1/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{p}_{1/2}$), T(s, $\mathrm{p}_{1/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{p}_{3/2}$), T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{p}_{1/2}$), T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{p}_{3/2}$) 和 T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, $\mathrm{d}_{5/2}$, $\mathrm{p}_{3/2}$); 第三部分是与极化率相关的$\alpha_0^1\beta_0$项. 表 6 列出了不同项对 Be^+离子基态超极化率的贡献, 我们可以发现, 在第一部分和第二部分中, 第二项和第三项是中间激发态 $\mathrm{p}_{1/2}$ 和 $\mathrm{p}_{3/2}$ 的交换, 这两项对超极化率的贡献是一样的, 即 T(s, $\mathrm{p}_{1/2}$, s, $\mathrm{p}_{3/2}$) 和 T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, s, $\mathrm{p}_{1/2}$) 是相等的, T(s, $\mathrm{p}_{1/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{p}_{3/2}$) 和 T(s, $\mathrm{p}_{3/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{p}_{1/2}$) 也是相等的. 在所有贡献中, 与极化率相关的$\alpha_0^1\beta_0$项贡献最大. 从表 6 中可以看出, 使用 RCICP 方法计算的不同中间态对 Be^+离子基态超极化率的贡献与相对论多体方法 (RMBT)[25] 的结果符合得很好. 为了进一步评估目前的计算精度, 我们将对超极化率有重要贡献的 $2s\rightarrow 2p_j$, $2p_j\rightarrow 3d_j$ 跃迁矩阵元替换为 NIST[42] 跃迁矩阵元, 并重新计算了超极化率 (标记为 RCICP$^{\mathrm{C}}$), 我们发现 RCICP 的超极化率与 RCICP$^{\mathrm{C}}$ 的结果仅仅相差 73 a.u., 这个差别在我们计算的不确定度内, 仅占 RCICP 计算的超极化率的 0.6%. 因此, 我们用 RCICP 计算的超极化率的精度应该在 1% 以内.

3.3.2 Li 原子的电偶极极化率和超极化率

表 7 列出了用 RCICP 方法计算的 Li 原子基态的电偶极极化率α_0^1、超极化率γ_0 和已有的理论

与实验结果. 从表 7 中可以看出, 除受限 Hartree-Fock[32] 的理论值外, 使用 RCICP 方法计算的电偶极极化率与其他理论值[1,31–35,48–52] 和实验测量

表 3 Be^+离子基态和部分低激发态之间跃迁的振子强度, “Diff.”表示用 RCICP 方法计算的结果与 NIST 结果之差的百分比

Table 3. Oscillator strengths of transitions between the ground state and some low-lying states of Be^+ ions. “Diff.” represents the difference in percentage form calculated by RCICP method and NIST results.

Transitions	RCICP	NIST[42]	Theor.[25]	Diff./%
$2s_{1/2}\rightarrow2p_{1/2}$	0.16624	0.16596	0.1661	0.17
$2s_{1/2}\rightarrow2p_{3/2}$	0.33258	0.33198	0.3322	0.18
$2s_{1/2}\rightarrow3p_{1/2}$	0.02760	0.02768	0.0277	0.29
$2s_{1/2}\rightarrow3p_{3/2}$	0.05517	0.05540	0.0553	0.42
$2p_{1/2}\rightarrow3s_{1/2}$	0.06434	0.06438	0.0644	0.06
$2p_{3/2}\rightarrow3s_{1/2}$	0.06436	0.06438	0.0644	0.03
$2p_{1/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.01022	0.01039	0.0102	1.64
$2p_{3/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.01022	0.01039	0.0102	1.64
$2p_{1/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.6320	0.6320	0.6319	0.00
$2p_{3/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.0632	0.0632	0.0632	0.00
$2p_{3/2}\rightarrow3d_{5/2}$	0.5689	0.5689	0.5688	0.00
$3s_{1/2}\rightarrow3p_{1/2}$	0.2768	0.2767	0.2767	0.04
$3s_{1/2}\rightarrow3p_{3/2}$	0.5538	0.5535	0.5535	0.05
$3p_{1/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.08069	0.08113	0.0811	0.54
$3p_{3/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.08059	0.08103	0.081	0.54
$3p_{3/2}\rightarrow3d_{5/2}$	0.07256	0.07294	0.073	0.52
$3p_{1/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.1346	0.1347	0.1346	0.07
$3p_{3/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.1346	0.1347	0.1346	0.07

表 4 Li 原子基态和部分低激发态之间跃迁的振子强度, “Diff.”表示用 RCICP 方法计算的结果与 NIST 结果之间差别的百分比

Table 4. Oscillator strengths of transitions between the ground state and some low-lying states of Li atoms. “Diff.” represents the difference in percentage form calculated by RCICP method and NIST results.

Transitions	RCICP	NIST[42]	Theor.[29]	Diff./%
$2s_{1/2}\rightarrow2p_{1/2}$	0.24915	0.24899	0.2490	0.06
$2s_{1/2}\rightarrow2p_{3/2}$	0.49832	0.49797	0.4981	0.07
$2s_{1/2}\rightarrow3p_{1/2}$	0.00157	0.00157	0.0016	0.00
$2s_{1/2}\rightarrow3p_{3/2}$	0.00313	0.00314	0.0032	0.32
$2p_{1/2}\rightarrow3s_{1/2}$	0.11058	0.11050	0.1106	0.07
$2p_{3/2}\rightarrow3s_{1/2}$	0.11059	0.11050	0.1106	0.08
$2p_{1/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.01285	0.01283	0.0128	0.16
$2p_{3/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.01285	0.01283	0.0128	0.16
$2p_{1/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.63876	0.63858	0.6386	0.03
$2p_{3/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.06388	0.06386	0.0639	0.03
$2p_{3/2}\rightarrow3d_{5/2}$	0.57489	0.57472	0.5747	0.03
$3s_{1/2}\rightarrow3p_{1/2}$	0.40512	0.4051	0.405	0.00
$3s_{1/2}\rightarrow3p_{3/2}$	0.81027	0.8100	0.810	0.03
$3p_{1/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.07397	0.0733	0.0744	0.91
$3p_{3/2}\rightarrow3d_{3/2}$	0.00740	0.00736	0.0074	0.54
$3p_{3/2}\rightarrow3d_{5/2}$	0.06657	0.0663	0.0669	0.41
$3p_{1/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.22325	0.2230	0.2232	0.11
$3p_{3/2}\rightarrow4s_{1/2}$	0.22325	0.2230	0.2232	0.11
$3d_{3/2}\rightarrow4p_{1/2}$	0.01453	0.01497	0.015	2.94
$3d_{3/2}\rightarrow4p_{3/2}$	0.00290	0.00299	0.003	3.01
$3d_{5/2}\rightarrow4p_{3/2}$	0.01743	0.01796	0.018	2.95

表 5 Be^+离子基态的电偶极极化率 α_0^1 和超极化率 γ_0, “Diff.”表示用 RCICP 方法计算的 γ_0 与其它理论数据之间差别的百分比, 括号内的值表示不确定度

Table 5. Electric-dipole polarizability and hyperpolarizability of the ground state of Be^+ ions. “Diff.” represents the difference of γ_0 in percentage form calculated by RCICP and other theoretical method. The values in parentheses indicate the uncertainties.

Method	α_0^1/a.u.	γ_0/a.u.	Diff./%
RCICP	24.504(32)	–11529.971(84)	
Coulomb approximation[43]	24.77		
Variation-perturbation Hylleraas CI[44]	24.5		
Hylleraas[24]	24.489		
Asymptotic correct wave function[45]	24.91		
Variation-perturbation FCCI[46,47]	24.495		
Hartree-Fock plus core polarization[22]	24.493	–11511	0.16
Hylleraas[22]	24.4966(1)	–11521.30(3)	0.08
Relativistic many-body calculation[25]	24.483(4)	–11496(6)	0.29
The finite field method[30]	24.5661	–11702.31	1.49

表 6 中间态对 Be^+离子基态超极化率的贡献, RCICP^C 表示 $2s\rightarrow 2p_j$, $2p_j\rightarrow 3d_j$ 跃迁的约化矩阵元用 NIST[42] 结果替换之后计算的结果, 括号内的值表示 RCICP 相对于 RCICP^C 的不确定度 (单位: a.u.)

Table 6. Contributions to the hyperpolarizability of the ground state of Be^+ ions. RCICP^C represents that the reduced matrix elements of the $2s\rightarrow 2p_j$, $2p_j\rightarrow 3d_j$ transitions are replaced by NIST[42] results. The values in parentheses indicate the uncertainties of RCICP relative to RCICP^C (in a.u.).

Contr.	RCICP	RCICP^C	RMBT[25]
$\frac{1}{18}T$ (s, $p_{1/2}$, s, $p_{1/2}$)	34.34(2)	34.32	32.605(53)
$-\frac{1}{18}T$ (s, $p_{1/2}$, s, $p_{3/2}$)	68.68(5)	68.63	68.886(92)
$-\frac{1}{18}T$ (s, $p_{3/2}$, s, $p_{1/2}$)	68.68(5)	68.63	68.886(92)
$\frac{1}{18}T$ (s, $p_{3/2}$, s, $p_{3/2}$)	137.35(10)	137.25	137.669(109)
$T(s,p_{j'},s,p_{j''})$	308.04(12)	308.83	308.046(178)
$\frac{1}{18}T$ (s, $p_{1/2}$, $d_{3/2}$, $p_{1/2}$)	202.75(16)	202.59	202.031(121)
$\frac{1}{18\sqrt{10}}T$ (s, $p_{1/2}$, $d_{3/2}$, $p_{3/2}$)	40.55(4)	40.51	40.403(18)
$\frac{1}{18\sqrt{10}}T$ (s, $p_{3/2}$, $d_{3/2}$, $p_{1/2}$)	40.55(4)	40.51	40.403(18)
$\frac{1}{180}T$ (s, $p_{3/2}$, $d_{3/2}$, $p_{3/2}$)	8.11(1)	8.10	8.080(3)
$\frac{1}{30}T$ (s, $p_{3/2}$, $d_{5/2}$, $p_{3/2}$)	437.85(40)	437.45	438.434(148)
$T(s,p_{j'},d_j,p_{j''})$	729.79(43)	729.17	729.351(192)
$\alpha_0^1\beta_0$	1999.67(6.95)	1992.72	1995.743(382)
γ_0(2 s)	–11529(84)	–11456	–11496(6)

表 7 Li 原子基态的电偶极极化率α_0^1和超极化率γ_0, 括号内的值表示不确定度 (单位: a.u.)

Table 7. Electric-dipole polarizability and hyperpolarizability of the ground state of Li atoms. The values in parentheses indicate the uncertainties (in a.u.).

Method	α_0^1	γ_0
RCICP	164.05(8)	1920(3264)
The coupled cluster (all single, double and triple substitution)[1]	164.19	2880
Finite-field quadratic configuration interaction[1]	164.32	1020
Hylleraas[31]	164.112(1)	3060(40)
The relativistic coupled-cluster method[48]	164.23	
Relativistic variation perturbation[49]	164.084	
Relativistic all-order methods[29]	164.16(5)	
Variation perturbation[33]	164.10	3000
Semiempirical pseudopotentials[26]	164.08	65000
Frozen core Hamiltonian with a semiempirical polarization potential[50]	164.21	
Finite-field fourth-order many-body perturbation theory[34]	164.5	4300
Configuration interaction[35]	164.9	37000
Relativistic ab initio methods[51]	164.0(1)	
The restricted Hartree-Fock[32]	170.1	–55000
The Rydberg-Klein-Rees inversion method with the quantum defect theory[52]	164.14	3390
Exp.[53]	164(3)	
Exp.[54]	164.2(11)	

值[53,54] 都符合得很好, 相差约 0.6%, 并且差别都在实验测量值[53] 的不确定度内. 但是, 与 Be^+完全不同的是, 使用不同理论方法计算的 Li 原子基态的超极化率差别却非常大, 如 RCICP 的结果比耦合簇[1] 方法的结果小 960 a.u., 约为 33%, 比 Hylleraas[31] 的结果小 1140 a.u., 约为 37%, 但 RCICP 的结果又比单双激发的组态相互作用[1] 方法计算的理论值大 900 a.u., 我们的计算结果在各种理论

表 8 中间态对 Li 原子基态超极化率的贡献, RCICP^{C} 表示 2s→2p$_j$, 2p$_j$→3d$_j$ 跃迁的约化矩阵元用 NIST[42] 结果替换之后计算的结果, "Diff."表示 RCICP 与 RCICP^{C} 之间差别的百分比, 括号内的值表示 RCICP 相对于 RCICP^{C} 的不确定度

Table 8. Contributions to the hyperpolarizability of the ground state of Li atoms. RCICP^{C} represents that the reduced matrix elements of 2s→2p$_j$, 2p$_j$→3d$_j$ transitions are replaced by NIST[42] results. "Diff." represents the difference in percentage form between RCICP method and RCICP^{C}. The values in parentheses indicate the uncertainties of RCICP relative to RCICP^{C}.

Contr.	RCICP/a.u.	RCICP^{C}/a.u.	Diff. /%
$\frac{1}{18}T$ (s, p$_{1/2}$, s, p$_{1/2}$)	8314(2)	8312	0.03
$-\frac{1}{18}T$ (s, p$_{1/2}$, s, p$_{3/2}$)	16629(5)	16624	0.03
$-\frac{1}{18}T$ (s, p$_{3/2}$, s, p$_{1/2}$)	16629(5)	16624	0.03
$\frac{1}{18}T$ (s, p$_{3/2}$, s, p$_{3/2}$)	33259(11)	33248	0.03
T(s, p$_{j'}$, s, p$_{j''}$)	74833(13)	74809	0.02
$\frac{1}{18}T$ (s, p$_{1/2}$, d$_{3/2}$, p$_{1/2}$)	33812(13)	33799	0.04
$\frac{1}{18\sqrt{10}}T$ (s, p$_{1/2}$, d$_{3/2}$, p$_{3/2}$)	6762(3)	6759	0.04
$\frac{1}{18\sqrt{10}}T$ (s, p$_{3/2}$, d$_{3/2}$, p$_{1/2}$)	6762(3)	6759	0.04
$\frac{1}{180}T$ (s, p$_{3/2}$, d$_{3/2}$, p$_{3/2}$)	1352(0)	1352	0.00
$\frac{1}{30}T$ (s, p$_{3/2}$, d$_{5/2}$, p$_{3/2}$)	73033(40)	72993	0.05
T(s, p$_{j'}$, d$_j$, p$_{j''}$)	121723(42)	121661	0.03
$\alpha_0^1\beta_0$	196396(268)	196128	0.14
γ_0(2 s)	1920(3264)	4109	170

方法结果之间. 半经验赝势方法[26]、组态相互作用[35]和受限 Hartree-Fock[32]的结果比其它理论方法的结果都大一个数量级.

为了解释不同理论方法计算得到的 Li 原子基态超极化率差别大的原因, 表 8 列出了不同中间态对 Li 原子基态超极化率的贡献. 从表 8 中可以发现, 第一部分 T(s, p$_{j'}$, s, p$_{j''}$)与第二部分 T(s, p$_{j'}$, d$_j$, p$_{j''}$)的和为 196556 a.u., 值得注意的是, 这个值与第三部分 $\alpha_0^1\beta_0$ 的值 196396 a.u.近似相等. 根据 (21) 式, 第一部分与第二部分的和与 $\alpha_0^1\beta_0$ 的值接近抵消了, 其差仅仅为 160 a.u., 这个值仅占第三部分 $\alpha_0^1\beta_0$ 的 0.08%. 为了评估该计算结果的误差, 与 Be$^+$离子类似, 将 2s→2p$_j$ 和 2p$_j$→3d$_j$ 跃迁的矩阵元分别替换为 NIST[42] 跃迁矩阵元. 从表 8 中可以发现, 替换之后, 第一部分 T(s, p$_{j'}$, s, p$_{j''}$)与第二部分 T(s, p$_{j'}$, d$_j$, p$_{j''}$)的和为 196470 a.u., 这个值与 RCICP 的结果符合得非常好, 相差仅仅为 86 a.u., 约为 0.04%, 第三部分 $\alpha_0^1\beta_0$ 的值为 196128 a.u., 与 RCICP 的结果相差 268 a.u., 约为 0.14%. 对于这三部分, 尽管 RCICP^{C} 的结果与 RCICP 的结果相差比较小, 但是, 前两部分之和与第三部分 $\alpha_0^1\beta_0$ 的差将变为 342 a.u., 这个值是 RCICP 的结果 160 a.u. 的 2.14 倍, 相应 RCICP^{C} 的超极化率为 4109 a.u., 其值也是 RCICP 的 2.14 倍, 因此 RCICP 的计算不确定度达到了 170%. 综上所述, 造成不同理论方法计算的 Li 原子超极化率相差较大的原因是, 前两部分的和与第三部分 $\alpha_0^1\beta_0$ 近似相等, 其差值放大了计算误差, 跃迁矩阵元小于 0.1% 的不确定度将导致超极化率产生 100% 以上的不确定度.

4 结 论

本文利用 RCICP 方法, 计算了 Be$^+$离子和 Li 原子的波函数、能级以及振子强度, 得到了 Be$^+$离子和 Li 原子基态的电偶极极化率和超极化率, 并与其它理论以及实验结果进行了对比, 进一步讨论了不同中间态对基态超极化率的贡献. 对于 Be$^+$离子, RCICP 方法计算的电偶极极化率和超极化率与其它理论方法计算的结果符合得非常好, 对超极化率贡献最大的是 $\alpha_0^1\beta_0$. 对于 Li 原子, RCICP 方法计算的电偶极极化率与其它理论方法计算的理论数据以及实验值符合得非常好, 但是不同理论方法给出的超极化率相差非常大, RCICP 方法计算的超极化率在 Hylleraas 的结果和耦合簇的结果之间. 为了解释这些差别的原因, 我们详细分析了

不同中间态对超极化率的贡献, 发现$T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{s},\mathrm{p}_{j''})$与$T(\mathrm{s},\mathrm{p}_{j'},\mathrm{d}_{j},\mathrm{p}_{j''})$之和对超极化率的贡献与$\alpha_0^1\beta_0$对超极化率的贡献近似相等, 其差值放大了计算误差, 跃迁矩阵元小于 0.1% 的不确定度将导致超极化率产生 100% 以上的不确定度. 因此, 各种不同理论方法计算的基态超极化率有数倍甚至十几倍的差异.

感谢武汉物理与数学研究所的唐丽艳研究员在数据计算方面给予的讨论和帮助.

参考文献

[1] Kassimi E B, Thakkar A J 1994 *Phys. Rev. A* **50** 2948
[2] Dür W, Briegel H J 2002 *Phys. Rev. Lett.* **90** 067901
[3] Childress L, Taylor J M, Sørensen A S, Lukin M D 2005 *Phys. Rev. A* **72** 052330
[4] Jiang L, Taylor J M, Sørensen A S, Lukin M D 2007 *Phys. Rev. A* **76** 062323
[5] Gorshkov A V, Rey A M, Daley A J, Boyd M M, Ye J, Zoller P, Lukin M D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 110503
[6] Wineland D J, Drullinger R E, Walls F L 1978 *Phys. Rev. Lett.* **40** 1639
[7] Neuhauser W, Hohenstatt M, Toschek P E, Dehmelt H 1978 *Phys. Rev. Lett.* **41** 233
[8] Flury J 2016 *J. Phys. Conf. Ser.* **723** 012051
[9] Bregolin F, Milani G, Pizzocaro M, Rauf B, Thoumany P, Levi F, Calonico D 2017 *J. Phys. Conf. Ser.* **841** 012015
[10] Pihan-Le Bars H, Guerlin C, Bailey Q G, Bize S, Wolf P 2017 arXiv: 1701.06902[gr-qc]
[11] Roberts B M, Blewitt G, Dailey C, Murphy M, Pospelov M, Rollings A, Sherman J, Williams W, Derevianko A 2017 *Nat. Commun.* **8** 1195
[12] Bloom B J, Nicholson T L, Williams J R, Campbell S L, Bishof M, Zhang X, Zhang W, Bromley S L, Ye J 2014 *Nature* **506** 71
[13] Chou C W, Hume D B, Koelemeij J C J, Wineland D J, Rosenband T 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 070802
[14] Brewer S M, Chen J S, Hankin A M, Clements E R, Chou C W, Wineland D J, Hume D B, Leibrandt D R 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 033201
[15] Hinkley N, Sherman J A, Phillips N B, Schioppo M, Lemke N D, Beloy K, Pizzocaro M, Oates C W, Ludlow A D 2013 *Science* **341** 1215
[16] Brusch A, Le T R, Baillard X, Fouché M, Lemonde P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 103003
[17] Barbe Z W, Lemke J E, Polt N D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 103002
[18] Westergaard P G, Lodewyck J, Lorini L, Lecallier A, Burt E A, Zawada M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 210801
[19] Derevianko A, Katori H 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 331
[20] Katori H, Takamoto M, Pal'Chikov V G, Ovsiannikov V D 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 173005
[21] Porsev S G, Safronova M S, Safronova U I, Kozlov M G 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 063204
[22] Tang L Y, Zhang J Y, Yan Z C, Shi T Y, Babb J F, Mitroy J 2009 *Phys. Rev. A* **80** 042511
[23] Tang L Y, Yan Z C, Shi T Y, Babb J F 2014 *Phys. Rev. A* **90** 012524
[24] Tang L Y, Zhang J Y, Yan Z C, Shi T Y, Mitroy J 2010 *Phys. Rev. A* **81** 042521
[25] Safronova U I, Safronova M S 2013 *Phys. Rev. A* **87** 032502
[26] Fuentealba P, Reyes O 1993 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 2245
[27] Jiang J, Mitroy J, Cheng Y J, Bromley M W J 2016 *Phys. Rev. A* **94** 062514
[28] Mitroy J, Safronova M S, Clark C W 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 202001
[29] Safronova M S, Safronova U I, Clark C W 2012 *Phys. Rev. A* **86** 042505
[30] Yin D, Zhang Y H, Li C B, Gao K L, Shi T Y 2016 *Sci. China Phys. Mech.* **59** 690011
[31] Tang L Y, Yan Z C, Shi T Y, Babb J F 2009 *Phys. Rev. A* **79** 062712
[32] Stiehler J, Hinze J 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 4055
[33] Pipin J, Bishop D M 1992 *Phys. Rev. A* **45** 2736
[34] Maroulis G, Thakkar A J 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2439
[35] Nicolaides C A, Themelis S I 1993 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 2217
[36] Kaneko S 1977 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **10** 3347
[37] Mitroy J, Zhang J Y, Bromley M W J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 032512
[38] Bhatia A K, Drachman R J 1997 *Can. J. Phys.* **75** 11
[39] Johnson W R, Cheng K T 1996 *Phys. Rev. A* **53** 1375
[40] Bromley M W J, Mitroy J 2001 *Phys. Rev. A* **65** 012505
[41] Grant I P, Quiney H M 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022508
[42] Kramida A, Ralchenko Yu, Reader J NIST ASD Team https://physics.nist.gov/asd [2019-9-10]
[43] Adelman S A, Szabo A 1973 *J. Chem. Phys.* **58** 687
[44] Pipin J, Woźnicki W 1983 *Chem. Phys. Lett.* **95** 392
[45] Patil S H, Tang K T 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 2298
[46] Wang Z W, Chung K T 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** 855
[47] Chen C, Wang Z W 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 4171
[48] Wansbeek L W, Sahoo B K, Timmermans R G E, Das B P, Mukherjee D 2010 *Phys. Rev. A* **82** 029901
[49] Johnson W R, Safronova U I, Derevianko A, Safronova M S 2008 *Phys. Rev. A* **77** 022510
[50] Zhang J Y, Mitroy J, Bromley M W J 2007 *Phys. Rev. A* **75** 810
[51] Derevianko A, Babb J F, Dalgarno A 2001 *Phys. Rev. A* **63** 052704
[52] Cohen S, Themelis S. I. 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 3705
[53] Molof R W, Schwartz H L, Miller T M, Bederson B 1974 *Phys. Rev. A* **10** 1131
[54] Miffre A, Jacquet M, Büchner M, Trénec G, Vigué J 2006 *Eur. Phys. J D* **38** 353

Theoretical study of polarizabilities and hyperpolarizabilities of Be^+ ions and Li atoms*

Wang Ting Jiang Li Wang Xia Dong Chen-Zhong
Wu Zhong-Wen Jiang Jun †

(*College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou* 730070, *China*)

(Received 24 August 2020; revised manuscript received 12 October 2020)

Abstract

The wave functions, energy levels, and oscillator strengths of Be^+ ions and Li atoms are calculated by using a relativistic potential model, which is named the relativistic configuration interaction plus core polarization method (RCICP). The calculated energy levels in this work are in good agreement with experimental levels tabulated in NIST Atomic Spectra Database, and the difference appears in the sixth digit after the decimal point. The present oscillator strengths are in good agreement with the existing theoretical and experimental results. By means of these energy levels and oscillator strengths, the electric-dipole static polarizabilities and hyperpolarizabilities of the ground states are determined. The contributions of different intermediate states to the hyperpolarizabilities of the ground state are further discussed. For Be^+ ions, the present electric-dipole polarizability and hyperpolarizability are in good agreement with the results calculated by Hartree-Fock plus core polarization method, the finite field method and relativistic many-body method. The largest contribution to the hyperpolarizability is the term of $\alpha_0^1\beta_0$. For Li atoms, the present electric-dipole polarizability is in good agreement with the available theoretical and experimental results. However, the present hyperpolarizability is different from the other theoretical results significantly. Moreover, the hyperpolarizabilities calculated by different theoretical methods are quite different. The biggest difference is more than one order of magnitude. In order to explain the reason for these differences, we analyze the contributions of different intermediate states to the hyperpolarizability in detail. It is found that the sum of the contributions of the $2s\rightarrow np_j (n \geqslant 3)$ and $np_j\rightarrow nd_j (n \geqslant 3)$ to hyperpolarizability is approximately equal to that term of $\alpha_0^1\beta_0$. The total hyperpolarizability, which is the difference between the sum of the contributions of the $2s\rightarrow np_j (n \geqslant 3)$ and $np_j\rightarrow nd_j (n \geqslant 3)$ to hyperpolarizability and $\alpha_0^1\beta_0$, is relatively small. Consequently, this difference magnifies the calculated error. If the uncertainties of the transition matrix elements are less than 0.1%, the uncertainty of hyperpolarizability is more than 100%. Therefore, the differences of hyperpolarizabilities for the ground state of Li atoms, calculated by various theoretical methods, are more than 100% or one order of magnitude.

Keywords: electric-dipole polarizability, hyperpolarizability, Be^+ ions, Li atoms, the relativistic model potential method

PACS: 31.15.ac, 31.15.ap **DOI:** 10.7498/aps.70.20201386

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0402300) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11774292, 11804280, 11864036).

† Corresponding author. E-mail: phyjiang@yeah.net