

## 类锂离子体系自旋四重态费米接触项的精密计算\*

魏向杰<sup>1)</sup> 孙邓<sup>1)</sup> 王黎明<sup>1)†</sup> 严宗朝<sup>2)</sup>

1) (河南师范大学物理学院, 新乡 453007)

2) (Department of Physics, University of New Brunswick, Fredericton E3B 5A3, Canada)

(2022年5月10日收到; 2022年6月22日收到修改稿)

费米接触项与原子超精细结构常数有密切关系, 往往对原子能级的超精细劈裂起主要贡献. 波函数在原点处的行为以及电子之间的关联效应是影响费米接触项计算精度的两个主要因素. 对于一般的原子体系来说, 费米接触项的高精度计算不是一件容易的工作. 本文利用 Hylleraas 坐标下的 Rayleigh-Ritz 变分法求解了锂原子和类锂离子体系 ( $Z = 4-10$ ) 自旋四重态  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  和  $1s2s2p\ ^4P$  的薛定谔方程, 得到的非相对论变分能量收敛精度达到  $10^{-13}$ . 根据所得到的高精度变分波函数, 计算了这些体系的费米接触项, 并研究了原子核的有限质量对结果的影响. 费米接触项的精度达到了  $10^{-10}$ . 本文结果可以作为其他理论方法的参考基准, 同时也为相关的实验研究提供了参考数据.

**关键词:** 类锂离子, 费米接触项, Hylleraas 坐标, 变分法

**PACS:** 31.15.ac, 31.15.aj, 31.15.xt

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220923

## 1 引言

一直以来, 少电子原子分子体系 (氢原子、氦原子、氢分子离子等) 的精密光谱研究为检验基本物理理论、测定基本物理常数 (里德伯常数  $R_\infty$ 、精细结构常数  $\alpha$  等)、确定原子核的电荷分布半径和磁矩分布半径等提供了有效的方法<sup>[1-4]</sup>. 锂原子以及类锂的铍离子 ( $\text{Be}^+$ ) 作为三电子原子体系, 受到了理论和实验研究者的广泛关注. 锂原子精密光谱的一个重要应用是确定原子核的性质, 如核电核分布半径和磁矩分布半径 (Zemach 半径) 等. 例如, Yan 和 Drake<sup>[5]</sup> 发展了锂原子能级的精密计算理论和方法. 根据他们的方法, 锂原子最低的三个能级 (2S, 3S 和 2P) 间的跃迁频率的同位素移动的高精度理论计算值和实验值的对比被用于确定锂原子核同位素的电荷分布半径, 特别是具有“晕核”结

构的  $^7\text{Li}$  的电荷分布半径<sup>[4]</sup> (这里的电荷分布半径指的是相对于某个电荷半径为已知的同位素的相对电荷分布半径, 目前的理论计算值的精度还不足以确定锂原子核的绝对电荷分布半径). 对于铍离子 ( $\text{Be}^+$ ), 也有类似的应用<sup>[4]</sup>. Puchalski 和 Pachucki<sup>[6]</sup> 则发展了锂原子超精细结构的高精度计算理论和方法, 根据他们计算的锂原子基态的超精细结构劈裂理论值与实验值的比较发现,  $^7\text{Li}$  原子核的 Zemach 半径比  $^6\text{Li}$  的大 40%, 为原子核结构的研究提出了一个重要的问题. 最近, 基于锂离子 ( $\text{Li}^+$ ) 的超精细结构的研究也得到了相似的结论<sup>[7]</sup>.

超精细结构是原子精密谱研究的一个重要内容. 对于原子体系的磁偶极超精细结构来说, 其最主要的来源是费米接触相互作用. 因此, 要想得到高精度的超精细结构劈裂, 必须要把费米接触项计算到足够高的精度<sup>[6,7]</sup>. 对于类氢原子体系, 费米接触项 (Fermi contact term,  $f_c$ ) 可以由解析计算获

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11774080) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wlm@whu.edu.cn

得; 而对于含有两个电子或更多电子的原子体系,  $f_c$  只能通过数值计算得到, 其数值精度严重依赖波函数在原点处的质量. 除此之外, 电子间的关联效应也会对  $f_c$  产生重要影响. 通过使用全局化方法<sup>[8,9]</sup>, 可以降低  $f_c$  对波函数在原点附近行为的依赖性; 而通过使用 Hylleraas 型变分波函数, 则可以充分照顾到电子关联效应对  $f_c$  的影响<sup>[10]</sup>. 目前, 利用全局化方法和 Hylleraas 变分波函数, 锂原子基态 ( $1s^2 2s^2 S$ ) 非相对论  $f_c$  的理论计算值的精度已经达到了  $10^{-8}$ <sup>[6,11]</sup>; 对于锂原子的其他几个较低的自旋双重态,  $f_c$  的值也可以达到很高的精度<sup>[11]</sup>. 对于锂原子的自旋四重态, Yan<sup>[12]</sup> 用 Hylleraas 变分波函数计算了  $1s2s3s^4 S$ ,  $1s2s4s^4 S$  和  $1s2s5s^4 S$  这三个态的  $f_c$ , 精度高达  $10^{-8}$ ; King<sup>[13]</sup> 也做了类似的计算 (包括  $1s2s6s^4 S$ ), 但是与 Yan 的结果相比, 精度稍差. Zhuo 及其合作者<sup>[14,15]</sup> 用组态相互作用方法计算了类锂离子体系 ( $Z = 7-10$ ) 几个较低的自旋四重 P 态 ( $1snlnl'^4 P^o$  和  $1s2pnp^4 P$ ) 的费米接触项以及其他超精细结构常数. 对于  $f_c$ , 他们的结果的精度在  $10^{-5}$  (通过和本研究小组的结果对比而发现). 本文对锂原子及类锂离子体系 ( $Z = 4-10$ ) 的  $1s2s3s^4 S$ ,  $1s2s4s^4 S$  和  $1s2s2p^4 P$  的费米接触项做了计算, 一方面弥补了在  $Z = 4-6$  这个区域中相关数据的缺失; 另一方面, 对于文献上已有的结果, 在精度上有明显的提高 (1—3 个量级). 除此之外, 还研究了原子核的有限质量对  $f_c$  的影响. 本文所有  $f_c$  的精度都在  $10^{-10}$  以上, 可以作为其他计算方法的基准, 同时也为相关的实验研究提供了有价值的参考数据.

## 2 理论方法

### 2.1 非相对论哈密顿量

在质心坐标系中, 三电子原子体系的非相对论哈密顿量为<sup>[16]</sup> (本文使用原子单位, 即  $\hbar = e = m_e = 1$ )

$$H = \sum_{i=1}^3 \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j}^3 \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\mu}{M} \sum_{i<j}^3 \nabla_i \cdot \nabla_j, \quad (1)$$

其中,  $M$  代表原子核的质量,  $\mu = m_e M / (m_e + M)$  代表电子的折合质量. (1) 式中能量的单位是  $2R_M$ , 而  $R_M = (1 - \mu/M)R_\infty$ . 原子核的有限质量对能量的影响通过能量单位  $2R_M$  (normal mass shift) 和 (1) 式中的最后一项 (specific mass shift) 体现出来.

### 2.2 三电子体系 Hylleraas 型变分波函数

本文使用瑞利-李兹变分法求解体系的薛定谔方程, 选择三电子体系的 Hylleraas 型基函数构造变分波函数. Hylleraas 型基函数是目前求解两电子和三电子原子体系薛定谔方程的精度最高的基函数<sup>[17]</sup>. 把体系的变分波函数做如下展开:

$$\psi = \sum_{i=1}^N c_i \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (2)$$

而

$$\Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \mathcal{A}[\phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)\chi(1, 2, 3)], \quad (3)$$

其中,  $\mathcal{A}$  表示三电子体系的反对称化算符,  $\phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  表示基函数的轨道部分:

$$\phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = r_1^{j_1} r_2^{j_2} r_3^{j_3} r_{12}^{j_{12}} r_{23}^{j_{23}} r_{31}^{j_{31}} e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_3} \mathcal{Y}_{(l_1 l_2) l_{12}, l_3}^{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (4)$$

而

$$\begin{aligned} & \mathcal{Y}_{(l_1 l_2) l_{12}, l_3}^{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \\ &= r_1^{l_1} r_2^{l_2} r_3^{l_3} \sum_{all m_i} \langle l_1 m_1; l_2 m_2 | l_{12} l_2; l_{12} m_{12} \rangle \langle l_{12} m_{12}; l_3 m_3 | l_{12} l_3; LM \rangle Y_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) Y_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) Y_{l_3 m_3}(\mathbf{r}_3), \end{aligned} \quad (5)$$

表示三个角动量函数耦合出的基函数的角向部分;  $\chi(1, 2, 3)$  表示自旋函数, 对于自旋四重态 ( $S = 3/2$ ,  $M_S = 3/2$ ), 有

$$\chi(1, 2, 3) = \alpha(1)\alpha(2)\alpha(3). \quad (6)$$

使用 (2) 式的变分波函数, 根据瑞利-李兹变分法<sup>[17]</sup>, 可以得到广义本征值方程:

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{O}\mathbf{c}, \quad (7)$$

其中  $\mathbf{H}$  和  $\mathbf{O}$  分别表示哈密顿矩阵和交叠矩阵. 求解广义本征值方程 (7), 即可得到体系的能量本征值和本征波函数的最佳近似值. 为了提高变分能量的收敛率, 参考 Yan 的方法<sup>[12]</sup>, 根据以下条件把变分基底分为 5 组:

$$\begin{aligned}
 \text{sector1 : } & \text{all } j_{12}, \quad j_{23} = 0, \quad j_{31} = 0; \\
 \text{sector2 : } & \text{all } j_{12}, \quad j_{23} = 0, \quad j_{31} \neq 0; \\
 \text{sector3 : } & \text{all } j_{12}, \quad j_{23} \neq 0, \quad j_{31} = 0; \\
 \text{sector4 : } & j_{12} = 0, \quad j_{23} \neq 0, \quad j_{31} \neq 0; \\
 \text{sector5 : } & j_{12} \neq 0, \quad j_{23} \neq 0, \quad j_{31} \neq 0. \quad (8)
 \end{aligned}$$

每组基底的规模用下面的条件控制:

$$j_1 + j_2 + j_3 + j_{12} + j_{23} + j_{31} \leq \Omega_i, \quad (9)$$

其中,  $j_\mu$ ,  $j_{\mu\nu}$  和  $\Omega_i$  均取非负整数.

### 2.3 费米接触项与全局化方法

费米接触项的定义为

$$f_c = 4\pi \left\langle \psi \left| \sum_{i=1}^3 \delta(\mathbf{r}_i) \sigma_{iz} \right| \psi \right\rangle, \quad (10)$$

其中  $\sigma_z$  是泡利矩阵. 从 (10) 式可知,  $f_c$  的数值精度对体系波函数在坐标原点处的取值有比较强的依赖关系, 这在数值计算中是不利的. 为了克服这一缺点, Hiller 及其合作者以及 Drachman 发展了“全局化方法”<sup>[8,9]</sup>. 本文采用 Drachman 的全局化方法<sup>[9]</sup>, 其主要思想是用一个等价的表达式代替  $\delta$  函数的期望值, 即

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \delta(\mathbf{r}_i) | \psi \rangle &= -\frac{1}{\pi} \left\langle \psi \left| \frac{1}{r_i} (V_d - E) \right| \psi \right\rangle \\
 &\quad - \frac{1}{2\pi} \sum_{s=1}^3 \left\langle \nabla_s \psi \left| \frac{1}{r_i} \right| \nabla_s \psi \right\rangle, \quad (11)
 \end{aligned}$$

其中

$$V_d = -\sum_{i=1}^3 \frac{Z}{r_i} + \sum_{i<j}^3 \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\mu}{M} \sum_{i<j}^3 \nabla_i \cdot \nabla_j. \quad (12)$$

不难发现, 利用全局化方法计算得到的  $f_c$  比直接使用定义 (10) 式计算在精度上可以提高 1—2 个量级.

## 3 结果与讨论

使用 2.2 节中描述的变分基底, 首先用瑞利-李兹变分法求解锂原子和类锂离子体系 ( $Z = 4-10$ ) 的  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  和  $1s2s2p\ ^4P$  的薛定谔方程, 得到了这些体系的变分能量和变分波函数. 把变分基底的规模从  $N = 210$  ( $N$  表示基函数的数目) 逐步扩大到  $N = 27130$ , 在每一组基底, 用牛顿法对 5 组非线性参数进行充分优化, 以得到尽可能低的变分能量. 在  $N < 10000$  的情况下, 优化参数能够带来比较明显的效果, 但是, 随着变分基底

的进一步增大, 优化参数带来的能量降低很有限. 这时, 主要靠增大基底的规模带来能量的进一步降低.

表 1 列出了锂原子  $1s2s3s\ ^4S$  态的变分能量 (原子核质量取为无穷大) 在不同基底下的值, 从收敛序列可以确认变分能量的收敛精度达到了  $10^{-13}$ . 对于其他两个态, 变分能量也达到了相似的精度. 表 2 列出了从锂原子到  $\text{Ne}^{7+}$  离子的  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  和  $1s2s2p\ ^4P$  的变分能量, 并与文献上已有的结果进行了对比. 相较于 Yan<sup>[12]</sup> 的结果, 本研究组的结果在精度上提高了 1—3 个量级; 相较于 Barrois 等<sup>[18]</sup> 的结果, 则提高了 5—6 个量级. 精度提高的主要原因是使用了更多的变分基函数.

表 1 锂原子  $1s2s3s\ ^4S$  态的非相对论变分能量的收敛情况, 核质量取为无穷大

Table 1. Study of the convergence of nonrelativistic variational energies of the  $1s2s3s\ ^4S$  state of lithium atom, suppose the mass of the nucleus is infinite.

$\Omega$	Number of terms	$E(\Omega)$ /a.u.	$R(\Omega)$
4	210	-5.212 747 426 455 68	
5	462	-5.212 748 209 017 03	
6	924	-5.212 748 244 064 12	22.33
7	1716	-5.212 748 246 979 61	12.02
8	3003	-5.212 748 247 204 70	12.95
9	5000	-5.212 748 247 216 73	18.71
10	8000	-5.212 748 247 223 54	1.77
11	12370	-5.212 748 247 224 70	5.87
12	18560	-5.212 748 247 224 71	89.09
13	27130	-5.212 748 247 224 84	0.10
$\infty$		-5.212 748 247 224 8(2)	
Yan <sup>[19]</sup>	$\infty$	-5.212 748 247 225(5)	
King <sup>[13]</sup>	1904	-5.212 748 246 6	

表 1 和表 2 中的变分能量都是在原子核质量取无穷大的假设下得到的, 即在方程 (1) 中取  $\mu/M = 0$ . 对于原子核质量取有限值的情况, 可以通过直接对角化方程 (1) 中的哈密顿量来得到体系的能量, 也可以用微扰法来处理有限核质量带来的影响, 即把方程 (1) 中的最后一项当作微扰算符来处理. 为了得到各种同位素的能量, 使用计算公式  $E_M = \epsilon_0 + (\epsilon_0 + \epsilon_1) \lambda + (\epsilon_1 + \epsilon_2) \lambda^2 + (\epsilon_2 + \epsilon_3) \lambda^3 + \dots$ , (13)

其中,  $E_M$  表示核质量为  $M$  的同位素的变分能量;  $\epsilon_0$  表示核质量取无穷大时体系系的能量;  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  和

$\epsilon_3$  分别表示一阶、二阶和三阶质量极化系数;  
 $\lambda = -\mu/M$ . 质量极化系数可以通过微扰论计算得  
 到. 用微扰论计算了一阶、二阶和三阶质量极化系

数, 数据列于表 3. 根据表 2 和表 3 中的数据, 只要  
 知道了核质量, 就可以根据方程 (13) 计算出该同  
 位素的非相对论能量.

表 2 类锂离子体系  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  和  $1s2s2p\ ^4P$  态的非相对论能量, 核质量取为无穷大 (原子单位)

Table 2. Nonrelativistic energies of the  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  and  $1s2s2p\ ^4P$  states of lithium-like ions, suppose the mass of the nucleus is infinite (in a.u.).

Ion	$1s2s3s\ ^4S$	$1s2s4s\ ^4S$	$1s2s2p\ ^4P$
Li	-5.212 748 247 224 8(2) -5.212 748 247 225(5) <sup>a</sup>	-5.158 393 473 137 2(4) -5.158 393 473 2(2) <sup>a</sup>	-5.368 010 154 030 5(2) -5.368 010 153 9(2) <sup>a</sup>
Be <sup>+</sup>	-9.619 844 613 890 47(2) -9.619 844 58(3) <sup>b</sup>	-9.462 507 112 198 5(2) -9.462 507 0(2) <sup>b</sup>	-10.066 652 477 404 7(4) -10.066 652(4) <sup>c</sup>
B <sup>2+</sup>	-15.389 482 739 000 99(1) -15.389 482 7(0) <sup>b</sup>	-15.136 079 140 469(2) -15.136 078(8) <sup>b</sup>	-16.267 610 175 163 7(4) -16.267 610(1) <sup>c</sup>
C <sup>3+</sup>	-22.520 800 619 349 34(1) -22.520 800 5(8) <sup>b</sup>	-22.194 572 767 231(2) -22.194 572(4) <sup>b</sup>	-23.969 555 014 323 5(3) -23.969 555(0) <sup>c</sup>
N <sup>4+</sup>	-31.013 515 458 020 68(2) -31.013 515 4(3) <sup>b</sup>	-30.615 962 427 558(2) -30.615 962(2) <sup>b</sup>	-33.172 011 265 984 3(3) -33.172 011(2) <sup>c</sup>
O <sup>5+</sup>	-40.867 505 629 631 74(1) -40.867 505 5(9) <sup>b</sup>	-40.399 023 507 082(4) -40.399 023(2) <sup>b</sup>	-43.874 766 296 947 8(4) -43.874 766(2) <sup>c</sup>
F <sup>6+</sup>	-52.082 709 993 193 28(2) -52.082 709 9(6) <sup>b</sup>	-51.543 484 487 834(1) -51.543 484(2) <sup>b</sup>	-56.077 710 886 696 3(4) -56.077 710(8) <sup>c</sup>
Ne <sup>7+</sup>	-64.659 094 417 708 25(1) -64.659 094 3(8) <sup>b</sup>	-64.049 233 634 687(2) -64.049 233(3) <sup>b</sup>	-69.780 783 217 935 2(2) -69.780 783(2) <sup>c</sup>

注: a, 文献[19]; b, 文献[18]; c, 文献[20].

表 3 类锂离子体系  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  和  $1s2s2p\ ^4P$  态的质量极化系数 (原子单位)

Table 3. Mass polarization coefficients of the  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  and  $1s2s2p\ ^4P$  states of lithium-like ions (in a.u.).

Ion	$\epsilon_1$	$\epsilon_2$	$\epsilon_3$
	$1s2s3s\ ^4S$		
Li	-0.019 098 689 45(3)	-0.346 258 57(4)	0.174 909 1(5)
Be <sup>+</sup>	-0.028 190 435 40(2)	-0.865 722 62(2)	0.897 689 5(2)
B <sup>2+</sup>	-0.033 290 376 39(3)	-1.642 090 43(4)	2.614 098 9(2)
C <sup>3+</sup>	-0.034 289 481 61(2)	-2.698 194 80(6)	5.879 648 9(1)
N <sup>4+</sup>	-0.031 162 328 61(2)	-4.056 337 23(2)	11.361 993 82(3)
O <sup>5+</sup>	-0.023 902 016 05(6)	-5.738 638 37(2)	19.842 156(2)
F <sup>6+</sup>	-0.012 506 894 13(5)	-7.767 142 43(4)	32.215 000(3)
Ne <sup>7+</sup>	0.003 023 055 68(3)	-10.163 856 84(2)	49.489 432 4(2)
	$1s2s4s\ ^4S$		
Li	-0.018 619 468 74(3)	-0.272 708 10(3)	0.061 978 4(3)
Be <sup>+</sup>	0.035 099 392 18(3)	-2.306 028 72(2)	35.296 396(2)
B <sup>2+</sup>	1.242 706 153 8(3)	-5.493 869 41(3)	-41.733 915(2)
C <sup>3+</sup>	2.125 081 744 6(3)	-5.285 653 44(3)	-13.261 767 4(3)
N <sup>4+</sup>	3.138 461 490 6(2)	-6.795 076 43(3)	-15.010 263 8(2)
O <sup>5+</sup>	4.330 570 648 1(3)	-8.699 185 86(2)	-22.191 657 9(2)
F <sup>6+</sup>	5.707 148 244 9(2)	-10.854 895 13(2)	-33.822 354 0(1)
Ne <sup>7+</sup>	7.269 691 423 1(3)	-13.212 273 43(5)	-50.532 032(2)
	$1s2s2p\ ^4P$		
Li	0.197 556 864 869(4)	-0.743 722 190(3)	0.462 807 90(2)
Be <sup>+</sup>	0.532 973 840 148(7)	-1.776 435 078(2)	1.072 866 24(5)
B <sup>2+</sup>	1.026 077 002 714(1)	-3.219 212 106(3)	1.903 522 30(1)
C <sup>3+</sup>	1.675 951 877 937(6)	-5.070 384 099(3)	2.956 052 91(3)
N <sup>4+</sup>	2.482 252 239 327(2)	-7.329 612 081(3)	4.231 693 02(2)
O <sup>5+</sup>	3.444 825 571 973(3)	-9.996 821 053(2)	5.731 157 12(2)
F <sup>6+</sup>	4.563 595 540 943(6)	-13.071 999 313(5)	7.454 857 77(5)
Ne <sup>7+</sup>	5.838 520 069 099(5)	-16.555 151 141(2)	9.403 043 87(2)

根据变分法得到的高精度波函数以及方程 (10) 和方程 (11), 即可得到  $f_c$  的数值. 表 4 列出了锂原子的  $f_c$  随基底逐渐增大而收敛的情况. 根据收敛序列, 可以确定  $f_c$  的收敛精度达到了  $10^{-10}$ . 表 5 列出的是从锂原子到  $\text{Ne}^{7+}$  三个最低的自旋四重态的  $f_c$ . 这些结果的收敛精度普遍达到了  $10^{-10}$ . 与早期使用 Hylleraas 变分波函数计算的锂原子费米接触项 [12,21] 相比, 本研究组的结果在精度上提高了 2—5 个量级. 精度提高的原因有两点: 一是在变分波函数中包括了更多的基函数; 二是使用了 Drachman 全局化方法 [9], 这种方法有利于加速结果的收敛. 通过比较 Zhuo 等 [14,15] 使用组态相互作用方法计算的  $\text{N}^{4+}$ ,  $\text{O}^{5+}$ ,  $\text{F}^{6+}$  和  $\text{Ne}^{7+}$  的  $1s2s2p\ 4P$  态的费米接触项, 发现他们的结果的精度在  $10^{-5}$  左右.

表 4 和表 5 中的  $f_c$  是在核质量取无穷大的情况下得到的, 与核的有限质量对变分能量的影响类似, 核的有限质量对  $f_c$  的影响也可以通过质量极化系数表示为

$$f_c^M = f_c^0 + (3f_c^0 + f_c^1) \lambda, \quad (14)$$

其中,  $f_c^0$  表示无穷大核质量情况下计算得到的费米接触项,  $f_c^M$  表示有限核质量下的费米接触项,  $f_c^1$  表示费米接触项的一阶质量极化系数. 方程 (14) 精确到  $O(\lambda)$ . 计算得到的费米接触项的一阶质量极化系数列于表 6. 根据表 5 和表 6 所列的数据可以看出, 原子核的有限质量对  $f_c$  的影响主要来自于  $3f_c^0\lambda$ , 即 normal mass shift, 质量极化效应  $f_c^1\lambda$  的影响相对来说要小很多.

表 5 类锂离子体系  $1s2s3s\ 4S$ ,  $1s2s4s\ 4S$  和  $1s2s2p\ 4P$  态的费米接触项, 核质量取为无穷大

Table 5. Fermi contact terms of  $1s2s3s\ 4S$ ,  $1s2s4s\ 4S$  and  $1s2s2p\ 4P$  states of lithium-like ions, suppose the mass of the nucleus is infinite.

Ion	$f_c$ / a.u.		
	$1s2s3s\ 4S$	$1s2s4s\ 4S$	$1s2s2p\ 4P$
Li	114.945 821 01(3) 114.945 823(2) <sup>a</sup>	114.756 210 17(5) 114.756 21(2) <sup>a</sup>	112.298 053(6) 112.269 8 <sup>b</sup>
$\text{Be}^+$	277.186 422 61(3)	273.548 196 54(2)	270.128 559(2)
$\text{B}^{2+}$	547.507 013 93(5)	498.901 685 71(3)	533.170 916(3)
$\text{C}^{3+}$	953.552 047 46(4)	859.720 632 46(5)	928.427 902(4)
$\text{N}^{4+}$	1522.968 426 9(2)	1366.477 417 5(2)	1482.900 739(3) 1482.85 <sup>c</sup>
$\text{O}^{5+}$	2283.403 624 4(2)	2042.089 145 6(3)	2223.589 964(6) 2223.711 <sup>d</sup>
$\text{F}^{6+}$	3262.505 305 2(2)	2910.646 989 8(5)	3177.495 846(5) 3177.40 <sup>c</sup>
$\text{Ne}^{7+}$	4487.921 213 6(2)	3996.354 065 8(2)	4371.618 515(2) 4371.347 <sup>d</sup>

注: a, 文献[12]; b, 文献[21]; c, 文献[15]; d, 文献[14].

表 4 锂原子  $1s2s3s\ 4S$  态的费米接触项的收敛情况, 核质量取为无穷大

Table 4. Study of the convergence of nonrelativistic variational energies of the  $1s2s3s\ 4S$  state of lithium atom, suppose the mass of the nucleus is infinite.

$\Omega$	Number of terms	$f_c$ / a.u.	$R(\Omega)$
4	210	114.945 400 79	
5	462	114.945 834 87	
6	924	114.945 803 15	-13.68
7	1716	114.945 820 05	-1.88
8	3003	114.945 821 97	8.78
9	5000	114.945 821 19	-2.45
10	8000	114.945 820 99	4.04
11	12370	114.945 821 02	-7.78
12	18560	114.945 821 02	8.02
13	27130	114.945 821 01	-0.26
$\infty$		114.945 821 01(3)	
Yan <sup>[12]</sup>	$\infty$	114.945 823(2)	
King <sup>[13]</sup>	1904	114.945 79	

## 4 结 论

本文利用 Hylleraas 坐标下的瑞利-李兹变分法对锂原子及类锂离子 ( $Z = 4-10$ ) 的自旋四重态  $1s2s3s\ 4S$ ,  $1s2s4s\ 4S$  和  $1s2s2p\ 4P$  的非相对论薛定谔方程进行了高精度求解, 得到的变分能量的精度达到了  $10^{-13}$ , 并给出了变分能量的一阶、二阶和三阶质量极化系数. 与文献上已有的结果相比, 本文的结果在精度上提高了 1—6 个数量级. 使用高精度的变分波函数, 计算了这些态的费米接触项,

表 6 类锂离子  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  和  $1s2s2p\ ^4P$  态的费米接触项的一阶质量极化系数

Table 6. First-order mass polarization coefficients of Fermi contact terms of  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  and  $1s2s2p\ ^4P$  states of lithium-like ions.

Ion	一阶质量极化系数 $f_c^1/a.u.$		
	$1s2s3s\ ^4S$	$1s2s4s\ ^4S$	$1s2s2p\ ^4P$
Li	1.895 4(2)	0.790 2(5)	4.832 8(3)
Be <sup>+</sup>	9.284 0(3)	103.777(2)	13.732(1)
B <sup>2+</sup>	27.430 7(2)	154.971(2)	28.485(4)
C <sup>3+</sup>	63.325 0(3)	41.512(2)	50.36(3)
N <sup>4+</sup>	125.663(3)	-0.590 2(3)	80.68(2)
O <sup>5+</sup>	224.854(2)	-60.458(4)	120.73(3)
F <sup>6+</sup>	373.014(2)	-156.223(3)	171.84(2)
Ne <sup>7+</sup>	583.972(2)	-302.256(5)	235.29(2)

$f_c$ 的精度达到了  $10^{-10}$ , 是目前已有结果中最精确的. 本文的结果可以作为其他计算方法参照的基准, 也为以后要开展的相对论修正和 QED 修正计算工作打下了基础, 同时也为相关的实验研究提供了有价值的参考数据.

### 参考文献

[1] Lamb W E, Retherford R C 1947 *Phys. Rev.* **72** 241  
 [2] Tiesinga E, Mohr P J, Newell D B, Taylor B N 2021 *Rev.*

*Mod. Phys.* **93** 025010  
 [3] Pachucki K, Yerokhin V A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 070403  
 [4] Lu Z T, Mueller P, Drake G W F, Nörtershäuser W, Pieper S C, Yan Z C 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1383  
 [5] Yan Z C, Nörtershäuser W, Drake G W F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 243002  
 [6] Puchalski M, Pachucki K 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 243001  
 [7] Qi X Q, Zhang P P, Yan Z C, Drake G W F, Zhong Z X, Shi T Y, Chen S L, Huang Y, Guan H, Gao K L 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 183002  
 [8] Hiller J, Sucher J, Feinberg G 1978 *Phys. Rev. A* **18** 2399 (Errata 1980 *Phys. Rev. A* **22** 2293; 1979 *Phys. Rev. A* **20** 378)  
 [9] Drachman R 1981 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 2733  
 [10] Yan Z C, McKenzie D, Drake G W F 1996 *Phys. Rev. A* **54** 1322  
 [11] Wang L M, Yan Z C, Qiao H X, Drake G W F 2012 *Phys. Rev. A* **85** 052513  
 [12] Yan Z C 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 3569  
 [13] King F W 2013 *Int. J. Quantum Chem.* **113** 2534  
 [14] Zhuo L, Gou B C, Zhu J J 2009 *Eur. Phys. J. D.* **54** 1  
 [15] Zhuo L, Chen F, Gou B C 2010 *Int. J. Quantum Chem.* **110** 1108  
 [16] Drake G W F 2006 *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics* (New York: Springer Science & Business Media) pp199-219  
 [17] Wang L M, Zhou W P, Yan Z C 2021 *Sci. Sin-Phys. Mech. Astron.*, **51** 074203 (in Chinese) [王黎明, 周挽平, 严宗朝 2021 中国科学: 物理学 力学 天文学 **51** 074203]  
 [18] Barrois R, Lüchow A, Kleindienst H 1996 *Chem. Phys. Lett.* **249** 249  
 [19] Yan Z C 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 2093  
 [20] Barrois R, Bekavac S, Kleindienst H 1997 *Chem. Phys. Lett.* **268** 531  
 [21] Glass R 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** 3469

# High precision calculations of Fermi contact term for lithium-like ions<sup>\*</sup>

Wei Xiang-Jie<sup>1)</sup> Sun Deng<sup>1)</sup> Wang Li-Ming<sup>1)†</sup> Yan Zong-Chao<sup>2)</sup>

1) (*School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China*)

2) (*Department of Physics, University of New Brunswick, Fredericton E3B 5A3, Canada*)

( Received 10 May 2022; revised manuscript received 22 June 2022 )

## Abstract

The Fermi contact term is closely related to the atomic hyperfine constants. It often dominates the hyperfine splittings. The quality of the wave function near the origin and the correlation effect between electrons are two main factors which affect the numerical accuracy of the Fermi contact term. It is not an easy task to compute the Fermi contact term with high precision for a general atom. In the present paper, the Schrödinger equations of the  $1s2s3s\ ^4S$ ,  $1s2s4s\ ^4S$  and  $1s2s2p\ ^4P$  states of lithium atom and lithium-like ions ( $Z = 4-10$ ) are solved by using Rayleigh-Ritz variational method in Hylleraas coordinates. The variational energies-energy converges to an accuracy of  $10^{-13}$ . Then the Fermi contact terms for these states are calculated based on the high precision variation wave functions. In particular, the Drachman global method are adopted in order to improve the convergence of the Fermi contact term. The effect of finite nuclear mass on Fermi contact term, i.e. the first-order mass polarization coefficient is also calculated. The Fermi contact term converges to an accuracy of  $10^{-10}$ , which is the most accurate result at present. Our results can be used as a reference for other theoretical methods or relevant experimental studies.

**Keywords:** lithium-like ions, Fermi contact term, Hylleraas coordinates, variational method

**PACS:** 31.15.ac, 31.15.aj, 31.15.xt

**DOI:** [10.7498/aps.71.20220923](https://doi.org/10.7498/aps.71.20220923)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11774080).

† Corresponding author. E-mail: [wlm@whu.edu.cn](mailto:wlm@whu.edu.cn)



## 类锂离子体系自旋四重态费米接触项的精密计算

魏向杰 孙邓 王黎明 严宗朝

### High precision calculations of Fermi contact term for lithium-like ions

Wei Xiang-Jie Sun Deng Wang Li-Ming Yan Zong-Chao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 203101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220923

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220923>

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

#### InAlN/GaN异质结二维电子气波函数的变分法研究

Variational study of the 2DEG wave function in InAlN/GaN heterostructures

物理学报. 2018, 67(2): 027303 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171827>

#### 非扩散洛伦兹系统的周期轨道

Periodic orbits of diffusionless Lorenz system

物理学报. 2018, 67(24): 240501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181581>

#### 低差分模式群时延少模光纤的变分法分析及优化

Analysis and optimization of few-mode fibers with low differential mode group delay by variational method

物理学报. 2022, 71(9): 094206 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212198>

#### 一维谐振子束缚的自旋轨道耦合玻色气体

One-dimensional spin-orbit coupling Bose gases with harmonic trapping

物理学报. 2019, 68(17): 173201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190143>

#### 一种求解锂离子电池单粒子模型液相扩散方程的新方法

A new method to solve electrolyte diffusion equations for single particle model of lithium-ion batteries

物理学报. 2022, 71(4): 048201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211619>

#### 基于电化学老化衰退模型的锂离子动力电池外特性

External characteristics of lithium-ion power battery based on electrochemical aging decay model

物理学报. 2022, 71(3): 038803 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211401>