

$^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子动力学电偶极极化率的高精度计算*

吴芳菲¹⁾ 施皓天²⁾ 戚晓秋^{3)†} 左娅妮^{4)5)‡}

1) (中国计量大学理学院, 杭州 310018)

2) (中国计量大学计量测试与仪器学院, 杭州 310018)

3) (浙江理工大学理学院, 杭州 310018)

4) (中国计量科学研究院, 时间频率研究所, 北京 100029)

5) (国家市场监督管理总局重点实验室(时间频率与重力计量基准), 北京 100029)

(2025年7月21日收到; 2025年8月25日收到修改稿)

作为典型的单中子晕核, ^{11}Be 在原子及核物理研究中具有独特的意义. 本文针对类氦 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子, 采用相对论组态相互作用方法, 高精度计算了主量子数最高达 $n=8$ 的 $n^3\text{S}_1$ 和 $n^3\text{P}_{0,1,2}$ 态的能量与波函数. 通过将有限核质量修正算符直接引入 Dirac-Coulomb-Breit 哈密顿量, 使计算能够同时考虑相对论效应和质量相关修正. 基于计算的高精度能量与波函数, 本文进一步确定了 $k^3\text{S}_1 \rightarrow m^3\text{P}_{0,1,2}$ ($k \leq 5, m \leq 8$) 电偶极跃迁的振子强度, 精度达 3—6 位有效数字. 此外, 利用态求和法计算了 $n'^3\text{S}_1$ ($n' \leq 5$) 态在宽光子频率范围内的动力学电偶极极化率, 在远离共振位置处结果最高可达 10^{-6} 精度水平. 上述高精度计算结果为 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子在高精度测量中涉及的斯塔克频移评估以及光与物质相互作用的模拟等方面提供了重要的理论依据和关键输入参数.

关键词: 极化率, 相对论组态相互作用, 类氦铍离子

PACS: 31.15.ac, 31.15.ap, 32.10.Dk

DOI: 10.7498/aps.74.20250972

CSTR: 32037.14.aps.74.20250972

1 引言

原子极化率是描述原子中电子云对外场响应能力的重要物理量, 反映了原子内部结构和电子云分布的特征, 已成为现代原子物理研究中的关键参数之一. 通过高精度的实验测量和理论计算确定的原子极化率, 在推动精密光谱学的发展、实现原子的激光冷却与捕获以及提升原子钟的精度等方面具有重要意义^[1,2]. 例如, 利用魔幻波长下原子两个能级极化率相等的特性, 可以构建光学偶极陷阱, 消除斯塔克频移的领头项, 从而显著提高光钟的精

度^[3,4]. 此外, 极化率在计算原子间或原子与表面间的长程相互作用系数时起着关键作用^[5,6], 直接影响气体的介电常数和频率相关的折射率^[1].

氦及类氦离子作为最简单的多电子系统, 在原子结构研究和原子核结构探索中具有重要意义. 目前, 这些系统的理论计算和实验测量均已达到较高的精度^[7-14]. 在极化率方面, 氦及类氦离子体系都有着重要应用. 例如, 氦原子基态的动力学极化率已被提出作为一种新型压力标准的基础, 有望超越传统汞柱法的精度^[15]. 此外, 幻零波长——某些特定原子态动力学极化率为零时对应的波长——可以从非能量角度检验原子结构理论^[16], 理论预言

* 国家自然科学基金(批准号: 12204412, 12004124)和国家市场监督管理总局重点实验室(时间频率与重力计量基准)(批准号: AKYKF2501)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xqqi@zstu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zuoyanizz@163.com

氦原子和类氦锂离子 2^3S 态的 413 nm 和 159 nm 幻零波长对相对论效应、核质量效应以及量子电动力学 (QED) 效应极为敏感^[16,17], 并且氦原子 2^3S 态的 413 nm 幻零波长的实验测量和理论计算精度已分别达到 0.4 ppm ($1 \text{ ppm} = 10^{-6}$) 和 10 ppb ($1 \text{ ppb} = 10^{-9}$) 水平^[18].

对于类氦 Be^{2+} 离子, 大多数理论研究主要集中在低能态. 早期, Yan 和 Drake^[19] 采用 Hylleraas 基函数计算了精细结构中 2^3P 态的能级, 而 Johnson 等^[20] 则利用相对论组态相互作用 (RCI) 方法研究了其超精细结构. 随后, Yerokhin 和 Pachucki^[21] 进一步引入了相对论和 QED 修正以及有限核质量效应, 在 $n=1$ 和 $n=2$ 能级上实现了 $m\alpha^6$ 和 $m^2/M\alpha^5$ 量级的高精度计算. 最近, Qi 等^[22,23] 采用非相对论量子电动力学 (NRQED) 方法, 一方面计算了 $7, 9\text{Be}^{2+}$ 的 2^3S_1 和 2^3P_J 态超精细劈裂直至 $m\alpha^6$ 阶相对论和 QED 修正^[22]; 另一方面计算了 $7, 9, 10, 11, 12, 14\text{Be}^{2+}$ 离子中 $2^1S_0 \rightarrow 2^3S_1$ 和 $2^3S_1 \rightarrow 2^3P$ 跃迁的同位素位移^[23]. 这些高精度的理论结果可与实验测量结合起来提取核结构信息, 如在 Qi 等^[22,23] 的研究工作中, 一旦实验测量达到与理论相同的量级, 就可以精确确定 Be 核的 Zemach 半径、核四极矩以及核电荷半径的平方差, 相应的不确定性均优于 5%. 此外, Be^{2+} 离子的 1^1S , $2^1,3S$ 以及 $2^1,3P$ 态的静态偶极极化率、四极极化率和八极极化率已在早期多项研究中得到报道^[24-29]. 在我们之前的工作中, 进一步证明了 2^3S_1 和 3^3S_1 态的静态偶极极化率以及分别位于 93, 238 nm 的幻零波长对核质量效应和 QED 修正表现出显著的敏感性^[30].

丰中子核素 ^{11}Be 因具有独特的单中子晕结构而备受关注, 该结构由紧密结合的 ^{10}Be 核芯和弱束缚的价中子组成. 这种特殊的核构型导致其磁半径和电荷半径存在显著不同, 其中磁半径明显较大. Takamine 等^[31] 在 RIKEN 利用在线离子阱系统, 对被俘获的 $^7\text{Be}^+$, $^9\text{Be}^+$ 和 $^{11}\text{Be}^+$ 离子进行了高精度激光光谱测量. 这些成果证明了通过纯光谱学方法提取核结构信息 (如电荷半径和磁化半径) 的可行性^[31]. 尽管取得了上述进展, 关于 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子极化率的理论研究仍较为匮乏, 亟需开展进一步的理论研究.

与以往针对 $^9\text{Be}^{2+}$ 离子等低激发态体系的研究^[29,30] 不同, 本研究聚焦于丰中子晕核 $^{11}\text{Be}^{2+}$, 重点探讨有限核质量效应对原子结构及极化率的直

接影响. 系统计算了包括 n^3S_1 和 $n^3P_{0,1,2}$ ($n \leq 8$) 等高激发态的能级、振子强度及动力学极化率数据. 研究首先采用 RCI 方法对 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子的能级和波函数进行高精度计算, 其中有限核质量修正算符被直接引入 Dirac-Coulomb-Breit (DCB) 哈密顿量, 以获得相应的质量修正. 基于所得能量和波函数, 进一步高精度计算振子强度, 并通过态求和方法计算动力学电偶极极化率, 为后续对 ^{11}Be 的研究提供关键原子数据. 除非另有说明, 文中所有数值均采用原子单位 (a.u.).

2 理论方法

该工作将有限核质量修正算符 H_M 直接包含至 DCB 哈密顿量中, 以直接获得包括核质量修正的能量和波函数, 相应的哈密顿量表示为

$$H = \sum_{i=1}^2 \left(c\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i + \beta m_e c^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \frac{1}{r_{12}} + H_B + H_M, \quad (1)$$

式中, c 是光速^[32], Z 是核电荷数, m_e 是电子质量, β 和 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 是 Dirac 矩阵, \mathbf{p}_i 是第 i 个电子的动量算符, r_i 表示电子与核的距离, r_{12} 表示两个电子之间的距离, H_B 是 Breit 相互作用算符. H_B 和 H_M 的表达式分别为

$$H_B = -\frac{1}{2r_{12}} [\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 + (\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})], \quad (2)$$

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

式中, $\hat{\mathbf{r}}_{12}$ 是电子间距离向量 \mathbf{r}_{12} 的单位矢量, M 是 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 的核质量, α 是精细结构常数. 计算中使用两种能量和波函数——有限核质量的 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 和无限核质量的 $^{\infty}\text{Be}^{2+}$, 分别对应哈密顿量中包含和不包含 H_M 算符的情况.

数值计算中, Be^{3+} 的径向波函数采用 Notre Dame 基组^[33] 中的 B 样条函数展开. 对于 Be^{2+} 离子, 每个总角动量量子数 (J, M_J) 对应的原子态波函数 $\Psi_{ij}(JM_J)$ 表示为组态函数 (CSFs) 的线性叠加, 具体表示为

$$\Psi_{ij}(JM_J) = \eta_{ij} \sum_{m_i m_j} \langle j_i m_i, j_j m_j | JM_J \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger | 0 \rangle, \quad (4)$$

式中, η_{ij} 是归一化常数, $\langle j_i m_i, j_j m_j | JM_J \rangle$ 是 Clebsch-

Gordan 系数, a_i^\dagger 是产生算符. 这些 CSFs 由相对论单电子轨道构成, 由量子数 $\kappa = (l - j) \times (2j + 1)$ 表征, l 和 j 分别为轨道和总角动量量子数, 且两个量子数 κ_i 和 κ_j 均限制在不超过最大分波数 ℓ_m 的范围内. 值得说明的是, 在求解 Dirac 方程时, 会得到正能态和负能态 (即正电子能态) 两部分. 先前的研究表明负能态是磁极化率的主要贡献, 而对电极化率的贡献可以被忽略, 主要原因是磁跃迁算符的贡献体现在初、末量子态相对论波函数的大分量和小分量的耦合, 而电跃迁算符是大分量与大分量、小分量与小分量的分别耦合^[34,35]. 因此, 考虑到负能态对本文研究的电偶极极化率影响微弱, 计算中可忽略其贡献.

在线偏振光作用下, 与主量子数为 N_g 、总角动量为 J_g 的磁子能级 $|N_g J_g M_{J_g}\rangle$ 相关的动力学电偶极极化率可以分解为两个部分: 标量部分 $\alpha^S(\omega)$ 和张量部分 $\alpha^T(\omega)$,

$$\alpha(\omega) = \alpha^S(\omega) + \frac{3M_{J_g}^2 - J_g(J_g + 1)}{J_g(2J_g - 1)}\alpha^T(\omega). \quad (5)$$

值得注意的是, 对于总角动量 $j \leq 1/2$ 的态, 张量极化率为零. 动态极化率的标量部分 $\alpha^S(\omega)$ 和张量部分 $\alpha^T(\omega)$ 的表达式如下:

$$\alpha^S(\omega) = \sum_{n \neq g} \frac{f_{gn}^{(1)}}{(\Delta E_{gn})^2 - \omega^2}, \quad (6)$$

$$\alpha^T(\omega) = \sqrt{\frac{30(2J_g + 1)J_g(2J_g - 1)}{(2J_g + 3)(J_g + 1)}} \sum_{n \neq g} (-1)^{J_g + J_n} \times \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J_g & J_g & J_n \end{Bmatrix} \frac{f_{gn}^{(1)}}{(\Delta E_{gn})^2 - \omega^2}, \quad (7)$$

式中, $\Delta E_{gn} = E_n - E_g$ 是从初始态 $|N_g J_g\rangle$ 到中间态 $|N_n J_n\rangle$ 的跃迁能量; ω 是外场的光子能量; $f_{gn}^{(1)}$ 是电偶极振子强度,

$$f_{gn}^{(1)} = \frac{2|\langle N_g J_g || T || N_n J_n \rangle|^2 \Delta E_{gn}}{3(2J_g + 1)}, \quad (8)$$

其中 T 是偶极跃迁算符.

3 结果与讨论

本文计算中采用了 $k = 7$ 阶 B 样条函数, B 样条基函数的数量 N 和最大分波数 ℓ_m 分别取为 50 和 10. 在所有计算中, 组态空间规模最大的是奇宇称且总角动量 $J = 2$ 的态, 其组态数量超过 11 万.

表 1 展示了 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3\text{S}_1$ 态 ($n \leq 8$) 能量的收敛性检验, 小括号内数字表示计算不确定度. 标注为“Extrap.”的行对应外推能量, 该能量通过假设随着 B 样条基函数数量 N 和最大分波数 ℓ_m 趋于无穷大时, 连续两次能量差的比值保持不变而获得, 即采用外推 $E_{\text{Extrap.}} = E_i + \frac{(E_i - E_{i-1})^2}{E_{i-1} - E_{i-2}}$ 确定, 相应的误差可覆盖组态空间最大的五个数值. 结果表明, 对于 $n \leq 5$ 的 $n^3\text{S}_1$ 态, 能量随着 B 样条基函数数量和分波数的增加, 已收敛至 8 位有效数字. 以 2^3S_1 态为例, 采用 NRQED 方法计算的能量为 $-9.298\,711\,181$ a.u.^[21], 本工作结果在 7 位有效数字上与之保持一致. 此前研究已报道未考虑有限核质量修正的 $n^3\text{S}_1$ 态 ($n \leq 5$) 相对论能量^[29]. 结合这些结果与表 1 数据, 提取出 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子核质量修正值: 2^3S_1 态为 $0.00046430(6)$ 、 3^3S_1 态为 $0.00042588(4)$ 、 4^3S_1 态为 $0.00041337(4)$ 和

表 1 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3\text{S}_1$ ($n \leq 8$) 态能量 (a.u.) 的收敛性检验, 以及 $^{\infty}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3\text{S}_1$ ($6 \leq n \leq 8$) 态的能量 (a.u.). 小括号内的数字是计算不确定度

Table 1. Convergence test of energy (in a.u.) for the $n^3\text{S}_1$ ($n \leq 8$) states of $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion, as well as the energy (in a.u.) for the $n^3\text{S}_1$ ($6 \leq n \leq 8$) states of $^{\infty}\text{Be}^{2+}$ ion. The numbers in parentheses are computational uncertainties.

(N, ℓ_m)	2^3S_1	3^3S_1	4^3S_1	5^3S_1	6^3S_1	7^3S_1	8^3S_1
(40, 8)	-9.2987118781	-8.5483475380	-8.3017888508	-8.1909936393	-8.1318566822	-8.0966153793	-8.0739367761
(40, 9)	-9.2987119119	-8.5483475470	-8.3017888543	-8.1909936410	-8.1318566832	-8.0966153799	-8.0739367765
(40, 10)	-9.2987118673	-8.5483475442	-8.3017888537	-8.1909936408	-8.1318566831	-8.0966153798	-8.0739367764
(45, 10)	-9.298 711 9028	-8.5483475516	-8.3017888542	-8.1909936238	-8.1318565642	-8.0966147583	-8.0739335599
(50, 10)	-9.2987118649	-8.5483475498	-8.3017888539	-8.1909936224	-8.1318565546	-8.0966147052	-8.0739332679
Extrap.	-9.29871191(5)	-8.54834755(2)	-8.30178885(1)	-8.19099362(3)	-8.1318566(1)	-8.0966147(4)	-8.073933(4)
	-9.298711181 ^[21]						
$^{\infty}\text{Be}^{2+}$	-9.29917621(4) ^[29]	-8.54877343(4) ^[29]	-8.30220222(4) ^[29]	-8.19140139(4) ^[29]	-8.1322613(2)	-8.0970178(6)	-8.074334(5)

5^3S_1 态为 0.00040777(5) a.u. 对于主量子数 $6 \leq n \leq 8$ 的 n^3S_1 态, 表中标注为 ${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$ 的行列出了无限核质量下的 RCI 能量, 由此可提取相应的核质量修正. 随着主量子数的增加, 核质量修正逐渐减小. 值得注意的是, 当主量子数达到 8 时, 收敛的有效数字减少了一位, 这主要归因于计算中所采用的腔半径和 B 样条基函数数量的限制.

表 2 列出了 $n^3P_{0,1,2}$ ($n \leq 8$) 态的能量. 结果显示能量收敛在 7—8 位有效数字. 对于 $2^3P_{0,1,2}$ 态, 本文计算结果与 Yerokhin 和 Pachucki^[21] 采用微扰方法得到的结果在至少 6 位有效数字上保持一致. 在本工作中, Breit 算符和有限核质量修正算符 HMS 被直接纳入哈密顿量中. 因此, 本研究的 RCI 结果不仅涵盖了 $m\alpha^4$ 阶及更高阶的单电子相对论修正, 还包括了 $m\alpha^4$ 阶及部分 $m\alpha^6$ 阶的电子-电子相互作用相对论修正, 同时包括了非相对论及最低阶相对论的有限核质量修正. 相比之下, Yerokhin 和 Pachucki^[21] 给出的微扰结果仅包含了 $m\alpha^4$ 阶的相对论修正以及非相对论和最低阶相对论的有限核质量修正. 这是因为该文献仅提供了 $m\alpha^6$ 阶相对论与 QED 修正的总和, 未对各项进行逐一分离. 因此, 本研究的 RCI 结果与微扰方法结果的主要差异在于, 前者额外包含了部分 $m\alpha^6$ 阶的相对论修正. 同时, 结合文献 [29] 中的数值, 提取出核质量修正值分别为 $2^3P_{0,1,2}$ 态 0.00042160(6)、 $3^3P_{0,1,2}$ 态 0.00041520(6)、 $4^3P_{0,1,2}$ 态 0.00040912(6) 和 $5^3P_{0,1,2}$ 态 0.00040566(6) a.u. 对于主量子数 $6 \leq n \leq 8$ 的 $n^3P_{0,1,2}$ 态, 核质量修正可由表 2 中列出的无限核质量 ${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$ 与有限核质量 ${}^{11}\text{Be}^{2+}$ 能量差获得. 此外, 通过与文献 [29] 中 ${}^9\text{Be}^{2+}$ 离子的结果对

比, 也可发现 ${}^9\text{Be}^{2+}$ 能量的有限核质量修正比 ${}^{11}\text{Be}^{2+}$ 大, 这是由于有限核质量修正与核质量成反比.

表 3 展示了 $n^3S_1 \rightarrow m^3P_{0,1,2}$ ($n \leq 5, m \leq 8$) 跃迁的振子强度. 对于主量子数小于 5 的跃迁, 振子强度至少收敛到 5 位有效数字. 如表 3 所列, 对于固定的初态, 随着末态主量子数的增加, 计算得到的振子强度的收敛有效数字位数逐渐减少, 这主要是由于腔体半径和 B 样条基函数数量的限制所致.

根据 (5)—(7) 式, 电偶极极化率可以通过能量和振子强度计算得到. 表 4 列出了 n^3S_1 ($n \leq 5$) 态静态电偶极极化率的收敛性检验, 所有结果均达到 6 位有效数字. 对于不同的磁子能级, 张量极化率的系数: $M_J = 0$ 时为 -2 , $M_J = \pm 1$ 时为 1 . 因此, 特定态中 $M_J = 0$ 和 $M_J = \pm 1$ 磁子能级的总静态电偶极极化率之差是张量极化率的 3 倍. 在前工作中给出了无穷核质量的结果: 2^3S_1 ($M_J = 0/\pm 1$) 和 3^3S_1 ($M_J = 0/\pm 1$) 态的静态电偶极极化率分别为 14.88258(1)/14.88578(1) 和 343.7495(2)/343.8140(2)^[30]. 通过与表 4 中给出的 ${}^{11}\text{Be}^{2+}$ 的结果对比, 可提取出 2^3S_1 ($M_J = 0/\pm 1$) 和 3^3S_1 ($M_J = 0/\pm 1$) 态的核质量位移分别为 0.00599(6) a.u. 和 0.1408(7) a.u. 对于相同的电子构型, 极化率随主量子数增加而增大的原因可归因于电子云空间扩展、相邻激发态间能级间隔减小以及偶极跃迁矩阵元增强.

${}^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 n^3S_1 ($n \leq 5$) 态的动态电偶极极化率在表 5 中展示. 对于 2^3S_1 和 3^3S_1 态, 光子能量范围限制在 0.4 a.u. 以下, 计算得到的极化率分别至少达到 4 位和 5 位有效数字. 对于 4^3S_1 和 5^3S_1 态,

表 2 ${}^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3P_{0,1,2}$ ($n \leq 8$) 态和 ${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3P_{0,1,2}$ ($6 \leq n \leq 8$) 态的能量 (a.u.). 小括号内的数字是计算不确定度
Table 2. Energy (in a.u.) for the $n^3P_{0,1,2}$ ($n \leq 8$) states of ${}^{11}\text{Be}^{2+}$ ion and the $n^3P_{0,1,2}$ ($6 \leq n \leq 8$) states of ${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$ ion. The numbers in parentheses are computational uncertainties.

n	3P_0 (${}^{11}\text{Be}^{2+}$)	3P_0 (${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$)	3P_1 (${}^{11}\text{Be}^{2+}$)	3P_1 (${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$)	3P_2 (${}^{11}\text{Be}^{2+}$)	3P_2 (${}^{\infty}\text{Be}^{2+}$)
2	-9.17627904(4)	-9.176 700 64(4) ^[29]	-9.17633162(4)	-9.17675322(4) ^[29]	-9.17626402(4)	-9.17668561(4) ^[29]
	-9.176278322 ^[21]		-9.176330730 ^[21]		-9.176263355 ^[21]	
3	-8.51591623(4)	-8.51633141(4) ^[29]	-8.51592914(4)	-8.51634433(4) ^[29]	-8.51590908(4)	-8.51632431(4) ^[29]
4	-8.28867151(4)	-8.28908063(4) ^[29]	-8.28867658(4)	-8.28908570(4) ^[29]	-8.28866814(4)	-8.28907727(4) ^[29]
5	-8.18442245(4)	-8.18482810(4) ^[29]	-8.18442495(4)	-8.18483061(4) ^[29]	-8.18442064(4)	-8.18482630(4) ^[29]
6	-8.12810385(8)	-8.12850744(8)	-8.12810527(8)	-8.12850886(8)	-8.12810278(8)	-8.12850637(8)
7	-8.09427236(8)	-8.09467469(8)	-8.09427324(8)	-8.09467556(8)	-8.0942717(1)	-8.0946740(1)
8	-8.0723741(4)	-8.0727757(4)	-8.0723745(4)	-8.0727762(4)	-8.072373(4)	-8.0727752(4)

表 3 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3\text{S}_1 \rightarrow m^3\text{P}_{0,1,2}$ 跃迁的振子强度 (a.u.). 小括号中的数字是计算不确定度, 中括号中的数字表示 10 的幂次

Table 3. Oscillator strengths (in a.u.) for $n^3\text{S}_1 \rightarrow m^3\text{P}_{0,1,2}$ transitions of $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion. Numbers in parentheses are computational uncertainties. Numbers in square brackets represent the power of 10.

	2^3S_1	3^3S_1	4^3S_1	5^3S_1
2^3P_0	2.372207(2)[-2]	9.872733(2)[-3]	1.928282(2)[-3]	7.371365(4)[-4]
2^3P_1	7.113520(4)[-2]	2.959444(1)[-2]	5.780477(2)[-3]	2.209758(2)[-3]
2^3P_2	1.186353(6)[-1]	4.935354(6)[-2]	9.638898(6)[-3]	3.684637(4)[-3]
3^3P_0	2.8034387(2)[-2]	3.9595500(4)[-2]	2.1969329(1)[-2]	4.408759(2)[-3]
3^3P_1	8.412570(1)[-2]	1.1872683(2)[-1]	6.5866197(8)[-2]	1.3218516(4)[-2]
3^3P_2	1.4016114(8)[-1]	1.980174(5)[-1]	1.0983887(8)[-1]	2.204119(1)[-2]
4^3P_0	7.9394418(4)[-3]	2.9307965(4)[-2]	5.442867(2)[-2]	3.485147(2)[-2]
4^3P_1	2.3822715(1)[-2]	8.794741(2)[-2]	1.6320086(4)[-2]	1.0449598(8)[-1]
4^3P_2	3.969574(2)[-2]	1.465153(2)[-1]	2.721986(4)[-1]	1.742527(2)[-1]
5^3P_0	3.436979(4)[-3]	8.804208(4)[-3]	3.165094(4)[-2]	6.89132(2)[-2]
5^3P_1	1.031254(1)[-2]	2.641763(1)[-2]	9.49775(1)[-2]	2.066303(6)[-1]
5^3P_2	1.718454(2)[-2]	4.401593(4)[-2]	1.582203(2)[-1]	3.446360(4)[-1]
6^3P_0	1.822257(8)[-3]	3.98831(2)[-3]	9.67922(2)[-3]	3.44362(4)[-2]
6^3P_1	5.46755(4)[-3]	1.196685(8)[-2]	2.904307(4)[-2]	1.03336(2)[-1]
6^3P_2	9.11117(6)[-3]	1.99396(1)[-2]	4.838841(4)[-2]	1.72139(1)[-1]
7^3P_0	1.08963(8)[-3]	2.1925(2)[-3]	4.4708(2)[-3]	1.057500(8)[-2]
7^3P_1	3.2693(2)[-3]	6.5784(6)[-3]	1.34147(8)[-2]	3.17309(6)[-2]
7^3P_2	5.4481(6)[-3]	1.0961(1)[-2]	2.2351(1)[-2]	5.2866(2)[-2]
8^3P_0	7.067(8)[-4]	1.350(1)[-3]	2.503(4)[-3]	4.926(4)[-3]
8^3P_1	2.1182(4)[-3]	4.051(4)[-3]	7.510(4)[-3]	1.479(2)[-3]
8^3P_2	3.530(2)[-3]	6.750(2)[-3]	1.252(2)[-2]	2.464(2)[-2]

表 4 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3\text{S}_1 (n \leq 5)$ 态静态电偶极极化率 (a.u.) 的收敛性检验. 小括号中的数字是计算不确定度
Table 4. Convergence test of static dipole electric polarizability (in a.u.) for the $n^3\text{S}_1 (n \leq 5)$ states of $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion. The numbers in parentheses are computational uncertainties.

(N, ℓ_m)	$2^3\text{S}_1 (M_J = 0/\pm 1)$	$3^3\text{S}_1 (M_J = 0/\pm 1)$	$4^3\text{S}_1 (M_J = 0/\pm 1)$	$5^3\text{S}_1 (M_J = 0/\pm 1)$
(40, 8)	14.888529/14.891730	343.889786/343.954302	2868.6928/2869.2072	14424.502/14427.048
(40, 9)	14.888533/14.891735	343.889940/343.954462	2868.6941/2869.2085	14424.508/14427.054
(40, 10)	14.888538/14.891742	343.890034/343.954574	2868.6946/2869.2092	14424.510/14427.058
(45, 10)	14.888561/14.891758	343.890263/343.954742	2868.6970/2869.2111	14424.544/14427.088
(50, 10)	14.888528/14.891735	343.889933/343.954502	2868.6944/2869.2092	14424.531/14427.080
Extrap.	14.88858(6)/14.89177(4)	343.8904(7)/343.9548(5)	2868.697(5)/2869.211(4)	14424.54(4)/14427.08(4)

由于高光子能量下共振态密集, 动态极化率仅报道了光子能量低于 0.26 a.u. 和 0.13 a.u. 的结果. 图 1 给出了 2^3S_1 和 3^3S_1 态在光子能量 0—0.4 a.u. 范围内的动力学电偶极极化率曲线. 图 2 给出了 4^3S_1 和 5^3S_1 态在 0.015—0.13 a.u. 光子能量范围内的动力学电偶极极化率曲线. 如图 1 和图 2 所示, $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子的动态极化率 $\alpha(\omega)$ 随光子能量 ω 的变

化呈现非单调特性: 在远离共振区 (如 2^3S_1 态在 $\omega < 0.1$ a.u. 时的曲线) 符合 $\alpha(\omega) \approx \alpha(0) + \beta\omega^2$ 的低频近似规律; 而当 $\omega \approx \Delta E_{gn}$ 时, 因跃迁能级分母项趋零导致极化率剧烈振荡, 如 3^3S_1 态在 $\omega \approx 0.26$ a.u. 处的符号反转, 这本质上是外场与原子能级的共振耦合效应. 对比不同主量子数态发现, 高 n 态 (如 $n \geq 4$) 的极化率幅值显著增强, 这

表 5 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 $n^3\text{S}_1 (\leq 5)$ 态的动力学电偶极极化率及其计算不确定度 (a.u.), ω 为外场频率, 原子单位
 Table 5. Dynamic electric dipole polarizabilities and computational uncertainties (in a.u.) for $n^3\text{S}_1 (\leq 5)$ states of $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion, where ω is the frequency of external field, in a.u.

$\omega/\text{a.u.}$	$2^3\text{S}_1(M_J = 0/\pm 1)$	$3^3\text{S}_1(M_J = 0/\pm 1)$	$4^3\text{S}_1(M_J = 0/\pm 1)$	$5^3\text{S}_1(M_J = 0/\pm 1)$
0.02	15.27929(3)/15.28277(2)	551.7125(9)/551.9742(7)	-2126.974(5)/-2125.537(4)	-1666.090(2)/-1665.446(2)
0.03	15.79888(3)/15.80274(3)	2348.47(3)/2355.50(2)	-649.2535(8)/-648.9762(6)	-638.422(2)/-638.155(2)
0.04	16.59145(4)/16.59592(3)	-645.258(3)/-644.484(2)	-317.9701(4)/-317.8436(3)	-284.578(3)/-284.410(3)
0.045	17.11436(4)/17.11926(3)	-361.0677(9)/-360.7746(7)	-238.3984(3)/-238.3025(2)	-171.451(4)/-171.301(4)
0.05	17.74088(4)/17.74631(3)	-240.8547(5)/-240.6914(4)	-183.3957(2)/-183.3195(2)	-60.173(6)/-60.025(7)
0.055	18.49116(5)/18.49728(4)	-175.3147(3)/-175.2190(3)	-143.3993(2)/-143.3365(2)	102.35(2)/102.53(2)
0.06	19.39221(5)/19.39919(4)	-134.5050(2)/-134.4378(2)	-113.0578(2)/-113.00454(9)	672.43(7)/672.93(7)
0.065	20.48070(6)/20.48879(5)	-106.9053(2)/-106.8553(2)	-89.1419(1)/-89.09557(8)	-1326.21(8)/-1325.85(8)
0.07	21.80763(7)/21.81719(6)	-87.1505(2)/-87.11157(9)	-69.56520(9)/-69.52388(6)	-490.156(5)/-490.103(5)
0.075	23.44577(9)/23.45730(7)	-72.41078(9)/-72.37938(7)	-52.87530(8)/-52.83766(5)	-338.839(2)/-338.785(2)
0.08	25.5025(2)/25.51673(8)	-61.05605(8)/-61.03007(6)	-37.95614(6)/-37.92106(5)	-278.694(3)/-278.627(3)
0.085	28.1427(2)/28.1609(1)	-52.08358(7)/-52.06161(5)	-23.81351(7)/-23.77994(6)	-257.546(6)/-257.452(6)
0.09	31.6335(2)/31.6576(2)	-44.84405(6)/-44.82516(4)	-9.35342(8)/-9.32025(7)	-277.90(2)/-277.68(2)
0.095	36.4367(3)/36.4702(2)	-38.89943(5)/-38.88295(4)	6.9806(1)/7.01487(9)	-432.7(2)/-431.7(2)
0.10	43.4261(4)/43.4760(3)	-33.94404(5)/-33.92949(4)	28.0790(2)/28.1170(2)	441.99(6)/442.72(6)
0.11	74.483(2)/74.6458(9)	-26.18144(4)/-26.16973(3)	131.7548(7)/131.8358(8)	32.52(3)/32.53(3)
0.12	361.19(4)/365.51(3)	-20.39655(3)/-20.38682(2)	-486.980(5)/-486.775(5)	-146(1)/-146(1)
0.13	-111.268(4)/-110.830(3)	-15.91658(3)/-15.90826(2)	-116.4122(2)/-116.4040(2)	-8.5(2)/-8.4(2)
0.14	-45.6790(6)/-45.5965(5)	-12.32375(2)/-12.31647(2)	-68.80539(6)/-68.79816(6)	
0.15	-27.7762(3)/-27.7422(2)	-9.34226(2)/-9.33576(2)	-46.6878(2)/-46.6794(2)	
0.16	-19.4618(2)/-19.4433(1)	-6.77800(2)/-6.77207(2)	-28.4859(4)/-28.4748(4)	
0.17	-14.68262(9)/-14.67079(7)	-4.48302(2)/-4.47750(2)	27.568(5)/27.602(5)	
0.18	-11.59257(6)/-11.58420(5)	-2.33146(2)/-2.32622(1)	-76.562(2)/-76.550(2)	
0.19	-9.43904(5)/-9.43342(4)	-0.19850(2)/-0.193392(9)	-51.2307(7)/-51.2156(7)	
0.20	-7.85783(4)/-7.85328(3)	2.06578(2)/2.070910(9)	-47.611(3)/-47.577(3)	
0.22	-5.70307(3)/-5.70005(2)	8.05211(2)/8.058053(9)	56.557(6)/56.635(6)	
0.24	-4.31412(2)/-4.31196(2)	22.40003(2)/22.41095(2)	2.70(5)/2.70(5)	
0.26	-3.35158(2)/-3.349930(9)	-1580.80(4)/-1566.25(4)	-5.1(6)/-5.0(6)	
0.28	-2.64914(1)/-2.647830(7)	-26.249939(7)/-26.248577(8)		
0.30	-2.115953(8)/-2.114877(6)	-12.800496(3)/-12.799903(3)		
0.32	-1.698284(7)/-1.697376(5)	-7.278323(3)/-7.277525(3)		
0.34	-1.362367(6)/-1.361585(4)	-2.571976(7)/-2.570642(7)		
0.36	-1.085927(5)/-1.085241(4)	22.4313(3)/22.4461(3)		
0.38	-0.853663(4)/-0.853051(3)	-10.49399(3)/-10.49349(3)		
0.40	-0.654682(4)/-0.654128(3)	-4.67869(3)/-4.67806(3)		

主要源于以下三个原因: 1) 电子云空间扩展使偶极矩 $\langle r \rangle$ 增大; 2) 能级间隔 ΔE_{gn} 缩小提升跃迁矩阵元贡献; 3) $n^3\text{P}_J$ 等近简并中间态增多导致态求和累积效应. 特别地, 4^3S_1 和 5^3S_1 态在 $\omega > 0.13$ a.u.

时因密集共振结构而需更高精度计算. 此外, (5) 式揭示的张量极化率 $\alpha^T(\omega)$ 表现出磁子能级依赖性——以 $2^3\text{S}_1(J=1)$ 态为例, $M_J=0$ 与 $|M_J|=1$ 能级的 $\alpha(0)$ 差异约 0.001 a.u. 完全来自 $\alpha^T(0)$, 反

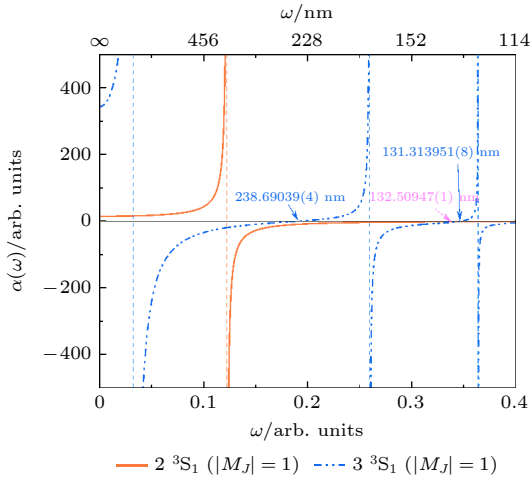


图 1 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 2^3S_1 和 3^3S_1 态 $|M_J|=1$ 磁子能级的动力学电偶极极化率, 垂直虚线表示共振位置. 橘黄色和蓝色数字分别表示 $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 和 $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态的幻零波长, 玫红色数字表示使 $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 和 $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态极化率相等的魔幻波长

Fig. 1. Dynamic electric dipole polarizabilities of the $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ and $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ states, with vertical dashed lines indicating the resonance positions. The orange and blue numbers represent the tune-out wavelengths for the $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ and $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ states, respectively, and the magenta numbers indicate the magic wavelengths at which the polarizabilities of the $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ and $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ states are equal.

映了电子云各向异性响应. 此外, 图 1 和图 2 中标记了使某一个量子态极化率为零的幻零波长和使某一跃迁的两个量子态极化率相等的魔幻波长. 从图 1 可以看出, $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态在光子能量 0—0.4 a.u. 范围内不存在幻零波长, $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态存在两个幻零波长, 分别为 238.69039(4) nm 和 131.313951(8) nm. 在此范围内, $2^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 和 $3^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态存在一个魔幻波长, 在图 1 中以玫红色数字表示. 由图 2 可知, 在 0—0.13 a.u. 光子能量范围内, $4^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 和 $5^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态分别有 1 和 2 个幻零波长, 使这两个态极化率相等的魔幻波长有 3 个. 其中, 魔幻波长 472.877(8) nm 和 383.38(2) nm, 以及 5^3S_1 态的幻零波长 472.90(1) nm 都很靠近共振位置, 实现其更高精度的计算需要提高能量精度.

4 结论

本文采用包含有限核质量修正算符的 Dirac-Coulomb-Breit 哈密顿量, 对类氦 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子的能

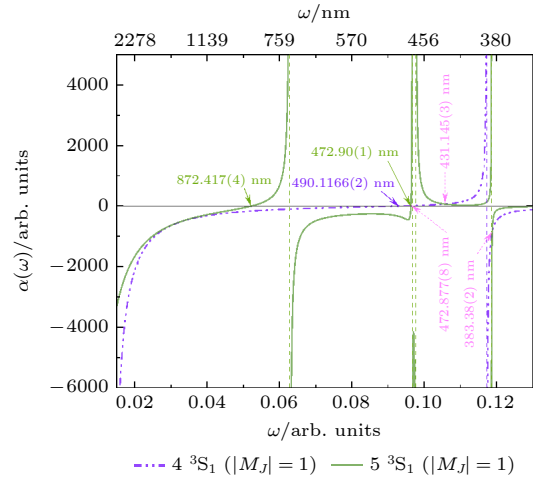


图 2 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子 4^3S_1 和 5^3S_1 态 $|M_J|=1$ 磁子能级的动力学电偶极极化率, 垂直虚线表示共振位置. 紫色和绿色数字分别表示 $4^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 和 $5^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态的幻零波长, 玫红色数字表示使 $4^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 和 $5^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ 态极化率相等的魔幻波长

Fig. 2. Dynamic electric dipole polarizabilities of the $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion $4^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ and $5^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ states, with vertical dashed lines indicating the resonance positions. The purple and green numbers represent the tune-out wavelengths for the $4^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ and $5^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ states, respectively, and the magenta numbers indicate the magic wavelengths at which the polarizabilities of the $4^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ and $5^3\text{S}_1(|M_J|=1)$ states are equal.

级结构和波函数进行了高精度计算, 同时系统性地考虑了相对论效应、QED 修正和有限核质量效应. 基于精确的波函数, 采用态求和方法计算了 $n^3\text{S}_1$ ($n \leq 5$) 态的动力学电偶极极化率, 其中能量计算精度达到 10^{-8} a.u., 约 6—8 位有效数字; 静态极化率精度达 10^{-6} a.u., 约 6 位有效数字. 此外, 首次系统确定了 $n^3\text{S}_1 \rightarrow m^3\text{P}_{0,1,2}$ ($n \leq 5, m \leq 8$) 跃迁的振子强度, 精度达 10^{-5} — 10^{-6} . 这些结果为 $^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子的能级结构、振子强度及电偶极极化率提供了可靠的理论数据, 预计将为未来涉及原子系统中晕核的实验与理论研究提供重要参考.

参考文献

- [1] Mitroy J, Safronova M S, Clark C W 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 202001
- [2] Wang T, Jiang L, Wang X, Dong C Z, Wu Z W, Jiang J 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 043101 (in Chinese) [王婷, 蒋丽, 王霞, 董晨钟, 武中文, 蒋军 2021 物理学报 **70** 043101]
- [3] Notermans R P M J W, Rengelink R J, van Leeuwen K A H, Vassen W 2014 *Phys. Rev. A* **90** 052508
- [4] Lou Z S, Wang Y F, Kang B Y, Li R, Zhang W J, Wei Y F, Bu M L, Cai Y Y 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 103202 (in

- Chinese) [娄宗帅, 王跃飞, 康博溢, 李睿, 张文君, 魏远飞, 布明鹭, 蔡翊宇 2025 物理学报 74 103202]
- [5] Mitroy J, Zhang J Y, Bromley M W J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 032512
- [6] Babb J F, Klimchitskaya G L, Mostepanenko V M 2004 *Phys. Rev. A* **70** 042901
- [7] Patkóš V C V, Yerokhin V A, Pachucki K 2021 *Phys. Rev. A* **103** 042809
- [8] Patkóš V C V, Yerokhin V A, Pachucki K 2021 *Phys. Rev. A* **103** 012803
- [9] Zheng X, Sun Y R, Chen J J, Jiang W, Pachucki K, Hu S M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 063001
- [10] Kato K, Skinner T D G, Hessels E A 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 143002
- [11] Guan H, Chen S, Qi X Q, Liang S, Sun W, Zhou P, Huang Y, Zhang P P, Zhong Z X, Yan Z C, Drake G W F, Shi T Y, Gao K 2020 *Phys. Rev. A* **102** 030801(R)
- [12] 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
- [13] Sun W, Zhang P P, Zhou P P, Chen S L, Zhou Z Q, Huang Y, Qi X Q, Yan Z C, Shi T Y, Drake G W F, Zhong Z X, Guan H, Gao K L 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 103002
- [14] Qi X Q, Zhang P P, Yan Z C, Tang L Y, Chen A X, Shi T Y, Zhong Z X 2025 *Phys. Rev. Res.* **7** L022020
- [15] Puchalski M, Piszczatowski K, Komasa J, Jezierski B, Szalewicz K 2016 *Phys. Rev. A* **93** 032515
- [16] Mitroy J, Tang L Y 2013 *Phys. Rev. A* **88** 052515
- [17] Wu F F, Deng K, Lu Z H 2022 *Phys. Rev. A* **106** 042816
- [18] Henson B M, Ross J A, Thomas K F, Kuhn C N, Shin D K, Hodgman S S, Zhang Y H, Tang L Y, Drake G W F, Bondy A T, Truscott A G, Baldwin K G H 2022 *Science* **376** 199
- [19] Yan Z C, Drake G W F 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4791
- [20] Johnson W R, Cheng K T, Plante D R 1997 *Phys. Rev. A* **55** 2728
- [21] Yerokhin V A, Pachucki K 2010 *Phys. Rev. A* **81** 022507
- [22] Qi X Q, Zhang P P, Yan Z C, Shi T Y, Drake G W F, Chen A X, Zhong Z X 2023 *Phys. Rev. A* **107** L010802
- [23] Qi X Q, Zhang P P, Yan Z C, Drake G W F, Chen A X, Zhong Z X, Shi T Y 2024 *Phys. Rev. A* **110** 012810
- [24] Bishop D M, Rérat M 1989 *J. Chem. Phys.* **91** 5489
- [25] Johnson W R, Cheng K T 1996 *Phys. Rev. A* **53** 1375
- [26] Zhu J M, Zhou B L, Yan Z C 1999 *Chem. Phys. Lett.* **313** 184
- [27] Yan Z C, Zhu J M, Zhou B L 2000 *Phys. Rev. A* **62** 034501
- [28] Zhu J M, Zhou B L, Yan Z C 2000 *Mol. Phys.* **98** 529
- [29] Wu F F, Deng K, Lu Z H 2023 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **295** 108414
- [30] Wu F F, Qi X Q, Chen A X 2024 *J. Chem. Phys.* **161** 134304
- [31] Takamine A, Wada M, Okada K, Nakamura T, Schury P, Sonoda T, Lioubimov V, Iimura H, Yamazaki Y, Kanai Y, Kojima T M, Yoshida A, Kubo T, Katayama I, Ohtani S, Wollnik H, Schuessler H A 2009 *Eur. Phys. J. A* **42** 369
- [32] Tiesinga E, Mohr P J, Newell D B, Taylor B N 2021 *Rev. Mod. Phys.* **93** 025010
- [33] Johnson W R, Blundell S A, Sapirstein J 1988 *Phys. Rev. A* **37** 307
- [34] Wu F F, Shi T Y, Ni W T, Tang L Y 2023 *Phys. Rev. A* **108** L051101
- [35] Porsev S G, Kozlov M G, Safronova M S 2023 *Phys. Rev. A* **108** L051102

High-precision calculation of dynamic electric dipole polarizability of $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion*

WU Fangfei¹⁾ SHI Haotian²⁾ QI Xiaoqiu^{3)†} ZUO Yani^{4)5)‡}

1) (College of Sciences, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China)

2) (College of Metrology Measurement and Instrument, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China)

3) (School of Science, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China)

4) (Division of Time and Frequency Metrology, National Institute of Metrology (NIM), Beijing 100029, China)

5) (Key Laboratory of State Administration for Market Regulation (Time Frequency and Gravity Primary Standard), Beijing 100029, China)

(Received 21 July 2025; revised manuscript received 25 August 2025)

Abstract

^{11}Be , as a typical one-neutron halo nucleus, is of unique significance in studying atomic and nuclear physics. The nucleus comprises a tightly bound ^{10}Be core and a loosely bound valence neutron, forming an exotic nuclear configuration that is significantly different from traditional nuclear configuration in both magnetic and charge

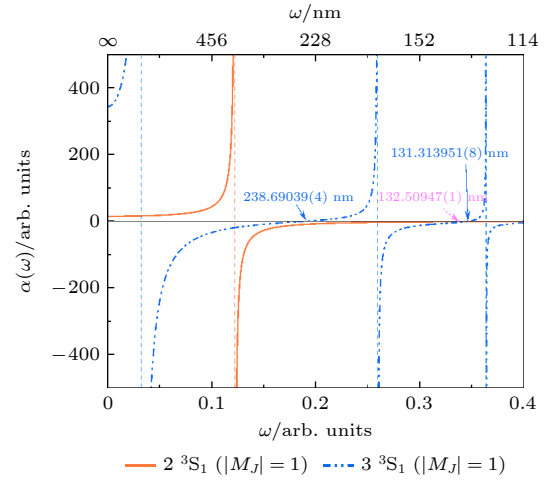
* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12204412, 12004124) and the Key Laboratory of State Administration for Market Regulation (Time Frequency and Gravity Primary Standard) (Grant No. AKYKF2501).

† Corresponding author. E-mail: xqqi@zstu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zuoyanizz@163.com

radii, thereby establishing a unique platform for investigating nuclear-electron interactions. In this study, we focus on the helium-like $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion and systematically calculate the energies and wavefunctions of the n^3S_1 and $n^3P_{0,1,2}$ states up to principal quantum number $n = 8$ by employing the relativistic configuration interaction (RCI) method combined with high-order B -spline basis functions. By directly incorporating the nuclear mass shift operator H_M into the Dirac-Coulomb-Breit (DCB) Hamiltonian, we comprehensively investigate the relativistic effects, Breit interactions, and nuclear mass corrections for $^{11}\text{Be}^{2+}$. The results demonstrate that the energies of states with $n \leq 5$ converge to eight significant digits, showing excellent agreement with existing NRQED values, such as $-9.29871191(5)$ a.u. for the 3S_1 state. The nuclear mass corrections are on the order of 10^{-4} a.u. and decrease with principal quantum number increasing.

By using the high-precision wavefunctions, the electric dipole oscillator strengths for $k^3S_1 \rightarrow m^3P_{0,1,2}$ transitions ($k \leq 5$, $m \leq 8$) are determined, resulting in low-lying excited states ($m \leq 4$) accurate to six significant digits, thereby providing reliable data for evaluating transition probabilities and radiative lifetimes. Furthermore, the dynamic electric dipole polarizabilities of the n^3S_1 ($n' \leq 5$) states are calculated using the sum-over-states method. The static polarizabilities exhibit a significant increase with principal quantum number increasing. For the $J = 1$ state, the difference in polarizability between the magnetic sublevels $M_J = 0$ and $M_J = \pm 1$ is three times the tensor polarizability. In the calculation of dynamic polarizabilities, the precision reaches 10^{-6} in non-resonant regions, whereas achieving the same accuracy near resonance requires higher energy precision. These high-precision computational results provide crucial theoretical foundations and key input parameters for evaluating Stark shifts in high-precision measurements, simulating light-matter interactions, and investigating single-neutron halo nuclear structures.



Keywords: polarizability, relativistic configuration interaction, helium-like beryllium ion

PACS: 31.15.ac, 31.15.ap, 32.10.Dk

DOI: 10.7498/aps.74.20250972

CSTR: 32037.14.aps.74.20250972

$^{11}\text{Be}^{2+}$ 离子动力学电偶极极化率的高精度计算

吴芳菲 施皓天 戚晓秋 左娅妮

High-precision calculation of dynamic electric dipole polarizability of $^{11}\text{Be}^{2+}$ ion

WU Fangfei SHI Haotian QI Xiaoqiu ZUO Yani

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 213101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250972

CSTR: 32037.14.aps.74.20250972

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250972>

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

Al^+ 光钟态“幻零”波长的理论计算

Theoretical calculation of “tune-out” wavelengths for clock states of Al^+

物理学报. 2024, 73(10): 103103 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240177>

B^{2+} 和 B^+ 离子的静态偶极极化率和超极化率的理论研究

Theoretical study of static dipole polarizabilities and hyperpolarizability of B^{2+} and B^+ ions

物理学报. 2023, 72(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221990>

相对论重离子碰撞中光子-光子相互作用的碰撞参数依赖性

Impact parameter dependence of photon-photon interactions in relativistic heavy-ion collisions

物理学报. 2023, 72(20): 201201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230948>

Ga^+ 离子 $4s^2\ ^1\text{S}_0-4s4p\ ^3\text{P}_0$ 跃迁动态极化率的理论计算

Theoretical calculation of dynamic polarizability of $4s^2\ ^1\text{S}_0-4s4p\ ^3\text{P}_0$ transition for Ga^+ ion

物理学报. 2025, 74(10): 103202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250125>

B -样条基组方法在少电子原子结构精密计算中的应用

Applications of B -spline method in precise calculation of structure of few-electron atoms

物理学报. 2025, 74(8): 083101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241728>

含自旋-轨道耦合的光谱常数计算

Calculation of spectroscopic constants with spin-orbit coupling

物理学报. 2025, 74(2): 023101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241435>