

氦原子 Rydberg 态 10G—10M 磁精细结构的计算^{*}

朱云霞 贺黎明[†] 曹 伟 葛自明

(华东理工大学物理系, 上海 200237)

(2005 年 2 月 5 日收到, 2005 年 4 月 13 日收到修改稿)

通过自洽迭代求解 Hartree 方程, 得到了氦原子 $1snl$ 组态下的严格数值解波函数, 以此构造 LS 耦合谱项(支项)波函数作为基矢. 采用线性变分法, 同时考虑交换作用和 Breit-Bethe 近似下的磁相互作用项, 计算了氦 Rydberg 态 10G—10M 系列能级的磁精细结构, 计算结果很好地符合已有的实验值. 对计算方法的进一步改进提出了设想和讨论.

关键词: 氦原子, Rydberg 态, 磁精细结构, 自洽迭代

PACC: 3130, 3150

1. 引 言

氦原子是最简单的多电子体系, 是检验量子力学及其处理多体问题的理论方法的理想场所. 尤其是氦原子激发态的精细结构, 更是许多实验和理论工作者研究的热点^[1].

实验方面, Wing 等人^[2-4]采用微波光学技术 (microwave-optical technique) 对氦 Rydberg 态的精细结构作了比较精确的测量. 后来, Cok 和 Lundeen^[5]采用快原子束 (fast atomics beams) 结合微波光学技术, 得到了更精确的测量值. Palfrey 和 Lundeen^[6]又改进了这项技术, 测量得到了氦原子高 Rydberg 态 $n = 10, L = 4, 5, 6$ 和 7 之间的能级间隔. 这个测量结果的一个重要意义是能够结合理论计算, 探测研究长程电磁相互作用, 即 Casimir 效应. 采用类似的测量技术, Lundeen 等人^[7-11]又得到了一系列不断改进的测量结果, 为理论研究提供了很好的依据. 此外, 值得提及的实验方法还有反交叉 (anticrossings) 技术^[12], 主要用于测量了氦原子 $1D-3D$ 之间的能级间隔^[13-15].

Bethe 和 Salpeter 的经典著作^[16]给出了 Breit-Pauli 近似下的各相对论作用项, 使我们能够利用非相对论形式的波函数计算相对论效应. 最早的基于一级微扰的双电子原子的精细结构计算方法是由

Araki^[17]提出, 后又经 Parish 和 Mires^[18]进行了扩充和完善. 在此基础上, Cok 和 Lundeen^[19]进一步给出了相当于推广的绝热近似 (extended adiabatic approximation) 的微扰算式. Chang 和 Poe^[20, 21]利用 Brueckner-Goldstone (BG) 多体微扰理论方法, 计算了氦原子及其等电子系列 D 态和 F 态的精细结构. 从这里的计算可以看到, 只考虑到二级微扰的计算结果往往是不够精确的. 为了克服这一问题, Chang^[22]又给出了将微扰论与组态相互作用相结合的计算方法. 其中用到了有限的 B 样条基矢组以构成所得到的准完备系, 这对于多体微扰或者组态相互作用计算都是非常有利的.

对于氦原子这样相对简单的量子力学体系, 又可以采用变分法来进行计算. 较早期的变分计算^[23, 24]只涉及较低(对于主量子数 n 和角量子数 L 都是如此)的激发态. 由于收敛比较困难, 通常认为变分法不太适用于较高的激发态, 但是通过仔细选择变分函数, 可以提高收敛的速度, 并且可以得到相当精确的计算结果^[25, 26]. 对于越是高的激发态, 基于原子实极化 (core-polarization) 模型的渐进展开 (asymptotic expansion) 方法^[27-29]就越加精确. 但这里的问题是完全忽略了电子间的交换作用. 传统的变分法多采用 Hylleraas 型基函数及其改进型, 展开项中明显包含了不同组态波函数的成分^[30, 31], 所以一般都能够得到很好的计算结果, 其中尤以

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10074014) 和华东理工大学校基金资助的课题.

[†] E-mail: lmhe@ecust.edu.cn

Drake^[31-33]的工作最为细致、准确.近年来的有关变分法的工作多集中在氦 Rydberg 态电精细结构的精确计算,重点在于研究高阶相对论效应和量子电动力学(QED)效应^[34-38]等.此外,有关研究工作还包括利用变分法和组态相互作用(CI)方法,计算了氦原子 Rydberg 系列能级的精细结构^[39],以及用类似方法计算较复杂的电子体系等^[40,41].

本文采用改进的 Numerov 格式^[42,43],用数值方法通过自洽迭代求解 Hartree 方程,得到 $1s n l$ 组态下的单态波函数,以此构造 LS 谱项的支项波函数作为基矢.利用线性变分法计算氦原子 Rydberg 态 10G—10M 各能级的磁精细结构.计算结果与实验值符合得相当好,从而验证了本文理论方法的有效性.

2. 理论与方法

氦原子精细结构主要取决于三种相互作用^[19]:离心力势(与角量子数 L 有关)和静电非有心力决定不同角量子数(由 L 决定)间的能级间隔;交换相互作用使能级分裂成单态和三重态;与电子自旋有关的磁相互作用使三重态进一步分裂.对于 $1s n l$ 组态,能级分裂只由后两种作用所决定.

氦原子单激发态由四个近简并能级组成,能级结构由交换作用和磁相互作用所决定.对于低的角量子数,交换作用远大于磁相互作用,所以分成一条单态能级和三条挨得很近的三重态能级.随着角动量的增加,交换能变得相对越来越小,这其中的能级结构会发生明显的变化.对于 $L > 3$ 的态,交换作用会变得很小,这时磁相互作用占主导地位,使之变成四条近似等间隔的能级结构^[7].图 1 给出了氦原子 10G 和 10H 态的能级结构示意图.这种主要由磁相互作用主导的能级结构被称为磁精细结构.其中不同的角动量态(L 不同)之间的能级间隔称为电精细结构.

根据上述物理图像,计算磁精细结构的哈密顿可表示为

$$H = H_{NR} + H_{spin}, \quad (1)$$

其中 H_{NR} 为非相对论部分的哈密顿算符, H_{spin} 为 Breit-Pauli 近似^[16]下各相对论作用项中与自旋有关的部分,即通常所说的磁相互作用.这里的非相对论项可表示为

$$H_{NR} = \sum_{i=1}^2 \mathcal{K}(i) + g_{12}, \quad (2)$$

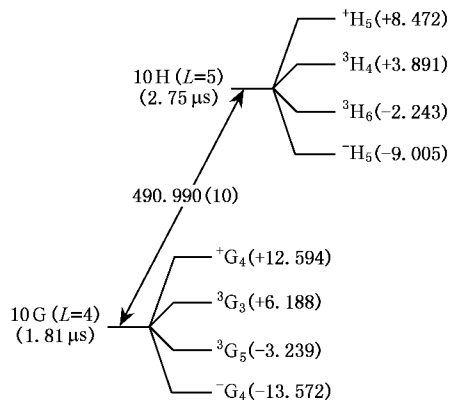


图 1 氦原子 10G 和 10H 态的能级结构图

其中(Rydberg 能量单位) $\mathcal{K}(i) = -\nabla_i^2 - \frac{2Z}{r_i}$ 和 $g_{12} = \frac{2}{r_{12}}$ 分别称为单电子和双电子算符.为了计算方便,还可将其表示为

$$H_{NR} = H_0 + V, \quad (3)$$

在微扰论计算中,通常由 H_0 构造零级近似波函数, V 为微扰算符.如采用线性变分法,则由 H_0 的解构成表示空间的基矢,是为 H_0 表象.

对于氦原子体系,许多作者^[7,19-22]都将类氢波函数作为 H_0 的解,我们认为这样做比较粗糙.本文定义(对于 $1s n l$ 组态)

$$H_0 = h_{1s} + h_{nl}, \quad (4)$$

这里 h_{1s} , h_{nl} 为两个电子的 Hartree 算符

$$\begin{cases} h_{1s} = f_{1s} + n l | g_{12} | n l, \\ h_{nl} = f_{nl} + 1 s | g_{12} | 1 s. \end{cases} \quad (5)$$

由此可得微扰算符

$$V = g_{12} - 1 s | g_{12} | 1 s - n l | g_{12} | n l. \quad (6)$$

而通过求解 Hartree 方程(组)

$$\begin{cases} h_{1s} \varphi_{1s} = \epsilon_{1s} \varphi_{1s}, \\ h_{nl} \varphi_{nl} = \epsilon_{nl} \varphi_{nl}, \end{cases} \quad (7)$$

可得到各单态波函数 $\{\varphi_{1s}, \varphi_{nl}\}$,再由此根据角动量耦合理论^[44,45]构造 LS 谱项的支项波函数 $|\gamma LSJM_J\rangle$.其中 $L = l, S = 0, 1$ 分别代表单态和三重态,对三重态, J 分别可取 $L-1, L, L+1$; γ 是为表征体系状态所需要的其他量子数(这里则是主量子数 n); M_J 表示角动量的分量,它与能量无关.所以,对于某一特定的组态($1s n l$),可得到四个分裂的能级,对应的可得到四个不同的波函数(下面用 $(n l)LSJ$ 表示).

先考虑非相对论作用项的矩阵元.首先, H_{NR} 与

电子的自旋无关,它不可能产生不同自旋态之间的混合.此外,还可以证明^[46]

$$\begin{aligned} & (n1)LSJ | H_{NR} | (n1)LSJ' \\ & = (n1)LS | H_{NR} | (n1)LS \quad , \quad (8) \end{aligned}$$

即这里的矩阵元还与总角动量无关.这样 H_{NR} 只产生对角矩阵元,且对应于三重态的三个对角元只取同一个值,所以有

$$\begin{aligned} & (n1)LS | H_{NR} | (n1)LS \\ & = (n1)LS | f_{1s} | (n1)LS + (n1)LS | f_{n1} | (n1)LS \\ & + (n1)LS | g_{12} | (n1)LS \\ & = \varphi_{1s} | f_{1s} | \varphi_{1s} + \varphi_{n1} | f_{n1} | \varphi_{n1} \\ & + (n1)LS | g_{12} | (n1)LS \quad . \quad (9) \end{aligned}$$

由 1s 态的 Hartree 方程 $h_{1s} \varphi_{1s} = \epsilon_{1s} \varphi_{1s}$ 两边同取对 φ_{1s} 的内积可得

$$\begin{aligned} & \varphi_{1s} | f_{1s} | \varphi_{1s} \\ & = \epsilon_{1s} - \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) | g_{12} | \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) \quad . \quad (10) \end{aligned}$$

同理可得

$$\begin{aligned} & \varphi_{n1} | f_{n1} | \varphi_{n1} \\ & = \epsilon_{n1} - \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) | g_{12} | \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) \quad (11) \end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned} & (n1)LS | g_{12} | (n1)LS \\ & = \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) | g_{12} | \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) \\ & + (-1)^S \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) | g_{12} | \varphi_{n1}(1) \varphi_{1s}(2) \quad (12) \end{aligned}$$

由这几项合并可得

$$\begin{aligned} & (n1)LS | H_{NR} | (n1)LS \\ & = \epsilon_{1s} + \epsilon_{n1} - \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) | g_{12} | \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) \\ & + (-1)^S \varphi_{1s}(1) \varphi_{n1}(2) | g_{12} | \varphi_{n1}(1) \varphi_{1s}(2) \quad . \quad (13) \end{aligned}$$

将其中的 g_{12} 用球张量形式表示为

$$g_{12} = \frac{2}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} C^{(k)}(1) \cdot C^{(k)}(2) \quad . \quad (14)$$

运用球张量理论^[44-46]可将这里的矩阵元最后用 Slater 积分表示成

$$\begin{aligned} & (n1)LS | H_{NR} | (n1)LS \\ & = \epsilon_{1s} + \epsilon_{n1} - F^0 + (-1)^S \frac{G^I}{2L+1} \quad . \quad (15) \end{aligned}$$

根据定义亦可得到微扰算符的矩阵元形式

$$(n1)LS | V | (n1)LS = (-1)^S \frac{G^I}{2L+1} \quad . \quad (16)$$

文献 16 给出了磁相互作用项 H_{spin} 的最低阶形式 (H_3 和 H_5). 随着实验和计算精度的提高,有必要进一步引入 αH_{spin} 阶的修正项. 这里主要考虑由

于电子的反常磁矩 (anomalous magnetic moment) 和原子核的有限质量所产生的修正. 由此可得^[7,19]

$$\begin{aligned} H_{\text{spin}} & = \alpha^2 \frac{Z}{r_2^3} \mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2 [(g-1) + gm/M] \\ & + \alpha^2 \left[\frac{\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_1}{r_{12}^3} \cdot \mathbf{s}_1 - \frac{\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} \cdot \mathbf{s}_2 \right] (g-1) \\ & + 2\alpha^2 \left[\frac{\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_1}{r_{12}^3} \cdot \mathbf{s}_2 - \frac{\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} \cdot \mathbf{s}_1 \right] (g/2) \\ & + 2\alpha^2 \left[\frac{\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 - \chi(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}^0) \chi(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r}_{12}^0)}{r_{12}^3} \right. \\ & \left. - \frac{8\pi}{3} \chi(\mathbf{r}_{12}) \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \right] (g/2)^2 \quad , \quad (17) \end{aligned}$$

其中 $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $g = 2(1 + \alpha/2\pi + \dots)$, m/M 是电子与核质量的比值.

为了简化计算,通常在计算磁相互作用时可以不考虑波函数的反对称性. 此外,对 L 较大的态,有 $r_2 \gg r_1$, 由此可得 $\mathbf{r}_{12} \approx \mathbf{r}_2$, 于是有 Breit-Bethe 近似^[47] 下的磁相互作用项^[7]

$$\begin{aligned} H_{\text{spin}}^{\text{BB}} & = \alpha^2 a_1 \frac{\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2}{r_2^3} - 2\alpha^2 a_2 \frac{\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_1}{r_2^3} \\ & + 2\alpha^2 a_3 \frac{\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 - \chi(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r}_2^0) \chi(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r}_2^0)}{r_2^3} \quad (18) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{cases} a_1 = (g-1) + 2gm/M \approx 1 + \alpha/\pi + 4m/M, \\ a_2 = g/2 \approx 1 + \alpha/2\pi, \\ a_3 = (g/2)^2 \approx 1 + \alpha/\pi, \end{cases} \quad (19)$$

而

$$\begin{aligned} & (n1)LSJ \left| \alpha^2 a_1 \frac{\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2}{r_2^3} \right| (n1)LS'J' \\ & = \alpha^2 a_1 r_2^{-3} (n1)LSJ | \mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2 | (n1)LS'J' \quad , \quad (20) \end{aligned}$$

即这里的矩阵元可表示成径向部分的积分乘以与角动量有关的积分. 其中径向积分 $r_2^{-3} = n1 | r^{-3} | n1$, 角动量部分的矩阵元

$$\begin{aligned} & LSJ | \mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2 | LS'J' \\ & = (-1)^{J+S+J'} \delta_{JJ'} \begin{Bmatrix} L & S' & J \\ S & L & 1 \end{Bmatrix} L \parallel \mathbf{l}_2 \parallel L \quad S \parallel \mathbf{s}_2 \parallel S' \\ & = (-1)^{J+J'} \delta_{JJ'} \sqrt{3/2} \sqrt{L(L+1) \chi(2L+1)} \\ & \quad \times \sqrt{(2S+1) \chi(2S'+1)} \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} L & S' & J \\ S & L & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{Bmatrix} \quad . \quad (21) \end{aligned}$$

应注意这里的 $L = l_2 = l$. 此外,考虑到 S 和 S' , L , J 各种可能的取值,可得上述算符的各项矩阵元的具

体计算结果如表 1 第二列所示. 同理可得

$$LSJ|l_2 \cdot s_1|LS'J' = (-1)^{L+S+S'+J} \delta_{JJ'} \sqrt{3/2} \times \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}. \quad (22)$$

$$\times \sqrt{L(L+1)(2L+1)}$$

$$\times \sqrt{(2S+1)(2S'+1)}$$

$$\times \begin{Bmatrix} L & S' & J \\ S & L & 1 \end{Bmatrix}$$

相应的矩阵元列于表 1 第三列. (22)与(21)式比较, 区别在于非对角矩阵元($S \neq S'$)相差一负号. 这里的非对角元对于给出图 1 的磁精细结构的计算结果是至关重要的.

表 1 磁相互作用中与角动量有关的各算符的矩阵元计算结果

力学量 O	$l_2 \cdot s_2$	$l_2 \cdot s_1$	Y
$L 0 L O L 0 L$	0	0	0
$L 0 L+1 O L 0 L+1$	$L/2$	$L/2$	$-L(2L-1)/2$
$L 1 L O L 1 L$	$-1/2$	$-1/2$	$(2L+3)(2L-1)/2$
$L 0 L-1 O L 0 L-1$	$-(L+1)/2$	$-(L+1)/2$	$-(2L+3)(L+1)/2$
$L 0 L O L 1 L$	$-\sqrt{L(L+1)}/2$	$\sqrt{L(L+1)}/2$	0

对于(18)式中最后一项, 可以定义^[16]

$$2\alpha^2 \frac{s_1 \cdot s_2 - \mathfrak{X} s_1 \cdot r_1^0 \mathfrak{X} s_2 \cdot r_2^0}{r_2^3}$$

$$= -2\alpha^2 \frac{1}{r_2^3} \frac{Y}{(2L+3)(2L-1)}, \quad (23)$$

这里的 Y 可表示成

$$Y = \left(2s_1 \cdot s_2 + \frac{3}{2}\right) L^2 - \frac{3}{2} (L \cdot S) - \mathfrak{X} L \cdot S \mathfrak{Y}. \quad (24)$$

由此可以证明 Y 与力学量 $\{L^2, S_2, J^2\}$ 都是对易的, 所以它在 $|LSJ\rangle$ 表象下是对角矩阵. 通过计算可得 Y 的矩阵元位于表 1 中最后一列.

3. 计算结果及讨论

根据上述计算方法, 首先通过自洽迭代求解 Hartree 方程, 得到 $1s_{nl}$ 组态下各单态的数值化径向轨道波函数. 第一次迭代采用的初始解为: 初始势 $V_{1s} = -2Z/r = -4/r$, $V_{nl} = -\mathfrak{X}(Z-1)\mathfrak{Y}r = -2/r$, 初始能量为 $\epsilon_{1s} = -Z^2 = -4Ry$, $\epsilon_{nl} = -(Z-1)^2/n^2 = -1/n^2 Ry$. 然后可由此计算初始波函数, 再由(5)式计算 Hartree 势, 并迭代求解方程组(7), 直到自洽为止. 最后由计算得到的波函数构造 H_0 表象的基矢. 有许多作者在处理类似计算问题时, 只使用了相当于上述初始解的势和对应的波函数作为 H_0 表象^[1, 20]. 相比较而言, 本文采用的是更为精确的基矢波函数.

根据高激发态波函数的特性, 必须保证在较远

离原子核的区域有足够的结点数密度, 才能得到合理准确的计算结果. 但是通常的 Numerov 格式不适用于 Rydberg 态 (特别是高 Rydberg 态) 的计算^[42]. 本文采用改进的 Numerov 格式^[42, 43], 双精度浮点运算, 这是为了能够得到由数值解波函数构建有效的表示空间基矢以及通过数值积分准确计算力学量在此空间下的矩阵元的必要条件.

在自洽迭代过程中, 我们把 $U = rV$ (V 为势能, 例如对于氢原子 $V = -2/r$) 作为收敛的判断依据. 对每次迭代, 计算相邻两次迭代中 U 变化量的最大值 $(\Delta U)_{\max}$. 如果它小于阈值 (本文设为 10^{-6}), 则认为已收敛. 表 2 给出了第一次和最后三次迭代的收敛情况.

表 2 自洽迭代过程的收敛情况

迭代次数	$(\Delta U)_{\max}$
1	1.996485878379142
20	$3.807994610749432 \times 10^{-6}$
21	$1.903997305152672 \times 10^{-6}$
22	$9.519986527983804 \times 10^{-7}$

另外, 对某一次自洽迭代, 计算某一单态的径向波动方程时, 还有一个自洽迭代的过程. 通常在内推和外推的交点处, 波函数并不重合, 由此可计算下次迭代的能量修正 ΔE . 在 Numerov 的自洽迭代中, 不断地改进单态能量 E , 直到 $\Delta E/E$ 小于阈值 (本文设为 10^{-8}). 以计算 $1s10g$ 组态为例, 表 3 给出了最后三次迭代的部分输出结果. 其中每次迭代的第一行数据对应于 $1s$ 态, 第二行对应于 $10g$ 态. 最后一

列则为 Numerov 迭代的收敛值,由此可以看出这里的每一项都小于我们设定的阈值.

表 3 最后三次迭代的部分输出结果

迭代次数	角量子数	主量子数	Numerov 迭代次数	最大结点数	单态能量	$\Delta E/E$
20	0	1	1	360	-3.978987812669179	-7.753082884158120 $\times 10^{-9}$
20	4	10	1	1240	-1.000000172596016 $\times 10^{-2}$	5.541796491224802 $\times 10^{-9}$
21	0	1	1	360	-3.978987793594879	-7.753081850580733 $\times 10^{-9}$
21	4	10	1	1240	-1.000000172596017 $\times 10^{-2}$	5.541795515688879 $\times 10^{-9}$
22	0	1	1	360	-3.978987784057730	-7.753081048205594 $\times 10^{-9}$
22	4	10	1	1240	-1.000000172596017 $\times 10^{-2}$	5.541800523229716 $\times 10^{-9}$

由上述径向波函数通过数值方法计算 Slater 积分 F 和 G , 以及径向积分 $r_2^{-3} = n1 | r^{-3} | n1$. 由 (15) (16) 式可得到非相对论作用项 H_{NR} 或微扰算符的矩阵元; 由 (18) (20) 和 (23) 式及表 1 等可以计算磁相互作用项 H_{spin}^{BB} 的矩阵元. 最后可得总的力学量 ($H_{NR} + H_{spin}^{BB}$) 或是其微扰部分 ($V + H_{spin}^{BB}$) 的矩阵元. 在 H_0 表象的四维空间下, 将矩阵对角化可得各能级 (或相对能级) 值的计算结果.

表 4 氮原子 Rydberg 态 10G—10M 磁精细结构的计算结果及其比较 (MHz)

能级间隔	本文计算 1	本文计算 2	实验 ^[7]	实验 ^[9]
$^+ G_4 - G_4$	26.1838	26.1432	26.178	
$^3 G_3 - G_4$	19.7363	19.7105	19.755	
$^3 G_5 - G_4$	10.2925	10.2683	10.345	
$^+ H_5 - H_5$	17.4811	17.4540	17.489	
$^3 H_4 - H_5$	12.9016	12.8852	12.905	
$^3 H_6 - H_5$	6.7620	6.7463	6.764	
$^+ I_6 - I_6$	12.5015	12.4822		12.509
$^3 I_5 - I_6$	9.0676	9.0563		9.072
$^3 I_7 - I_6$	4.7439	4.7329		4.745
$^+ K_7 - K_7$	9.3806	9.3661		9.390
$^3 K_6 - K_7$	6.7207	6.7124		6.727
$^3 K_8 - K_7$	3.5074	3.4992		3.510
$^+ L_8 - L_8$	7.2994	7.2881		7.309
$^3 L_7 - L_8$	5.1818	5.1755		5.187
$^3 L_9 - L_8$	2.6974	2.6911		2.699
$^+ M_9 - M_9$	5.8414	5.8324		
$^3 M_8 - M_9$	4.1175	4.1124		
$^3 M_{10} - M_9$	2.1382	2.1332		

表 4 列出了氮原子单激发组态 ($1s n l$) Rydberg 系列 10G—10M 的磁精细结构计算结果及其比较. 这里的能级是按 LS 耦合谱项 (支项) $J^{S+1} L_J$ 来标记

的. 但是对于 $J = L$ 的两个态, 由于有比较强的相互作用, 所以就没有纯粹的单态和三重态之分. 比较可取的方法就是按能级高低分别用 $+$, $-$ 号予以区分. 表 4 第二列给出了本文的主要计算结果. 为了比较 αH_{spin} 项的修正效应, 我们在 (18) 式中假定 $a_1 = a_2 = a_3 = 1$, 由此得到的计算结果列于第三列. 由于这样得到的算符形式每一项都要比 (18) 式偏小一些, 所以由此得到的能级分裂值都比第二列的值偏小. 表 4 同时给出了文献 [7] 和 [9] 的实验结果. 其中文献 [7] 直接给出了 10G 和 10H 的能级分裂值. 第五列是根据文献 [9] 中 H-I, I-K 和 K-L 之间的跃迁频率及第四列中 H 态的能级分裂值推算出的结果. 由表 4 的结果比较可知, 第三列的计算结果明显比实验值偏小, 说明引入 αH_{spin} 项的修正是完全必要的. 本文的主要计算结果与实验基本符合, 说明我们的计算方法是合理的.

然而, 本文计算中还完全没有考虑 $\alpha^2 H_{spin}$ 及以上阶的修正项, 也没有考察 Breit-Bethe 近似对不同的态所产生的影响. 这些我们可以在以后的工作中予以考虑. 至于组态相互作用对磁精细结构的影响问题, 我们是这样考虑的: 一方面包含电子相关效应的交换能的精确计算不很容易, 另一方面交换作用对高 L 态精细结构的影响非常有限. 本文只相当于取交换能的一阶微扰近似值, 我们认为在这里是一个可以接受的近似. 此外, 我们还注意到 (18) 式中各磁相互作用项也可以有不同组态间的矩阵元. 事实上我们采用组态相互作用方法对此进行了计算, 发现这部分相互作用对本文计算结果几乎没有影响.

4. 结 论

本文采用自洽迭代求解 Hartree 方程组, 得到了氮原子 $1s n l$ 组态下的严格数值解波函数. 以此构造

谱项(支项)波函数作为基矢,利用线性变分法在一个统一的框架下同时考虑交换作用和磁相互作用项,计算得到的氦原子 Rydberg 态 10G—10M 的磁精细结构,很好地符合了已有的实验结果。

磁精细结构的计算还可以在更严格的框架下进行,但可以肯定某些严格方案是不必要的。为了建立更准确、有效的计算方法,需要做更细致的研究,同时亦需要更精确的实验测量结果作为参考依据。

- [1] Gallagher T 1994 *Rydberg Atoms*(Cambridge :Cambridge University Press) p381
- [2] Wing W H and Lamb W E 1972 *Phys. Rev. Lett.* **28** 265
- [3] Farley J W *et al* 1982 *Phys. Rev. A* **25** 1559
- [4] Farley J W , MacAdam K B and Wing W H 1979 *Phys. Rev. A* **20** 1754
- [5] Cok D R and Lundeen S R 1981 *Phys. Rev. A* **23** 2488
- [6] Palfrey S L and Lundeen S R 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1141
- [7] Hessels E A ,Sturuss W G , Lundeen S R and Cok D R 1987 *Phys. Rev. A* **35** 4489
- [8] Hessels E A ,Sturuss W G and Lundeen S R 1988 *Phys. Rev. A* **38** 4574
- [9] Hessels E A ,Deck F J ,Arcuni P W and Lundeen S R 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2765
- [10] Hessels E A ,Arcuni P W ,Deck F J and Lundeen S R 1992 *Phys. Rev. A* **46** 2622
- [11] Claytor N E ,Hessels E A and Lundeen S R 1995 *Phys. Rev. A* **52** 165
- [12] Eck T G , Faldy L L and Weider H 1963 *Phys. Rev. Lett.* **10** 239
- [13] Miller T A ,Freund R S and Zegarski B R 1975 *Phys. Rev. A* **11** 753
- [14] Beyer H J and Kollath 1975 *J. Phys. B* **8** L326
- [15] Beyer H J and Kollath 1976 *J. Phys. B* **9** L185
- [16] Bethe H A and Salpeter E E 1957 *Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms*(Berlin :Springer-Verlag)
- [17] Araki G 1937 *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn.* **19** 128
- [18] Parish R M and Mires R M 1971 *Phys. Rev. A* **4** 2145
- [19] Cok D R and Lundeen S R 1979 *Phys. Rev. A* **19** 1830
- [20] Chang T N and Poe R T 1974 *Phys. Rev. A* **10** 1981
- [21] Chang T N and Poe R T 1976 *Phys. Rev. A* **14** 11
- [22] Chang T N 1989 *Phys. Rev. A* **39** 6129
- [23] Pekeris C L 1962 *Phys. Rev.* **127** 509
- [24] Accad Y , Pekeris C L and Schiff B 1971 *Phys. Rev. A* **4** 516
- [25] Kono A and Hattori S 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1199
- [26] Kono A and Hattori S 1986 *Phys. Rev. A* **34** 1727
- [27] Drachman R J 1982 *Phys. Rev. A* **26** 1228
- [28] Drachman R J 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1253
- [29] Drachman R J 1988 *Phys. Rev. A* **37** 979
- [30] Sims J S and Martin W C 1988 *Phys. Rev. A* **37** 2259
- [31] Drake D W F 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 1549
- [32] Drake D W F 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2769
- [33] Drake D W F 1989 *J. Phys. B* **22** L651
- [34] Zhang T and Drake D W F 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 4078
- [35] Yan Z C and Drake D W F 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4791
- [36] Wijngaarden A van , Holuj F and Drake D W F 2001 *Phys. Rev. A* **63** 012505
- [37] Korobov V I and Konobov S V 1999 *Phys. Rev. A* **59** 3394
- [38] Korobov V I 2004 *Phys. Rev. A* **69** 054501
- [39] Wu X L , Gou B C and Liu Y D 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 48 (in Chinese) [吴晓丽、苟秉聪、刘义东 2004 物理学报 **53** 48]
- [40] Han L H , Gou B C and Wang F 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1681 (in Chinese) [韩利红、苟秉聪、王 菲 2001 物理学报 **50** 1681]
- [41] Hu X Q , Hu W J and Kong C Y 2002 *Chin. Phys.* **11** 120
- [42] He L M , Lu H and Yang Y 2002 *Chin. J. At. Mol. Phys.* **19** 316 (in Chinese) [贺黎明、陆 慧、杨 樾 2002 原子与分子物理学报 **19** 316]
- [43] He L M , Yang Y and Lu H 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1385 (in Chinese) [贺黎明、杨 樾、陆 慧 2003 物理学报 **52** 1385]
- [44] Edmonds A R 1960 *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton :Princeton University Press)
- [45] Zare R N 1988 *Angular Momentum-Understanding Spatial in Chemistry and Physics*(New York :John Willy & Sons)
- [46] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley · Los Angeles · London :University of California Press)
- [47] MacAdam K B and Wing W H 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1464

The magnetic fine structure calculation of helium 10G—10M Rydberg states^{*}

Zhu Yun-Xia He Li-Ming Cao Wei Ge Zi-Ming

(Department of Physics , East China University of Science and Technology , Shanghai 200237 , China)

(Received 5 February 2005 ; revised manuscript received 13 April 2005)

Abstract

With self-consistent iterative method for solving the Hartree equation , precise numerical wavefunctions of helium $1snl$ configuration are generated to build up the LS term wavefunctions as basis sets. The magnetic fine structure of helium 10G—10M Rydberg states is calculated with the linear variation method , including both the exchange and magnetic interaction under the Breit-Bethe approximation. The calculated results agree well with the existing experiment data. Some ideas and discussions for further improvement are given.

Keywords : helium atom , Rydberg state , magnetic fine structure , self-consistent iteration

PACC : 3130 , 3150

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10074014) and the Foundation of East China University of Science and Technology .