

# 氢原子和类氢离子基态能量的变分计算 及相对论修正\*

刘玉孝<sup>1)</sup> 赵振华<sup>1)</sup> 王永强<sup>1)</sup> 陈玉红<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 兰州大学理论物理研究所, 兰州 730000)

<sup>2)</sup> 兰州理工大学理学院, 兰州 730050)

(2004 年 7 月 23 日收到, 2004 年 11 月 17 日收到修改稿)

采用一个包含坐标伸缩系数的简单有效的变分波函数, 同时考虑到核的运动, 利用 Mathematica 语言开发了一个用变分法计算三体问题的程序, 对氢原子和类氢离子 ( $H^-$ , He,  $Li^+$ ,  $Be^{++}$ ,  $B^{3+}$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ) 的非相对论基态能量和解析波函数进行了变分计算. 在此基础上, 对非相对论哈密顿量进行相对论和辐射修正, 并考虑到有限核电荷半径的影响, 得到了氢原子和类氢离子高精度的基态能量值.

关键词: 氢原子, 类氢离子, 变分法, 基态能量, 相对论修正

PACC: 3130J, 0420F, 3120A

## 1. 引言

众所周知, 多体问题中最基本、最典型的就是三体问题 ( $H^-$ , He,  $Li^+$ ,  $Be^{++}$ , ...). 通过对这一问题的研究, 人们可以寻求解决多体问题的方法, 掌握构造波函数的思路. 在过去的 70 多年中, 人们用诸如有限元方法<sup>[1,2]</sup>、超球谐函数方法<sup>[3,4]</sup>和变分法等技巧对此问题进行了广泛的研究, 但变分法始终是研究此问题最有力的一种工具.

在早期, 计算机比较庞大且昂贵, 科研人员的工作主要集中在对氢原子和类氢离子模型的研究上, 希望寻找尽可能简洁的变分函数. 近年来, 随着计算机计算功能的不断提高, 人们开始转向对氢原子和类氢离子的变分能量计算精度的追求.

1958 年, Pekeris<sup>[5,6]</sup> 在 Hylleraas<sup>[7]</sup> 工作的基础上提出了一个精确的有关联的变分波函数 (Hylleraas 坐标):

$$\varphi(s, t, u) = e^{-s/2} \sum C_{lmn} s^l u^m t^n, \quad (1)$$

得到了精度很高的库仑三体问题的系统基态能量.

1966 年, Frankowski 和 Pekeris<sup>[8,9]</sup> 在变分波函数 (1) 中加入对数因子, 提出了下面形式的变分函数:

$$\varphi(s, t, u) = e^{-ks} \sum C_{lmnj} s^l u^m t^n (s^2 + t^2)^{j/2} (\ln s). \quad (2)$$

之后, Freund 等人<sup>[10]</sup> 又对上述变分函数做了改进, 其形式如下:

$$\varphi(s, t, u) = e^{-s/2} \sum C_{lmnj} s^l u^m t^n (\ln s)^j, \quad (3)$$

发现引入对数因子对二电子原子体系的能量有实质性的改进.

后来, Drake 和 Yan<sup>[11,12]</sup> 用推广的 Hylleraas 波函数形式, 构造了双基组波函数

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum C_{ijk}^A r_1^i r_2^j r_{12}^k e^{-\alpha_A r_1 - \beta_A r_2} + \sum C_{ijk}^B r_1^i r_2^j r_{12}^k e^{-\alpha_B r_1 - \beta_B r_2}, \quad (4)$$

并对氢原子的能量进行了计算, 三体体系的能量又有了很大改进. 但在四体问题计算时出现了困难, 因提高其精度需要的波函数项数太多.

Korobov<sup>[13]</sup> 在此基础上引入了复指数, 用了下列形式的变分函数:

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum \{ U_i \operatorname{Re} [ \exp(-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_{12}) ] + W_i \operatorname{Im} [ \exp(-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_{12}) ] \} \times Y_{l_1 l_2}^{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (5)$$

得到了精度非常高的氢原子能量.

\* 国家自然科学基金(批准号: 10275030)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: liuyx01@st.lzu.edu.cn

上述计算工作大多是用 Fortran 等语言编写的程序来完成,这些程序具有计算速度快和精度较高的优点.但是近年来,Matlab 和 Mathematica 等符号语言的使用愈来愈广泛,这些语言所编制的程序,不仅符号推演功能很强,而且还具有数据可靠性好、计算精度高、物理意义明确以及便于作图等优点.本文采用包含坐标伸缩参数  $k$  的变分波函数<sup>[14-16]</sup>

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \varphi(ks, kt, ku) \\ &= e^{-ks} \sum C_{lmn}(ks)(kt)^m(ku)^n, \\ s &= r_1 + r_2, t = -r_1 + r_2, u = r_{12}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $\mathbf{r}_1$  和  $\mathbf{r}_2$  表示电子相对于原子核的位置;  $s, t$  和  $u$  称为 Hylleraas 坐标<sup>[7]</sup>;  $k$  是一个坐标伸缩参数.我们利用 Mathematica 语言开发了一个用变分法对三体问题进行计算的程序,然后运用坐标尺度伸缩的变分方法,对氦原子和类氦离子( $\text{H}^-, \text{He}, \text{Li}^+, \text{Be}^{++}, \text{B}^{3+}, \text{C}^{4+}, \text{N}^{5+}, \text{O}^{6+}$ )的基态能量进行了计算.在此基础上,对非相对论哈密顿量进行了  $\alpha^2, \alpha^2/M, \alpha^3$  和  $\alpha^3/M$  阶相对论和辐射修正,并考虑到有限核电荷半径  $R_N$  的影响,得到了氦原子和类氦离子高精度的基态能量值.

## 2. 理论与方法

根据变分原理,一个体系的薛定谔基态能量  $E_0$  及相应的波函数  $\varphi$  可由下式计算得到:

$$E_0 = \min_{\varphi} \frac{\int \varphi^* H_0 \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau}. \quad (7)$$

对于氦原子和类氦离子,本文变分波函数取(6)式,哈密顿量取为考虑核运动的非相对论形式

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2} \mathbf{p}_2^2 + \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (8)$$

因为研究系统的内部结构仅需考虑系统的相对运动动能,而不需考虑其平动动能,故本文中选取质心系坐标.(8)式中  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  和  $\mathbf{P} = -\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$  分别为质心系中电子和核的动量,  $M$  为核的质量,  $Z$  为核的电荷.

下面对非相对论哈密顿量(8)式进行相对论和辐射修正. Breit  $\alpha^2$  和  $\alpha^2/M$  阶修正可用下面的算符表示<sup>[17]</sup>:

$$H^{(2)} = \frac{\alpha^2}{8} \left\{ - \left( \mathbf{p}_1^4 + \mathbf{p}_2^4 + \frac{1}{M^3} \mathbf{P}^4 \right) \right.$$

$$\begin{aligned} &- 4 \left[ \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2}{r_{12}} + \frac{\mathbf{r}_{12}(\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} \right] \\ &+ \frac{4Z}{M} \left[ \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{P}}{r_1} + \frac{\mathbf{r}_1(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{P}}{r_1^3} + (1 \rightarrow 2) \right] \\ &+ 2(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{L}_1 + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{L}_2) \\ &+ 4 \left( \mathbf{L}_1 \times \mathbf{p}_1 + 2 \frac{\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} \right) \cdot \mathbf{S}_1 \\ &+ 4 \left( \mathbf{L}_2 \times \mathbf{p}_2 + 2 \frac{\mathbf{r}_{21} \times \mathbf{p}_1}{r_{12}^3} \right) \cdot \mathbf{S}_2 \\ &- \frac{64\pi}{3} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \delta(\mathbf{r}_{12}) \\ &+ \frac{8}{r_{12}^3} \left[ \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - \frac{\chi(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}) \chi(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right] \left. \right\}, \quad (9) \end{aligned}$$

其中  $\mathbf{L}_1 = -\text{grad}_1 V$  ( $V = Z/r_1 + Z/r_2 - 1/r_{12}$ ) 为核与第二个电子产生的库仑场.对于基态,量子数  $L, S$  和  $J$  全为零并且没有精细结构的劈裂.在此修正中明确地考虑核的自旋和电子的总自旋都为零,并用单态下电子自旋乘积的本征值  $-3/4$  代替算子  $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ . 对基态,方程(9)的算子期望值为

$$\begin{aligned} \delta E^{(2)} &= \alpha^2 - \frac{\mathbf{p}_1^4 + \mathbf{p}_2^4}{8} - \frac{\mathbf{P}^4}{8M^3} + \pi Z \frac{\delta(\mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r}_2)}{2} \\ &+ \pi \delta(\mathbf{r}_{12}) - \frac{1}{2} \left[ \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2}{r_{12}} + \frac{\mathbf{r}_{12}(\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} \right] \\ &+ \frac{Z}{2M} \left[ \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{P}}{r_1} + \frac{\mathbf{r}_1(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{P}}{r_1^3} + (1 \rightarrow 2) \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

本文中的尖括号表示对非相对论基态波函数求期望值.

对非相对论能量的  $\alpha^3$  和  $\alpha^3/M$  阶修正可表示如下<sup>[18]</sup>:

$$\begin{aligned} \delta E^{(3)} &= \alpha^3 \left\{ \frac{4Z}{3} \left( -2\ln\alpha - \beta + \frac{19}{30} \right) \delta(\mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r}_2) \right. \\ &+ \left( \frac{14}{3} \ln\alpha + \frac{164}{15} \right) \delta(\mathbf{r}_{12}) \\ &+ \frac{7}{3\pi} \frac{\ln r_{12} + \gamma}{r_{12}^2} \mathbf{i} \mathbf{n} \cdot \mathbf{p} \\ &+ \frac{2Z^2}{3M} \left( -\ln\alpha - 4\beta + \frac{31}{3} \right) \delta(\mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r}_2) \\ &+ \frac{7Z^2}{3\pi M} \frac{\ln r_1 + \gamma}{r_1^2} \mathbf{i} \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{p}_1 + (1 \rightarrow 2) \left. \right\}. \quad (11) \end{aligned}$$

其中

$$\mathbf{n}_1 = \frac{\mathbf{r}_1}{r_1}, \quad \mathbf{n}_2 = \frac{\mathbf{r}_2}{r_2}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}},$$

$$p = -i\nabla = -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{12}}, \quad (12)$$

$\gamma = 0.5772$  为 Euler 常数,  $\beta$  为 Bethe 对数<sup>[19]</sup>, 定义如下

$$\beta = \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \chi(H - E)) \ln[\chi(H - E)] (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)}{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \chi(H - E)) (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)}. \quad (13)$$

对于基态, 其具体取值引用文献 [20], 具体参见表 1.

表 1 Bethe 对数的具体取值<sup>[20]</sup>

H <sup>-</sup>	He	Li <sup>+</sup>	Be <sup>++</sup>	B <sup>3+</sup>	C <sup>4+</sup>	N <sup>5+</sup>	O <sup>6+</sup>
$\beta$ 2.99297	4.370159	5.179848	5.755091	6.203	6.567	6.876	7.141831

$$E_0 = \frac{k^2 \int \varphi^*(s, t, u) T(s, t, u) \varphi(s, t, u) d\tau + k \int \varphi^*(s, t, u) U(s, t, u) \varphi(s, t, u) d\tau}{\int \varphi^*(s, t, u) \varphi(s, t, u) d\tau}. \quad (16)$$

其中

$$\varphi(s, t, u) = e^{-s} \sum C_{lm} s^l t^{2m} u^n \quad (17)$$

为伸缩后的波函数. 如果动能项用  $K$  表示, 势能项用  $P$  表示, 分母上的归一化项用  $W$  表示, 则(16)式可写为

$$E_0 = \frac{k^2 K + kP}{W}. \quad (18)$$

在 Hylleraas 坐标下  $K, P$  与  $W$  的具体表达式如下:

$$K = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^u dt \pi^2 \{ u(s^2 - t^2) [(\partial_s \varphi)^2 + (\partial_u \varphi)^2 + (\partial_t \varphi)^2] - 2s(t^2 - u^2) \partial_s \varphi \partial_u \varphi + 2t(s^2 - u^2) \partial_t \varphi \partial_u \varphi + 2u[(s^2 - u^2) \chi(\partial_s \varphi)^2 - (t^2 - u^2) \chi(\partial_t \varphi)^2] M \}, \quad (19)$$

$$P = - \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^u dt \pi^2 (4Zsu - s^2 + t^2) \varphi^2 \quad (20)$$

$$W = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^u dt \pi^2 u(s^2 - t^2) \varphi^2. \quad (21)$$

在对  $E_0$  进行变分求解最小值的第一种方法中, 首先对  $k$  进行处理. 函数  $E_0(k)$  是开口向上的二次抛物线, 当  $dE_0(k)/dk = 0$  即  $k = -P/2K$  时  $E_0$  有最小值

$$E_0 = - \frac{P^2}{4WK}. \quad (22)$$

这使变分参数少了一个, 不过函数比较复杂. 另一种方法是把  $k$  作为变分参数直接对所有的变分参数进行变分而求解(18)式中  $E_0$  的最小值. 从形式看, 后一种方法将会简化计算, 因为其  $E_0$  的表达式中无

有限核电荷半径  $R_N = 1.673(1) \text{ fm}^{[9]}$  对氦原子和类氦离子基态能量的贡献为

$$\delta E_{\text{chr}} = \frac{2\pi Z\alpha}{3} R_N^2 [\delta(\mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r}_2)]. \quad (14)$$

### 3. 计算与结果

我们将非相对论哈密顿量写为如下形式

$$H_0(s, t, u) = T(s, t, u) + U(s, t, u). \quad (15)$$

其中  $T(s, t, u)$  是动能算符,  $U(s, t, u)$  是势能算符. 非相对论基态能量为

论是分子还是分母都比较简单些. 表 2 是用此两种方法对  $\text{Be}^{++} (Z=4)$  进行不同的基函数项数  $N$  的计算值. 从表 2 中的数据可以看出, 随着  $N$  的增大, 变分能量值越来越低, 且很快地趋向某一个数值, 此数值高于实验值  $-13.65660561 \text{ a.u.}$ , 说明考虑核的运动后变分能量得到了很好的改进. 此外, 在同一  $N$  下用第二种方法计算出的变分能量值均比第一种方法计算出的低, 这说明在  $N$  有限的情况下把  $k$  作为变分参数的方法将会改进计算结果. 不过由于此差别远远小于二阶及三阶相对论修正值, 后面对氦原子及类氦离子变分能量的计算仍然采用第一种方法.

表 2  $\text{Be}^{++} (Z=4)$  在两种方法下不同基函数项数  $N$  对应的非相对论能量基态  $E_{0i}$  及坐标伸缩系数  $k_i$  的计算值 ( $Z=4$ ). 下标  $i=1$  表示不把  $k$  看成变分参数情形, 其  $E_{01}$  对应(22)式;  $i=2$  表示  $k$  为变分参数情形, 其  $E_{02}$  对应(18)式

$N$	$E_{01} (\text{a.u.})$	$E_{02} (\text{a.u.})$	$k_1$	$k_2$
10	-13.654404411726	-13.654404411731	4.0799798585	4.0800307992
20	-13.654683442841	-13.654683442842	4.4815625068	4.4814751712
30	-13.654705064567	-13.654705064568	4.7085197795	4.7085427890
40	-13.654708118413	-13.654708118473	4.9711818335	4.9709741548
50	-13.654708494178	-13.654708498237	4.9559009389	4.9387370735
60	-13.654708958854	-13.654708958905	5.1755272235	5.1748386400
70	-13.654708991731	-13.654708992717	5.1700791262	5.1681767043

下面给出三维 Dirac  $\delta$ -函数和算子动能的平方

在基态下的期望值的表达式. 三维 Dirac  $\delta$ -函数  $\delta(\mathbf{r}_1)$  和  $\delta(\mathbf{r}_{12})$  的基态期望值分别为

$$\delta(\mathbf{r}_1) = \int d\tau_2 \varphi^2(0, \mathbf{r}_2) = 4\pi \int_0^\infty r^2 \varphi^2(r, r, r) dr, \quad (23)$$

$$\delta(\mathbf{r}_{12}) = \int d\tau_1 \varphi^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 4\pi \int_0^\infty r^2 \varphi^2(2r, \rho, \rho) dr. \quad (24)$$

对于第一个电子, 动能的平方的基态期望值的表达式可写为<sup>[17]</sup>

$$p_1^4 = \int d\tau_1 d\tau_2 \varphi \Delta_1^2 \varphi = \int d\tau_1 d\tau_2 (\Delta_1 \varphi)^2. \quad (25)$$

考虑到波函数的交换对称性我们有  $\delta(\mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r}_2)$  和  $p_1^4 = p_2^4$ .

对不同的核电荷数  $Z$ , 相关的计算结果列于表 3 和表 4 中. 其中表 3 中数据为基函数项数  $N = 70$  时用第一种变分法对氢原子和类氢离子计算所得到的坐标伸缩系数  $k$  以及在原子单位下非相对论能量计算值  $E_0$  及其与实验值  $E_{\text{exp}}$  的比较. 从表 3 中数据可见, 除了  $\text{Li}^+$  外, 均有  $E_0$  大于  $E_{\text{exp}}$  的规律, 这符合变分原理. 而在文献 [5—15] 中, 其能量的变分计算值却低于实验值. 这是因为在这些文献中, 没有考虑核的运动, 而核的动能是正的, 忽略之则自然会使能量的变分计算值偏低. 另外, 我们对坐标伸缩系数  $k$  与核电荷数  $Z$  进行了作图, 见图 1. 由图 1 可见,  $k$  与  $Z$  基本成线性关系, 但此关系并不是很严格. 这是因为  $k$  在一定程度上表征了核的有效电荷, 而我们考虑的三体问题其结构相同, 而核电荷数  $Z$  分别从 1 取到 8, 为线性递增关系, 其有效电荷自然也基本成线性递增关系. 表 4 中数据为对氢原子和类氢

表 3 坐标伸缩系数  $k$  以及非相对论能量计算值  $E_0$  及其与实验值  $E_{\text{exp}}$  的比较 ( $N = 70$ )

	$k$	$E_0/\text{a. u.}$	$E_{\text{exp}}/\text{a. u.}$ <sup>[21]</sup>	相对误差/%
$\text{H}^-$	0.6752091733	-0.527442799209		
He	2.3104096248	-2.903304285511	-2.90338648	-0.02831
$\text{Li}^+$	3.7531372295	-7.279321252704	-7.27873326	0.08078
$\text{Be}^{++}$	5.1700791262	-13.654708991731	-13.65660561	-0.13888
$\text{B}^{3+}$	6.5126203145	-22.029845769061	-22.03492536	-0.23053
$\text{C}^{4+}$	7.8588658320	-32.404733229139	-32.41584676	-0.34284
$\text{N}^{5+}$	9.2097053884	-44.779658102718	-44.80174196	-0.49292
$\text{O}^{6+}$	10.5998852768	-59.154532846064	-59.19212258	-0.63505

离子修正后的能量计算值  $E$  及其与实验值  $E_{\text{exp}}$  的比较. 从表中数据可见, 修正后的能量值的相对误差基本上比原来减小了 1 到 2 个数量级.

表 4 修正后的能量计算值  $E$  及其与实验值  $E_{\text{exp}}$  的比较 ( $N = 70$ )

	$E/\text{a. u.}$	相对误差/%
$\text{H}^-$	-0.527446269533	
He	-2.903378162813	-0.00286
$\text{Li}^+$	-7.279816242971	0.14879
$\text{Be}^{++}$	-13.656556463053	0.00360
$\text{B}^{3+}$	-22.034867966417	-0.00260
$\text{C}^{4+}$	-32.415955291646	0.00335
$\text{N}^{5+}$	-44.801629317381	-0.00251
$\text{O}^{6+}$	-59.193643431213	0.02569

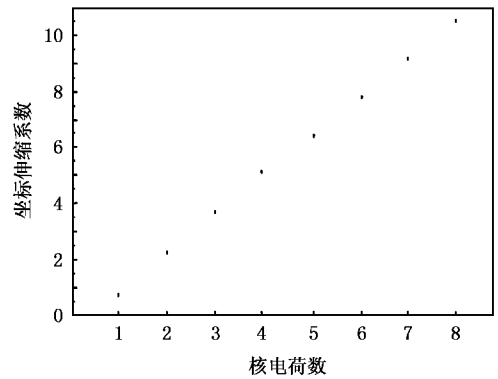


图 1 坐标伸缩系数  $k$  与核电荷数  $Z$  的关系

本文的计算程序采用 Mathematica 语言编制. 其中求能量解析表达式部分直接使用了(18)至(22)式, 求极小值部分使用了系统函数 FindMinimum. 因为 Mathematica 语言是一种符号计算工具, 本程序代码简明易懂, 且运算的中间过程是完全准确的, 唯有求极小值这一步才会引入误差, 而且此误差可以通过设置精度来控制, 我们已保证其远远小于  $\Delta E$ . 因此, 误差主要来源于两个方面: 基函数项数的截断以及模型的不准确性即高阶相对论及 QED 修正的忽略. 尽管符号运算所需计算机的内存较大, 计算时间也较多, 但综合比较, 本文所用的模型简单, 物理意义明确, 计算方法简便, 计算量较小, 易于实现, 而且计算结果的精度和可靠性较高, 所以是一种具有潜力的计算方法. 在原来的工作中<sup>[15, 16]</sup>, 我们使用的是 Mathematica4.1, 而本文则使用了 Mathematica5.0. 我们发现求极小值这一步所需的时

间比原来大大减少了(基函数项数  $N = 50$  时用 Mathematica4.1 需 100 多个小时,而 Mathematica5.0 仅需几分钟).

## 4. 结 论

本文采用了一个包含坐标伸缩系数的简单有效的变分波函数,同时考虑到核的运动,对氦原子和类

氦离子的非相对论基态能量和解析波函数进行了变分计算.在此基础上进一步对非相对论哈密顿量进行了  $\alpha^2$ ,  $\alpha^2/M$ ,  $\alpha^3$  和  $\alpha^3/M$  阶相对论和辐射修正,并考虑到有限核电荷半径的影响,得到了氦原子和类氦离子高精度的基态能量值.只要增加基函数项数并进一步考虑高阶相对论和 QED 修正,基态能量的理论计算值将会更好地接近实验值.

- |   |  |
|---|--|
| [ 1 ] Ackermann J and Shertzer J 1996 <i>Phys. Rev. A</i> <b>54</b> 365               | [ 13 ] Korobov V I 2000 <i>Phys. Rev. A</i> <b>61</b> 064503   |
| [ 2 ] Ackermann J 1998 <i>Phys. Rev. A</i> <b>57</b> 4201                             | [ 14 ] Kinoshita T 1956 <i>Phys. Rev.</i> <b>105</b> 1490  |
| [ 3 ] Lin C D 1995 <i>Phys. Rep.</i> <b>257</b> 1 and references therein              | [ 15 ] Chen Y H, Zhao S C, Liu Y X and Zhang L J 2003 <i>Chin. J. Atom. Mol. Phys.</i> <b>20</b> 437 |
| [ 4 ] Krivec R 1998 <i>Few-Body Syst.</i> <b>25</b> 199 and references therein        | [ 16 ] Duan Y S, Liu Y X, Zhang L J 2004 <i>Chin. Phys. Lett.</i> <b>21</b> 1714                     |
| [ 5 ] Pekeris C L 1958 <i>Phys. Rev.</i> <b>112</b> 1649                              | [ 17 ] Kabir P K and Salpeter E E 1957 <i>Phys. Rev.</i> <b>108</b> 1256                             |
| [ 6 ] Pekeris C L 1959 <i>Phys. Rev.</i> <b>115</b> 1216                              | [ 18 ] Yelkhovsky A 2001 <i>Phys. Rev. A</i> <b>64</b> 062104  |
| [ 7 ] Hylleraas E A 1929 <i>Z. Phys.</i> <b>54</b> 347                                | Yelkhovsky 2001 hep-ph/0103241   |
| [ 8 ] Frankowski K and Pekeris C L 1966 <i>Phys. Rev.</i> <b>146</b> 46               | [ 19 ] Kabir P K and Salpeter E E 1957 <i>Phys. Rev.</i> <b>108</b> 1256                             |
| [ 9 ] Frankowski K and Pekeris C L 1966 <i>Phys. Rev.</i> <b>150</b> 366(E)           | [ 20 ] Jonathan D B, Robert C F, Malgorzata J and John D M 2000 physics/0002005                      |
| [ 10 ] Freund D E, Huxtable B D and Morgan J D 1984 <i>Phys. Rev. A</i> <b>29</b> 980 | [ 21 ] Lide D R 1999 <i>Handbook of Chemistry and Physics</i> (New York: CRC Press) 10, 175, 177     |
| [ 11 ] Drake G W F and Yan Z C 1994 <i>Chem. Phys. Lett.</i> <b>229</b> 486           |  |
| [ 12 ] Drake G W F 1999 <i>Phys. Scr.</i> <b>T 83</b> 83                              |  |

# Variational calculations and relativistic corrections to the nonrelativistic ground energies of the helium atom and the helium-like ions<sup>\*</sup>

Liu Yu-Xiao<sup>1)†</sup> Zhao Zhen-Hua<sup>1)</sup> Wang Yong-Qiang<sup>1)</sup> Chen Yu-Hong<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>*(Institute of Theoretical Physics, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)*

<sup>2)</sup>*(School of Sciences, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)*

(Received 23 July 2004; revised manuscript received 17 November 2004)

## Abstract

Mathematica language is used to make a program that can solve the three-body problem with variational method. Considering the nuclear motion, the nonrelativistic ground energies and the analytic wave functions of the helium atom and the helium-like ions ( $H^-$ , He,  $Li^+$ ,  $Be^{++}$ ,  $B^{3+}$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ) are presented by using a simple effective variational wave function with a flexible parameter  $k$ . Based on these results, the influence of a finite nucleus charge radius, the relativistic and radiative corrections on the nonrelativistic Hamiltonian are discussed. The high precision values of the helium atom and the helium-like ions ground energies are evaluated.

**Keywords:** helium atom, helium-like ion, variational method, ground energy, relativistic correction

**PACC:** 3130J, 0420F, 3120A

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10275030).

<sup>†</sup>E-mail: liuyx01@st.lzu.edu.cn