

# 氢原子 Rydberg 态抗磁谱的高阶 B-spline 基组计算<sup>\*</sup>

康 帅<sup>1)B)</sup> 刘 强<sup>1)B)</sup> 钟振祥<sup>1)B)</sup> 张现周<sup>2)</sup> 史庭云<sup>1)†</sup>

1) 中国科学院武汉物理与数学研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

2) 河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453002)

3) 中国科学院研究生院, 北京 100049)

(2005 年 12 月 13 日收到, 2005 年 12 月 26 日收到修改稿)

在球坐标下采用基组展开方法计算了均匀磁场中的氢原子高 Rydberg 态能谱和振子强度谱. 径向和角向均采用高阶 B 样条基组. 径向采用 B 样条基组能很好地描述束缚态与连续态的耦合, 角向采用 B 样条基组有效地减少了基组维数, 计算效率得到大幅度提高. 用上述方法计算了磁场中氢原子 Rydberg 态  $-40\text{cm}^{-1}$  到零场电离阈的高精度抗磁谱并与已有理论和实验结果作了比较. 该方法适用于低于离化阈的所有能区的精确谱计算并易于推广到非氢原子、交叉场中的原子以及高于离化阈的正能区光谱的计算.

关键词: 氢原子, B 样条基组, 能谱, 振子强度谱

PACC: 3270, 3260S

## 1. 引 言

均匀外磁场中的氢原子是最简单的变量不可分离系统, 其经典运动存在混沌, 同时该系统可以进行高精谱测量和高精度的量子力学谱计算, 是研究经典-量子对应的理想体系之一. 多年来该领域研究在理论和实验研究中都取得了重要进展. 如准 Landau 共振区多重共振谱的发现<sup>[1]</sup>、闭合轨道理论的建立与发展<sup>[2,3]</sup>、实验测量谱与理论计算谱的高度一致等<sup>[4-9]</sup>. 目前, 实验工作一方面致力于附加电场对抗磁谱的影响, 研究三维变量不可分离体系的混沌现象<sup>[10,11]</sup>; 另一方面致力于在超冷环境下进行相关实验, 进一步提高光谱分辨率<sup>[12,13]</sup>. 由于高 Rydberg 态能级高度密集、磁场导致无场时的束缚态-束缚态和束缚态-连续态高度混合, 抗磁谱的精确量子力学计算是一项很困难的工作. 借助于计算机速度的快速增长、内存的不断扩大以及计算方法的不断革新, 抗磁谱的精确计算自上世纪 80 年代 Clark 和 Taylor<sup>[14]</sup>实现氢原子 Rydberg 态抗磁谱的精确计算以来有了很大发展. 一般而言, 在离化阈附近( $\sim \pm 5\text{cm}^{-1}$ ), 抗磁相互作用起支配作用, Hamilton 量可近似分离, 绝热耦合道方法可提供该

能区的高精确求解<sup>[15,16]</sup>; 在过渡区, 抗磁相互作用与库仑相互作用相当, 基组展开方法是应用最广的方法. 由于基组展开方法可以同时计算大量能谱, 在需要对能谱进行统计分析时经常采用<sup>[17,18]</sup>. 常采用的基组有 Sturmian 基和广义 Laguerre 基. 这类基组能同时描述束缚态和连续态, Hamilton 矩阵呈某种带状或稀疏结构, 特别适用于超大基组计算. 此外, 抗磁氢原子问题通过半抛物变换可转换为耦合谐振子问题, 此时采用谐振子基组是便利的选择, 相应的 Hamilton 矩阵也呈带状结构<sup>[18]</sup>.

本文介绍基于 B-spline 基组展开精确计算抗磁谱的一种高效方法. B-spline 函数由分段多项式构成, 具有许多优良的性质(如局域性、良好的可塑性、可以同时表征束缚态和连续态因而能够很好地描述外场导致的束缚态-连续态、连续态-连续态的耦合等)<sup>[19-24]</sup>. 近年来, 在原子的强场效应、原子分子的光离化、电子原子碰撞、离子原子碰撞的理论研究得到广泛应用<sup>[25-28]</sup>, 在囚禁量子体系的能谱计算中也得到了成功的应用<sup>[29-32]</sup>. 本文在径向和角向均采用 B-spline 基组. 利用径向 B-spline 基的局域性, 本文介绍的方法保持了其他基组方法(如 Sturmian 基、广义 Laguerre 基、谐振子基)中 Hamilton 矩阵带状性质的优点. 有别于传统基组方法采用球谐函数作为

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 30374119)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: tyshi@wipm.ac.cn

角向基矢. 本文采用定义在  $[-1, 1]$  之间的高阶 B-spline 函数作为角向基矢. 利用 B-spline 函数良好的可塑性, 大幅度减少了角向基组维数, 使相关计算可以在 PC 机上实现.

## 2. 理论方法

采用原子单位, 均匀磁场中的氢原子的 Hamilton 表示如下(磁场  $B$  沿  $z$  轴方向):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \gamma \hat{L}_z + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) \quad (1)$$

其中  $\gamma = B/B_0$ ,  $B_0 = 2.350517 \times 10^5$  T. 上式右边前两项是原子在无外场时的 Hamilton 量, 第三项是顺磁项, 第四项是抗磁项. 在此问题中, 磁量子数  $m$  ( $L_z$  本征值) 和宇称  $\pi$  是好量子数.

在球坐标系中, 令  $\xi = \cos\theta$ , 分离轴向波函数  $e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$  后系统满足的 Schrödinger 方程为

$$\hat{H}_{r\xi} \Phi^{m\pi}(r, \xi) = E \Phi^{m\pi}(r, \xi), \quad (2)$$

其中

$$\hat{H}_{r\xi} = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] - \frac{1}{r} + \frac{m\gamma}{2} + \frac{r^2(1 - \xi^2)\gamma^2}{8} \quad (3)$$

本文采用 B-spline 基组展开方法求解 Schrödinger 方程(B-spline 函数的详细定义和基本性质可参阅文献 [33]), 展开基矢由定义在  $[0, R_{\max}]$  区间的  $k_r$  阶径向 B-spline 函数  $B_{i, k_r}(\xi)$  和定义在  $[-1, 1]$  区间的对称化  $k_\xi$  阶角向 B-spline 函数  $B_{j, k_\xi}(\xi)$  乘积构成. 波函数按乘积基矢展开如下:

$$\Phi^{m\pi}(r, \xi) = \sum_{ij} C_{ij} B_{i, k_r}(r) (1 - \xi^2)^{m/2} [B_{j, k_\xi}(\xi) + \pi B_{n_\xi+1-j, k_\xi}(\xi)] \quad (i = 1, 2, \dots, n_r; j = 1, 2, \dots, n_\xi/2), \quad (4)$$

式中  $n_r$  和  $n_\xi/2$  分别为径向和对称化角向基矢的数目( $n_\xi$  是未对称化的角向基矢数目). 总的基组大小为  $N = n_r \times n_\xi/2$ . 角向 B-spline 基矢的对称化(反对称化)方法可参阅文献 [23], 角向基矢中引入因子  $(1 - \xi^2)^{m/2}$  是为了正确描述零场角向波函数在  $\xi \rightarrow \pm 1$  时的渐近行为, 同时可消除哈密顿 (3) 中的奇点. 将 (4) 式代入 (2) 式 Schrödinger 方程转化为广义本征值问题

$$HC = ESC, \quad (5)$$

其中  $E, C$  为待求本征值和本征矢,  $H, S$  分别是

Hamilton 和重叠矩阵. 由于 B-spline 的分段多项式特征, 采用 Gauss-Legendre 积分可快速、精确地计算 Hamilton 和重叠矩阵元. 更重要的一点是 B-spline 基矢的局域性导致  $H$  和  $S$  具有带状结构(带宽为  $N_b = n_\xi \times k_r/2$ ). 在实际计算中  $N_b \ll N$ , 大大降低了存储要求. 利用带状矩阵对角化程序求解 (5) 式可得  $E$  和  $C$ . 初态  $\Phi_i$  至末态  $\Phi_f$  的偶极跃迁振子强度  $f_{i \rightarrow f}$  由下式给出:

$$f_{i \rightarrow f} = \mathcal{A} (E_f - E_i) |\langle \Phi_i | \hat{d} | \Phi_f \rangle|^2, \quad (6)$$

式中  $\hat{d}$  为电偶极算子,  $E_i$  和  $E_f$  分别为初、末态能量<sup>[34]</sup>.

## 3. 结果与讨论

采用上节所述方法, 我们计算了实验室磁场下氢原子在 l 混合区、弱 n 混合区和强 n 混合区的能谱和振子强度谱. 计算过程中, 径向样条结点采用指数分布<sup>[24]</sup>, 这样可以同时给出精确的低能和高能谱.  $R_{\max}$  根据计算精度要求和量子态的径向分布确定. 一般而言, 当所计算的 Rydberg 态越高,  $R_{\max}$  要求越大, 精度要求越高,  $R_{\max}$  取值要越大. 角向样条结点采用 Gauss-Legendre 积分点分布, 这样可以包含更多的高“角分波”. 样条函数的阶对接近离化阈的 Rydberg 态的计算有较大影响(对于较低 Rydberg 态, 样条的阶对计算结果影响不大). 我们发现采用高阶样条较采用低阶样条效果要好, 这是由于接近离化阈时, 能态混合很强. 高阶径向样条会增强样条基矢之间的关联(基矢之间的重叠增大), 而高阶角向样条则使得基矢可包含更多的高“角分波”成分. 采用高阶样条的代价是矩阵的带宽增大, 计算量增大. 除特别指明外, 本文计算中均采用 12 阶径向样条和 13 阶角向样条. 以下给出 l 混合区、弱 n 混合区和强 n 混合区的计算结果.

对于 l 混合区, 我们在 PC 机上计算了磁场  $B = 4.7$  T 下氢原子的主量子数  $n = 23$  族, 磁量子数  $m = 0, 1$  的偶宇称和奇宇称态的能谱. 表 1 中列出了我们的结果. 计算过程中采用 80 个 9 阶径向 B-splines 和 20 个对称化的 13 阶角向 B-splines. 总的矩阵大小  $N = 1600$ , 半带宽  $N_b = 180$ . 其中采取的径向  $R_{\max} = 4000$  a. u.. 表中同时列出了 Clark 和 Taylor<sup>[14]</sup> 采用径向 Sturmian 基, 角向采用球谐函数基所得结果. 文献 [14] 采用的基组大小为 1500, 半带宽为 140, 计算结果有 7 位有效数字. 比较表明, 我们的

结果与文献 14 的结果前 7 位完全相同. 增大基组作收敛检验, 表明我们给出的结果有不低于 8 位的有效数字的精度(表中只列出 8 位有效数字). 可见, 在 1 混合区本文方法较 Sturmian 基方法精度高、效率相近.

表 1 氢原子在磁场中( $B = 4.7\text{T}$ ),  $m = 23$ ,  $m = 0, 1$  的态的能级( $10^{-4}$  Hartrees)

偶宇称, $m = 0$		偶宇称, $m = 1$	
本文结果	文献 14]	本文结果	文献 14]
-9.4386737	-9.438674	-9.3265958	-9.326596
-9.4151588	-9.415159	-9.3048566	-9.304857
-9.3955207	-9.395521	-9.2870064	-9.287006
-9.3824965	-9.382497	-9.2705744	-9.270574
-9.3701683	-9.370168	-9.2501507	-9.250151
-9.3499411	-9.349941	-9.2245195	-9.224520
-9.3242568	-9.324257	-9.1939473	-9.193947
-9.2936452	-9.293645	-9.1585648	-9.158565
-9.2582338	-9.258234	-9.1184213	-9.118421
-9.2180683	-9.218068	-9.0735310	-9.073531
-9.1731609	-9.173161	-9.0238905	-9.023891
-9.1235068	-9.123507		
奇宇称, $m = 0$		奇宇称, $m = 1$	
本文结果	文献 14]	本文结果	文献 14]
-9.4386737	-9.438674	-9.3265958	-9.326596
-9.4151581	-9.415158	-9.3048677	-9.304868
-9.3953754	-9.395375	-9.2879758	-9.287976
-9.3789107	-9.378911	-9.2774045	-9.277405
-9.3608547	-9.360855	-9.2609951	-9.260995
-9.3377292	-9.337729	-9.2379666	-9.237967
-9.3095560	-9.309556	-9.2098401	-9.209840
-9.2765355	-9.276536	-9.1768531	-9.176853
-9.2387440	-9.238744	-9.1390868	-9.139087
-9.1962074	-9.196207	-9.0965694	-9.096569
-9.1489280	-9.148928	-9.0493052	-9.049305

对于弱  $n$  混合区, 我们计算了氢原子在磁场  $B = 5.96\text{T}$  下、 $\Delta m = 0$  的奇宇称态的 Balmer 系(初态为  $2p_0$ )的吸收振子强度谱. 为便于同文献结果进行直接比较, 计算过程中采用 150 个径向 B-splines 基矢数以及 40 个角向 B-splines 基矢数, 总基矢数为  $N = 6000$ , 半带宽  $N_b = 480$ ,  $R_{\max}$  取  $10000\text{a.u.}$ . 我们采用更大的基组( $N = 10000, 12000$ )作了收敛检验, 确定当  $N = 6000$  时本文方法计算的能谱有 7—10 位

有效数字, 振子强度有 2—4 位有效数字. 图 1 给出了我们的计算结果与 Holle<sup>[4]</sup>的理论及实验结果的比较, 比较的谱线能量范围是  $-40\text{cm}^{-1}$ — $-20\text{cm}^{-1}$ , 总共有 132 条谱线. 图 1(a)是本文结果与文献 4 的理论计算结果的比较图. 文献 4]利用广义 Laguerre 函数基组方法求解 Schrödinger 方程, 采用 6400 个基矢, 得到了不低于 6 位有效数字的能谱和 2—3 位有效数字的振子强度谱. 从图 1(a)可见, 两种方法所得结果完全符合. 本文方法在计算精度上要优于广义 Laguerre 函数基组方法. 为了和文献 4 的实验谱作直接比较, 我们对理论振子强度谱作了 Gauss 展宽(展宽与实验采用的激光分辨率  $0.07\text{cm}^{-1}$  相同). 从图 1(b)可以看出, 展宽后理论谱与文献 4 的实验谱的相对强度、谱线形状绝大多数符合得很好, 对强度较大的谱线, 理论与实验的不一致是实验测量过程中的饱和效应及磁场强度发生变化所致(详细讨论见文献 4]).

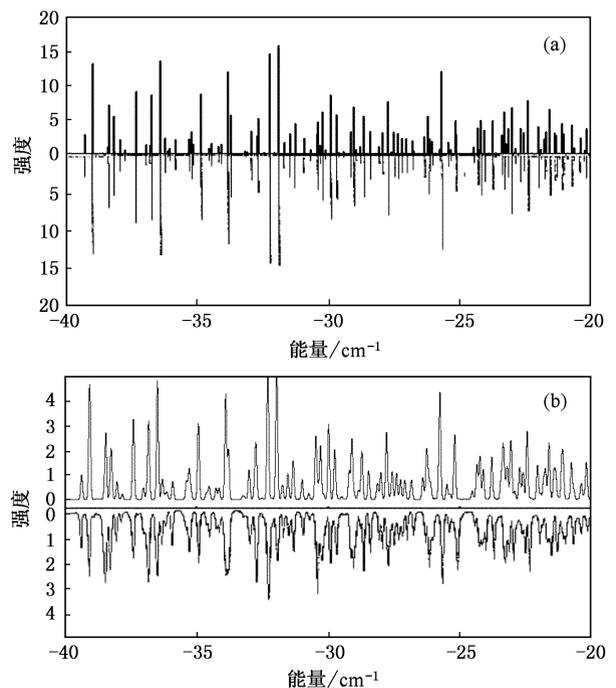


图 1 氢原子在磁场强度  $B = 5.96\text{T}$  下、 $\Delta m = 0$  的偶宇称态的 Balmer 系(初态为  $2p_0$ )的高 Rydberg 态振子强度谱与 Holle 的理论值和实验谱<sup>[4]</sup>的比较, 能量范围是  $-40$ — $-20\text{cm}^{-1}$ . (a) 我们的计算谱(上面的)与 Holle 的理论谱(下面的)的比较(纵坐标标度为  $10^{-6}$ ); (b) 我们的 Gauss 展宽谱(上面的)(纵坐标标度为  $10^{-6}$ )与 Holle 的实验谱(下面的)的比较(纵坐标标度为任意单位)展开半宽度为  $0.035\text{cm}^{-1}$

对于强  $n$  混合区, 我们计算了氢原子在磁场  $B$

= 6.1143T 下、 $\Delta m = 0$  的奇宇称态的 Paschen 系(初态为  $3s_0$ )的振子强度谱,在计算过程中采用 300 个径向 B-splines 基矢以及 45 个对称角向 B-splines 基矢,  $R_{\max}$  取 40000 a. u., 总基矢数为  $N = 13500$ , 半带宽  $N_b = 540$ . 在低于  $5\text{cm}^{-1}$  能区, 能谱计算结果精度不低于  $10^{-3}\text{cm}^{-1}$ , 振子强度有 3 到 5 位有效数字; 在  $[-5\text{cm}^{-1}, 0]$  能区, 能谱精度下降为  $10^{-2}\text{cm}^{-1}$ , 振子强度有 2 位有效数字. 在能量非常接近离化阈时(如  $[-5\text{cm}^{-1}, 0]$  能区)抗磁项的柱对称性占支配地位, 球坐标不是一个好的选择, 进一步提高该能区的计算精度, 除需要同时增大径向和角向基组外, 还须在方法上作改进(如引入复转动方法或在柱坐标下求解 Schrödinger 方程). Iu 等(麻省理工 Kleppner 小组)在其堪称经典的文献中<sup>[8]</sup>报道了高精度的锂原子抗磁谱(光谱分辨率达  $10^{-3}\text{cm}^{-1}$ ), 并与精确的氢原子理论抗磁谱进行了逐条谱线的比较, 实验与理论几近“完美”符合. 文献[8]的理论计算采用 sturmian 基组加复转动方法, 采用大基组计算(90000 个基矢, 其中 300 径向 sturmian 基矢和 300 角向球谐函数, 相应的带状哈密顿矩阵半带宽约为 900), 得到了在  $[-30\text{cm}^{-1}, 30\text{cm}^{-1}]$  能区精度不低于  $10^{-3}\text{cm}^{-1}$  的能谱. 图 2 给出了我们的结果和 Kleppner 小组理论谱的比较(能量范围为  $-30\text{cm}^{-1}$ — $0$ ). 为便于比较, 我们对理论谱线作了与文献[8]相同的展宽( $0.05\text{cm}^{-1}$ ). 从图 2 可以看出上下两部分几乎是一个镜面反射. 两种理论计算方法所用径向基矢数目相同, 本文方法的角向基矢数仅为文献[8]所用角向基矢数的  $1/6$ , 半带宽也只有文献[8]的约  $1/2$ . 由于基组方法的计算量正比于  $N^2$ , 因而本文方法需要的存储空间和计算量要远小于文献[8]的方法, PC

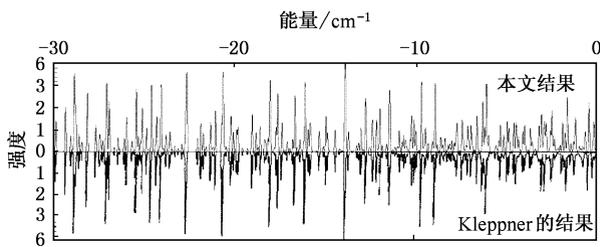


图 2 氢原子在磁场强度  $B = 6.1143\text{T}$  下、 $\Delta m = 0$  的奇宇称态的 Paschen 系(初态为  $3S_0$ )的高 Rydberg 态振子强度谱与 Kleppner 小组的理论谱<sup>[8]</sup>的比较(能量范围为  $-30\text{cm}^{-1}$ — $0\text{cm}^{-1}$ ), 其理论谱 Gauss 展宽为  $0.05\text{cm}^{-1}$ . (纵坐标标度为  $2 \times 10^{-5}$ )

和一般的工作站就能满足计算要求. 对两种理论方法采用的基组大小进行比较清楚表明本文方法在计算效率上要远好于文献[8]的方法.

## 4. 结论与展望

本文介绍了一种基于 B-spline 基组展开的高效、精确的氢原子抗磁谱计算方法, 计算了磁场下氢原子里德堡态在不同能区的能谱和振子强度谱并与已有的精确理论计算结果和实验谱进行了比较. 计算和比较表明, B-spline 基组方法可以用于实验室磁场中原子的高 Rydberg 态的精确计算, 在 l 混合区和弱 n 混合区, 本文方法与 Sturmian、广义 Laguerre 基组方法有相近(稍好)的计算精度和效率; 在强 n 混合区, 在  $[-30\text{cm}^{-1}, -5\text{cm}^{-1}]$  能区得到与 Sturmian 基组方法相同精度的能谱和振子强度谱. 考虑到我们采用的角向基组远小于 Sturmian 基组方法, 在此能区范围内本文方法的效率要优于 Sturmian 基组方法. 总之, 除了保持其他基组方法的优点(如带状矩阵、矩阵元计算快速准确)以外, 本文方法的最大特点在于引入高阶角向样条基组, 由于每一样条函数原则上都包含有无限的角“分波”, 从而大大减小了基组维数, 使得以往需要超级计算机才能完成的工作能在 PC 机上实现. 此外, 本文方法作适当推广可处理更一般性的问题. 例如, 结合复坐标转动方法, 可以推广到求解接近离化阈及正能区( $-5\text{cm}^{-1}$ — $5\text{cm}^{-1}$ )的共振谱结构; 结合多通道量子亏损理论和 R 矩阵方法或结合模型势方法, 本文方法很容易推广到非氢原子的情形(我们采用模型势对 Na 原子的高 Rydberg 态抗磁谱的计算显示本文的方法是切实可行的, 相关工作将另文报道<sup>[35]</sup>). 超冷环境下 Rydberg 原子磁场效应实验装置的建立<sup>[12]</sup>, 预期更精密的实验光谱将问世, 这无疑会对理论计算精度提出更高要求. 由于具带状结构的哈密顿矩阵的对角化便于并行计算<sup>[36]</sup>, 本文方法程序并行化后将能提供更高精度的理论计算谱, 处理更复杂的多维问题(如三维变量不可分离问题、交叉场中的 Rydberg 原子)相关工作正在进行中.

李白文教授对本文工作提出了许多有益的建议. 作者在此谨表谢意.

- [ 1 ] Holle A , Wiebusch G , Main J , Hager B , Rottke H , Welge K H 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 2594
- [ 2 ] Du M L , Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896
- [ 3 ] Wang D H , Ding S L 2004 *Chin. Phys.* **13** 30
- [ 4 ] Holle A , Wiebusch G , Main J , Welge K H , Zeller G , Wunner G , Ertl T , Ruder H 1987 *Z. Phys.* **D 5** 279
- [ 5 ] Delande D , Gay J C 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 2006
- [ 6 ] Wunner G , Woelk U , Zech I , Zeller G , Ertl T , Geyer F , Schweitzer W , Ruder H 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 3261
- [ 7 ] Delande D , Bommier A , Gay J C 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 141
- [ 8 ] Iu C H , Wech G R , Kash M M , Kleppner D , Delande D , Gay J C 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 145
- [ 9 ] Mitchell K A , Handley J P , Tighe B , Flower A , Delos J B 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 073001
- [ 10 ] Connerade J P , Hogan S D , Abdulla A M 2005 *J. Phys.* **B 38** S141
- [ 11 ] Abdulla A M , Hogan S D , Zhan M S , Connerade J P 2004 *J. Phys.* **B 37** L147
- [ 12 ] Guest J R , Choi J H , Hansis E , Povilus A P , Raithel G 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 073003
- [ 13 ] Lesanovsky I , Schmelcher P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 053001
- [ 14 ] Clark C W , Taylor K T 1982 *J Phys.* **B 5** 1175
- [ 15 ] Watanabe S , Komie H 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3227
- [ 16 ] O'Mahony P F , Mota-Furtado F 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 2283
- [ 17 ] Zakrzewski J , Dupret K , Delande D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 522
- [ 18 ] Friedrich H , Wintgen D 1989 *Phys. Rep.* **183** 37
- [ 19 ] Qiao H X , Rao J G , Li B W 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2104 ( in Chinese ) [ 乔豪学、饶建国、李白天 1997 物理学报 **46** 2104 ]
- [ 20 ] Qiao H X , Li B W 1999 *Phys. Rev. A* **60** 3134
- [ 21 ] Zou Y C , Zhang Z J , Qiao H X 2003 *Chin. Phys.* **12** 365
- [ 22 ] Martin F 1999 *J. Phys.* **B 32** R197
- [ 23 ] Vanne Y V , Saenz A 2004 *J. Phys.* **B 37** 410
- [ 24 ] Bachau H , Cormier E , Decleva P , Hansen J , Martín F 2001 *Rep. Prog. Phys.* **64** 1815
- [ 25 ] Rao J G , Li B W 1995 *Prog. Nat. Sci.* **5** 230 ( in Chinese ) [ 饶建国、李白天 1995 自然科学进展 **5** 230 ]
- [ 26 ] Rao J G , Xi J H , Li B W 1997 *Acta Phys. Sin.* **44** 1886 ( in Chinese ) [ 饶建国、习金华、李白天 1995 物理学报 **44** 1886 ]
- [ 27 ] Rao J G , Xi J H , Liu H , Liu W Y , Li B W 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 1056 ( in Chinese ) [ 饶建国、习金华、刘 鸿、刘文瑜、李白天 1994 物理学报 **43** 1056 ]
- [ 28 ] Xi J , He X H , Li B W 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5806
- [ 29 ] Hui P 2000 *Chin. Phys.* **9** 846
- [ 30 ] Hui P 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4324 ( in Chinese ) [ 惠 萍 2005 物理学报 **54** 4324 ]
- [ 31 ] Shi T Y , Qiao H X , Li B W 2000 *J Phys* **B 33** L349
- [ 32 ] Shi T Y , Bao C G , Li B W 2001 *Comm. Theor. Phys.* **35** 195
- [ 33 ] Deboor C 1978 *A Practical Guide to Splines* ( New York :Springer )
- [ 34 ] Friedrich H 1998 *Theoretical Atomic Physics* ( New York :Springer ) p115
- [ 35 ] Meng H Y , Shi T Y , Zhan M S 2006 *J. At. Mol. Phys.* **23** 217 ( in Chinese ) [ 孟慧艳、史庭云、詹明生 2006 原子分子物理学报 **23** 217 ]
- [ 36 ] Krug A 2001 *PhD thesis* ( Ludwig-Maximilians-Universitat , Munchen )

# Calculation of diamagnetic spectrum of Rydberg hydrogen atom using B-spline basis sets <sup>\*</sup>

Kang Shuai<sup>1)B)</sup> Liu Qiang<sup>1)2)</sup> Zhong Zhen-Xiang<sup>1)B)</sup> Zhang Xian-Zhou<sup>2)</sup> Shi Ting-Yun<sup>1)†</sup>

1) *State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics and Mathematics, The Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China*

2) *College of Physics and Information Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453002, China*

3) *Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049 China*

( Received 13 December 2005 ; revised manuscript received 26 December 2005 )

## Abstract

The energy spectrum and oscillator strength of hydrogen atom in static magnetic field have been calculated using basis set method. Both the radial and angular wave-functions are expanded in terms of B-spline functions. The resultant size of Hamiltonian matrix is reduced considerably, which enables the calculations to be carried out in personal computer. Diamagnetic spectrum of Rydberg hydrogen atom from  $-40\text{cm}^{-1}$  to the field free ionization threshold was obtained with high accuracy. The results have been compared with those of most accurate ones in the literature. The method presented in this paper can be extended easily to the region with positive energy and to the cases of non-hydrogen atoms and the crossed field problem.

**Keywords** : hydrogen atom , B-splines , energy levels , oscillator strength spectra

**PACC** : 3270 , 3260S

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10374119 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : tyshi@wipm.ac.cn