

平行电磁场中的 Rydberg 锂原子 吸收谱的模型势计算*

孟慧艳¹⁾²⁾ 康 帅¹⁾³⁾ 史庭云¹⁾ 詹明生¹⁾

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) 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026)

3) 中国科学院研究生院, 北京 100080)

(2006 年 9 月 12 日收到, 2006 年 10 月 16 日收到修改稿)

用 B 样条基组展开方法结合模型势计算了 Rydberg 锂原子在平行电磁场下的振子强度谱. 径向和角向均采用高阶 B 样条基组. 计算结果与已有的实验结果符合得很好. 利用分波分析法, 对部分谱线的振子强度的强弱进行了分析. 本文方法简单有效, 易于推广到交叉电磁场中 Rydberg 原子的精确谱的计算.

关键词: B 样条, 能谱, 振子强度, 平行电磁场, Rydberg 原子

PACC: 3270, 3260S, 3260V

1. 引 言

Rydberg 原子的基本性质及外场效应研究一直是原子物理研究的重要前沿^[1]. 由于 Rydberg 原子具有一系列独特的性质: 很大的原子尺寸、很长的寿命、到基态的辐射跃迁很弱、能级间隔小、最外层电子受原子实的束缚很小、易受外电、磁场的影响等. 这使它成为研究许多涉及原子、量子物理基本问题的理想模型. 其中, Rydberg 原子的外场效应由于其在理解量子经典对应、量子混沌的重要作用, 近二十余年来得到了广泛深入的研究. 实验技术的发展已使人们能够对开放系统的混沌运动、原子双激发态的外场效应进行很精细的研究^[2-10]. 最近 Stania 和 Walther^[3]测定了⁸⁵Rb 在交叉电磁场中经典离化阈以上的光激发谱, 首次在原子体系中观察到了谱的 Ericson 涨落——量子混沌散射的特征表现形式之一. 随后 Madroñero 和 Buchleitner^[4]利用多通道量子亏损理论和复坐标转动方法计算了⁸⁵Rb 在交叉电磁场中精确的光激发截面, 理论结果再现了实验谱的主要特征. 为得到精确可靠的光激发截面值, 文献^[4]计算中利用 Sturmian 基组, 求解大小为

300000 × 4000 的复对称带状本征值问题, 对计算资源要求很高. 显见, 外场下 Rydberg 原子谱的精确量子力学计算仍非易事. 这也促使人们寻找一些更有效的理论方法, 以期用较少的计算资源达到较高的计算精度. 这一点对处理涉及多电子原子的问题(如: 原子双激发态的外场效应)尤其显得重要.

目前, 对外场中原子谱的理论计算已发展了多种行之有效的办法, 但这些方法的有效性通常依赖于外场的强度以及原子所处的态. 在外电、磁场与价电子的相互作用与库仑相互作用相当的过渡区, 基组方法是应用最为广泛的方法. 常用的基矢有 Sturmian 基^[11, 12], 广义 Laguerre 基^[13], 谐振子基^[14], 有限元基^[15], 势模型基^[16-23], B 样条基^[24-33]等. 其中势模型基组方法由于其物理图像明晰、矩阵元可解析求出、使用简便、精度高、计算资源占有少等优点, 在碱金属 Rydberg 原子的磁场、电场、微波场及各种组合场的研究中得到广泛应用^[16-23]. 由于势模型基组方法采用由解析势模型导出的碱金属原子的零场束缚态波函数构成, 对于离化阈附近的光谱(此时连续态有不可忽略的贡献)计算不再适用^[31].

习金华等首次把 B 样条有限基组引入到氢原子在均匀外磁场中低能态的计算, 在 0—4.7 × 10⁸ T

* 国家自然科学基金(批准号: 10674154, 10474119)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: tysshi@wipm.ac.cn, mszhan@wipm.ac.cn

大范围磁场区域内均能给出满意的结果^[24]. 其成功的关键之一在于他们用 B 样条函数描述电子的角向运动. 由于 B 样条良好的可塑性(通过改变结点分布调节 B 样条函数的分布及基矢分布密度)使得他们能够处理远偏离球对称的体系. 该思想后来被乔豪学等^[27]应用到氢原子在强磁场中高精度的低能态能级的计算中. 相关方法也被应用于受限原子体系偏心问题的研究中^[28, 29]. 文献 29 对采用球谐函数和 B 样条函数作为角向基组的优劣在计算效率上进行了定量的比较. 尽管球谐函数作为角向基有其固有的优点, 如: 基矢是正交的、角向矩阵元有解析表达式、便于对计算结果进行分析, 但是对于系统远偏离球对称的情况其收敛、灵活性、效率等则远不如 B 样条函数^[29].

B 样条函数另外的两个主要性质是其高局域性和近似完备性. B 样条的高局域性使 Hamilton 矩阵呈带状结构, 利于实现大规模基组计算; B 样条的近似完备性可以很好地描述外场导致的束缚态-连续态、连续态-连续态之间的耦合等. 最近我们采用 B 样条同时作为径向和角向基矢对氢原子高 Rydberg 态抗磁谱(能谱范围 $-30 \sim 0 \text{ cm}^{-1}$)进行了计算^[30], 用较小的基矢再现了高精度的实验谱. 结合模型势我们把该方法推广到处理高 Rydberg 碱金属原子抗磁谱计算中, 同样取得了好的结果^[31].

为进一步检验我们方法^[30, 31]的适用范围, 本文将文献 30, 31 的方法推广到碱金属原子在平行电磁场中的情况. Cacciani 等^[36]对平行电磁场中的锂原子的吸收光谱进行了系统的实验研究, 在实验涉及的能区用二阶微扰论对实验谱做了半定量的解释. 尽管由二阶微扰论理论给出的能谱位置与实验很好地符合, 但文中没有给出理论的振子强度谱. Santos^[12]等采用非微扰方法对文献 36 涉及的能区中 π 激发光谱做过定量的计算, 对二阶微扰论的适用性有简略的讨论. 本文将给出文献 36 中涉及 σ 激发的光谱进行计算, 一方面评估我们的方法的有效性, 另一方面对文献 36 中涉及 σ 激发的部分振子强度谱给出定量的结果与分析.

2. 计算方法

本节简述计算方法, 更为详细的描述可参看文献 30]. 平行电磁场中的碱金属原子, 在非相对论和忽略自旋和轨道耦合的情况下, 体系的哈密顿量

可由下式描述(文中除特别指明均采用原子单位, 磁场方向取 z 轴方向):

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r) + \frac{1}{2} \gamma L_z + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) + fz. \quad (1)$$

式中 $\gamma = B/B_0$, $B_0 = 2.35 \times 10^5 \text{ T}$, $\frac{1}{2} \gamma L_z$ 为顺磁项, $\frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2)$ 为抗磁项, $f = F/F_0$, $F_0 = 5.14 \times 10^9 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$. $V(r)$ 描述原子实与电子的相互作用, 本文采用如下形式的模型势^[15]:

$$V(r) = -\frac{1}{r} \{ (Z-1) \exp(-c_1 r) + c_2 r \exp(-c_3 r) + 1 \}, \quad (2)$$

其中 Z 为碱金属原子电荷数, c_1, c_2, c_3 是可调参数, 通过与低能态实验谱拟合得到. 对锂原子 $Z = 3.0$, $c_1 = -3.395$, $c_2 = 3.212$, $c_3 = -3.207$.

把 ϕ 变量分离且令 $\xi = \cos \theta$ 后, 体系的哈密顿量可表示为

$$H_{r\xi} = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2r^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] + V(r) + \frac{m\gamma}{2} + \frac{r^2(1 - \xi^2)\gamma^2}{8} + fr\xi. \quad (3)$$

由于体系磁量子数 m 是好量子数, 对具有确定 m 的量子态, 波函数由样条函数乘积基组展开如下:

$$\Psi^m(r, \xi) = \sum_{ij} C_{ij} B_{i, k_r}(r) \chi(1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} B_{j, k_\xi}(\xi) \quad (4)$$

其中 $B_{i, k_r}(r) \chi(i = 1, 2, \dots, n_r)$ 和 $B_{j, k_\xi}(\xi) \chi(j = 1, 2, \dots, m_\xi)$ 分别是定义在 $[0, R_{\max}]$ 和 $[-1, 1]$ 区间的径向和角向样条函数. k_r, k_ξ 分别为径向和角向样条的阶, n_r, m_ξ 是径向和角向 B 样条基矢数目, R_{\max} 是截断半径, 由所研究的能区决定. 无场或仅有磁场的情况下, 体系磁量子数和宇称是守恒量, 波函数可采用如下对称化的形式:

$$\Psi^{m\pi}(r, \xi) = \sum_{ij} C_{ij} B_{i, k_r}(r) \chi(1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \times [B_{j, k_\xi}(\xi) + (-1)^j B_{n_\xi+1-j, k_\xi}(\xi)] \quad (5)$$

这样可使基组大小减小一半^[30, 31]. 利用线性变分法, 薛定谔方程的求解转化为哈密顿矩阵本征值的求解,

$$HC = ESC. \quad (6)$$

E, C 为待求本征值和本征矢, H, S 分别是哈密顿

量 and 重叠矩阵. 通过矩阵对角化可求得能量本征值和本征矢.

由于外场的作用, 角动量 l 不再是好量子数, 量子态由大量的角分波混合而成. 为了定量描述量子态各分波的组成, 下面给出采用 B 样条函数作为角向基矢时分波权重的表达式. 由于角向 B 样条函数和连带 Legendre 多项式都是定义在 $[-1, 1]$ 上的完备基矢, 因此有

$$(1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} B_{j, k_\xi}(\xi) = \sum_l D_l^j \tilde{P}_l(\xi), \quad (7)$$

式中 $\tilde{P}_l(\xi)$ 是归一化的连带 Legendre 多项式. 由 (7) 式可知 $(1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} B_{j, k_\xi}(\xi)$ 包含有“无限”角分波.

利用 (4), (7) 式和波函数的归一化条件

$$\int |\Psi^m(r, \xi)|^2 r^2 dr d\xi = 1, \text{ 可定义分波权重为}$$

$$W_l = \sum_{ij} \sum_{i'j'} D_l^j D_{l'}^{j'} C_{ij} C_{i'j'} s_{l'i}. \quad (8)$$

其中

$$s_{l'i} = \int B_{i, k_r}(r) B_{l', k_r}(r) r^2 dr,$$

$$D_l^j = \int_{-1}^1 (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} B_{j, k_\xi}(\xi) \tilde{P}_l(\xi) d\xi,$$

且 W_l 满足 $\sum_l W_l = 1$.

由 (4) 式给出的波函数, 偶极跃迁振子强度可由下式给出

$$f_{i \rightarrow j} = \langle E_j - E_i | \Psi_i | \hat{d} | \Psi_j \rangle|^2, \quad (9)$$

其中 $\hat{d} = \sqrt{4\pi/3} r Y_{1q}(\theta, \phi)$, $q = 0, \pm 1$ 分别对应于 π, σ 跃迁, E_i 和 E_j 分别为初、末态能量.

3. 结果与讨论

在计算过程中, 径向样条结点采用指数分布, 这样可以同时给出精确的低能和高能谱. R_{\max} 可以根据计算精度要求和量子态的径向分布确定. 本文 $R_{\max} = 40000 \text{ a.u.}$. 角向样条结点按 Gauss-Legendre 积分点分布, 这样可以包含更多的高的“角分波”. 振子强度的计算涉及初、末态波函数. 实验采用的初态为低能态, 要得到精确的吸收谱, 精确的低能态波函数是必需的, 同时也可评估本文采用的模型势是否合适. 我们先计算了锂原子在零场下低能态的能量值和振子强度, 结果见表 1 和表 2, 表中同时列出其他方法计算的结果供比较.

表 1 锂原子在零场下的部分 p 态能级(单位/a.u.) 和 3s 到 np 态的振子强度

主量子数	能级 $E^{\text{QD}}[15]$	能级 $E^{\text{MP}}[15]$	振子强度 ^[15]	能级 E^{MP} [本文结果]	振子强度 [本文结果]
6	-0.014106892	-0.014110542	1.183×10^{-3}	-0.014110528	1.183×10^{-3}
7	-0.010341701	-0.010344126	0.8566×10^{-3}	-0.010344117	0.8566×10^{-3}
8	-0.007904824	-0.007906499	0.6134×10^{-3}	-0.007906493	0.6134×10^{-3}
9	-0.006237737	-0.006238936	0.4472×10^{-3}	-0.006238932	0.4472×10^{-3}
10	-0.005047335	-0.005048220	0.3336×10^{-3}	-0.005048217	0.3336×10^{-3}
11	-0.004167806	-0.004168478	0.2545×10^{-3}	-0.004168475	0.2545×10^{-3}
12	-0.003499629	-0.003500150	0.1981×10^{-3}	-0.003500148	0.1981×10^{-3}
13	-0.002980139	-0.002980550	0.1570×10^{-3}	-0.002980549	0.1570×10^{-3}
14	-0.002568283	-0.002568613	1.265×10^{-4}	-0.002568612	1.265×10^{-4}
15	-0.002236258	-0.002236527	1.033×10^{-4}	-0.002236526	1.033×10^{-4}
16	-0.001964690	-0.001964912	0.8539×10^{-4}	-0.001964912	0.8539×10^{-4}

注: E^{QD} 表示量子亏损方法计算, E^{MP} 表示模型势方法计算, 下同.

表 2 锂原子在零场下的部分 s 态能级(单位/a.u.) 和 3p 到 ns 态的振子强度

主量子数	能级 $E^{\text{QD}}[15]$	能级 $E^{\text{MP}}[15]$	振子强度 ^[15]	能级 E^{MP} [本文结果]	振子强度 [本文结果]
6	-0.015946323	-0.015945303	0.2651×10^{-1}	-0.015945095	0.2651×10^{-1}
7	-0.011478979	-0.011478611	0.1273×10^{-1}	-0.011478485	0.1274×10^{-1}
8	-0.008656488	-0.008656353	0.7253×10^{-2}	-0.008656271	0.7253×10^{-2}
9	-0.006760216	-0.006760173	0.4578×10^{-2}	-0.006760116	0.4578×10^{-2}
10	-0.005425116	-0.005425110	0.3097×10^{-2}	-0.005425069	0.3097×10^{-2}
11	-0.004449761	-0.004449770	0.2202×10^{-2}	-0.004449740	0.2203×10^{-2}
12	-0.003715618	-0.003715632	0.1627×10^{-2}	-0.003715609	0.1627×10^{-2}
13	-0.003149237	-0.003149253	0.1239×10^{-2}	-0.003149235	0.1239×10^{-2}
14	-0.002703141	-0.002703156	0.9667×10^{-3}	-0.002703142	0.9667×10^{-3}
15	-0.002345530	-0.002345545	0.7696×10^{-3}	-0.002345533	0.7696×10^{-3}
16	-0.002054462	-0.002054475	0.6231×10^{-3}	-0.002054466	0.6231×10^{-3}

表 1 是锂原子在零场下的 p 态的能级和 $3s$ 到 np 态的振子强度, 表 2 类似表 1, 给出的是 s 态的能级和 $3p$ 到 ns 态的振子强度. 表中列出三组理论计算结果, 表中第二列是采用量子亏损理论所得的能级, 第三、五列给出采用模型势计算所得能级(其中, 第三列是有限元基组计算结果, 第五列为本文用 B 样条基组所的结果), 第四、六列给出两种不同基组下采用模型势计算所得的振子强度值. 从表 1、2 中可以看出, 完全不同的理论处理方法(量子亏损理论和模型势方法)所得结果很好地符合, 表明模型势计算的有效性; 采用相同的模型势, 但波函数采用不同的基来描述, 有限元基^[15]和样条基所计算的结果非常吻合. 不同理论之间, 能级有 4 到 5 位有效数字相同. 有限元基和样条基给出的振子强度在 4 个有效数字内完全相同. 这说明零场下, B 样条与模型势相结合的方法, 可以给出合理的结果.

图 1 是锂偶宇称态 $n = 42, m = 1$ 的振子强度谱(相对值, 初态为 $2p_1, \pi$ 激发过程), 磁场 $B = 0.584$ T. 图 1(a) 是本文计算结果, 图 1(b) 采用解析势模型方法^[19]给出的结果, 图 1(c) 是文献 36 给出的实验谱, 从图 1 中可以看出两种不同理论方法所得结果无论是在谱线的位置还是振子强度的分布都符合的很好, 且与实验谱也非常符合. 这说明了这些理论方法是可行的.

图 2 是锂 $n = 43, m = +1$ 的振子强度谱(初态为 $2p_1, \pi$ 激发过程, 基组大小 150×60), 磁场 $B =$

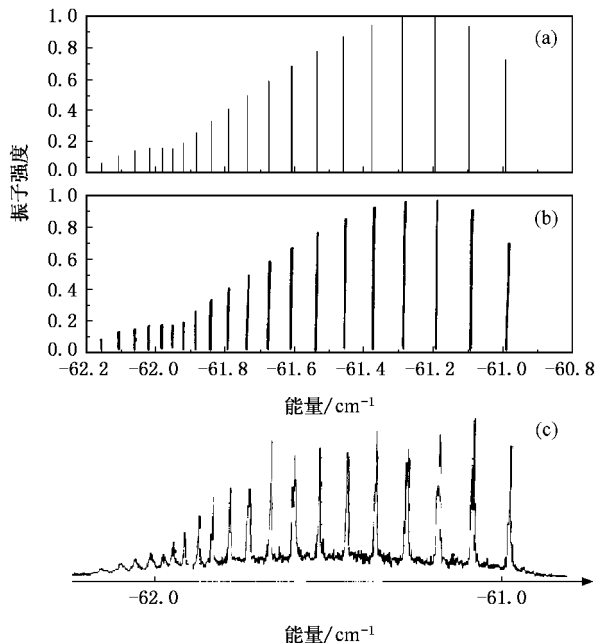


图 1 锂偶宇称态 $n = 42, m = 1$ 的振子强度谱(相对值) (a) 本文计算结果 (b) 文献 19 的理论结果 (c) 文献 36 的实验结果

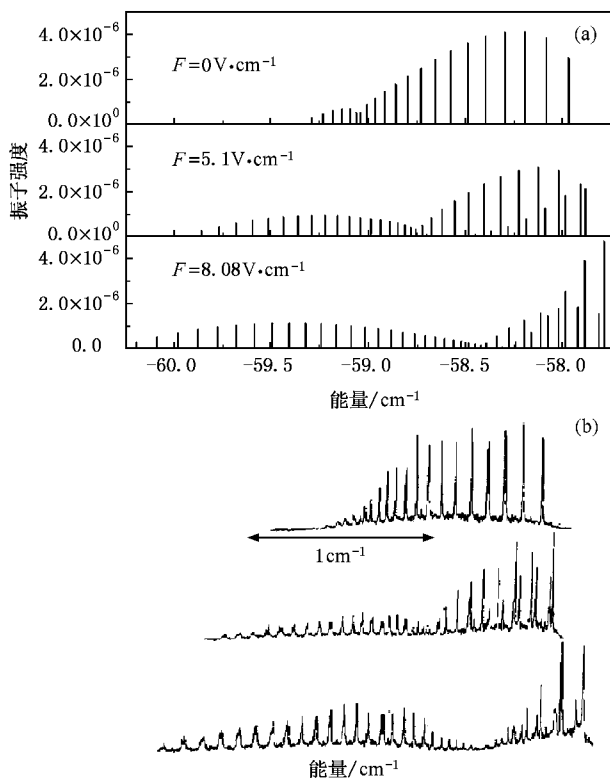


图 2 锂 $n = 43, m = +1$ 的振子强度谱, 磁场 $B = 0.594$ T, F 分别为 $0 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}, 5.1 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}, 8.08 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ (初态为 $2p_1, \pi$ 激发过程) (a) 本文计算结果; (b) 文献 36 的实验结果, 振子强度的值是相对值.

0.594 T, F 分别为 $0 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}, 5.1 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}, 8.08 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$. 图 2(a) 是本文计算结果, 图 2(b) 是相应的实验结果^[36]. 从图 2 中可以看出电场对谱线结构的影响. 由于加了电场, 宇称不再是好量子数, 末态不同宇称的态混合在一起, 出现一些新的谱线. 低能部分和高能部分对电场的敏感程度不同, 谱线的能量间隔和强度的分布也非常不同. 低能部分由近似等间距的谱线组成, 中间有一强度最大的谱线, 这种结构相应与线性 Stark 效应. 而高能部分则出现了“双线结构”, 也就是 Cacciani 指出的有两类不同行为的态存在. 比较图 2(a) 和 2(b), 我们可以看到理论和实验非常吻合.

图 3(a) 是锂原子 $n = 43$ 的振子强度理论谱, 磁场 $B = 0.594$ T, F 分别为 $0 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}, 5.33 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ (初态为 $2p_1, \sigma^-$ 激发过程, 末态 $m = 2$, 基组大小 150×60). 在 $F = 0 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ 的情况下, 有 21 个谱线组分; 在 $F = 5.33 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ 时, 有 41 个谱线组分. 图 3(b) 是实验谱, 但是末态是 $m = 2$ 和 $m = 0$ 的混合

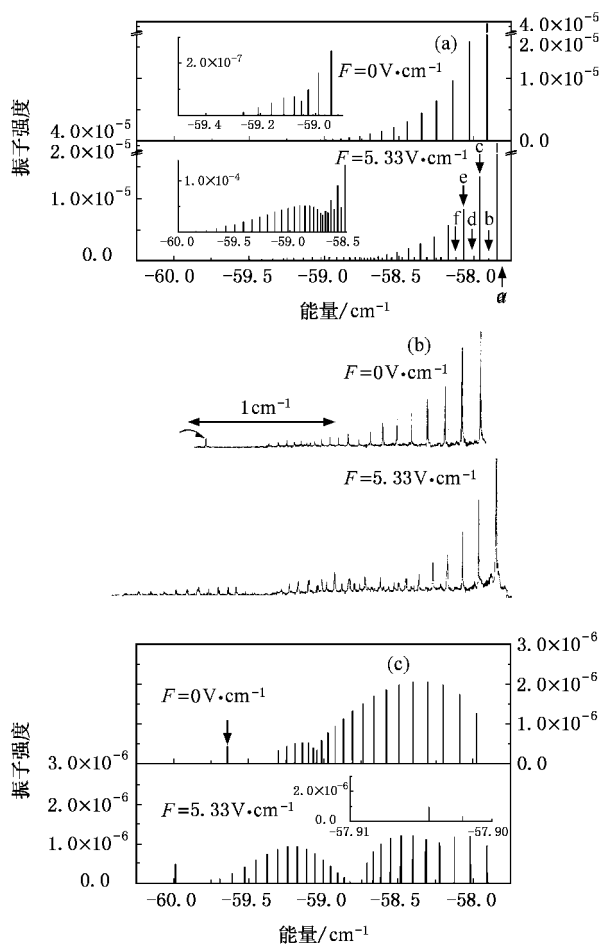


图3 锂 $n=43$ 的振子强度谱, 磁场 $B=0.594\text{ T}$, F 分别为 $0\text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$, $5.33\text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ (初态为 $2p_1$, σ 激发过程) (a) 本文计算结果, 末态 $m=2$, 图中的小图是局部放大图; (b) 文献 [36] 的实验结果, 末态 $m=2$ 和 $m=0$; (c) 本文计算结果, 末态 $m=0$.

物. 图 3(c) 是锂原子 $n=43$, 末态 $m=0$ 的振子强度理论谱. 理论谱中未考虑顺磁项, 由于平行电磁场的情况下, 磁量子数 m 仍是好量子数, 顺磁项仅使谱线有个整体的平移. 从图 3 可以看出, 有电场出现后, 有两种谱线类型出现, 低能部分依然由近似等间距的谱线组成, 是典型的线性 Stark 效应. 高能部分图 3(c) 同样出现了“双线结构”, 但是图 3(a), 3(c), 3(a) 新出现的谱线强度上有很大的差别, 有电场出现后, 图 3(a) 高能部分新出现的谱线在强度较大的两谱线中间, 且强度也很小, 3(c) 新出现的谱线与原来的谱线靠得很近. 由此可以看出磁量子数 m 的值对谱有很大的影响. 从图 3(a), 3(c) 中可以看出整体上 $m=2$ 的谱线强度要比 $m=0$ 的大, 所以实验上所测的谱线以 $m=2$ 的谱线为主, 如图 3(b). $F=0$ 时, 图 3(c) 中箭头所指出的谱线 43 s 即为实验上所测的图 3(b) 指出的谱线. 图 2 和图 3(a) 的情况下, 末态 m 分别为 1 和 2, 这两种情况下, 虽然由于场的作用, 不同的态强烈混合, 但由于没有 s 态的混合, 所以谱线结构非常类氢, 图 3(c) 由于有 s 态的混合, s 态的量子亏损较大, 谱线结构与氢原子有很大的不同.

利用分波分析法, 表 3 列出了图 3(a) $F=5.33\text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ 的情况下, 最右边 6 条谱线的角量子数 l 从 2 到 15 的分波权重. 从表中可以看出不同 l 的态强烈混合. d 分波所占比重较大的谱线, 其振子强度也较大. 也就是 b, d, f 谱线强度远小于 a, c, e 的原因.

表 3 图 3(a) $F=5.33\text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ 中所标记的 6 条谱线 a, b, c, d, e, f 的分波权重 (未给出数字处表示 $W_l < 10^{-3}$)

l	$W_l(a)$	$W_l(b)$	$W_l(c)$	$W_l(d)$	$W_l(e)$	$W_l(f)$
2	0.4055	3.491×10^{-3}	0.1671	4.859×10^{-3}	9.9999×10^{-2}	5.612×10^{-3}
3	0.1210	8.384×10^{-2}	3.224×10^{-2}	9.589×10^{-2}	1.015×10^{-2}	9.017×10^{-3}
4	0.1009	0.1101	2.689×10^{-3}	0.1072	4.366×10^{-3}	8.231×10^{-2}
5	0.1675	4.162×10^{-2}		1.685×10^{-2}	4.541×10^{-2}	2.671×10^{-3}
6	6.159×10^{-3}	0.2453	2.090×10^{-3}	7.677×10^{-2}	2.064×10^{-3}	2.926×10^{-3}
7	0.1133		8.904×10^{-2}	1.228×10^{-3}	0.1389	
8	5.164×10^{-3}	0.2145	1.229×10^{-2}		1.992×10^{-2}	6.130×10^{-2}
9	4.222×10^{-2}	4.775×10^{-2}	0.1474	4.206×10^{-3}	3.755×10^{-2}	4.775×10^{-2}
10	1.476×10^{-2}	8.423×10^{-2}	0.1104	3.669×10^{-2}	1.141×10^{-2}	4.267×10^{-2}
11	7.571×10^{-3}	7.998×10^{-2}	6.045×10^{-2}	0.1014		7.928×10^{-2}
12	1.064×10^{-2}	1.013×10^{-2}	0.1778	1.335×10^{-2}	2.887×10^{-2}	
13		5.242×10^{-2}		0.2102		
14	3.815×10^{-3}		0.1161	1.021×10^{-2}	0.1406	
15		1.726×10^{-2}	1.262×10^{-2}	0.1419	5.006×10^{-2}	4.995×10^{-2}

4. 结 论

本文采用 B 样条基和模型势结合的方法, 计算了锂原子在均匀平行电磁场中的吸收谱, 并与 Cacciani 等的高精度的实验谱^[36]进行比较. 理论谱与实验谱非常吻合, 并以图 3(a) $F = 5.33 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ 的情况为例, 对谱线的振子强度的强弱进行了分析. 从以上所得结果, 可知 B 样条基与模型势结合的方法可以很好地计算碱金属在平行场下的吸收光谱. 本文方法采用 B 样条作为径向基矢有效地克服了以往势模型基方法^[16-23]中基矢不完备的缺点;

这一点对于涉及到连续态有重要贡献的物理量的计算至关重要^[30, 34, 35]. 最近, Jin^[33]等采用 B 样条函数结合模型势方法应用于微波场中碱金属原子的多光子跃迁问题的研究, 与本文不同之处在于角向基矢的选取, 他们采用球谐函数基. 本文采用 B 样条作为角向基矢有效地减少了基矢数目使其能直接推广到更高激发态吸收谱的计算中. 本文方法与复坐标相结合, 可计算共振态的位置、寿命等. 我们期望用该方法来处理碱金属在交叉场下的问题, 甚至可以处理最外层有两个价电子的碱土金属原子在外场中的问题.

- [1] Côté R, Pattard T, Weidemüller M 2005 *J. Phys. B* (Special issue on Rydberg physics) **38** S1-S436
- [2] Abdulla A M, Hogan S, Zhan M S, Connerade J P 2004 *J. Phys. B* **37** L147
- [3] Stania G, Walther H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 194101
- [4] Madroñero J, Buchleitner A 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 263601
- [5] Guest J R, Choi J H, Hansis E, Povilus A P, Raithe G 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 073003
- [6] Lesanovsky I, Schmelcher P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 053001
- [7] Harries J R, Sullivan J P, Sternberg J B *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 133002
- [8] Prince K C, Coreno M, Richter R *et al* 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 093001
- [9] Sathe C J R, Ström M, Agåker M *et al* 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 043002
- [10] Tong X M, Lin C D 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 223003
- [11] Halley M H, Delande D, Taylor K T 1993 *J. Phys. B* **26** 1775
- [12] Santos J P, Mota-Furtado F, Laranjeira M F, Parente F 1999 *Phys. Rev. A* **59** 1703
- [13] Holle A, Wiebusch G, Main J, Welge K H, Zeller G, Wunner G, Ertl T, Ruder H 1987 *Z. Phys. D* **5** 279
- [14] Main J, Schwacke M, Wunner G 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1149
- [15] Schweizer W, Fabinger P 1999 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **72** 33
- [16] Li B W, Chen A Q, Zhang X R, Zhang C X 1987 *Acta Phys. Sin.* **36** 998 (in Chinese) [李白文、陈暖球、张学荣、张承修 1987 物理学报 **36** 998]
- [17] He X H, Li B W, Zhang C X 1989 *Acta Phys. Sin.* **38** 1717 (in Chinese) [何兴虹、李白文、张承修 1989 物理学报 **38** 1717]
- [18] He X H, Li B W, Chen A Q, Zhang C X 1990 *J. Phys. B* **23** 661
- [19] Liu W Y, He X H, Li B W 1994 *Progress in natural science* **4** 241
- [20] Liu W Y, Li B W 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** 5185
- [21] Li Y, Liu W Y, Li B W 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 1433
- [22] Zhang X Z, Jiang H M, Rao J G, Li B W 2003 *Phys. Rev. A* **68** 025401
- [23] Zhang X Z, Jiang H M, Rao J G, Li B W 2003 *J. Phys. B* **36** 4089
- [24] Xi J H, He X H, Li B W 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5806
- [25] 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、李白文 1994 物理学报 **43** 1056]
- [26] Qiao H X, Rao J G, Li B W 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2104 (in Chinese) [乔豪学、饶建国、李白文 1997 物理学报 **46** 2104]
- [27] Qiao H X, Li B W 1999 *Phys. Rev. A* **60** 31 34
- [28] Shi T Y, Qiao H X, Li B W 2000 *J. Phys. B* **33** L349
- [29] Kang S, Li J, Shi T Y 2006 *J. Phys. B* **39** 3491
- [30] Kang S, Liu Q, Zhong Z X, Zhang X Z, Shi T Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3380 (in Chinese) [康 帅、刘 强、钟振祥、张现周、史庭云 2006 物理学报 **55** 3380]
- [31] Meng H Y, Shi T Y, Zhan M S 2006 *J. Atomic Molec. Phys.* **23** 217 (in Chinese) [孟慧艳、史庭云、詹明生 2006 原子与分子物理学报 **23** 217]
- [32] Hui P 2000 *Chin. Phys.* **9** 846
- [33] Jin C, Zhou X X, Zhao S F 2005 *Commun. Theor. Phys.* **44** 1065
- [34] Zhou X X, Lin C D 2000 *Phys. Rev. A* **61** 053411
- [35] Bian X B, Qiao H X, Shi T Y 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2403
- [36] Cacciani P, Liberman S, Luc-Koenig E, Pinard J, Thomas C 1988 *J. Phys. B* **21** 3473
- Cacciani P, Liberman S, Luc-Koenig E, Pinard J, Thomas C 1988 *J. Phys. B* **21** 3499
- Cacciani P, Liberman S, Luc-Koenig E, Pinard J, Thomas C 1988 *J. Phys. B* **21** 3523

Model potential calculations of oscillator strength spectra of lithium atoms in parallel electric and magnetic fields^{*}

Meng Hui-Yan^{1,2,3)} Kang Shuai^{1,3)} Shi Ting-Yun^{1)†} Zhan Ming-Sheng^{1)†}

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

² *Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*

³ *Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China*

(Received 12 September 2006; revised manuscript received 16 October 2006)

Abstract

We present oscillator strength spectra of Rydberg lithium atoms in parallel electric and magnetic fields obtained via the B-spline basis set method combined with model potential. Both the radial and angular wavefunctions are expanded in terms of B-spline functions. The results are in good agreement with previous high-precision experiments. By analyzing the components of partial-wave, we give an explanation to the oscillator strength of part of the spectrum. The method of this paper is simple and effective. It is suggested that the present method can be applied to deal with the problem of Rydberg atom in crossed magnetic and electric field.

Keywords: B-splines, energy levels, oscillator strength, Parallel electric and magnetic fields, Rydberg atom

PACC: 3270, 3260S, 3260V

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10674154, 10474119).

[†] Corresponding author. E-mail: tyshi@wipm.ac.cn, mshzhan@wipm.ac.cn