

用 B-样条函数研究静电场中锂原子里德伯态的性质^{*}

何永林 周效信[†] 李小勇

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2007 年 3 月 14 日收到, 2007 年 4 月 23 日收到修改稿)

用 B-样条函数展开方法, 结合原子的单电子势模型研究了静电场中锂原子里德伯态的性质. 所得到的 Stark 能级图、反交叉位置、反交叉宽度以及振子强度与已有的实验和其他理论结果符合得很好. 表明该方法是一种有效的研究静电场中碱金属原子性质的方法. 最后, 在数值上研究了锂原子里德伯态振子强度谱随静电场场强的演化特征.

关键词: B-样条函数, 振子强度, 反交叉位置, 反交叉宽度

PACC: 3260S, 3270C

1. 引 言

随着激光技术的发展, 人们对里德伯原子的研究不断深入^[1], 实验上可以获得确定的原子里德伯态^[2-4], 这使得里德伯原子的实际应用成为可能^[5-8]. 里德伯原子的能级交叉和反交叉光谱广泛应用于观测里德伯态的性质, 如测量精细和超精细结构、Stark 位移、塞曼位移、能级寿命等. 随着研究的不断深入, 里德伯原子的应用会越来越广泛. 因此, 里德伯原子及其外场效应的研究具有十分重要的意义.

从理论上研究外场中的里德伯原子常借助于数值方法求解体系的薛定谔方程. 近年来, 随着计算机技术的快速发展, B-样条函数由于其优良的性质而被广泛地应用于原子物理的理论研究中^[9]. 利用 B-样条函数研究原子的外场效应方面已取得巨大的成功: 早在 1992 年, Xi 和 Liu 等人将 B-样条函数用于研究氢原子在磁场中的问题等^[10, 11]; 后来, 饶建国等人用 B-样条函数结合复坐标旋转法研究了强磁场中氢原子自离化态的能级及宽度^[12, 13]; Rao 等人于 1995 年又用 B-样条函数研究了氢原子在平行电场和磁场中的问题^[14]; 此后, Cormier 等人引入 B-样条函数研究了氢原子在强激光场中的阈上电离谱^[15]; Zhou 等人以 B-样条函数作为基函数, 研究了模型原

子在强激光场中产生的高次谐波及其电离概率^[16]; 最近, 我们小组利用 B-样条函数研究了钾原子里德伯态间能级的反交叉位置、反交叉宽度和多光子过程^[17, 18], 得到了与实验一致的结果. 这些成功的研究表明 B-样条函数是研究原子与外场相互作用的有效工具.

由于反交叉位置与宽度的计算对所用近似波函数精度的高度敏感性^[19], 使其计算变得比较困难. 安继明等人采用模型势方法计算了锂原子几个里德伯态间的反交叉位置与宽度^[20], 但他们计算所需要的高 n 态量子亏损数是由里兹公式从低 n 态的量子亏损数外推得到的, 不能保证计算精度. 另外, Menéndez 等人用量子亏损轨道方法计算了锂的 Stark 能级以及电场强度保持不变的里德伯吸收跃迁振子强度^[21], 但没有涉及振子强度随电场的演化情况. 已有的研究表明 B-样条函数展开法在反交叉位置与宽度的计算方面有计算量小, 计算结果精确的优点^[17, 18]. 本文利用 B-样条函数结合模型势方法, 在研究静电场中锂原子的能级结构和反交叉位置与宽度的基础上, 在数值上研究了锂原子里德伯态的振子强度谱随静电场场强的演化特征.

2. 理论方法

当碱金属原子处在静电场中(电场方向沿 z 轴)

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10674112)、甘肃省自然科学基金(批准号: 3ZS061-A25-013)和甘肃省教育厅基金(批准号: 0601-23)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhoux@nwnu.edu.cn

时,体系的哈密顿量可由下式给出(采用原子单位):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + Fz, \quad (1)$$

其中 $\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r)$ 是忽略原子自旋-轨道相互作用的零场哈密顿量, F 为静电场的场强. \hat{H}_0 中的 $V(r)$ 是碱金属原子的价电子感受到原子实的势. 当 $V(r)$ 已知时,可以通过适当的数值方法,求解碱金属原子零场下的定态薛定谔方程,获得 \hat{H}_0 的本征值和本征矢. 然后再以 \hat{H}_0 的本征矢为基矢,利用矩阵对角化方法就可得到 \hat{H} 的本征值和本征矢.

2.1. 势模型

当碱金属原子处在高激发态时,价电子远离原子实,此时价电子受到的原子核和其他电子对它的作用可以简化为一个模型势. Marinescu 等人^[22]发展的描述碱金属原子价电子运动的参量调节势模型依赖于价电子的轨道角动量量子数 l , 由下式给出:

$$V_l(r) = -\frac{Z_l(r)}{r} - \frac{\alpha_c}{2r^4} [1 - e^{-(r/r_c)^6}], \quad (2a)$$

其中 α_c 是偶极极化率, r_c 是截断半径,截断半径的引入可以消除极化势在核附近的短程相互作用. 径向电荷数由下式给出:

$$Z_l(r) = 1 + (z-1)e^{-a_1 r} - (a_3 + a_4 r)e^{-a_2 r}, \quad (2b)$$

式中 z 为核电荷数,对于锂原子来说,模型势中的参数 $\alpha_c, r_c, a_1, a_2, a_3, a_4$ 列于文献[22]中.

2.2. B-样条函数

在给定的区间 $[a, b]$ 内,选取 $N+k$ 个节点序列 $\{r_1 \leq r_2 \leq r_3 \leq \dots \leq r_N \leq \dots \leq r_{N+k}\}$, B-样条函数的定义为^[23]

$$B_{i,l}(r) = \begin{cases} 1, & r_i \leq r \leq r_{i+1} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

$$B_{i,k}(r) = \frac{r - r_i}{r_{i+k-1} - r_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{r_{i+k} - r}{r_{i+k} - r_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r), \quad (3)$$

其中 k 为 B-样条函数的阶数, N 为 B-样条函数的数目. B-样条函数为分段多项式,它既具有解析函数的性质,又具有数值函数的性质. 在给定的区间内,任一个有意义的连续可微函数都可以用该区域内的一组 B-样条函数展开. 当以 B-样条函数为基函数时,基函数的完备性与所选的节点序列有关,所

选的节点序列越密,基函数的完备性就越好. B-样条函数的节点序列、阶数和数目的选取可以优化体系的能级和波函数.

本文在计算中,将 B-样条函数的阶数取为 $k=9$, 数目取为 $N=180$, 节点序列由下式给出^[9]:

$$r_i = r_{\min} + (r_{\max} - r_{\min}) \frac{e^{\gamma(\frac{i-1}{n-1})} - 1}{e^{\gamma} - 1},$$

其中 n 为节点总数,空间范围取为 $r_{\min}=0, r_{\max}=3000 \text{ a.u.}$, γ 为可调参量,对 γ 值的调节,可以优化计算结果.

2.3. 薛定谔方程的求解

由于零场下势的中心对称性,零场下锂原子的波函数可以写为

$$\Phi_{nlm} = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

其中 n, l, m 分别是主量子数,角量子数和磁量子数. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 是球谐函数, $R_n(r)$ 是径向波函数. 以 B-样条函数为基函数,径向波函数 $R_n(r)$ 可展开为

$$R_n(r) = \sum_i D_i B_i(r). \quad (5)$$

将(2)(5)两式代入径向薛定谔方程:

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_l(r) \right] R_n(r) = E_n R_n(r), \quad (6)$$

然后方程两边左乘 $B_{j,k}(r)$, 并对 r 积分,得到一个矩阵方程. 用矩阵对角化方法,可获得锂原子径向波函数 $R_n(r)$ 的展开系数 D_i 以及能量本征值 E_n . 由此得到的零场下径向波函数 $R_n(r)$ 有正确的节点数. 同时径向波函数 $R_n(r)$ 还满足正交归一性.

当锂原子处在沿 z 轴方向大小为 F 的电场中时,由(1)式定义的哈密顿量的本征值和本征函数可以用零场波函数 $\Phi_i = |nlm\rangle$ 作为基矢求出. 哈密顿量 $\hat{H} = \hat{H}_0 + Fz$ 的矩阵元形式为

$$H_{nlm, n'l'm'} = \delta_{nlm, n'l'm'} E_n + F nlm |z| n'l'm', \quad (7)$$

对角化上式的哈密顿矩阵,可以得到锂原子在静电场中的能量本征值和本征矢,其本征矢可表示为

$$|\Psi^F\rangle = \sum_n \sum_l U_n^i(F) |\Phi_i\rangle, \quad (8)$$

其中 $U_n^i(F)$ 为系数矩阵. 由于(7)式中关于 z 的非对角元会随着所涉及的两个态之间的能量差的增加而迅速减小,故在计算电场中某一范围内能态的结构时,只需选择零场下这一范围附近的能态作为基

组 就可以达到足够的精度,按照这个原则选取的基组可大大缩短计算时间.

2.4. 振子强度、反交叉位置和宽度

从一个确定的低能态到一个确定的高能态的吸收谱线强度通常用振子强度(原子单位)来表示^[24],即

$$f = \frac{\Delta E}{3} S, \quad (9)$$

需要说明的是,原子的 Stark 态用抛物量子数 $n, n_1, n_2, |m|$ 标记,其中 n 的含义类似主量子数: $n = n_1 + n_2 + |m| + 1, |m| = 0, 1, \dots, (n-1)$, 当 $|m|$ 值给定时, n_1, n_2 的取值范围为 0 到 $n - |m| - 1$. 在我们所考虑的 $|3, 0, 0, 0\rangle \rightarrow |n, n_1, n_2, 0\rangle$ 的吸收跃迁中

$$\begin{aligned} S^{1/2} &= \Psi^s \parallel P^{(1)} \parallel \Psi^s \\ &= \sum_n \sum_l \sum_{n'} \sum_{l'} U_{nl}^i(F) U_{n'l'}^s(F) \Phi_i \parallel P^{(1)} \parallel \Phi_{l'} \\ &= \sum_n \sum_l \sum_{n'} \sum_{l'} U_{nl}^i(F) U_{n'l'}^s(F) \\ &\quad \times (-1)^m \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 R_{nl} |r| R_{n'l'}, \quad (10) \end{aligned}$$

其中 Ψ^s 表示初态 $|3, 0, 0, 0\rangle$ 的波函数, Ψ^s 表示末态 $|n, n_1, n_2, 0\rangle$ 的波函数.

原子在静电场中 Stark 能级之间的反交叉位置与宽度可定义为在某一能量范围内, ΔE 取得极小值时所对应的电场强度的大小称为反交叉位置,而此时的 ΔE 的值称为反交叉宽度. 由(7)式可知 Stark 态的能量是电场强度 F 的函数,故通过扫描静电场场强 F ,即可获得锂原子 Stark 态之间的反交叉位置与宽度.

3. 结果与讨论

本文利用 B-样条函数展开方法,得到了零场下锂原子里德伯态的波函数和能级值. 表 1 列出了本文计算的零场下锂原子 p 态部分能级值(E^{MP}),为了便于与其他理论结果进行比较,表中还列出了其他作者分别利用模型势方法(E^{MP1})和量子亏损方法(E^{QD})所得的能级值^[25]. 从表中可以看到本文的结果与其他两种理论的结果符合得很好,说明用 B-样条函数展开方法得到的零场下的能级值有很高的精度,这保证了下一步计算静电场中锂原子能级时有

很好的基矢.

表 1 零场下里德伯锂原子的 p 态能级值 E^{MP} (单位: Hartree)¹⁾

$n(p)$	E^{MP}	$E^{\text{MP1}}[25]$	$E^{\text{QD}}[25]$
6	-0.014106495	-0.014110542	-0.014106892
7	-0.010341418	-0.010344126	-0.010341701
8	-0.079046183	-0.007906499	-0.007904824
9	-0.006237583	-0.006238936	-0.006237737
10	-0.005047218	-0.005048220	-0.005047335
11	-0.004167716	-0.004168478	-0.004167806
12	-0.003499558	-0.003500150	-0.003499629
13	-0.002980082	-0.002980550	-0.002980139
14	-0.002568236	-0.002568613	-0.002568283
15	-0.002236219	-0.002236527	-0.002236258
16	-0.001964658	-0.001964912	-0.001964690
17	-0.001739719	-0.001739931	-0.001739745
18	-0.001551309	-0.001551489	-0.001551332
19	-0.001391928	-0.001392081	-0.001391947
20	-0.001255904	-0.001256035	-0.001255921
21	-0.001138887	-0.001139000	-0.001138901
22	-0.001037493	-0.001037592	-0.001037506
23	-0.000949061	-0.000949148	-0.000949072
24	-0.000871472	-0.000871548	-0.000871481
25	-0.000803022	-0.000803090	-0.000803031

1) 1 Hartree = 110.5×10^{-21} J.

3.1. Stark 能级结构

当锂原子处在静电场中时,用零场下的波函数作为基函数,我们计算了锂原子在 $n = 15$ 时的 Stark 能级,图 1、图 2 分别给出了 $|m| = 1$ 和 $|m| = 0$ 时的 Stark 能级结构. 为了与实验结果进行比较,图 3、图 4 分别给出了 Zimmerman 等人相应的实验结果^[26]. 由图可以看出,本文的结果与实验结果符合得很好. 对于给定的 $n, |m| = 1$ 的态,其 Stark 能级图(图 1)显示出类氢的特征,能级几乎随电场线性变化,能级反交叉宽度非常小. 这是因为在计算 $|m| = 1$ 的能级结构时,量子亏损数较大的 $l = 0$ 的态不能包含在基函数中,因此这类能态的量子亏损数较小;与氢原子 Stark 能级图的明显差别在于零场时锂原子 p 态能级与相同 n 的其他能级不简并,随着电场强度的不断增加,能级“p”逐渐融入这一 n 簇. 而对于给定的 $n, |m| = 0$ 的态,其 Stark 能级结构(图 2)显示出较大的反交叉宽度,它的特征与 $|m| = 1$ 态的特征明显不同,这种不同是由于在计

算 $|m| = 0$ 的能级结构时,量子亏损数较大的 $l = 0$ 的态必需包含在基函数中,因此这类能态具有较大的量子亏损数,导致了它与氢原子在静电场中的 Stark 能级结构有明显的不同; $|m| = 0, 1$ 态的 Stark

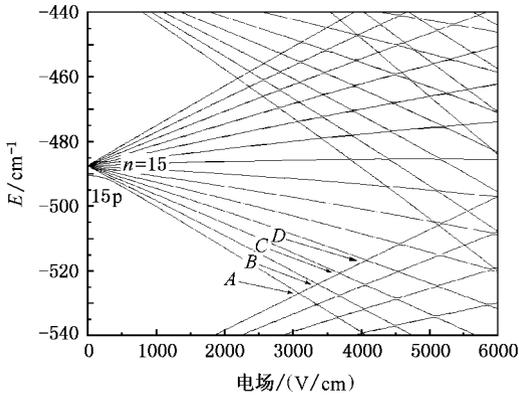


图 1 $n = 15, |m| = 1$ 锂原子 Stark 能级结构的计算结果

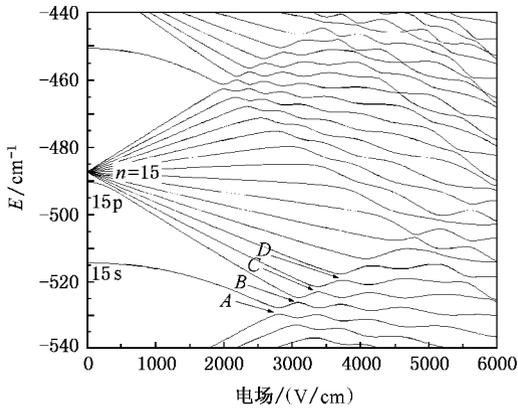


图 2 $n = 15, |m| = 0$ 锂原子 Stark 能级结构的计算结果

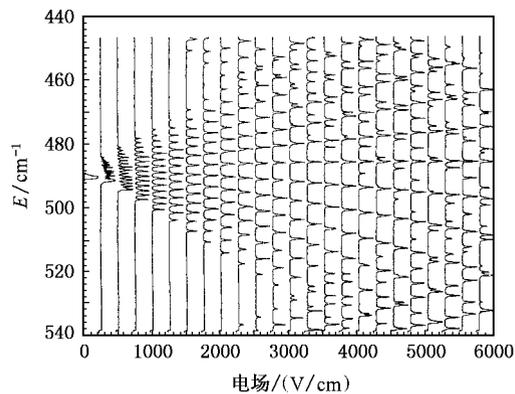


图 3 $n = 15, |m| = 1$ 锂原子 Stark 能级结构的实验结果^[26]

能级结构之间还有一个明显差别在于 $|m| = 1$ 态的 Stark 能级图中具有“s”态特征的能级没有出现,即

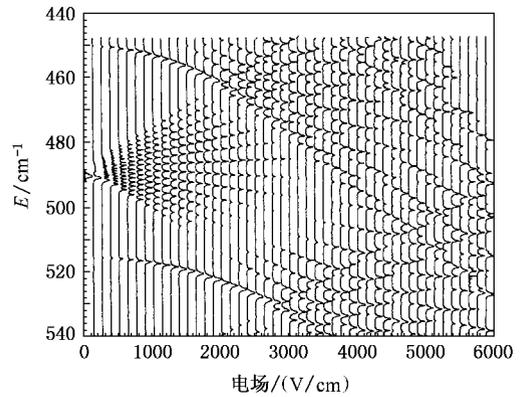


图 4 $n = 15, |m| = 0$ 锂原子 Stark 能级结构的实验结果^[26]

较 $|m| = 0$ 态的 Stark 能级少了一个能级,这是由抛物量子数 n_1 的取值范围以及 n 和 n_1, n_2 之间的关系决定的: $n_1 = 0, \dots, n - |m| - 1, n = n_1 + n_2 + |m| + 1$. $|m|$ 每增加一个单位,其所对应的能态的 Stark 能级图中相应的就有一个能级消失.在此基础上,本文还计算了 $n = 13-19, |m| = 0$ 时的 Stark 能级结构.图 5 给出了我们的计算结果.对于 $|m| = 1$ 的情况,其 Stark 能级结构(图中未给出)的大范围特征与 $|m| = 0$ 时的大范围特征相似.由图 5 可看出,其 Stark 能级图有如下特征: n 越大,相邻的两个 Stark 簇之间的第一个反交叉位置处的电场值越小,即 n 值越大,该簇与相邻簇之间就越早出现 n 的混合.

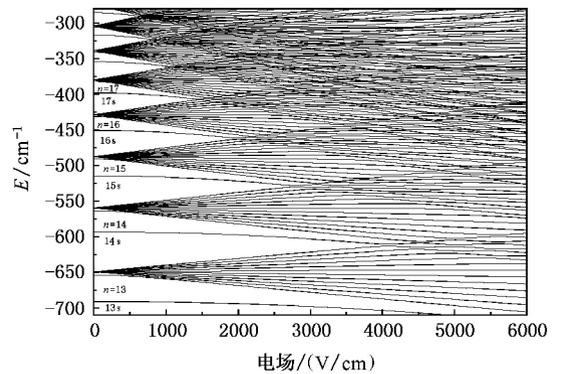


图 5 $n = 13-19, |m| = 0$ 锂原子 Stark 能级结构的计算结果

3.2. 反交叉位置和宽度

为了叙述简便,当 $|m|$ 一定时,用 (n, n_1) 来标记 Stark 态.本文计算了 $|m|$ 分别为 0 和 1 情况下, n 在 15—22 之间的 Stark 态和 Stark 态 $(n-1, n-2)$ 之间的反交叉位置和宽度,类似于图 1、图 2 中的 A, B, C, D 所标的不同 n 和 $|m|$ 的反交叉位置和宽度.

表 2 和表 3 列出了本文的计算结果和文献 [20] 的计算结果. 尽管文献 [20] 仅计算了很少几个态的反交叉位置和宽度, 由表 2、表 3 可看出, 两者符合得很好. 两种理论的反交叉位置值之间的最大相对差值

为 8.1%, 反交叉宽度值之间的最大相对差值为 3.95%. 表中还给出了我们计算的其他态之间的反交叉位置与宽度, 由于缺乏这方面的数据, 还有待于其他理论和实验进一步进行验证.

表 2 态 $(n-1, n-2)$ 和 (n, n_1) 之间的反交叉宽度 ($n=15-22, n_1=0-3$) (单位为 cm^{-1})

n	m =0				m =1				
	n ₁ =0		n ₁ =1	n ₁ =2	n ₁ =3	n ₁ =0	n ₁ =1	n ₁ =2	n ₁ =3
	th1	th2	th1						
15	1.8869	1.8859	1.4263	1.5830	1.8291	0.1548	0.2139	0.2544	0.2846
16	1.4784	1.4775	1.0737	1.1761	1.3379	0.1116	0.1546	0.1841	0.2064
17	1.1761	1.1806	0.8231	0.8917	1.0015	0.0821	0.1139	0.1359	0.1526
18	0.9483	0.9478	0.6410	0.6882	0.7646	0.0615	0.0855	0.1022	0.1156
19	0.7737	0.7846	0.5063	0.5394	0.5938	0.0468	0.0651	0.0779	0.0877
20	0.6381	0.6491	0.4049	0.4287	0.4681	0.0361	0.0503	0.0603	0.0679
21	0.5312	0.5522	0.3275	0.3448	0.3739	0.0282	0.0394	0.0473	0.0533
22	0.4462	0.4459	0.2675	0.2804	0.3023	0.0223	0.0312	0.0374	0.0423

注: 其中 th1 为本文计算结果, th2 引自文献 [20].

表 3 态 $(n-1, n-2)$ 和 (n, n_1) 之间的反交叉位置 ($n=15-22, n_1=0-3$) (单位为 V/cm)

n	m =0				m =1				
	n ₁ =0		n ₁ =1	n ₁ =2	n ₁ =3	n ₁ =0	n ₁ =1	n ₁ =2	n ₁ =3
	th1	th2	th1						
15	2808.5	2810	3092.9	3383.7	3722.9	3089.5	3359.7	3682.6	4074.9
16	1999.8	2000	2191.1	2380.9	2599.1	2192.1	2368.4	2576.3	2824.6
17	1455.2	1460	1587.3	1714.9	1859.6	1590.0	1708.5	1846.4	2008.9
18	1079.3	1080	1172.8	1260.6	1359.1	1175.9	1257.5	1351.5	1461.5
19	814.1	810	881.6	943.5	1012.2	884.7	942.1	1007.6	1083.1
20	623.4	620	673.1	717.6	766.4	675.9	717.1	763.8	817.0
21	483.9	480	521.1	553.6	589.0	523.6	553.6	587.5	625.7
22	380.2	380	408.5	432.6	458.7	410.6	432.9	457.9	485.9

注: 其中 th1 为本文计算结果, th2 引自文献 [20].

3.3. 振子强度谱及其演化

为了进一步检验 B-样条函数展开法的有效性, 本文计算了锂原子在电场 $F=2125\text{V}/\text{cm}$ 时, 由初态 $|3, 0, 0, 0\rangle$ 到末态 $|n, n_1, n_2, 0\rangle$ 的吸收跃迁振子强度谱. 图 6、图 7 分别给出了本文的计算结果和 Zimmerman 等人的实验结果^[26]. 从图中可以看出, 除图中标出的强度 a 与实验存在一些差异外, 两者符合得很好. 但本文的计算结果与文献 [21] 的计算结果是一致的, 说明用 B-样条函数展开法计算振子强度同样能得到很好的结果.

由于 B-样条函数展开法能有效地计算振子强度, 我们还可以通过计算进一步说明电场强度的变化对振子强度谱的影响. 为此, 我们计算了锂原子的能量范围为 -350cm^{-1} — -700cm^{-1} , 电场强度分别为 $1500\text{V}/\text{cm}$, $2000\text{V}/\text{cm}$, $2500\text{V}/\text{cm}$, $3000\text{V}/\text{cm}$, $3500\text{V}/\text{cm}$ 时的振子强度谱. 图 8 给出了我们的计算结果, 其中强度超出 50 的谱线用数字标出了其强度的大小. 从图可看出, 振子强度谱的演化有如下特征: 1) 当电场强度较小时, 振子强度的分布有一定的“周期性”, 即振子强度近似“周期性”地出现一个较大的值, 在这样两个较大值之间振子强度的分布

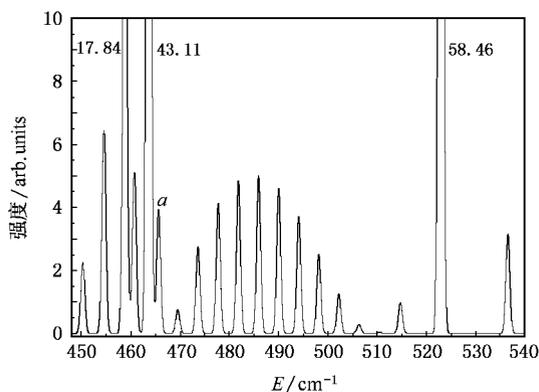


图 6 $|m| = 0$ 电场强度为 2125 V/cm 时锂原子的振子强度高斯展宽谱

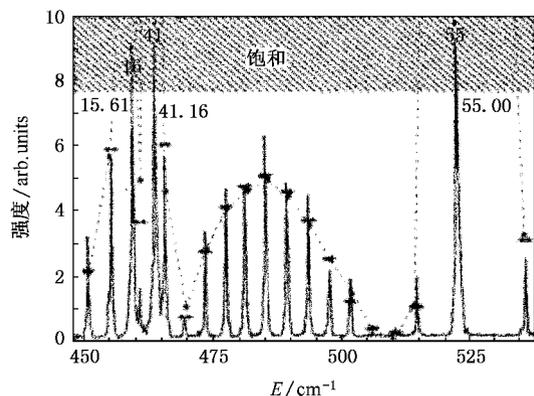


图 7 $|m| = 0$ 电场强度为 2125 V/cm 时锂原子振子强度谱的实验结果(箭头和圆点分别表示 Zimmerman 等人和 Menéndez 等人计算结果^[21])

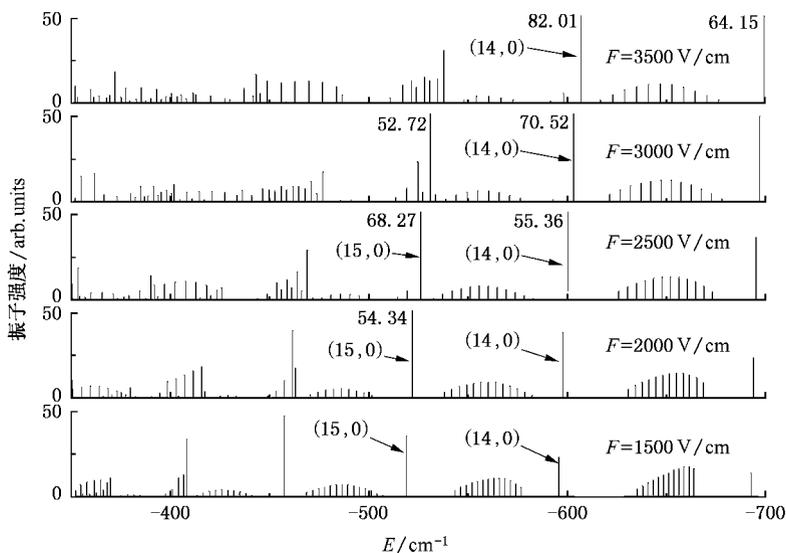


图 8 $|m| = 0$ 不同电场强度下锂原子的能量范围在 $-350.0 \sim -700.0 \text{ cm}^{-1}$ 的振子强度谱

呈现出中间大两边小的特征。随着电场强度的增大,这种“周期性”逐渐被破坏,能量较高处的谱线先出现混乱。2) 在未出现混乱时,那些“周期性”出现的强度较大的谱线(如图中的(14,0)谱线)随电场强度的增大而向能量较低的方向移动,而两个较强谱线之间的那些谱线(如图中标出的 82.01 和 64.15 两谱线之间的谱线)的移动方向明显与较强谱线的移动不同,其中一些向能量低的方向移动,而另一些则向能量高的方向移动,即由集中分布逐渐向两边散开。3) 较强谱线的强度随电场强度的增大而增大,直到出现混乱时,其强度才开始降低(如图中的(15,0)所标出的谱线),而两个较强谱线之间的那些谱线的强度随电场强度的增大而减小。到出现混乱时,各强度重新分布。能量较高处的谱线先出现混乱的原因是 n 值越大,该 Stark 簇与相邻的 Stark 簇之间越早出现 n 的混合(图 5)。这个演化特征也从侧面体现了零场下的偶极跃迁选择定则在外加电场情况下失效的过程: n 值越小的能级越靠近原子实,越不容易受到外加电场的影响,这些能级比较接近零场时的能级。当图 8 中“周期性”地出现较大的振子强度时,其跃迁特征比较接近零场下的偶极跃迁选择定则的描述,当电场强到足以影响这些能级时,其振子强度谱的分布开始变化,逐渐开始混乱,即零场下的偶极跃迁选择定则在外加电场情况下不再适用。另外,各谱线的位置随电场强度的变化而出现移动,这正是 Stark 效应的结果,同时移动方向的不同体现出 Stark 效应中不仅出现谱线的红

移,而且也出现谱线的蓝移^[1].之所以振子强度谱的分布出现混乱,并且其强度大小发生变化,是因为当电场强度逐渐增大时,不同的 n 簇出现混合,从而导致波函数的变化,最终引起振子强度的大小和位置的重新分布.

4. 结 论

本文用 B-样条展开法得到了锂原子的 Stark 能级结构、反交叉位置、反交叉宽度和振子强度,我们的计算结果与实验结果或其他理论结果符合得很

好.在此基础上,本文还在数值上获得了锂原子里德伯态的随静电场场强演化的振子强度谱.振子强度谱随静电场场强演化的特征说明外加静电场引起里德伯态振子强度的重新分布,由零场下的“周期性”分布逐渐演变为无明显特征的混乱分布,表明零场下的偶极跃迁选择定则在外加电场情况下不再适用.此外,振子强度谱在静电场中的演化还体现出 Stark 效应中不仅出现谱线的红移,而且也出现谱线的蓝移.本文的研究表明 B-样条函数展开法结合原子的势模型能很好地处理锂原子在外电场中的问题.

- [1] Gallagher T F 1988 *Rep. Prog. Phys.* **51** 143
- [2] Freeman R R, Bjorklund G C 1978 *Phys. Rev. Lett.* **40** 118
- [3] Svanberg S, Tsekeris P, Happer W 1973 *Phys. Rev. Lett.* **30** 817
- [4] Littman M G, Kash M M, Kleppner D 1978 *Phys. Rev. Lett.* **41** 103
- [5] Dunning F B, Dunham H R, Oubre C, Nordlander 2003 *Nucl. Instrum. Meth. B* **203** 69
- [6] Connerade J P 2003 *Highly Excited Atoms* (Beijing : Science Press) (in Chinese)[康纳德 著,詹明生、王 谨 译 高激发原子(北京 科学出版社)]
- [7] Kenji Suzuki, Kenji Takashima, Yukio Furukawa 2006 *Science and Technology of Advanced Materials* **7** 456
- [8] Stevens G D, Iu C-H, Bergeman T, Metcalf H J, Seipp I, Taylor K T, Delande D 1996 *Phys. Rev. A* **53** 1349
- [9] Bachau H, Cormier E, Decleva P, Hansen J E, Martin F 2001 *Rep. Prog. Phys.* **64** 1815
- [10] Xi J H, Wu L J, He X H, Li B W 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5806
- [11] Liu W Y, Xi J H, He X H, Wu L J, Li B W 1993 *Phys. Rev. A* **47** 3151
- [12] Rao J G, Xi J H, Li B W 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 1894 (in Chinese)[饶建国、习金华、李白文 1995 物理学报 **44** 1894]
- [13] 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、刘文渝、李白文 1994 物理学报 **43** 1056]
- [14] Rao J G, Li B W 1995 *Phys. Rev. A* **51** 4526
- [15] Cormier E, Lambropoulos P 1997 *J. Phys. B* **30** 77
- [16] Zhou X X, Li B W, Lin C D 2001 *Phys. Rev. A* **64** 43403
- [17] Jin C, Zhou X X, Zhao S F 2007 *Commun. Theor. Phys.* **47** 119
- [18] Jin C, Zhou X X, Zhao S F 2005 *Commun. Theor. Phys.* **44** 1065
- [19] Li Y, Rao J G, Li B W 1997 *Opt. Commun.* **135** 55
- [20] An J M, Zhou G H 1998 *J. At. Mol. Phys.* **15** 407 (in Chinese) [安继明、周国华 1998 原子与分子物理学报 **15** 407]
- [21] Menéndez J M, Martín I, Velasco A M 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 12926
- [22] Marinescu M, Sadeghpour H R, Dalgarno A 1994 *Phys. Rev. A* **49** 982
- [23] de Boor C 1978 *A Practical Guide to Splines* (New York : Springer)
- [24] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (San Diego : University of California Press) p424
- [25] Schweizer W, Faßbinder, Gonzalez-Ferez R 1999 *Atom. Data. Nucl. Data.* **72** 33
- [26] Zimmerman M L, Littman M G, Kash M M, Kleppner D 1979 *Phys. Rev. A* **20** 2251

Study of Rydberg states of lithium in a static electric field using B-spline functions^{*}

He Yong-Lin Zhou Xiao-Xin[†] Li Xiao-Yong

(College of Physics and Electronic Engineering , Northwest Normal University , Lanzhou 730070 , China)

(Received 14 March 2007 ; revised manuscript received 23 April 2007)

Abstract

The B-spline expansion technique and the method of model potential of atom have been applied to study the properties of Stark states of lithium. Our results for Stark maps , oscillator strength distributions , avoided crossing positions and widths for Li are in good agreement with other reported theoretical calculations and experimental measurement. It shows that the method we used can be applied to investigate the properties of alkali-metal atoms in external static electric field. Finally , for the first time , we obtained the evolution of the oscillator strength spectrum of Li with varying static electric field.

Keywords : B-spline , oscillator strength , avoided crossing position , avoided crossing width

PACC : 3260S , 3270C

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674112) , the Natural Science Foundation of the Gansu Province , (Grant No. 3ZS061-A25-013) and the Foundation of Education Department of Gansu Province (Grant No. 0601-23) .

[†] Corresponding author. E-mail : zhouxx@nwnu.edu.cn