

相对论多组态相互作用方法计算 Mg^+ 离子同位素位移

余庚华 颜辉 高当丽 赵朋义 刘鸿 朱晓玲 杨维

Calculation of isotope shift of Mg^+ ion by using the relativistic multi-configuration interaction method

Yu Geng-Hua Yan Hui Gao Dang-Li Zhao Peng-Yi Liu Hong Zhu Xiao-Ling Yang Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 013101 (2018) DOI: 10.7498/aps.20171817

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20171817>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

采用相对论多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法对 Mg 原子同位素位移的理论研究

Theoretical calculations on isotope shifts of Mg I by using relativistic multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock method

物理学报.2017, 66(11): 113101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.113101>

理论研究 B_2 分子 $X^3\Sigma_g^-$ 和 $A^3\Pi_u$ 态的光谱性质

Study on spectroscopic properties of B_2 ($X^3\Sigma_g^-$, $A^3\Pi_u$) molecule

物理学报.2012, 61(20): 203101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.203101>

镁原子碰撞激发微分截面和 Stokes 参数的理论研究

A theoretical study on electron impact excitation differential cross sections and Stokes parameters of Mg atom

物理学报.2012, 61(10): 103102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.103102>

相对论效应对类锂离子能级结构及辐射跃迁性质的影响

The effect of relativity on the structures and transition properties of Li-like ions

物理学报.2012, 61(9): 093106 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.093106>

相对论多组态相互作用方法计算 Mg⁺ 离子同位素位移*

余庚华¹⁾ 颜辉^{2)†} 高当丽³⁾ 赵朋义⁴⁾ 刘鸿¹⁾ 朱晓玲¹⁾ 杨维¹⁾

1) (成都大学信息科学与工程学院, 成都 610106)

2) (华南师范大学, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

3) (西安建筑科技大学理学院, 西安 710055)

4) (湖北师范大学物理与电子科学学院, 黄石 435002)

(2017年8月11日收到; 2017年10月11日收到修改稿)

采用相对论多组态相互作用方法研究了 Mg⁺ 离子 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 两条跃迁谱线的特殊质量位移系数和场位移因子, 并计算了中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的 Mg⁺ 离子的同位素位移. 计算结果与其他理论的计算值符合得比较好, 与最新的实验测量结果比较, 相对误差在 0.13% 到 0.28% 范围, 是目前最接近 Mg⁺ 离子同位素位移实验测量的理论计算结果. 该计算结果可为 Mg⁺ 离子同位素位移实验和理论研究提供参考, 能够用于 Mg⁺ 离子的短寿命同位素的光谱测量实验以及利用 Mg⁺ 离子开展幻中子数 $N = 8$ 和 $N = 20$ 附近的奇异原子核特性研究等. 所用的计算方法和电子激发模式也可以推广到其他核外电子数为 11 的多电子体系, 用于开展相应的原子光谱结构计算和同位素位移的理论研究.

关键词: 同位素位移, 组态相互作用, 轨道波函数, 镁离子

PACS: 31.30.Gs, 31.15.am, 21.10.Gv, 32.10.Bi

DOI: 10.7498/aps.67.20171817

1 引言

同位素位移 (isotope shift, IS) 的理论和实验研究应用广泛, 是基础物理研究的热点内容之一^[1-3]. IS 是研究原子核性质的有效手段之一, 通过测量 IS 可以获得核电荷半径、磁偶极矩、电四极矩、核自旋和超精细结构等重要的原子数据^[4-7]; 在基础物理领域, IS 可以用于检验量子力学计算方法和标准模型理论, 研究精细结构常数 α 的时空演化性质^[8-10]; 在天体物理的研究中, IS 可以用于研究黑洞的性质和霍金辐射^[11-13]. 此外, IS 的应用还包括原子分子精密谱、光频标、冷原子物理和原子的激光冷却与囚禁等方面^[14-17]. 对绝大多数元素而言, 可供参考的 IS 实验数据很少, 更多的时

候需要进行理论计算. 因此, 在准确计算 IS 方面取得的任何进展都显得特别有意义. 近年来, Mg 元素 (核电荷数 $Z = 12$) 的 IS 效应研究一直受到关注^[18-20]. 和测量类星体 (quasars and quasi-stellar object, QSO) 的 C 同位素 (核电荷数 $Z = 6$) 吸收丰度来检验宇宙的化学演化模型类似^[21], 在的一些的化学演化模型中, 大量的中等质量恒星会产出 Mg 同位素, 研究这些恒星中 Mg 同位素的相对丰度变化可以为恒星演化提供相应的直接证据^[22]. 同时, Mg 的同位素很多, 半衰期在在几十毫秒至几十小时的同位素有十几个, 其中包括幻中子数 $N = 8$, 18 和 28 的同位素, 这些短寿命同位素是研究反转岛附近原子核奇特性质的研究对象^[23,24], 通过研究这些同位素的 IS 可以帮助我们获得相应的奇异原子核的重要性质.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11304093, 11604253)、陕西省青年科技新星项目 (批准号: 2015KJXX-33)、四川省教育厅科研基金 (批准号: 14ZB0375) 和广东省量子调控工程与材料重点实验室开放基金 (批准号: 00201607) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yanhui@scnu.edu.cn

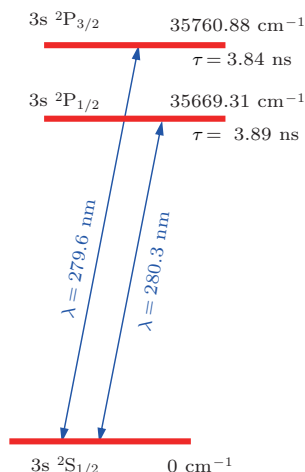

 图1 Mg^+ 离子基态和低激发态能级图

Fig. 1. The diagram of ground and low lying energy levels of Mg^+ ion.

我们选择 Mg^+ 离子基态到低激发态 $3s^2\text{S}_{1/2}$ — $3s^2\text{P}_{1/2}$ 和 $3s^2\text{S}_{1/2}$ — $3s^2\text{P}_{3/2}$ 两条跃迁谱线作为研究对象, 计算其同位素位移. 跃迁能级如图 1 所示, 这两条跃迁对应的波长分别为 280.3 和 279.6 nm. 原子谱线的 IS 包括两方面的贡献, 原子核的有限质量引起的质量位移 (mass shift, MS) 和原子核的电荷分布引起的场位移 (field shift, FS). 质量位移又可分为正常质量位移 (normal mass shift, NMS) 和特殊质量位移 (specific mass shift, SMS). 理论计算 IS 的难点主要在于 SMS 和 FS, 常用的处理方式有组态相互作用 (configuration interaction, CI)、多体微扰论 (many-body perturbation theory, MBPT)、耦合簇方法、Dirac-Fock-Sturm (DFS) 方法以及 Dirac-Hartree-Fock (DHF) 方法等, 由此发展起来的 CI+MBPT [25–27]、相对论耦合簇 [28]、CI+DFS [29,30] 和多组态 DHF (multi-configuration Dirac-Hartree-Fock method, MCDHF) [31–33] 等计算方法在 IS 的理论研究中取得了比较好的结果.

在 Mg^+ 离子的 IS 计算中采用 MCDHF 方法, 结合相对论组态相互作用 (relativistic configuration interaction, RCI) 和自洽场 (self-consistent field, SCF) 方法对电子波函数进行优化, 并在 RCI 计算中引入 Breit 近似, 得到了 Mg^+ 离子 $3s^2\text{S}_{1/2}$ — $3s^2\text{P}_{1/2}$ 和 $3s^2\text{S}_{1/2}$ — $3s^2\text{P}_{3/2}$ 两条跃迁谱线的 SMS 系数和 FS 因子, 并计算了中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的 Mg^+ 离子同位素位移. 用 RCI 和 MCDHF 方法计算 Mg^+ 离子 IS 的理论结果与用其他理论方法得到的计算结果符合得比较好, 与最新的 Mg^+ 离子 IS 测量实验结果相比也符合得很好.

2 理论方法

2.1 同位素位移一般理论

考虑能级 l 和 u 之间的一条原子跃迁谱线, 能级 l 和 u 对应的能量分别为 E_u 和 E_l ($E_u > E_l$), 原子谱线跃迁频率为 ν ; 两个同位素对应的质量数分别为 A 和 A' ; 则能级 l 和 u 之间跃迁 $h\nu = E_u - E_l$ 的 IS 可以表示为 [19,32,33]:

$$\delta\nu^{A,A'} = (\Delta K^{\text{NMS}} + \Delta K^{\text{SMS}}) \left(\frac{1}{M} - \frac{1}{M'} \right) + F\delta\langle r^2 \rangle^{A,A'}, \quad (1)$$

其中, $\delta\nu^{A,A'}$ 是该原子跃迁谱线的 IS; ΔK^{NMS} , ΔK^{SMS} 和 F 分别为 NMS 系数、SMS 系数和 FS 因子; M 和 M' 分别是同位素 A 和 A' 对应的原子核质量, $\delta\langle r^2 \rangle^{A,A'}$ 是同位素 A 和 A' 原子核方均根电荷半径的平方差.

NMS 系数可以表示为

$$\Delta K^{\text{NMS}} = -\frac{m_e}{M_A} \nu = -\frac{\nu}{1823}, \quad (2)$$

其中 m_e 是电子质量, M_A 是单位原子质量, 1823 是单位原子质量与电子质量的比值. 引入 SMS 算符:

$$H_{\text{SMS}} = \frac{1}{2M} \sum_{i \neq j}^N \left[\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j - \frac{\alpha Z}{r_i} \left(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{p}_j + \frac{(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{r}_i) \mathbf{r}_i}{r_i^2} \cdot \mathbf{p}_j \right) \right], \quad (3)$$

其中 Z 为核电荷数, α 为精细结构常数, $\boldsymbol{\sigma}_i$ 是 (4×4) 狄拉克矩阵.

设能级 i ($i = l, u$) 对应的电子波函数为 $|\Psi_i\rangle$, 则该能级的 SMS 系数表示为

$$K_i^{\text{SMS}} = M \langle \Psi_i | H_{\text{SMS}} | \Psi_i \rangle. \quad (4)$$

于是, 能级 l 和 u 之间跃迁的 SMS 系数可以表示为

$$\Delta K^{\text{SMS}} = K_u^{\text{SMS}} - K_l^{\text{SMS}}. \quad (5)$$

场位移因子 F 正比于原点 $r = 0$ 处的电子概率密度的变化:

$$F = \frac{2\pi}{3h} Z \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \Delta|\Psi(0)|^2, \quad (6)$$

$$\Delta|\Psi(0)|^2 = \Delta\rho^e(0) = \rho_u^e(0) - \rho_l^e(0), \quad (7)$$

其中, $\rho_i^e(0)$ ($i = l, u$) 是原点 $r = 0$ 处的电子电荷密度.

用上述公式可以分别计算 NMS, SMS 和 FS 的贡献, 三者相加即是总的 IS.

2.2 MCDHF 和 RCI 数值计算方法

在 MCDHF 方法中, 原子态波函数 (atomic state wave function, ASF) 可以表示成组态函数 (configuration state function, CSF) 的线性叠加 [31–33]:

$$|\Psi_{PJM_J}\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} |\Phi(\gamma_{\mu} PJM_J)\rangle, \quad (8)$$

其中, P 为宇称, J 是角动量量子数, M_J 是角动量 J 的 z 分量, $\{c_{\mu}\}$ 是叠加系数, $\{\gamma_{\mu}\}$ 是标识 CSFs 的一组量子数. 叠加系数 $\{c_{\mu}\}$ 和 CSFs 通过 SCF 方法进行同步优化. 用 RCI 方法开展计算时, 将 Breit 相互作用作为微扰项进行考虑.

我们用 GRASP2K 原子结构计算程序包 [31] 和 RIS3 同位素位移计算程序包 [33] 来开展计算. GRASP2 K 程序包可以系统地计算电子关联效应, 包括价电子和内层电子之间的关联以及原子核与核外电子之间的关联等. 对于中性原子和近似中性的离子而言, 电子关联效应是理论计算和实验测量之间差异的主要来源. 用 GRASP2K 程序包先计算 ASFs, 再用 RIS3 程序包调用 ASFs 来计算同位素位移.

在 GRASP2 K 程序包中采用了双参数费米模型来描述原子核的电荷分布. 双参数费米模型如下 [34]:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-c)/a}}, \quad (9)$$

$$t/a = 4 \ln 3, \quad (10)$$

其中 ρ_0 是归一化系数, c 为半密度半径, t 为原子核皮厚度, a 是与核皮厚度 t 相关的参数, t 取值为 2.30 fm.

2.3 原子核质量修正

原子核的质量可以用原子质量进行修正得到, 方法为: 原子质量扣除电子质量, 再加上电子与核的结合能:

$$M_{\text{nuclear}} = M_{\text{atom}} - Zm_e + B_{\text{el}}, \quad (11)$$

其中 B_{el} 是电子与核的结合能, 它可以由下列经验公式进行估算 [35]:

$$B_{\text{el}} = 14.4381 \times Z^{2.39} + 1.55468 \times Z^{5.35}$$

$$\times 10^{-6} \text{ (eV)}. \quad (12)$$

进行原子核质量修正时注意需要将能量单位 eV 换算成原子质量单位 amu.

3 计算结果

Mg⁺ 离子的基态电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, 计算过程中展开 CSFs 时采用的是一种受限制的双电子激发模式: 最里层 $1s^2$ 的两个电子选择不激发, 最外层 $3s^1$ 中的一个电子选择激发, 另从 $2s^2 2p^6$ 八个电子中再选择一个电子激发. CSFs 对应的主量子数 $n = 3, 4, 5, \dots$, 轨道角量子数 $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ (对应的光谱学符号表示为 $l = s, p, d, f, \dots$), 计算中最大的主量子数为 $n_{\text{max}} = 6$, 最大的轨道角量子数 $l_{\text{max}} = 4$ (用光谱学符号表示为 $l_{\text{max}} = g$).

3.1 谱线的跃迁能量

在计算电子波函数的同时也得到了 Mg⁺ 离子基态到低激发态 $3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{1/2}$ 和 $3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{3/2}$ 两条谱线的跃迁能量, 以波数 (cm^{-1}) 为单位, 并与实验值和其他理论值 [28] 进行了对比, 结果如表 1 所列. 实验值取自美国国家标准研究院 (The National Institute of Standards and Technology, NIST) 的原子光谱数据库 (atomic spectra database, ASD). 表 1 中括号里的百分数表示的是理论计算结果与 NIST ASD 的实验数据为参考的相对百分差. 其中, 文献 [28] 采用的是相对论耦合簇计算方法, 本文计算的两条谱线的跃迁能量与实验和理论都符合得比较好, 表明本文对电子波函数的计算准确可靠.

表 1 Mg⁺ 离子 $3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{1/2}$ 和 $3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{3/2}$ 谱线跃迁能量, 括号中的百分数表示与 NIST ASD 实验测量值的相对百分差

Table 1. Transition energies for $3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{1/2}$ and $3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{3/2}$ transitions of Mg⁺ ion. The data in brackets represents the percentage difference compared with the NIST ASD result.

	Transition energy/ cm^{-1}	
	$3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{1/2}$	$3s^2 S_{1/2} - 3s^2 P_{3/2}$
NIST ASD	35669.31	35760.88
Present	35674.02 (0.013%)	35770.70 (0.027%)
Ref.[28]	35627.472 (0.12%)	35718.758 (0.12%)

3.2 特殊质量位移系数和场位移因子

Mg^+ 离子 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 两条跃迁谱线的 NMS 系数、SMS 系数和 FS 因子的计算结果如表 2 所列, NMS 系数和 SMS 系数的单位为 $\text{GHz}\cdot\text{amu}$, FS 因子的单位为 $\text{MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$. 表中比较了 CI+MBPT 方法 [19,25]、相对论耦合簇方法 [28]、相对论 HF 方法 [36] 以及相对论 CI+DF 方法 [37] 的计算结果. 其中, 文献 [19] 是在有限场近似下将 SMS 算符作为一个微扰项加入到系统的哈密顿量中再用 CI+MBPT 方法展开计算; 文献 [25] 采用的也是 CI+MBPT 方法, 但在计算跃迁矩阵元高阶修正时采用了随机相位近似 (random-phase

approximation); 文献 [28] 中采用 Dirac 哈密顿量结合 Breit 近似计算电子波函数, 但是在计算 SMS 系数时用的是非相对论形式的 SMS 算符; 文献 [36] 是将同位素位移算子加入到库仑势中, 这种处理方式与文献 [19] 很相似, 因此二者对场位移因子 F 的计算结果相同, 且 SMS 系数的计算结果也很接近; 文献 [37] 用 CI+DF 方法展开求解组态波函数时引入了一个权重函数 (weight function), 但是没有详细考虑电子的关联效应. 表 2 中不同的计算方法各有特色, 计算得到的 SMS 系数和场位移因子虽然存在一些差异, 但是总的来看, 这些理论结果彼此都还符合得比较好.

表 2 Mg^+ 离子 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 跃迁谱线的 NMS 系数、SMS 系数和 FS 因子 (NMS 和 SMS 系数的单位为 $\text{GHz}\cdot\text{amu}$, 场位移因子 F 的单位为 $\text{MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$)

Table 2. The NMS coefficients, SMS coefficients and FS factors for the $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ and $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ transitions of Mg^+ ion. The unit of the NMS and SMS coefficient is $\text{GHz}\cdot\text{amu}$ and the unit of the field shift factor F is $\text{MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$.

	$3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$			$3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$		
	ΔK^{NMS}	ΔK^{SMS}	F	ΔK^{NMS}	ΔK^{SMS}	F
Present	-586.99	-371.90	-117.10	-588.50	-371.95	-117.18
Ref. [19]	-585.6	-378	-127	-586.3	-378	-127
Ref. [25]		-362	-125.81		-361	-125.82
Ref. [28]		-390.1	-126.22		-386.0	-126.32
Ref. [36]	-587	-379	-127	-588	-373	-127
Ref. [37]		-406.1	-123.2			

用表 2 中 NMS 系数、SMS 系数和 FS 因子的计算结果结合必要的原子核质量和核电荷半径数据, 就可以计算相应的 Mg^+ 离子这两条跃迁谱线的 IS, 并与实验结果进行对比.

3.3 同位素位移

Mg 元素稳定的同位素有三个, ^{24}Mg , ^{25}Mg 和 ^{26}Mg , 原子核方均根电荷半径 [38] 分别为 $3.0570(7) \text{ fm}$, $3.0290(7) \text{ fm}$ 和 $3.0340(26) \text{ fm}$, 用 (11) 和 (12) 式修正后的原子核质量分别为 23.9790132016 , 24.9798084806 和 $25.9765644726 \text{ amu}$. 以 $^{24}\text{Mg}^+$ 离子为参考同位素, $^{25}\text{Mg}^+$ 离子和 $^{26}\text{Mg}^+$ 离子的 IS 计算结果如表 3 所列, 表 3 同时列出了其他理论计算值和实验测量值, 并与我们的计算结果进行了对比. 需要说明的是, 最新的 Mg^+ 离子稳定同位素的 IS 实验测量 [40] 是在离子阱囚禁装

置中完成的, 在实验中消除了多普勒频移, 并对光频移、亚多普勒频移等频移效应做了修正, 是目前精度最高的 Mg^+ 离子 IS 实验测量结果.

对于 $^{25}\text{Mg}^+$ 离子两条谱线的 IS 结果, 我们的计算值与最新实验测量值 [40] 的绝对误差分别只有 2.1 MHz ($3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$) 和 3.7 MHz ($3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$), 相对误差分别为 0.13% 和 0.23% , 与实验符合得非常好. 对 $^{26}\text{Mg}^+$ 离子的 IS 而言, 我们计算的 SMS 和 MS 与其他理论结果 [19,36] 的绝对误差在 $3-6 \text{ MHz}$ 范围, 相对误差小于 0.26% ; 两条谱线总的 IS 计算结果与实验值 [40] 的绝对误差分别为 6.6 MHz ($3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$) 和 8.9 MHz ($3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$), 相对误差分别为 0.21% 和 0.28% . 与其他理论计算相比, 我们对 Mg^+ 离子 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 两条跃迁谱线的 IS 计算结果最接近实验测量值.

表3 Mg^+ 离子稳定同位素 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 跃迁谱线的 IS 计算结果 (参考同位素为 $^{24}\text{Mg}^+$ 离子, IS 单位为 MHz)

Table 3. The IS results of the stable Mg^+ ion isotopes for the $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ and $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ transitions with the unit of MHz. The reference isotope is $^{24}\text{Mg}^+$ ion.

	$3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$				$3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$			
	SMS	MS	FS	IS	SMS	MS	FS	IS
$^{25}\text{Mg}^+$								
Present	621.37	1602.11	19.95	1622.07	621.45	1604.72	19.97	1624.69
Ref.[28]				1604(25)				1600(40)
Expt.[39]								1589(100)
Expt.[40]				1620(19)				1621(19)
$^{26}\text{Mg}^+$								
Present	1192.64	3075.06	16.40	3091.47	1192.81	3080.06	16.42	3096.48
Ref.[19]						3086.3		
Ref.[28]				3079(40)				3071(60)
Ref.[36]					1196(18)			
Expt.[39]								3050(100)
Expt.[40]				3084.905(93)				3087.560(87)

考虑到中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的短寿命 Mg 同位素在反转岛附近奇异原子核结构性性质研究中的重要应用, 我们也计算了这些短寿命离子的 IS. 中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的短寿命 Mg 同位素的原子质量^[41]、半衰期、原子核质量修正结果、原子核电荷半径以及核电荷半径的平方差等数据如表 4 所列,

其中参考同位素为 ^{24}Mg .

结合表 2 中 NMS 系数、SMS 系数、FS 因子的计算结果和表 4 中各同位素原子核质量和原子核电荷半径数据, 以 $^{24}\text{Mg}^+$ 离子为参考同位素, 得到中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的短寿命 Mg^+ 离子的 IS 计算结果如表 5 所列.

表4 短寿命 Mg 同位素的原子质量、半衰期、修正后的原子核质量、原子核半径以及原子核半径的平方差, 参考同位素为 ^{24}Mg

Table 4. The atomic masses (amu), half-lives (in units of h-hour, min-minute, s-second and ms-millisecond), modified nuclear mass (amu), nuclear charge radius (r , in unit of fm) and the difference of charge radius square ($\delta\langle r^2 \rangle$, in unit of fm^2) for the short-lived Mg isotopes. The reference isotope is ^{24}Mg .

Isotope	Half-life	Atomic mass/amu	Nuclear mass/amu	r /fm	$\delta\langle r^2 \rangle^{A,24}$ / fm^2
^{21}Mg	122 ms	21.011713	21.0056845	3.0629	0.03611
^{22}Mg	3.875 5 s	21.999574	21.9935453	3.0691	0.07413
^{23}Mg	11.317 s	22.994124	22.9880952	3.0428	-0.08662
^{27}Mg	9.458 min	26.984342	26.9783121	3.0327	-0.14798
^{28}Mg	20.915 h	27.983877	27.9778483	3.0695	0.07658
^{29}Mg	1.30 s	28.988600	28.9825715	3.0759	0.11591
^{30}Mg	335 ms	29.990434	29.9844055	3.1110	0.33307
^{31}Mg	232 ms	30.996546	30.9905175	3.1488	0.56969
^{32}Mg	86 ms	31.998975	31.9929465	3.1863	0.80726

表5 短寿命 Mg^+ 离子同位素 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 跃迁谱线的 IS 计算结果, IS 单位为 MHz, 参考同位素为 $^{24}\text{Mg}^+$ 离子

Table 5. The IS results of the short-lived Mg^+ ion isotopes for the $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ transitions with the unit of MHz. The reference isotope is $^{24}\text{Mg}^+$ ion.

Isotope	$3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$				$3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$			
	NMS	SMS	FS	IS	NMS	SMS	FS	IS
$^{21}\text{Mg}^+$	-3465.02	-2195.34	-4.23	-5664.58	-3473.93	-2195.63	-4.23	-5673.79
$^{22}\text{Mg}^+$	-2209.87	-1400.11	-8.68	-3618.66	-2215.56	-1400.30	-8.69	-3624.54
$^{23}\text{Mg}^+$	-1055.20	-668.54	10.14	-1713.60	-1057.91	-668.63	10.15	-1716.40
$^{27}\text{Mg}^+$	2721.48	1724.25	17.33	4463.05	2728.48	1724.48	17.34	4470.30
$^{28}\text{Mg}^+$	3498.80	2216.74	-8.97	5706.56	3507.80	2217.03	-8.97	5715.86
$^{29}\text{Mg}^+$	4226.12	2677.55	-13.57	6890.09	4236.99	2677.91	-13.58	6901.31
$^{30}\text{Mg}^+$	4902.81	3106.28	-39.00	7970.09	4915.43	3106.70	-39.03	7983.10
$^{31}\text{Mg}^+$	5538.37	3508.95	-66.71	8980.61	5552.61	3509.42	-66.76	8995.28
$^{32}\text{Mg}^+$	6131.84	3884.96	-94.53	9922.27	6147.61	3885.48	-94.59	9938.50

表5中IS理论计算结果依赖于原子质量和原子电荷半径的实验数据. 原子质量一般能准确到 10^{-7} amu 量级, 原子电荷半径会存在一定的测量误差, 但是考虑到对Mg这样的轻核元素而言FS在总IS中的贡献比较小, 我们认为IS的计算误差主要来源于NMS系数、SMS系数和FS因子的不确定度. 表5的IS理论计算结果的相对不确定度大约为0.30%, 评估相对不确定度的依据将在下文讨论. 对于中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的短寿命 Mg^+ 离子同位素 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 两条跃迁谱线, 目前并没有实验数据可以比对, 这些短寿命的同位素半衰期从几十毫秒到几十个小时, 足够用于IS测量, 且这两条跃迁对应的波长分别为279.6和280.3 nm, 这种波长的激光光源也很容易获得, 因此表5中的计算结果可以用作进一步的IS测量实验参考.

4 讨 论

在表2中列出了用不同方法计算SMS系数的理论结果, 其中文献[28]和[37]的计算结果与其他理论值的差异比较大, 主要原因在于: 文献[28]中计算电子波函数时用的是相对论狄拉克哈密顿量, 但是在计算SMS系数时忽略了SMS算符中相对论效应的近似项; 在文献[37]的计算中, 未充分考虑电子的关联效应, 而电子关联效应在中性原子和近似中性离子的IS中的作用不可忽视. GRASP2K

原子结构计算程序包可以对电子关联效应做系统地计算, 同时采用了相对论的SMS算符表达式, 从而获得了与实验值更接近的计算结果. 在计算 Mg^+ 离子IS时采用的是受限制的双电子激发模式, 且将NMS和SMS分开进行计算; 用类似的处理方法也计算了Mg原子的同位素位移^[42], 并得到了与实验结果相符的计算结果. 表明我们采用的受限制的双电子激发模式在处理核外电子数为11和12的原子体系的光谱计算问题是成功的, 同时表明将NMS和SMS分别用不同的方法进行处理也是可行的.

GRASP2 K原子结构计算程序包本身没有设计对计算结果进行误差分析的程序模块, 因此用GRASP2 K开展理论计算的文献通常只对自身计算结果的不确定度做粗略评估, 主要把计算结果与实验测量或者其他理论计算结果进行比较. 在IS的计算中, SMS系数和FS因子的不确定度受电子波函数的计算精度影响. 从IS的计算方法和GRASP2 K计算程序包的应用特点来看, 存在这样的规律: 如果跃迁能量与实验值的相对不确定度为 $\Delta\%$, 则FS的理论计算值的相对不确定与 $\Delta\%$ 同量级, 而SMS的理论计算值的相对不确定度比 $\Delta\%$ 要高一个量级, 大约为 $\Delta\%$ 的10倍左右. 谱线跃迁能量或者能级能量本质上是哈密顿算符的期望值, 其不确定度反映的是电子波函数的计算精度. FS因子正比于两个跃迁能级的电子波函数在零点处的模的平方差(概率幅之差), 因此FS只受电子波函

数的计算精度影响, 与 $\Delta\%$ 同量级. 计算 SMS 系数引入的相对论 SMS 算符是在 $(\alpha Z)^4 m^2/M$ 近似条件下的结果^[43,44], 所以 SMS 系数的计算精度不仅受电子波函数的计算精度影响, 同时也受近似条件的影响, 总的结果是 SMS 计算的不确定度要比 $\Delta\%$ 高大约一个量级, 可以粗略评估为 $\Delta\% \times 10$. 根据本文的计算结果, 两条谱线跃迁能量的相对不确定度最大为 0.027%, 因此我们评估表 5 中 IS 计算结果的不确定度大约为 0.30%.

采用 MCDHF 和 RCI 方法开展原子结构理论计算的结果与实验值的相对误差通常在 1% 范围左右, 用 GRASP2K 计算 Mg^+ 离子两条谱线的 IS 理论值与实验测量值的相对误差在 0.13%—0.28% 范围. 为了进一步提高 IS 的理论计算精度, 可以考虑在计算中引入 QED (quantum electrodynamics, QED) 修正^[2,30,45,46]. QED 修正在少电子体系比如 Li 原子、 Be^+ 离子和 Be 原子等的 IS 计算中取得了很大的成功, IS 计算精度获得了提高. 最新的研究文献表明 QED 修正也可应用于多电子体系比如碱金属 Na, K, Rb, Cs 和类碱金属离子的光谱计算^[47], 说明引入 QED 修正方法来进一步提高多电子原子体系的 IS 计算精度是可行的办法.

5 结 论

本文用 RCI 结合 MCDHF 方法计算了 Mg^+ 离子 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ 和 $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ 两条跃迁谱线的 SMS 系数和 FS 因子, 并计算了中子数 $8 \leq N \leq 20$ 的 Mg^+ 离子的 IS, 包括 3 个稳定同位素和 9 个短寿命同位素. 用 GRASP2 K 原子结构计算程序包计算电子波函数, 并用 RIS3 同位素位移计算程序包调用 GRASP2K 的电子波函数计算结果, 进而计算 IS. 本文的计算结果与其他理论计算结果符合得比较好, 与最新的实验测量值相比, 本文得到的 IS 理论值的相对误差在 0.13%—0.28% 范围, 是目前最接近 IS 实验测量值的计算结果. 该计算结果能为 Mg^+ 离子 IS 实验和理论研究提供参考, 能够用于 Mg^+ 离子的短寿命同位素的光谱测量实验以及利用 Mg^+ 离子开展幻中子数 $N = 8$ 和 $N = 20$ 附近的奇异原子核特性研究等. 同时, 本文采用的一种受限制的双电子激发模式对于基态电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 的原子体系具有普适性, 计算结果也表明这种电子激发模式在计算 Mg^+ 离子光谱是可靠的, 可以推广到核外电子数为 11 的多

电子体系的原子或离子, 比如 Na 原子、 Al^{2+} 离子、 Si^{3+} 离子等, 用于开展相应的光谱结构和 IS 的理论研究.

参考文献

- [1] Volotka A V, Glazov D A, Shabaev V M, Tupitsyn I I, Plunien G 2015 *Phys. Rev. Lett.* **112** 253004
- [2] Yan Z C, Nörtershäuser W, Drake G W F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 243002
- [3] Cheal B, Cocolios T E, Fritzsche S 2012 *Phys. Rev. A* **86** 042501
- [4] Borremans D, Balabanski D L, Blaum K, Geithner W, Gheysen S, Himpe P, Kowalska M, Lassen J, Lievens P, Mallion S, Neugart R, Neyens G, Vermeulen N, Yordanov D 2005 *Phys. Rev. C* **72** 044309
- [5] Neugart R, Balabanski D L, Blaum K, Borremans D, Himpe P, Kowalska M, Lievens P, Mallion S, Neyens G, Vermeulen N, Yordanov D T 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 132502
- [6] Nörtershäuser W, Sánchez R, Ewald G, Dax A, Behr J, Bricault P, Bushaw B A, Dilling J, Domschky M, Drake G W F, Götze S, Kluge H J, Kühl T, Lassen J, Levy C D P, Pachucki K, Pearson M, Puchalski M, Wojtaszek A, Yan Z C, Zimmermann C 2011 *Phys. Rev. A* **83** 012516
- [7] Takamine A, Wada M, Okada K, Sonoda T, Schury P, Nakamura T, Kanai Y, Kubo T, Katayama I, Ohtani S, Wollnik H, Schuessler H A 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 162502
- [8] Tang L Y, Yan Z C, Shi T Y, James F B 2009 *Phys. Rev. A* **79** 062712
- [9] Duff M J, Okun L B, Veneziano G 2002 *J. High Energy Phys.* **2002** 023
- [10] Webb J K, King J A, Murphy M T, Flambaum V V, Carswell R F, Bainbridge M B 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 191101
- [11] Hawking S W 1974 *Nature* **248** 30
- [12] Drobyshchevski E M, Drobyshchevski M E, Izmodenova T Y, Telnov D S 2003 *Astron. Astrophys. Trans.* **22** 263
- [13] Federman S R, Lambert D L, Cardelli J A, Sheffer Y 1996 *Nature* **381** 764
- [14] Xu P, Yang J W, Liu M, He X D, Zeng Y, Wang K P, Wang J, Papoular D J, Shlyapnikov G V, Zhan M S 2015 *Nat. Commun.* **6** 7803
- [15] Papp S B, Pino J M, Wieman C E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 040402
- [16] Burke J P, Bohn J L, Esry B D, Greene C H 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2097
- [17] Hamilton M S, Gorges A R, Roberts J 2012 *J. Phys. B* **45** 095302
- [18] Filippin L, Godefroid M, Ekman J, Jönsson P 2016 *Phys. Rev. A* **93** 062512
- [19] Korol V A, Kozlov M G 2007 *Phys. Rev. A* **76** 022103
- [20] Yu G H, Zhao P Y, Xu B M, Zhu X L, Yang W 2017 *Mod. Phys. Lett. B* **31** 1750003
- [21] Fenner Y, Murphy M T, Gibson B K 2005 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **358** 468

- [22] Ashenfelter T P, Mathews G J, Olive K A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 041102
- [23] Patra S K, Prahara J C R 1991 *Phys. Lett. B* **273** 13
- [24] Shubhchintak N, Chatterjee R, Shyam R, Tsushima K 2015 *Nucl. Phys.* **939** 101
- [25] Safronova M S, Johnson W R 2001 *Phys. Rev. A* **64** 052501
- [26] Safronova M S, Tupitsyn I I 2015 *Comput. Phys. Commun.* **195** 199
- [27] Dzuba V A, Johnson W R, Safronova M S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 022503
- [28] Sahoo B K 2010 *J. Phys. B* **43** 231001
- [29] Kozhedub Y S, Volotka A V, Artemyev A N, Glazov D A, Plunien G, Shabaev V M, Tupitsyn I I, Stöhlker T 2010 *Phys. Rev. A* **81** 042513
- [30] Yan Z C, Drake G W F 2002 *Phys. Rev. A* **66** 042504
- [31] Nazé C, Gaidamauskas E, Gaigalas G, Godefroid M, Jönsson P 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2187
- [32] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [33] Jönsson P, Gaigalas G, Bierón J, Fischer C F, Grant I 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2197
- [34] Lunney D, Pearson J M, Thibault C 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 1021
- [35] Wang M, Audi G, Wapstra A H, Kondev F G, Mac-cormick M, Xu X, Pfeiffer B 2012 *Chin. Phys. C* **36** 1603
- [36] Berengut J C, Dzuba V A, Flambaum V V 2003 *Phys. Rev. A* **68** 022502
- [37] Tupitsyn I I, Shabaev V M, López-Urrutia J R C, Draganic I, Orts R S, Ullrich J 2003 *Phys. Rev. A* **68** 022511
- [38] Yordanov D T, Bissell M L, Blaum K, de Rydt M, Gép-pert C, Kowalska M, Krämer J, Kreim K, Krieger A, Lievens P, Neff T, Neugart R, Neyens G, Nörtershäuser W, Sánchez R, Vingerhoets P 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 042504
- [39] Drullinger R, Wineland D, Bergquist J 1980 *Appl. Phys.* **22** 365
- [40] Batteiger V, Knünz S, Herrmann M, Saathoff G, Schüssler H A, Bernhardt B, Wilken T, Holzwarth R, Hänsch T W, Udem T 2009 *Phys. Rev. A* **80** 022503
- [41] Coursey J S, Schwab D J, Tsai J J, Dragoset R A 2015 *Atomic Weights and Isotopic Compositions* (version 4.1) [Online] Available: <http://physics.nist.gov/Comp> [2016, May, 27] National Institute of Standards and Technol-ogy, Gaithersburg, MD
- [42] Yu G H, Liu H, Zhao P Y, Xu B M, Gao D L, Zhu X L, Yang W 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 113101 (in Chinese) [余庚华, 刘鸿, 赵朋义, 徐炳明, 高当丽, 朱晓玲, 杨维 2017 物理学报 **66** 113101]
- [43] Shabaev V M 1985 *Theor. Math. Phys.* **63** 588
- [44] Shabaev V M 1988 *Sov. J. Nucl. Phys.* **47** 69
- [45] Zhang P P, Zhong Z X, Yan Z C, Shi T Y 2015 *Chin. Phys. B* **24** 033101
- [46] Yan Z C, Drake G W F 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 113004
- [47] Tupitsyn I I, Kozlov M G, Safronova M S, Shabaev V M, Dzuba V A 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 253001

Calculation of isotope shift of Mg^+ ion by using the relativistic multi-configuration interaction method*

Yu Geng-Hua¹⁾ Yan Hui^{2)†} Gao Dang-Li³⁾ Zhao Peng-Yi⁴⁾ Liu Hong¹⁾
Zhu Xiao-Ling¹⁾ Yang Wei¹⁾

1) (School of Information Science and Engineering, Chengdu University, Chengdu 610106, China)

2) (Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

3) (School of Science, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

4) (College of Physics and Electronic Science, Hubei Normal University, Huangshi 435002, China)

(Received 11 August 2017; revised manuscript received 11 October 2017)

Abstract

The special mass shift coefficients and field shift factors for the atomic transitions $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ and $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ of Mg^+ ion are calculated by the relativistic multi-configuration interaction method, and the isotope shifts are also obtained for the Mg^+ isotopes with the neutron numbers $8 \leq N \leq 20$. Our calculations are carried out by using the GRASP2 K package together with the relativistic isotope shift computation code package RIS3. In our calculations the nuclear charge distribution is described by the two-parameter Fermi model and the field shifts are calculated by the first-order perturbation. In order to generate the active configurations, a restricted double excitation mode is used here, the electron in the 3s shell ($3s^1$) is chosen to be excited, another electron is excited from the 2s or 2p shells ($2s^22p^6$), and the two electrons in the inner 1s shell ($1s^2$) are not excited. The active configurations are expanded from the occupied orbitals to some active sets layer by layer, each correlation layer is labeled by the principal quantum number n and contains the corresponding orbitals s, p, d $\cdots$ etc. The maximum principal quantum number n is 6 and the largest orbital quantum number $l_{\max}$ is g . According to our calculations, the normal mass shift coefficients are $-586.99 \text{ GHz}\cdot\text{amu}$ and $-588.50 \text{ GHz}\cdot\text{amu}$, the special mass shift coefficients are $-371.90 \text{ GHz}\cdot\text{amu}$ and $-371.95 \text{ GHz}\cdot\text{amu}$, the field shift factors are $-117.10 \text{ MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$ and $-117.18 \text{ MHz}\cdot\text{fm}^{-2}$ for the $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{1/2}$ and the $3s^2S_{1/2}-3s^2P_{3/2}$ transitions of Mg^+ ions, respectively. Then the isotope shifts for different Mg^+ isotopes are obtained using the available data of the nuclear mass and the nuclear charge radii. Our results are coincident with other theoretical calculations and also with experimental results. The relative errors of our calculations are in a range from 0.13% to 0.28% compared with the latest measurements. Our calculations are the most consistent with the experimental measurements for the moment. The results provided here in this paper could be referred to for the experimental and theoretical study of Mg^+ isotope shift, and they could be applied to the spectral measurement experiments of the short-lived Mg^+ isotopes and also used for the research of the characteristics of exotic nuclei with Mg^+ isotopes near the magic neutron numbers $N = 8$ and $N = 20$. The calculation method and the excitation mode used here could also be extended to other multi-electron systems with eleven orbital electrons, and the corresponding theoretical studies of the atomic spectral structures and isotope shifts could then be carried out.

Keywords: isotope shift, configuration interaction, orbital wave function, magnesium ion

PACS: 31.30.Gs, 31.15.am, 21.10.Gv, 32.10.Bi

DOI: 10.7498/aps.67.20171817

* Project supported by the National Natural Science Foundations of China (Grant Nos. 11304093, 11604253), the Plan Project of Youth Science and Technology New Star of Shaanxi Province, China (Grant No. 2015KJXX-33), the Fund of the Scientific Research Foundation of Sichuan Provincial Department of Education, China (Grant No. 14ZB0375) and the Open Fund of Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, China (Grant No. 00201607).

† Corresponding author. E-mail: yanhui@scnu.edu.cn